

Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs

Marie-Anne Jaud

▶ **To cite this version:**

Marie-Anne Jaud. Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université Paris Sud - Paris XI, 2006. Français. NNT : . tel-00165490

HAL Id: tel-00165490

https://theses.hal.science/tel-00165490

Submitted on 26 Jul 2007

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.

N° D'ORDRE 8442





UNIVERSITE PARIS-SUD XI
Faculté des Sciences d'Orsay

THÈSE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE

Ecole Doctorale "Sciences et Technologies de l'Information des Télécommunications et des Systèmes"

Présentée par

Marie-Anne JAUD

Sujet :

Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs

Soutenue le 26 octobre 2006 devant les membres du jury :

M. Alain PONCET	Président
M. Philippe DOLLFUS	Directeur de thèse
Mme Mireille MOUIS	Rapporteur
M. Jean-Luc THOBEL	Rapporteur
M. Sylvain BARRAUD	Encadrant
M. Hervé JAOUEN	Encadrant

« … I think I can safely say
that nobody understands
Quantum Mechanics »

Richard P. Feynman

Remerciements

Je n'ai que deux mots à vous dire : MER – CI !!!

En premier lieu, je souhaite vivement remercier Sylvain Barraud qui m'a suivi et soutenu quotidiennement pendant ces trois années de thèse et les six mois de stage qui ont précédé. Son calme inconditionnel, son optimisme à toute épreuve même lorsqu'il est évident que les calculs vont partir en vrille, sa rigueur de raisonnement mais aussi d'écriture, dont il a su m'inculquer de nombreux principes, ont rendu riche et agréable ce travail de thèse. Ce fut un plaisir d'essuyer les plâtres de son premier rôle d'encadrement de stagiaire puis de thésard. Je me permets cependant une petite note à l'attention de mes successeurs : même si vous pensez votre rapport parfait, comptez sur Sylvain pour vous dégoter la virgule mal placée, la majuscule omise ou vous suggérer de remplacer un adjectif par un de ses synonymes.

Je tiens également à remercier très sincèrement Philippe Dollfus qui a assuré la direction scientifique de ce travail. Malgré l'éloignement, il a toujours suivi cette thèse au plus près et a été de précieux conseils. Je n'oublie pas mes séjours à l'IEF, les pizzas à Pise, le Haggis à Glasgow, les pâtisseries à Vienne et le dîner asiatique à Gif la veille de ma soutenance.

Merci enfin à Hervé Jaouen d'avoir rendu possible cette thèse et s'être toujours montré disponible. Ses judicieuses remarques, en particulier lors des réunions d'avancement, m'ont bien souvent permis de prendre du recul sur mon travail.

Trois encadrants sur trois lieux différents peut vite devenir difficile à gérer … Cela n'a pas du tout été le cas pour moi, grâce à la collaboration mise en place autour de ce travail. Soyez assurés, Sylvain, Philippe et Hervé de ma profonde reconnaissance.

Je remercie l'ensemble des membres du jury pour l'attention qu'ils ont porté à ce travail. Merci à Monsieur Alain Poncet, Professeur à l'INSA de Lyon d'avoir présidé le jury. Merci à Madame Mireille Mouis, directrice de recherche au CNRS à l'IMEP et à Monsieur Jean-Luc Thobel, chargé de recherche au CNRS à l'IEMN, d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette étude.

Un merci particulier à Fabien Boulanger de m'avoir accordé sa confiance au sein du Laboratoire de Simulation et Caractérisation des Dispositifs et Procédés (LSCDP). Je n'oublie pas non plus François de Crécy qui m'a permis de faire mes premiers pas en simulation numérique au LETI.

Je tiens également à remercier toute l'équipe simulation du LSCDP qui a rendu ces trois dernières années bien plaisantes : Gilles pour son suivi, son soutien et les multiples discussions autour d'un verre ou d'un repas ; Pierrette pour les plantes, le ski de rando et les orangettes ; Jean-Charles pour inlassablement attendre « patiemment » que je finisse mon déjeuner ; François T. pour sa « théorie de Feynman pour les nuls » ; Philippe pour les petits dépannages quotidiens de Lethe, Algue, Dniepr et tous leurs copains ; Olga pour les séances piscine ; Pascal : peut-être qu'un jour je te rencontrerai sur la plage de la barrique ? et Sébastien qui nous fait parfois l'honneur de sa présence. Un grand merci aussi au petit monde des thésards, post-doc et stagiaires : mention toute spéciale à Pierre-Yves et Erwan car, bien que vous ayez du mal avec ma conception du sport, j'adore

papoter et prendre le thé avec vous ; Olivier qui a été l'un des premiers lecteurs assidus et un correcteur sans faille de mon manuscrit ; Cyril et Manu pour tous les bons moments passés ensemble au début de ma thèse au 4123 bureau 437 ; Stéphane ; Sébastien M. ; Emmanuelle et Sébastien S..

Merci également à mes administrateurs système préférés : Michel, Bernard, Jean-François et André car une thèse en simulation numérique sans CPU c'est comme une voiture sans essence ; à Cyrille et Yves pour avoir inlassablement été des sources d'amélioration de chacune de mes présentations orales, Gaby, Cécilia avec une mention toute particulière, Vince, Emilie, Fred, toute l'équipe du LNDE et bien sur toute l'équipe caractérisation électrique du LSCDP.

Je souhaite remercier chaleureusement toute l'équipe de Philippe Dollfus à l'Institut d'Electronique Fondamentale d'Orsay : Sylvie, Arnaud, Christophe, Valérie, Johann, Jérôme, Audrey, Damien, Karim, Nam, Hugues et Francesca. Merci pour tous les services rendus, pour votre accueil et votre bonne humeur communicative à chacun de mes passages et spécialement le jour de ma soutenance.

Merci également à toute l'équipe de Hervé Jaouen à STMicroelectronics de m'avoir accueilli les trop rares fois où je me suis rendue à Crolles. Merci tout particulièrement à Clément, mais aussi à Denis, Ardéchir et Lorenzo.

Je tiens également à remercier sincèrement tous ceux qui en dehors du milieu professionnel ont rendu ces trois dernières années à Grenoble bien agréables. Merci tout particulier à Denis pour son soutien quasi quotidien, je me souviendrai toujours de la soirée Misa Tango de l'orchestre autour d'une Chartreuse-orange ; Nelly et Fanny pour toutes les heures passées à papoter autour d'un repas ou d'une tisane rue Prosper Mérimée et tous les autres bons moments ; Ariane ma copine de rédaction, Arnaud et toutes ses idées de randos, Josquin pour nos déjeuners trimestriels avec ou sans invité surprise, Jérémie pour l'après-midi déguisement ACJ à Biviers, Anne pour m'avoir initié au skating, Suzanne et ses connaissances au GUM que je ne connais pas encore, Xavier pour avoir partagé tant de choses aux CUG, Marie G. pour m'avoir fait découvrir les frites au four, Marie C. pour l'unique footing commun, Véro pour l'après-midi aviron, Dimitrios pour la finale de coupe du monde, Alexis et Loys pour les magrets et les bons moments à la Croix-Rouge.

Merci aussi aux vendéens exilés à Grenoble, Mélanie, Yohann et Baptiste car c'est toujours de bons moments que ceux que l'on passe ensemble.

Enfin merci à toute ma petite famille qui malgré l'éloignement m'a apporté un soutien inconditionnel tout au long de ces années. Merci à mes parents, à Samuel d'avoir participé activement à cette thèse en m'hébergeant lors de chacun de mes séjours à Orsay, à Hélène et à Vincent et Carine. Merci également à Tatate Marie-Thérèse, Claudine, Jean-François, Floriane et Marie-Alice de m'avoir fait le plaisir d'être présents à ma soutenance.

Table des matières

REMERCIEMENTS **3**

TABLE DES MATIERES **5**

GLOSSAIRE ET ABREVIATIONS **9**

INTRODUCTION **13**

CHAPITRE 1 LE TRANSISTOR MOSFET : MINIATURISATION, MODELISATION ET SIMULATION **17**

1.1 La simulation numérique : une méthodologie de la recherche scientifique **19**

1.1.1 Les débuts de la simulation numérique et l'explosion des moyens de calcul 19

1.1.2 La simulation numérique : entre théorie et expérience 22

1.1.3 Conclusion 25

1.2 Miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique **26**

1.2.1 Principe et fonctionnement des transistors MOSFETs 26

1.2.2 Les approches de type Monte-Carlo semi-classique 35

1.2.3 Effets quantiques 38

1.2.4 Conclusion 40

1.3 Modélisation du transport électronique avec prise en compte des effets quantiques par simulation Monte-Carlo **41**

1.3.1 Formalisme de Wigner 41

1.3.2 Couplage Monte-Carlo Schrödinger 45

1.3.3 Méthodes de corrections quantiques 47

1.3.4 Bilan 49

1.4 Méthodes de corrections quantiques par simulation Monte-Carlo **50**

1.4.1 Potentiel de type Wigner 50

1.4.2 Potentiel de type Bohm 51

1.4.3 Potentiel de type Schrödinger 52

1.4.4 Potentiel Effectif de type Gaussien 53

1.4.5 Bilan 54

1.5 Objectifs de l'étude **54**

CHAPITRE 2 LE POTENTIEL EFFECTIF DE TYPE GAUSSIEN 57

2.1 Etude théorique 59

2.1.1 Origines du Potentiel Effectif de type Gaussien 59
2.1.2 Interprétation du Potentiel Effectif de type Gaussien 68
2.1.3 Conditions aux limites 72
2.1.4 Résumé 74

2.2 Mise en œuvre dans un code Monte-Carlo 74

2.2.1 Méthodologie générale du programme 74
2.2.2 Calcul du Potentiel Effectif de type Gaussien 80
2.2.3 Auto-cohérence entre le mouvement des porteurs et le potentiel effectif 82
2.2.4 Conclusion 83

2.3 Potentiel Effectif de type Gaussien et effets de confinement quantique 84

2.3.1 Influence des paramètres spécifiques au Potentiel Effectif de type Gaussien 84
2.3.2 Etat de l'art 86
2.3.3 Résultats 87
2.3.4 Conclusion 89

2.4 Limitations du Potentiel Effectif de type Gaussien 89

2.4.1 Limitations d'ordre « expérimental » 89
2.4.2 Limitation d'ordre « empirique » 97
2.4.3 Limitation d'ordre théorique 98

2.5 Conclusion 100

CHAPITRE 3 LE POTENTIEL EFFECTIF DE TYPE PEARSON 103

3.1 Principe de la formulation 105

3.1.1 Paquets d'ondes solutions de l'équation de Schrödinger 105
3.1.2 Description originale du paquet d'ondes d'une particule 107

3.2 Les distributions de type Pearson IV 109

3.3 Calibrage des paramètres de la distribution Pearson IV 111

3.3.1 Densités de probabilité d'une résolution Poisson-Schrödinger 111
3.3.2 Asymétrie 114
3.3.3 Aplatissement 115
3.3.4 Position moyenne 116
3.3.5 Ecart-type 121
3.3.6 Application à d'autres architectures 124
3.3.7 Bilan 126

3.4 Mise en œuvre dans un code Monte-Carlo 127

3.4.1 Méthodologie générale du programme 127
3.4.2 Calcul du potentiel effectif 130

3.5 Potentiel Effectif de type Pearson et effets de confinement quantique 133

3.5.1 Dispositifs double-grille 134
3.5.2 Dispositifs sur substrat massif (*bulk*) 139
3.5.3 Dispositifs SOI 141

3.6 Conclusion 142

CHAPITRE 4 ANALYSE DU TRANSPORT ELECTRONIQUE PAR SIMULATION MONTE-CARLO AVEC EFFETS DE CONFINEMENT QUANTIQUE 145

4.1 Traitement du régime de bande plate par le Potentiel Effectif de type Pearson 147

4.1.1 Difficulté de la prise en compte du confinement dans les régimes de bande plate par l'approche du Potentiel Effectif de type Pearson 147

4.1.2 Différenciation des régimes 148

4.1.3 Traitement des régimes de bande plate 148

4.2 Correction par le Potentiel Effectif en 2D 151

4.2.1 Représentation du paquet d'ondes dans la direction du transport 151

4.2.2 Calcul du potentiel effectif en 2D 152

4.2.3 Conditions aux limites aux électrodes de source et de drain 152

4.3 Application 153

4.3.1 Dispositif simulé 153

4.3.2 Résultats 153

4.3.3 Comparaisons avec une méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger 163

4.4 Conclusion 169

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES 171

ANNEXES 175

Annexe A : Méthode Monte-Carlo 175

Annexe B : Formulation de Bohm 178

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES 181

PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS DE L'AUTEUR 189

Glossaire et abréviations

B, β

β	Aplatissement

C

C_{DEP}	Capacité de désertion entre la grille et le substrat
C_{OX}	Capacité d'oxyde de grille
CPU	*Central Process Unit*

D

DIBL	Effets de l'abaissement de la barrière de potentiel du canal dû à la polarisation du drain – *Drain Induced Barrier Lowering*
DOE	Plan d'expériences – *Design Of Experiments*

E

E_B	Paramètre assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde – *Energy Barrier*
E_C	Energie de la bande de conduction
E_{eff}	Champ effectif dans la direction transverse au transport
E_F	Energie du niveau de Fermi
E_V	Energie de la bande de valence
E_x	Champ électrique local dans la direction transverse au transport
ε_0	Permittivité du vide ($8{,}854.10^{-12}$ F.m^{-1})

F

FD	Dispositif totalement déserté – *Fully Depleted*
FFT	Transformée de Fourier rapide – *Fast Fourier Transform*

G, γ

GEP	Potentiel effectif de type gaussien – *Gaussian Effective Potential*
γ	Asymétrie

H

h	Constante de Planck ($6{,}626.10^{-34}$ J.s^{-1})
$\hbar$	Constante de Planck réduite $h/2\pi$ ($1{,}054.10^{-34}$ J.s^{-1})

I

I_{DS}	Courant circulant entre la source et le drain
I_{DSsat}	Courant de drain de saturation
I_{OFF}	Courant de drain I_{DS} à $V_{DS} = V_{DD}$ et $V_{GS} = 0$
I_{ON}	Courant de drain I_{DS} à $V_{DS} = V_{GS} = V_{DD}$

K

k	Vecteur d'onde
κ	Permittivité relative
k_B	Constante de Boltzmann ($1{,}38.10^{-23}$ J K^{-1})

L

L_G	Longueur de grille

M, μ

MC	Monte-Carlo
m_0	Masse de l'électron ($9{,}109.10^{-31}$ kg)
m_l	Masse longitudinale ($0{,}916.m_0$ pour les électrons dans le silicium)
m_t	Masse transverse ($0{,}191.m_0$ pour les électrons dans le silicium)
MOSFET	Transistor Métal Oxyde Semi-conducteur à effet de champ - *Metal Oxyde Semi-conducteur Field Effect Transistor*
μ_0	Mobilité à faible champ transverse
μ_{eff}	Mobilité effective des porteurs

N

N_A	Concentration de dopants de type accepteurs d'électrons
N_D	Concentration de dopants de type donneurs d'électrons

P

PEP	Potentiel effectif de type Pearson – *Pearson Effective Potential*
PS	Poisson-Schrödinger

Q

q	Charge élémentaire ($1{,}602.10^{-19}$ C)
Q_{INV}	Charge d'inversion dans le canal

R

R&D	Recherche et Développement
R_P	Position moyenne

S, σ

S	Pente sous le seuil - *Subthreshold slope*
SCE	Effets de canal court - *Short Channel Effects*
SOI	Silicium sur isolant - *Silicon On Insulator*
σ	Ecart-type

T

T	Température
TCAD	*Technology Computer Aided Design*
TEM	Microscopie à transmission électronique - *Transmission Electron Microscopy*
TF, TF^{-1}	Transformée de Fourier et transformée de Fourier inverse
T_{ox}	Epaisseur physique d'oxyde de grille
T_{Si}	Epaisseur du film de silicium

V

V_{DD}	Tension nominale d'alimentation
V_{DS}	Tension entre le drain et la source
V_{DSsat}	Tension entre le drain et la source à partir de laquelle a lieu la saturation du courant
V_{eff}	Potentiel effectif
V_{GS}	Tension entre la grille et la source
V_P	Potentiel de Poisson
V_T	Tension de seuil - *Threshold voltage*

W

W	Largeur du transistor

Y, ψ

ψ_i	Fonction d'onde de la sous-bande i

Introduction

Qui aurait pu imaginer, il y a une cinquantaine d'années, alors que les tous premiers ordinateurs occupaient des pièces entières, que posséder un ordinateur portable serait devenu chose courante de nos jours (l'ENIAC pour *Electronique Numerical Integrator and Computer* mis en service en 1946 occupait 23 m^3 et pesait environ 30 tonnes [Histoire]) ? Et les téléphones portables ? Bien malin qui aujourd'hui parvient à en acheter un sans écran couleur et sans appareil photo intégré car ceux-ci sont déjà obsolètes. C'est évident, le marché de l'électronique est marqué par une évolution fulgurante vers des appareils toujours plus petits, toujours plus performants et toujours moins onéreux. Cette progression est principalement due à l'évolution du composant de base de la microélectronique, le transistor MOSFET. Au risque d'être un peu réducteur, la miniaturisation du transistor MOSFET était autrefois majoritairement limitée par les procédés technologiques. Citons en particulier l'amélioration de la résolution de la photo-lithographie qui peut être considérée comme l'une des causes majeures des progrès de la microélectronique. La lithographie détermine les dimensions des transistors, c'est donc un des points clés du procédé de fabrication des transistors. De nos jours, bien que les limitations d'ordre technologique soient toujours et plus que jamais présentes, l'industrie microélectronqiue doit également faire face à des limitations d'ordre physique. En effet, les dimensions des transistors sont devenues telles que les lois de la physique dite « classique » ne sont plus suffisantes pour décrire leur fonctionnement. Des phénomènes physiques qui, pour de relativement grandes dimensions, pouvaient être considérés comme négligeables ne peuvent plus l'être à l'échelle nanométrique. Prenons quelques exemples imagés. Quelle serait votre réaction si je vous parlais de balles jetées au fond d'un trou et qui, au lieu de s'entasser les unes sur les autres au fond du trou, se répartissent à différentes hauteurs distinctes comme si elles étaient situées sur les barreaux d'une échelle ? De même que penseriez-vous si je vous parlais d'une balle projetée contre un mur et qui, dans le cas d'un mur suffisamment peu épais, a une probabilité non nulle de le traverser ? Bizarre, bizarre me diriez-vous … non, quantique et la physique des semi-conducteurs doit désormais tenir compte d'effets difficiles à accepter par notre intuition immédiate comme ces effets quantiques.

Dans le régime nanométrique, les dimensions des transistors sont de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde des électrons participant au courant. Ceux-ci ne peuvent donc plus être considérés comme ponctuels (ou assimilés à des balles). Leur nature ondulatoire doit être prise en compte et elle

est susceptible d'influencer de manière non négligeable le fonctionnement de ces transistors. Reprenons l'exemple de la barrière d'énergie (ou mur) dont l'objectif est d'empêcher le passage des électrons (ou balles). Dans le cas d'une barrière d'énergie particulièrement fine, la nature ondulatoire des électrons les autorise, dans une certaine mesure, à franchir cette barrière. Celle-ci ne joue alors plus efficacement son rôle. La conséquence majeure de ce phénomène est évidente : une augmentation des pertes en courant et donc de la consommation statique, ce qui est très dommageable pour toutes les technologies actuelles dites à basse consommation comme les ordinateurs portables ou les téléphones portables. La microélectronique doit donc désormais tenir compte de ces effets susceptibles de modifier profondément les caractéristiques électriques des transistors (courants de fuite, mécanismes de transport électronique …). Précisons cependant que la microélectronique ne considère pas uniquement d'un mauvais œil ces effets quantiques. En effet, l'exploitation de leurs spécificités permet d'envisager des architectures de dispositifs innovantes. Les mémoires flash, notamment intégrées dans les clés USB, utilisent l'effet tunnel à travers un oxyde de grille pour piéger les électrons porteurs de l'information dans une grille flottante.

Dans le contexte actuel de la miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique, considérer les effets quantiques est devenu essentiel. Et bien que leur existence soit connue depuis de nombreuses années (l'expérience des fentes d'Young mettant en évidence la nature ondulatoire de la lumière date de 1801), ces effets n'en restent pas moins méconnus en particulier en ce qui concerne la quantification de leur impact. Par ailleurs, dans les transistors MOSFETs, ces phénomènes sont très difficiles, voire impossibles à isoler de par les divers phénomènes de transport électronique ou les très nombreux effets parasites présents dans de telles architectures. La mise au point de modèles de simulation numérique permettant de mieux comprendre ces effets quantiques et d'évaluer leur influence sur les caractéristiques électriques des transistors est ainsi devenu un véritable enjeu dans la course à la miniaturisation. C'est dans ce contexte précis que ce situe cette étude intitulée « approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs ». Les effets de quantification ou effets de confinement quantique consistent en un confinement des porteurs du canal dans des puits de potentiel étroits du fait des forts dopages des dispositifs sur silicium massif ou d'épaisseurs de film de silicium très minces. Il en résulte une quantification de l'énergie de ces porteurs affectant principalement leur répartition spatiale et par conséquent le contrôle de la charge par la grille. La tension de seuil mais aussi le courant de drain s'en trouvent entre autre modifiés, ce qui justifie l'introduction de ces effets de quantification dans les simulateurs. Le plan de ce mémoire est le suivant.

Le chapitre 1, après avoir discuté de la place de la simulation numérique et de ses atouts dans la recherche scientifique, rappelle les problématiques actuelles de la miniaturisation des transistors MOSFETs. Ensuite, d'une part, l'approche Monte-Carlo semi-classique pour l'étude du transport électronique dans de tels dispositifs est introduite et d'autre part, les effets quantiques et leurs conséquences sur le fonctionnement des transistors MOSFETs sont décrits. Enfin, les différentes

méthodes pour la prise en compte des effets quantiques dans les simulateurs particulaires de type Monte-Carlo sont présentées et le choix de l'utilisation d'une méthode de correction quantique et plus spécifiquement de la correction par le potentiel effectif est justifié.

Le chapitre 2 traite exclusivement du potentiel effectif de type gaussien, le plus répandu à l'heure actuelle, comme potentiel de correction quantique pour les approches Monte-Carlo semi-classique. Tout d'abord, nous en proposons une étude théorique et détaillons sa mise en œuvre dans un code Monte-Carlo. Ensuite, par notre mise en œuvre, nous montrons l'obtention de résultats similaires à ceux de la littérature. Dans le but d'améliorer ces derniers et en particulier de décrire correctement le profil de la densité de porteurs, une méthodologie basée sur des plans d'expériences est mise en place. Les résultats obtenus mettent en évidence les limitations de la correction par le potentiel effectif de type gaussien à reproduire correctement ces profils. Enfin, nous identifions clairement l'origine principale de la limitation de cette correction pour la prise en compte des effets de confinement quantique.

A partir de l'étude effectuée dans le chapitre 2 et plus particulièrement à partir de l'analyse des limitations du potentiel effectif de type gaussien, le chapitre 3 propose une formulation innovante de potentiel effectif : le potentiel effectif de type Pearson. Le principe de cette formulation originale repose sur une amélioration de la description du paquet d'ondes de la particule. Pour cela, nous nous sommes inspirés des allures et des dépendances des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie d'une résolution Poisson-Schrödinger. Tout d'abord, le principe de cette correction est exposé. Puis la manière dont elle a été calibrée est explicitée en détail. Enfin, nous prouvons la capacité de la correction par le potentiel effectif de type Pearson à reproduire correctement les profils de densité de porteurs dans diverses architectures de transistor à double-grille, sur SOI ou sur substrat massif.

Dans le chapitre 4, le potentiel effectif de type Pearson précédemment validé est utilisé pour la simulation Monte-Carlo avec effets de confinement quantique d'un dispositif de taille nanométrique. Tout d'abord, nous présentons une solution pour traiter de manière quantique les zones de source et drain en contact avec de l'oxyde et traitons de l'étendue de la correction en deux dimensions. Ensuite, pour une architecture de transistor à double-grille, des comparaisons de résultats Monte-Carlo semi-classique obtenus par deux approches sont présentés : notre approche Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson et une approche consistant en un couplage Monte-Carlo Schrödinger.

Chapitre 1
Le transistor MOSFET : Miniaturisation, Modélisation et Simulation

Le transistor MOS (pour Métal-Oxyde-Semi-conducteur) à effet de champ ou transistor MOSFET (pour *Field Effect Transistor*) atteint aujourd'hui des dimensions nanométriques. De par ces très faibles dimensions, des phénomènes physiques qui auparavant étaient inexistants ou négligeables deviennent désormais prédominants (transport hors-équilibre, transport balistique, effets quantiques …). Ces phénomènes sont susceptibles de remettre en cause non seulement les règles de miniaturisation utilisées jusqu'à maintenant, mais aussi l'architecture même des dispositifs. Pour l'étude prédictive et l'optimisation des futures générations de transistors au moyen de codes numériques et de simulateurs physiques appropriés, il convient donc de développer des modèles capables de quantifier l'impact de ces phénomènes sur le fonctionnement et les performances des dispositifs.

L'objectif de ce premier chapitre est double : d'une part, introduire la problématique de la simulation des transistors MOSFETs de taille nanométrique et d'autre part, justifier le choix du modèle de simulation utilisé. Dans une première partie, nous traitons de la simulation numérique en tant que méthode pour la recherche scientifique. La deuxième partie a pour objet de décrire le transistor MOSFET et les enjeux de la miniaturisation sur ce type de dispositif. La méthode de simulation particulaire de type Monte-Carlo semi-classique pour la résolution de l'équation de transport de Boltzmann y est également introduite et les effets quantiques y sont décrits. Dans une troisième partie les différentes méthodes pour la prise en compte des effets quantiques par simulation Monte-Carlo sont présentées. Enfin, les méthodes dites de corrections quantiques sont détaillées dans la quatrième partie. C'est une nouvelle approche de ce type qui est développée dans ce mémoire.

CHAPITRE 1 LE TRANSISTOR MOSFET : MINIATURISATION, MODELISATION ET SIMULATION

1.1 La simulation numérique : une méthodologie de la recherche scientifique 19
1.1.1 Les débuts de la simulation numérique et l'explosion des moyens de calcul 19
1.1.2 La simulation numérique : entre théorie et expérience 22
1.1.2.1 Théorie, modélisation et simulation 22
1.1.2.2 Les apports de l'expérience numérique 22
1.1.2.3 L'expérience peut-elle être supplantée par la simulation ? 24
1.1.3 Conclusion 25
1.2 Miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique 26
1.2.1 Principe et fonctionnement des transistors MOSFETs 26
1.2.1.1 Principe général 26
1.2.1.2 Régimes de fonctionnement des transistors MOS à canal long 27
1.2.1.3 Enjeux de la miniaturisation pour les futures générations de composants MOSFETs 30
1.2.1.4 Equation de transport de Boltzmann 33
1.2.2 Les approches de type Monte-Carlo semi-classique 35
1.2.3 Effets quantiques 38
1.2.3.1 Confinement quantique 38
1.2.3.2 Effet tunnel 39
1.2.3.3 Interférences quantiques 40
1.2.4 Conclusion 40
1.3 Modélisation du transport électronique avec prise en compte des effets quantiques par simulation Monte-Carlo 41
1.3.1 Formalisme de Wigner 41
1.3.1.1 Equation de transport de Wigner 41
1.3.1.2 Méthode du terme de collision additionnel 43
1.3.1.3 Méthode de l'affinité électronique 44
1.3.1.4 Bilan 45
1.3.2 Couplage Monte-Carlo Schrödinger 45
1.3.3 Méthodes de corrections quantiques 47
1.3.4 Bilan 49
1.4 Méthodes de corrections quantiques par simulation Monte-Carlo 50
1.4.1 Potentiel de type Wigner 50
1.4.2 Potentiel de type Bohm 51
1.4.3 Potentiel de type Schrödinger 52
1.4.4 Potentiel Effectif de type Gaussien 53
1.4.5 Bilan 54
1.5 Objectifs de l'étude 54

Chapitre 1
Le transistor MOSFET : Miniaturisation, Modélisation et Simulation

L'activité scientifique s'est longtemps articulée autour d'une démarche dialectique entre la théorie et l'expérience. Les dernières décennies ont vu la simulation numérique s'imposer comme une troisième approche dans la plupart des disciplines de la recherche et du développement (R&D) et en particulier dans le domaine de la microélectronique. Le triptyque théorie-modélisation, simulation numérique et expérimentation s'est ainsi affirmé comme le cœur du processus de R&D, soutenu par les progrès des ordinateurs et du génie logiciel.

1.1 La simulation numérique : une méthodologie de la recherche scientifique

La simulation, dit le dictionnaire, est « la représentation d'un objet par un modèle analogue, plus facile à étudier » ou encore « la représentation mathématique d'un certain nombre d'éléments pouvant intervenir sur un système, afin d'étudier les conséquences de la variation de certains de ces éléments ». La simulation numérique consiste donc à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système préalablement décrit par des modèles. Ces modèles s'expriment au travers d'équations mathématiques qui, dans les cas les plus simples, présentent des solutions analytiques. Cependant, ce n'est en général pas le cas et l'on a alors recourt à la résolution numérique effectuée à l'aide d'un ordinateur.

1.1.1 Les débuts de la simulation numérique et l'explosion des moyens de calcul

D'après de nombreux textes anciens, la première expérience de simulation date de Pythagore lui-même. Ayant entendu, comme tout le monde, les sons émis par un forgeron frappant à la masse le fer chaud sur l'enclume, il chercha, dit-on, à les reproduire, en pendant des poids divers à des cordes

qui se mirent à vibrer. Ainsi mesura-t-il pour la première fois les rapports harmoniques de tierce, de quarte, de quinte … En passant de la frappe de la masse sur l'acier aux cordes qu'il fait vibrer, Pythagore reproduit des sons ; en cherchant à les imiter, il les simule. Au XVIII^{ème} siècle, le français Pierre Simon de Laplace faisait déjà, lui aussi, des simulations. Il utilisait une version simple de modèle planétaire permettant de décrire le mouvement des planètes autour du soleil. Il effectuait ses calculs à la main en s'aidant de tables numériques telles que les anciennes tables de logarithmes. C'est ainsi que, les besoins de simulation de modèles physiques devenant de plus en plus importants, ils ont conduit à l'invention des machines à calculer programmables, les futurs ordinateurs. Par conséquent, si aujourd'hui les simulations sont tributaires de l'outil informatique, il n'en reste pas moins que du point de vue historique, ce sont les ordinateurs qui sont nés de l'idée de simulation ! C'est dans le cadre du projet Manhattan, le programme nucléaire militaire qui permit aux Etats-Unis de se doter de la première bombe atomique, que le mathématicien américain John Von Neumann, pour effectuer des calculs nécessaires à la mise au point de la bombe, s'est attelé à la fabrication du premier ordinateur qui vit le jour en 1946. Mais ce n'était pas encore de la simulation, seulement du calcul. Ce n'est qu'en 1954 que Fermi eu le premier l'idée d'utiliser un ordinateur d'une manière totalement nouvelle, c'est-à-dire d'y voir autre chose qu'un simple moyen d'accélérer les calculs : reproduire une réalité physique, simuler la réalité. En étudiant au niveau atomique l'évolution d'un cristal vers un équilibre thermique, Fermi réalise pour la première fois ce qu'on appellera une expérience numérique.

Dès lors, la simulation numérique, de manière interactive et simultanément au développement des moyens de calculs, est peu à peu venue s'ajouter à la théorie et à l'expérience en tant que nouvel outil scientifique. D'une part, les exigences toujours croissantes de la simulation ont été à l'origine de grands progrès dans les ordinateurs. Par exemple, c'est pour répondre aux gigantesques besoins de la simulation numérique pour les prévisions météorologiques que l'informaticien américain Seymour Cray a conçu les ordinateurs vectoriels dans les années 1980. D'autre part, seule l'augmentation des puissances de calculs a permis à la simulation numérique d'acquérir pleinement ses lettres de noblesse et de se démocratiser. Comme illustré par la **Figure 1.1**, ces puissances ont connu une croissance considérable associée à une diminution fulgurante du coût des calculs depuis une soixantaine d'années. Ceci est

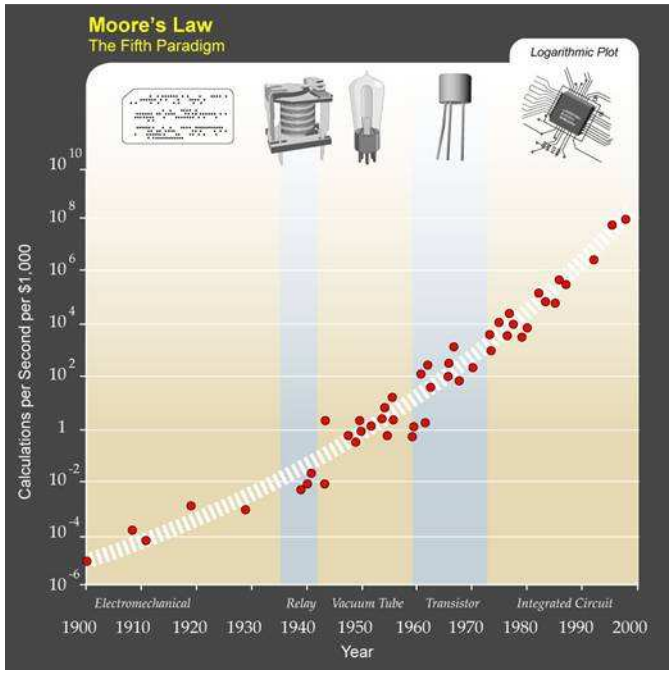


Figure 1.1 : Loi de Moore : Evolution du nombre de calculs par seconde et par dollar au fil des années [Kurzweil 01].

majoritairement dû à l'évolution du composant de base de la microélectronique : le transistor MOSFET. En effet, depuis l'énoncé du principe de ce transistor dans les années 1930 [Lilienfeld 30] puis la première réalisation pratique d'un tel transistor en 1960 [Kahng 60], celui-ci s'est imposé comme la structure de base incontournable de la microélectronique et n'a cessé d'être amélioré au fil des années. Le premier microprocesseur INTEL 4004 a ainsi vu le jour en 1971. Constitué de 2300 transistors nMOS, il effectue 60000 opérations par seconde à une fréquence d'horloge de 108 kHz. Actuellement les processeurs d'Intel comportent 140 millions de transistors fonctionnant à une fréquence d'horloge supérieure à 4 GHz. Pour se rendre compte de cette puissance phénoménale, prenons l'exemple de Tera-10, un super calculateur installé début 2006 à la direction des applications militaires du CEA [CEA 06]. Celui-ci peut effectuer 50000 milliards d'opérations à la seconde (50 téraflops), une tâche qui mobiliserait une armée de 500000 mathématiciens travaillant jour et nuit pendant cinq ans et effectuant une opération par seconde. Sa mémoire centrale et son espace disque directement accessible n'en sont pas moins phénoménaux : respectivement 30 téraoctets et 1 pétaoctet soit l'équivalent de respectivement la totalité et de 30 fois la totalité des informations de la bibliothèque nationale de France.

L'émergence des très grands calculateurs a ouvert une nouvelle approche dans la démarche scientifique : la simulation numérique. Elle est désormais devenue une pratique courante dans des domaines aussi variés que la construction, la finance, la biologie… Dans le domaine de la microélectronique, la simulation numérique constitue une part importante des processus de recherche et développement. Elle permet notamment l'optimisation des générations actuelles et le développement des futures générations de transistors MOS qui, rappelons-le, sont les composants de base de l'industrie microélectronique. Ainsi donc, le cas de la microélectronique est tout à fait atypique : la simulation numérique joue un rôle de première importance dans l'amélioration des performances des transistors MOS ; ce sont ces mêmes transistors qui sont intégrés dans les microprocesseurs et participent ainsi à la montée en puissance des calculateurs ; calculateurs qui sont indispensables à la simulation numérique. Cependant, bien que la simulation numérique soit largement utilisée, son statut épistémologique n'en reste pas moins complexe. Entre théorie et expérience, quelle est la place de la simulation numérique ? Quels sont ses rapports avec ces deux entités qui depuis toujours ont constitué le fondement du progrès scientifique ? Quels sont les atouts d'une telle méthodologie de recherche scientifique ? Est-il possible de tout simuler numériquement ? La simulation peut-elle remplacer les expériences ? Dans le paragraphe suivant quelques éléments de réponse et pistes de réflexions sont donnés. La majorité des exemples concernent la simulation numérique appliquée au domaine de la microélectronique.

1.1.2 La simulation numérique : entre théorie et expérience

1.1.2.1 Théorie, modélisation et simulation

La simulation numérique ne se réduit pas à un simple appui sur la touche « entrée » d'un ordinateur pour lancer des calculs puis à attendre patiemment que l'ordinateur effectue les tâches demandées. Simuler à l'aide de nombres n'est possible que si ces nombres sont régis par un modèle. Un modèle est alors défini comme la traduction d'un phénomène dans le langage des équations mathématiques (le seul compréhensible par un ordinateur). Ainsi, simulation et modélisation vont toujours de pair. Simuler revient donc à faire des expérimentations sur un modèle, puis à observer le comportement de ce modèle lorsque l'on fait varier les actions que l'on peut exercer sur celui-ci ; on en déduit alors ce qui se passerait dans la réalité sous l'influence d'actions analogues. Par conséquent, réaliser des simulations et interpréter leurs résultats impose une bonne connaissance du modèle utilisé, au risque d'interprétations erronées. En effet, il convient d'avoir conscience qu'un modèle n'admet qu'un domaine de validité fini, de par les hypothèses sur lesquelles il repose, les approximations qu'il contient… Simuler se révèle donc être une activité à exercer avec une grande prudence et qui requiert le respect des points suivants. Tout d'abord il est nécessaire de maîtriser la théorie inhérente aux structures et aux phénomènes étudiés. Il devient alors possible d'élaborer un modèle ou de choisir judicieusement un modèle parmi ceux existants. Le modèle choisi doit, en premier lieu, être en adéquation avec la nature de la structure et/ou du phénomène à étudier. Il convient ensuite de déterminer le niveau physique de la modélisation, ce qui implique notamment de déterminer les phénomènes qu'il est pertinent de prendre en compte ou au contraire de négliger. Enfin, il est nécessaire de s'assurer que le modèle choisi est utilisé dans sa gamme de validité (par exemple une gamme de température …). Cette démarche est celle utilisée dans ce manuscrit pour le choix du modèle de simulation des dispositifs MOSFETs de taille nanométrique.

La simulation ne peut être sans modèle à simuler. Les modèles ne peuvent être sans les théories, validées ou non par des expériences, sur lesquelles ils reposent. L'interprétation de résultats de simulation n'a de valeur que si elle est effectuée en parfaite conscience du modèle utilisé et des théories relatives aux phénomènes étudiés. La simulation numérique est donc profondément reliée à la théorie et peut être vue comme une manière de faire « parler » des théories à travers des modèles, de rendre explicite aux travers de résultats de simulation ce qui n'est qu'implicite dans des théories. Mais la simulation numérique, outre le fait de donner une dimension concrète aux théories, présente également de nombreux autres atouts dont ceux présentés dans le paragraphe suivant.

1.1.2.2 Les apports de l'expérience numérique

Les débuts de la simulation numérique (avec la première expérience numérique mise en œuvre par Fermi) ont montré que l'un des atouts majeurs de l'expérience numérique est de pouvoir dépasser les frontières de l'expérience possible. La simulation numérique permet d'explorer en détail des

phénomènes que l'on ne peut pas reproduire en laboratoire tout simplement parce que c'est impossible (galaxie) ou impensable (risques nucléaires). On simule donc par nécessité. Par exemple, dans le domaine de la microélectronique, la simulation s'avère un outil indispensable à l'étude du temps de rétention des mémoires qui est de l'ordre de 10 ans. De même, dans le domaine spécifique du transport électronique, la simulation numérique permet d'avoir accès à l'évolution d'un courant sur des échelles de temps de l'ordre de quelques picosecondes, échelles de temps trop petites pour effectuer des mesures expérimentales. La simulation permet également de connaître la limite balistique d'un transistor tout simplement en n'autorisant aucune interaction. A ce jour, de tels dispositifs ne sont pas réalisables. Enfin, la complexité des systèmes, comme une puce électronique intégrant des millions de transistors, rend les calculs à la main impossibles et la simulation numérique devient alors indispensable à la description d'autant d'éléments interconnectés entre eux. Lorsque l'expérience n'est pas possible, la simulation devient irremplaçable.

La simulation numérique est également un puissant outil d'analyse. En effet, simuler numériquement un objet comme un transistor MOSFET nécessite de le discrétiser, c'est-à-dire de le définir par un nombre fini de points appelés nœuds du maillage. Les équations régissant le fonctionnement de cet objet sont alors résolues à chaque nœud du maillage. De cette manière, tous les paramètres décrivant l'état et l'évolution de l'objet sont connus en chacun de ces nœuds. Ainsi, il est possible de visualiser directement la distribution spatiale des porteurs de charge à l'intérieur d'un transistor. Il en est de même pour bien d'autres grandeurs difficiles voire impossibles à obtenir expérimentalement. La simulation numérique permet une meilleure compréhension du fonctionnement du transistor et plus généralement de l'objet étudié.

Dans le même ordre d'idée, la simulation numérique permet de s'affranchir des imperfections et aléas de la nature et de dissocier des phénomènes indissociables dans la nature. L'étude d'un phénomène que la simulation a permis d'isoler dans une structure parfaite est alors un outil de meilleure compréhension du phénomène en question. La simulation numérique permet ainsi de simuler des structures parfaites de transistors MOSFETs : dimensions précisément définies, constantes, matériaux sans défaut … on s'affranchit ainsi de tout ce qui fait la différence entre le transistor parfait tel qu'il a été pensé et la réalisation technologique qui en est faite. Pour se replacer dans le cas de cette étude, la simulation du transistor avec et sans effets quantiques permet de quantifier l'impact de ces effets sur le fonctionnement du transistor et conduit à une meilleure compréhension de ce phénomène. Bien entendu cette expérience numérique n'est pas réalisable en laboratoire car les effets quantiques sont toujours présents dans les transistors, simplement, ils sont plus ou moins prédominants selon, par exemple, les dimensions du transistor. Les isoler pour les étudier de manière expérimentale est impossible. On touche là du doigt l'une des difficultés à comparer des résultats issus de simulations numériques avec des résultats issus d'expériences réelles pour des dispositifs complexes comme les transistors de taille nanométrique. En effet le dispositif simulé ne peut être la reproduction exacte du dispositif réel et le modèle simulé ne peut prendre en compte l'intégralité des phénomènes se produisant dans ce dispositif réel. Cependant le choix

judicieux d'un modèle prenant en compte seulement les phénomènes prédominants dans le dispositif étudié, ce qui implique au préalable une connaissance des phénomènes et du dispositif étudié, permettra d'effectuer des comparaisons valides.

La simulation numérique a également envahi le domaine de la recherche technologique et du développement industriel. Elle est désormais un outil incontournable de conception mais aussi d'optimisation à moindre coût. Si le nombre d'expériences réelles qu'il est possible de réaliser est limité de par les temps de réalisation et/ou les coûts (la réalisation de transistors MOSFETs en salle blanche est très longue et très coûteuse), la simulation numérique permet la sélection des concepts les plus pertinents par l'analyse possible d'un très vaste espace de paramètres. Les études paramétriques, susceptibles de couvrir un domaine aussi étendu que souhaité, sont facilitées et autorisent une marge d'optimisation quasi infinie. Cette étape préalable de simulation numérique permet, outre l'optimisation des concepts, de cibler au mieux les expériences à réaliser. Le recours à l'expérience étant réduit, les coûts s'en trouvent diminués, les délais raccourcis et les produits sont mis plus rapidement sur le marché. Bien entendu, tout ceci suppose que le logiciel de conception adapté à la situation soit disponible et c'est d'ailleurs dans le développement, la mise au point et la validation de ce logiciel que réside une partie du coût. La conception d'un objet passe donc par la mise au point d'un modèle issu de la théorie, le développement et la validation du logiciel adapté, la simulation de son comportement, l'optimisation de ses détails et la vérification de son bon fonctionnement par un nombre réduit d'expériences.

Enfin, simuler permet de dépasser le réel, de ne pas seulement se limiter à l'étude du réel mais d'étudier le possible. C'est ainsi qu'un des rôles majeurs de la simulation numérique est de travailler en avance de phase par rapport à la technologie. La simulation numérique accroît ainsi la capacité d'innovation car elle permet d'introduire des ruptures technologiques ou de faire sauter des verrous comme par exemple l'introduction de nouveaux matériaux ou de nouvelles structures de transistors dans le domaine de la microélectronique. L'exploration des nombreuses situations que permet la simulation numérique peut conduire à l'observation de comportements inattendus, ce qui parfois suggère des expériences et fait avancer la connaissance physique.

Dépasser les limites de l'expérience possible, mieux comprendre, mieux concevoir ou encore accroître la capacité d'innovation sont parmi les enjeux majeurs de la simulation numérique. Forte de toutes ces capacités, il est donc légitime de s'interroger sur la place de la simulation numérique vis-à-vis de l'expérience.

1.1.2.3 L'expérience peut-elle être supplantée par la simulation ?

Nous l'avons vu précédemment, il n'est pas possible de tout expérimenter (limites d'échelles d'espace ou de temps …), de la même manière il n'est pas non plus possible de tout simuler numériquement. La première limitation de la simulation numérique est inhérente aux puissances de calcul puisque certains modèles requièrent des puissances indisponibles actuellement. Une autre

limitation est d'un ordre plus fondamental, elle résulte du fait que certains phénomènes sont mal compris et par là difficilement traduisibles sous forme d'équations. Enfin, la dernière limitation est d'ordre théorique : il existe des modèles mathématiques pour lesquels aucune méthode de résolution applicable à un ordinateur dans un temps raisonnable n'est connue.

D'un autre côté, les puissances de calcul dont nous disposons actuellement permettent d'envisager, dans de nombreux domaines, des simulations qui rivalisent de qualités avec certaines expériences pour un coût bien moindre. Cependant dans la majorité des cas, c'est la comparaison de résultats expérimentaux et de résultats numériques qui permet de valider les modèles mis en œuvre dans les logiciels de simulation. De plus, un modèle présente souvent un ou plusieurs paramètres plus ou moins empirique pour lesquels, la plupart du temps, seule l'expérience est capable de fournir une valeur. Ces modèles, qui ne sont qu'une abstraction de la réalité, peuvent être progressivement affinés au fur et à mesure de l'avancée de la connaissance scientifique mais également grâce à des résultats d'expérimentations toujours plus précis. Ainsi l'expérience alimente indirectement la simulation. Et inversement, des résultats de simulation peuvent susciter de nouvelles expériences. Loin de supplanter l'expérimentation, le rôle de la simulation est donc plutôt d'appréhender le réel de manière différente et complémentaire.

1.1.3 Conclusion

Aujourd'hui, les puissances de calcul disponibles autorisent une approche numérique dans de nombreux domaines. La simulation numérique fait désormais partie intégrante de la démarche scientifique qui s'organise autour du triptyque théorie-modélisation, simulation et expérience. Loin de prendre la place de la théorie ou de l'expérience, la simulation numérique doit plutôt être considérée comme un moyen d'appréhender les phénomènes d'une manière différente, comme une forme complémentaire d'étude des phénomènes.

Dans le domaine de la recherche technologique en microélectronique, la simulation numérique est ainsi devenue un outil incontournable pour l'étude des phénomènes de transport électronique dans les dispositifs de taille nanométrique. Mais, simuler nécessite de disposer de modèles. Ainsi, une grande partie de l'activité couramment appelée simulation numérique consiste en réalité en une activité de modélisation. Ce n'est que dans un second temps que les modèles préalablement élaborés sont utilisés pour la simulation numérique à proprement parler. Notons que les modèles ne sont pas figés, ils se précisent continuellement en adéquation avec l'avancée de la recherche scientifique mais également de par l'accès à des ordinateurs toujours plus puissants. Cette augmentation incessante de la puissance de calcul est entre autre due à l'évolution de la microélectronique et de son composant de base, le transistor MOSFET sur lequel porte l'étude présentée dans ce manuscrit. Afin d'accroître toujours plus les performances des processeurs, ce transistor est condamné à devenir toujours moins encombrant spatialement tout en conservant, voire même en améliorant, ses performances. De par cette miniaturisation, le transistor MOSFET, qui est désormais de taille nanométrique, est devenu le

siège de phénomènes physiques complexes qui nécessitent l'enrichissement des modèles nécessaires à sa description. C'est dans ce contexte que, dans le paragraphe suivant, est tout d'abord introduit le transistor MOSFET. Les méthodes de type Monte-Carlo semi-classique sont ensuite présentées et leur choix pour la simulation du transport électronique dans les transistors MOSFETs de taille nanométrique est justifié. Enfin, les effets quantiques qui, de par la miniaturisation des transistors ne peuvent plus être négligés, sont décrits.

1.2 Miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique

1.2.1 Principe et fonctionnement des transistors MOSFETs

1.2.1.1 Principe général

De manière idéale, le fonctionnement du transistor MOSFET est comparable à celui d'un interrupteur de très petite taille : laisser passer ou interrompre un courant à la demande. C'est pourquoi, s'appliquant directement au traitement du langage binaire, il s'est imposé comme composant de base de la microélectronique pour les applications logiques (inverseurs, additionneurs, cellules mémoires …).

Le transistor MOSFET comporte trois électrodes : une électrode d'entrée dite de « source » ; une électrode de sortie dite de « drain » et une électrode de commande appelée la « grille » (cf. **Figure 1.2**).

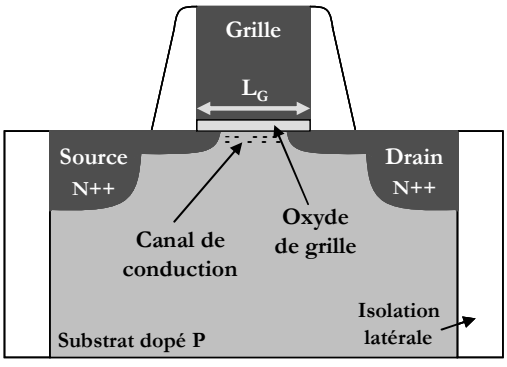


Figure 1.2 : Structure d'un transistor MOS à effet de champ de type n (nMOSFET)

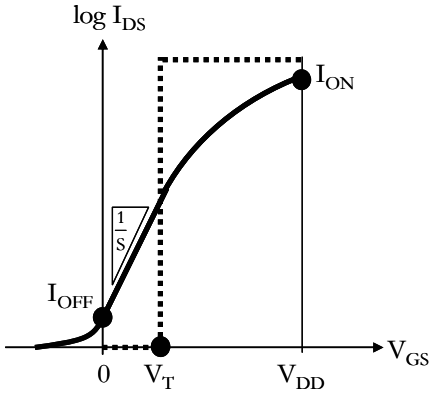


Figure 1.3 : Caractéristique de sortie $I_{DS}(V_{GS})$ d'un interrupteur (trait pointillé) et d'un transistor nMOSFET (trait plein).

Le signal appliqué sur la grille commande l'existence ou non d'une couche conductrice de porteurs libres en surface (le canal de conduction) entre la source et le drain. On distingue deux types de transistors MOS : les nMOS dont le canal de conduction est constitué d'électrons et les pMOS dont

le canal de conduction est constitué de trous. Dans toute cette étude, nous ne nous intéresserons qu'aux transistors nMOS et par conséquent nous ne détaillerons que ce type de transistor. Cependant, il est important de préciser que nMOS et pMOS fonctionnent sur le même principe. Les transistors nMOSFETs présentent des zones de source et drain dopées N, c'est-à-dire équivalentes à des réservoirs d'électrons. Le substrat est quant à lui dopé P, c'est-à-dire qu'il présente des trous libres en faible quantité vis-à -vis des électrons libres des zones de source et drain.

Un transistor nMOS est dit passant lorsqu'un nombre suffisant de porteurs se trouve dans le canal de conduction, c'est-à-dire lorsque la tension de grille V_{GS} appliquée est supérieure à une tension dite de seuil (V_T). La commande de grille est de type capacitif et s'effectue à travers une fine couche isolante : l'oxyde de grille. Le canal de conduction étant formé, le transport des porteurs entre les électrodes de source et de drain se fait sous l'impulsion d'un champ électrique induit par une différence de polarisation entre ces deux électrodes. Dans le cas d'un transistor MOS isolé, l'électrode de grille permet donc de moduler le passage d'un courant de drain (I_{DS}) d'une valeur idéale nulle, mais qui équivaut en réalité à un courant de fuite en régime sous le seuil ($V_{GS} < V_T$), à une valeur de saturation (I_{ON}) lorsque la polarisation appliquée sur la grille est égale à celle du drain ($V_{GS} = V_{DS} = V_{DD}$) (cf. **Figure 1.3**). Le principal enjeu de l'amélioration des performances du transistor MOSFET isolé pour les applications hautes performances et à faible consommation s'exprime généralement en ces termes : le rapport I_{ON}/I_{OFF} doit être aussi élevé que possible, avec I_{ON} défini comme le courant de drain lorsque $V_{GS} = V_{DS} = V_{DD}$ et I_{OFF} comme le courant de drain lorsque $V_{GS} = 0$ et $V_{DS} = V_{DD}$. De cette manière, des fréquences de commutation élevées sont autorisées par un courant I_{ON} élevé et un courant de I_{OFF} minimal permet une faible dissipation d'énergie au repos. Etudions désormais de manière plus précise les différents régimes de fonctionnement d'un transistor MOSFET à canal long.

1.2.1.2 Régimes de fonctionnement des transistors MOS à canal long

Un transistor MOSFET présente quatre régimes de fonctionnement distincts : le régime d'accumulation, le régime de désertion ou déplétion, le régime d'inversion faible et le régime d'inversion forte. Explicitons succinctement et successivement chacun de ces régimes dont les principes généraux sont résumés par la **Figure 1.4**.

Régime d'accumulation

En régime d'accumulation, les porteurs majoritaires du substrat (les trous pour un transistor nMOSFET) sont attirés à l'interface entre le semi-conducteur et l'oxyde. Il existe une barrière de potentiel entre la source et le substrat empêchant les électrons de circuler de la source vers le drain. Le transistor est à l'état bloqué.

Régime de désertion ou déplétion

Pour une tension de grille supérieure à la tension de bande plate (définie comme la tension donnant un champ électrique normal à l'interface nul) mais inférieure à la tension de seuil, les porteurs majoritaires dans le substrat sont repoussés en profondeur. Il se crée une zone de charge d'espace où

l'absence de charges libres induit une capacité de désertion (C_{DEP}). Le transistor est toujours à l'état bloqué.

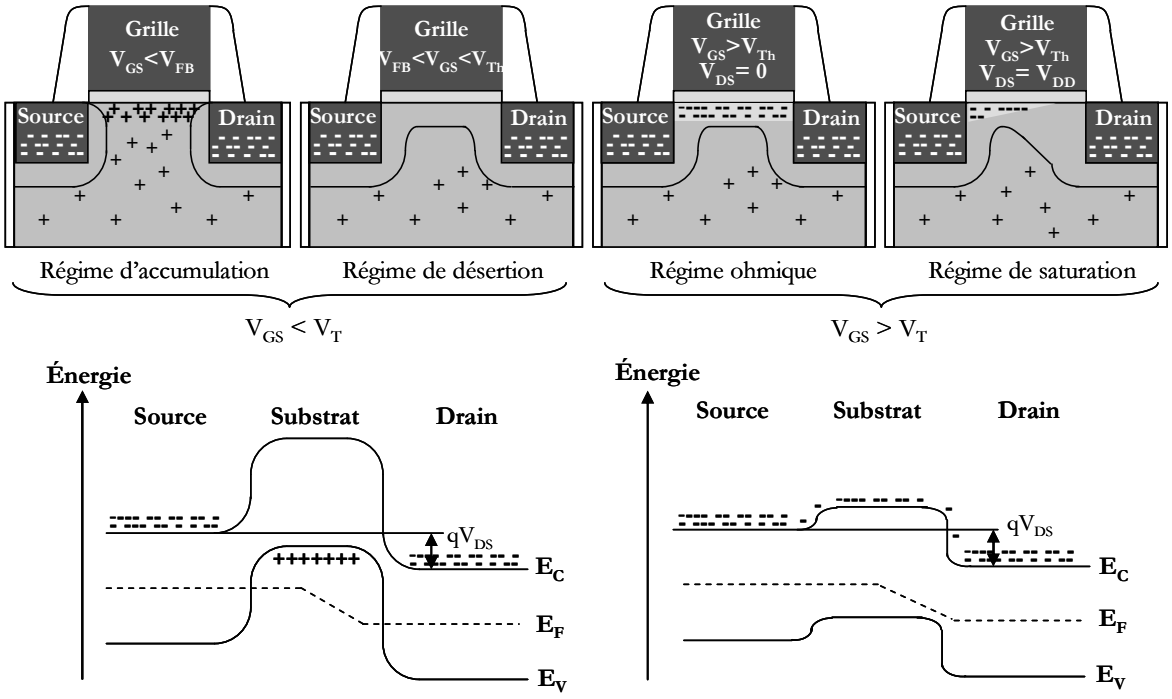


Figure 1.4 : Représentation schématique des différents régimes de fonctionnement d'un transistor nMOSFET et schéma des bandes d'énergie de la jonction source/substrat/drain dans le cas de régimes sous le seuil ($V_{GS} < V_T$) et au dessus du seuil ($V_{GS} > V_T$).

Régime de faible inversion

Les concentrations des porteurs majoritaires et minoritaires sont équivalentes. La barrière de potentiel entre la source et le canal reste importante. Seuls quelques porteurs arrivent à la franchir par activation thermique. Il en résulte un faible courant de diffusion dans le drain qui s'exprime par [Sze 81 p.446]

$$I_{DS} = \mu_0 C_{DEP} \frac{W}{L_G} \left(\frac{k_B T}{q} \right)^2 \left(1 - \exp\left(\frac{-qV_{DS}}{k_B T} \right) \right) \cdot \left(\exp\left(q \frac{V_{GS} - V_T}{n k_B T} \right) \right) \qquad (1.1)$$

avec n le facteur de pente égal à $(1+C_{DEP}/C_{OX})$, C_{DEP} la capacité de désertion du semi-conducteur, C_{OX} la capacité d'oxyde de grille, W la largeur du transistor, μ_0 la mobilité des porteurs en faible inversion (ou mobilité à faible champ transverse), k_B la constant de Boltzmann, T la température et q la charge élémentaire.

Ce courant est représenté par une droite en échelle semi-logarithmique en fonction de V_{GS} (**Figure 1.3**). La pente de cette droite correspond à l'inverse du paramètre appelé pente sous le seuil et défini par :

$$S = \frac{k_B T}{q} \ln 10 \left(1 + \frac{C_{DEP}}{C_{OX}} \right) = n \frac{k_B T}{q} \ln 10 \qquad (1.2)$$

Dans le cas idéal où C_{DEP} est négligeable devant C_{OX}, on obtient la pente théorique minimale de 60 mV/décade à 300K. Le contrôle de la pente sous le seuil est primordial pour le paramètre du courant de fuite I_{OFF}.

Régime d'inversion forte

Pour des polarisations de grille supérieures à la tension de seuil V_T, le transistor est en régime d'inversion forte et devient passant. En fonction de la polarisation de drain, deux régimes se distinguent, le régime ohmique et le régime de saturation ou régime de source de courant.

A l'état passant, lorsque qu'une tension positive est appliquée sur l'électrode de grille, il se crée une courbure de bande à l'interface oxyde/substrat. La source va donc pouvoir injecter des porteurs dans le substrat par abaissement de la barrière de potentiel de la jonction source/substrat. Ce champ électrique vertical induit par la tension de grille permet la création du canal de conduction. Lorsqu'il est associé à un champ électrique horizontal entre la source et le drain destiné à mettre en mouvement les porteurs, le transistor est fonctionnel. Pour de faibles tensions de drain, la vitesse des porteurs varie linéairement avec le champ électrique dans la direction source-drain. Un tel régime est dit ohmique ou « linéaire » car le canal se comporte comme une résistance suivant l'équation :

$$I_{DS} = \mu_{eff} C_{OX} \frac{W}{L_G} \left((V_{GS} - V_T) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right) \qquad (1.3)$$

avec μ_{eff} la mobilité effective des porteurs.

Lorsque la tension de drain V_{DS} augmente au-delà de la valeur V_{GS}-V_T, la charge d'inversion ne peut plus être considérée comme uniforme dans le canal. En effet la densité de porteurs devient nulle côté drain créant un point de pincement qui va se déplacer vers la source au fur et à mesure de l'augmentation de la tension de drain. Au premier ordre, le courant de drain ne dépend alors plus de la tension de drain mais seulement de la tension de grille. Le transistor se comporte finalement comme une source de courant commandée par V_{GS} (dans la limite des transistors à grande longueur de grille)

$$I_{DSsat} = \mu_{eff} C_{OX} \frac{W}{L_G} \left(\frac{V_{DSsat}^2}{2} \right) \quad \text{avec} \quad V_{DSsat} = \frac{V_{GS} - V_T}{n} \qquad (1.4)$$

D'après l'équation (1.4) le courant de saturation dépend directement des dimensions géométriques du transistor : réduire la longueur de grille L_G ou bien réduire l'épaisseur d'oxyde de grille, ce qui revient à augmenter la capacité d'oxyde de grille C_{OX}, entraîne une augmentation du courant de sortie. De même l'équation (1.2) indique qu'une augmentation de la capacité d'oxyde de grille permet une amélioration de la pente sous le seuil. D'où l'un des intérêts de la miniaturisation : réduire les dimensions des transistors de manière à augmenter leurs performances. Cependant, la miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique ne consiste pas en une simple réduction des dimensions mais présente de nombreux enjeux.

1.2.1.3 Enjeux de la miniaturisation pour les futures générations de composants MOSFETs

La miniaturisation du transistor à effet de champ est dictée à la fois par des arguments de coût, par la nécessité d'intégrer de nombreuses fonctions sur une surface réduite, mais aussi par la volonté d'augmenter la vitesse des circuits tout en diminuant leur consommation. Pour cela, l'un des enjeux majeurs est d'obtenir un rapport I_{ON}/I_{OFF} élevé. Dans ce paragraphe sont décrits brièvement et de manière non exhaustive quelques uns des enjeux majeurs des transistors MOSFETs de taille nanométrique. Nous renvoyons aux références pour plus de détails.

A tensions de polarisation $V_{GS} = V_{DS} = V_{DD}$ constantes, une augmentation du courant de drain I_{ON} passe notamment par une augmentation de la capacité d'oxyde ce qui équivaut à une diminution de l'épaisseur d'oxyde électrique. Cette diminution de l'épaisseur d'oxyde électrique est en premier lieu possible grâce à une diminution de la capacité physique d'oxyde donnée par $k_{ox}\varepsilon_0/T_{ox}$ avec k_{ox} la permittivité relative du matériau d'oxyde, ε_0 la permittivité du vide et T_{ox} l'épaisseur physique de l'oxyde de grille. Cependant, pour le diélectrique standard SiO_2, les générations actuelles de transistors préconisent la réalisation technologique d'épaisseurs d'oxyde inférieures au nanomètre, ce qui comporte bien des difficultés. En effet, l'obtention d'une uniformité sur une couche de quelques épaisseurs atomiques n'est pas chose aisée mais est pourtant indispensable à l'homogénéité des tensions de seuil des transistors d'une même puce électronique. De plus, pour de si faibles épaisseurs d'oxyde, les fuites par effet tunnel (cf. 1.2.3) [Momose 98] sont susceptibles de dégrader fortement les performances et en particulier le courant I_{OFF}. Une solution consiste donc à remplacer le diélectrique standard SiO_2 (k = 3,9) par un diélectrique de plus haute permittivité dit *high-k* comme l'oxyde d'hafnium (HfO_2, k = 20-25) [Guillaumot 02, Ragnarsson 05]. Il est ainsi possible d'obtenir une capacité physique d'oxyde équivalente à celle du SiO_2, tout en ayant une épaisseur physique d'oxyde plus élevée, ce qui limite les soucis de réalisation technologique de très fines couches d'oxyde et les courants de fuite. Notons cependant que l'intégration technologique de ces diélectriques haute permittivité est bien plus complexe que celle du SiO_2. Diminuer l'épaisseur d'oxyde électrique, peut également s'obtenir par le changement de matériau de la grille. En effet, les électrodes de grille standards sont en silicium polycristallin et sont la cause d'une zone de désertion à proximité de l'interface avec l'oxyde lorsque le canal est en inversion. L'utilisation d'une grille polysilicium totalement siliciurée [Kedzierski 03] ou de grilles métalliques [Guillaumot 02, Doris 03] permet alors de supprimer cette zone de désertion parasite. Précisons que le travail de sortie du métal est un critère primordial dans le choix du métal de grille car la tension de seuil du transistor en dépend directement. Notons également que, là encore, le changement de matériau de grille est une innovation technologique importante, en particulier parce que sa réalisation technologique doit être compatible avec l'ensemble du procédé de fabrication d'une puce électronique.

En diminuant la longueur de grille, c'est-à-dire en rapprochant la source du drain, certes le temps de commutation entre les états logiques du dispositif est diminué, mais la proportion spatiale du canal de conduction contrôlée par la grille l'est aussi. Ces effets dits de canal court (SCE pour *Short Channel*

Effects) peuvent se résumer à la perte du contrôle électrostatique de la grille sur le canal [Sze 81 p.469]. En effet, dans les transistors longs, la charge de désertion dans le canal est essentiellement contrôlée par la grille. Mais, lorsque la longueur de grille du transistor diminue, les régions de désertion aux jonctions source et drain restent de taille constante alors que la région du canal contrôlée par la grille diminue (cf. **Figure 1.5**). Il en résulte, dans les transistors courts, que le potentiel le long du canal peut être complètement dominé par les extensions des zones de charge d'espace autour des jonctions source et drain au détriment du contrôle de la grille. Ce partage des charges conduit à l'abaissement de la barrière du potentiel entre la source et le canal. Ce phénomène est accentué pour les fortes polarisations de drain puisqu'une augmentation de la tension de drain est la cause de l'extension de la zone de charge d'espace autour du drain. Le DIBL (pour *Drain Induced Barrier Lowering*) est alors attribué à l'influence électrostatique du potentiel de drain sur la hauteur de barrière de la jonction source/canal. La **Figure 1.6** représente l'évolution de la barrière de potentiel dans la direction source-drain pour un transistor long, pour ce même transistor avec une longueur de grille fortement diminuée (illustration du partage des charges) à faible et forte tension de drain (illustration du DIBL). Cet abaissement de la barrière de potentiel, dû aux effets de canal court entre la source et le drain est la cause d'une diminution de la tension de seuil mais aussi d'une augmentation du courant de fuite I_{OFF}.

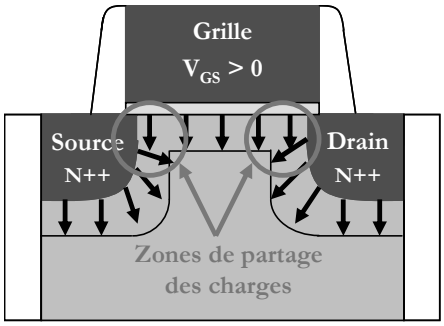


Figure 1.5 : Schéma du partage des charges de déplétion entre la source, la grille et le drain dans un nMOSFET.

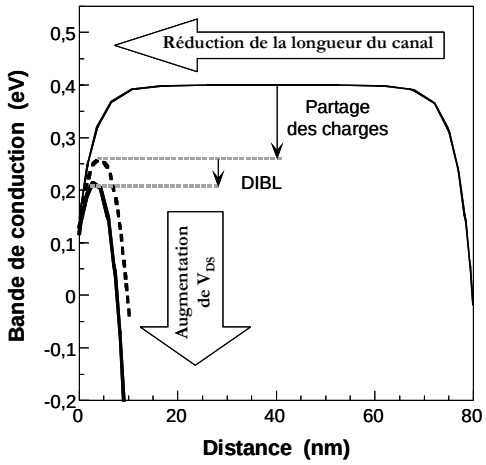


Figure 1.6 : Evolution de la bande de conduction dans le canal en fonction de la longueur de canal et de la polarisation de drain dans un transistor nMOSFET.

Afin de limiter l'impact de ces effets de canal court et donc d'augmenter le contrôle de la grille sur le canal, plusieurs solutions sont proposées dans la littérature. Le transistor sur film mince ou SOI (*Silicon on Insulator*) se distingue du transistor conventionnel par la présence d'une couche d'oxyde enterré. Ainsi, pour de très faibles épaisseurs de film, le canal d'un transistor SOI peut être complètement déserté (*Fully Depleted SOI* – SOIFD) (cf. **Figure 1.7**(a)). De cette manière, un très bon contrôle du potentiel dans le canal est autorisé ce qui limite les effets de canal court. Ceci constitue l'un des avantages majeurs des films minces de silicium.

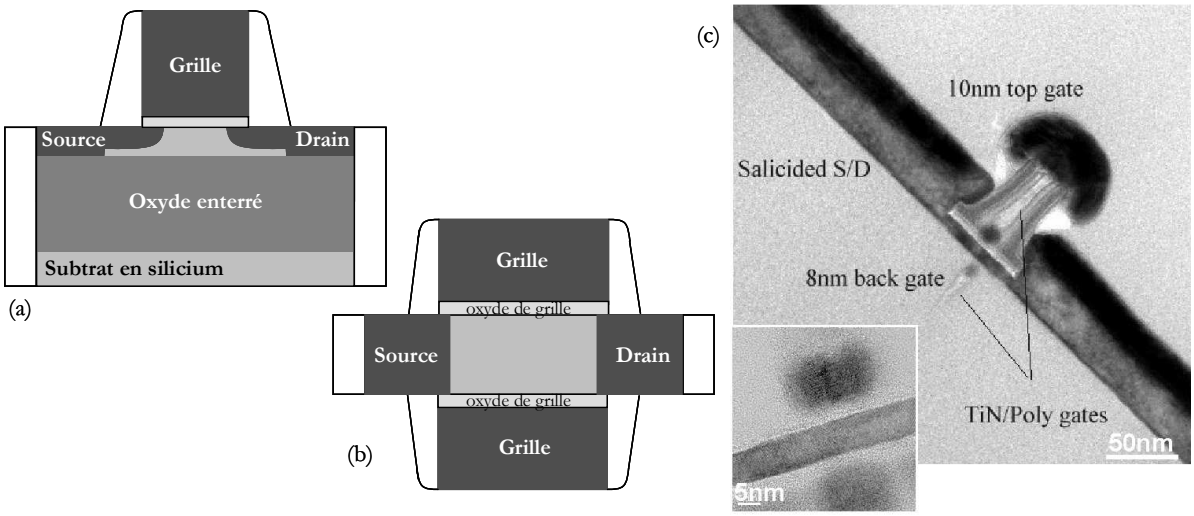


Figure 1.7 : Représentation schématique de la structure d'un transistor SOI (a) et à double-grille (b) et image TEM (Microscopie à transmission électronique) d'un transistor nMOS à double-grille [Vinet 05] (c).

Afin d'améliorer encore plus le contrôle de la grille sur le canal, une autre solution consiste en l'introduction d'une ou plusieurs grilles de contrôle supplémentaires. De telles architectures suscitent donc un réel engouement puisqu'elles permettent une diminution du courant de fuite I_{OFF} mais également un gain en courant I_{ON} de par, par exemple, la présence de deux canaux de conduction dans le cas du transistor à double-grille (cf. **Figure 1.7**(b)). De nombreuses réalisations technologiques sont proposées parmi lesquelles les architectures planaires ([Vinet 05] cf. **Figure 1.7**(c)), ou les finFET [Jahan 05]. Dans toute la suite de cette étude, les architectures à double-grille planaires, en cours d'étude au CEA-LETI [Widiez 05], constitueront nos dispositifs tests. En effet, comme il vient d'être explicité, ces architectures à grilles multiples sont reconnues comme une excellente solution pour le transistor ultime. De plus, le transistor à double-grille est intéressant pour mettre en avant les effets quantiques qui font l'objet de cette étude, et en particulier les effets de confinement quantique présents à chacune des deux interfaces oxyde-silicium.

Ces diminutions de longueurs de grille mais également d'épaisseur de film ont également un impact non négligeable sur le transport électronique. En effet, le champ électrique variant désormais rapidement dans le canal, les porteurs soumis à ce champ sont susceptibles d'acquérir des énergies très élevées que les interactions avec les phonons du réseau cristallin ne suffiront pas à ramener à leur valeur d'équilibre. On définit ainsi le transport hors-équilibre comme régissant le mouvement des porteurs lorsque le gain d'énergie des porteurs induit par le champ électrique est plus important que la puissance que peut dissiper le réseau cristallin par l'intermédiaire des interactions phonons inter-vallées [Ferry 00a, Grasser 03]. De plus, il est désormais possible que le temps mis par un porteur pour aller de la source au drain soit du même ordre de grandeur que le temps caractéristique entre deux interactions successives subies par un porteur. Ainsi, lorsqu'une proportion non négligeable des porteurs est susceptible d'aller de la source au drain en ne subissant aucune interaction, le transport est qualifié de quasi-balistique [Saint-Martin 04, Palestri 05, Eminente 05, Fuchs 06]. Enfin, lorsque la dimension des dispositifs devient de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde des porteurs, ce qui est

notamment le cas pour les très faibles épaisseurs de film, il convient de prendre en compte la nature ondulatoire des porteurs. Ces effets quantiques et leurs conséquences sur le transport électronique sont présentés en détail au paragraphe 1.2.3. Ces différents phénomènes de transport électronique sont susceptibles de jouer de manière considérable sur les performances électriques des transistors. Ils sont aujourd'hui bien identifiés et ont été abondamment étudiés ces dernières années. Par conséquent, nous ne les détaillerons pas plus et renvoyons aux références associées à chacun d'eux.

Afin d'améliorer le transport électronique dans le canal, c'est-à-dire afin d'augmenter le courant I_{ON} sans pour autant dégrader le courant I_{OFF}, l'augmentation de la mobilité dans le canal est une solution (cf. équations (1.3) et (1.4)). Rappelons ici que la mobilité traduit l'aptitude des porteurs à se déplacer sous l'effet d'un champ électrique donné. Depuis, quelques années, on s'intéresse donc à l'introduction de contraintes mécaniques dans le canal du transistor MOS. Ces contraintes sont soit introduites lors du procédé de fabrication, soit induites par le substrat lui-même. Des matériaux alternatifs dits à forte mobilité comme le silicium contraint [Rim 03], le silicium-germanium [Mizuno 03, Andrieu 05] ou le germanium [Shang 03, Clavelier 05] sont donc actuellement utilisés ou à l'étude. Notons également que les changements d'orientation cristalline du substrat sont un autre moyen d'augmenter la mobilité des porteurs [Yang 03, Weber 05].

Au-delà des quelques enjeux présentés ci-dessus, précisons que la diminution des résistances d'accès par exemple par l'introduction de sources et drains métalliques (transistors à barrière Schottky), la limitation des zones d'influence des extensions source et drain par l'implantation de poches ou encore la réduction des capacités entre le canal et les zones de source et drain par des jonctions fines sont autant de points clés des futures technologies.

Ainsi donc, les enjeux de la miniaturisation du transistor MOSFET dans le régime nanométrique sont multiples et seuls quelques uns sont évoqués ici. Ils concernent non seulement les matériaux utilisés (matériaux contraints, grilles métalliques, oxyde *high-k* …) mais également l'architecture même des transistors (transistors sur film mince, à grilles multiples …). De plus, de telles architectures sont désormais le siège de phénomènes de transport électronique complexes. L'étude du transport électronique est donc également devenu l'un des enjeux majeurs des futures générations de composants MOSFETs. Pour cela, la résolution de l'équation de transport de Boltzmann, équation fondamentale régissant le transport d'un gaz d'électrons libres, est requise. Cette équation est introduite dans le paragraphe suivant.

1.2.1.4 Equation de transport de Boltzmann

Notion de fonction de distribution

L'étude classique du transport électronique consiste en la détermination de l'évolution temporelle de l'état des porteurs dans le dispositif. Les approches classiques reposent sur l'hypothèse d'une fonction de distribution $f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$, qui décrit complètement le système étudié. Ainsi, la

grandeur $f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$ représente la probabilité de trouver à un instant t, un porteur positionné dans l'espace aux coordonnées $\vec{r}$ et présentant un vecteur d'onde $\vec{k}$. La population de porteurs est donc représentée par un gaz de porteurs 3D, dont la position et le moment sont parfaitement connus. La connaissance de la fonction de distribution permet alors d'accéder à toutes les grandeurs caractéristiques du système comme la concentration de porteurs, l'énergie des porteurs, la densité de courant …, grandeurs utiles pour l'analyse du fonctionnement des transistors MOSFETs de très petites dimensions.

Equation de transport de Boltzmann

Le transport électronique dans un matériau semi-conducteur est régi par l'équation de Boltzmann qui établit l'évolution temporelle de la fonction de distribution. Elle s'exprime d'une façon générale sous la forme :

$$\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\Big/\partial t+\vec{v}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\,f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)+\frac{\vec{F}}{\hbar}.\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)=\left[\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\Big/\partial t\right]_{coll} \qquad (1.5)$$

où $\vec{F}=q\vec{E}+q\vec{v}\times\vec{B}$ est la force extérieure appliquée avec $\vec{E}$ et $\vec{B}$ les champs extérieurs électrique et magnétique, $\vec{v}=\frac{1}{\hbar}\times\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,\varepsilon\left(\vec{k}\right)$ avec $\varepsilon\left(\vec{k}\right)$ la relation de dispersion de l'énergie et $\hbar$ la constante de Planck réduite et où $\left[\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\Big/\partial t\right]_{coll}$, appelé intégrale de collision, caractérise l'effet des collisions de toute nature (impuretés, phonons, rugosité de surface …) des porteurs avec le milieu. Dans tout la suite de cette étude nous considérons que le champ magnétique appliqué est nul $\vec{B}=\vec{0}$.

Le premier terme de l'équation (1.5) correspond à la variation de $f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$ en fonction du temps. Le deuxième terme prend en compte les variations en fonction de l'espace, directement reliées à la vitesse de groupe $\vec{v}$. Le troisième terme traduit l'effet de la force appliquée $\vec{F}$ sur le moment $\vec{k}$.

Intégrale de collision

L'intégrale de collision est définie par :

$$\left[\frac{\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)}{\partial t}\right]_{coll}=\sum_{\vec{k}',i}\left[S_i\left(\vec{k}',\vec{k}\right)f\left(\vec{r},\vec{k}',t\right)\left[1-f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\right]-S_i\left(\vec{k},\vec{k}'\right)f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\left[1-f\left(\vec{r},\vec{k}',t\right)\right]\right] \qquad (1.6)$$

où $S_i\left(\vec{k}',\vec{k}\right)$ représente la probabilité de transition d'un état $\vec{k}'$ vers un état $\vec{k}$ par une interaction de nature i, $f\left(\vec{r},\vec{k}',t\right)$ est la probabilité d'occupation de l'état $\vec{k}'$ et $\left[1-f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\right]$ est la probabilité de

non occupation d'un état $\vec{k}$.

Ainsi pour un moment donné $\vec{k}$, la variation de $f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$ due aux interactions est la somme des probabilités sur chacun des types d'interaction i et sur chacun des moments $\vec{k'}$, qu'un porteur dans un état $\vec{k'}$ subisse une interaction de type i vers l'état $\vec{k}$ moins la somme des probabilités qu'un porteur dans l'état $\vec{k}$ subisse une interaction i vers un état $\vec{k'}$.

Domaine de validité

Pour utiliser l'équation de transport de Boltzmann à bon escient, il est nécessaire de définir et d'avoir conscience de son domaine de validité. En effet, cette description semi-classique du transport repose sur l'hypothèse de séparation des échelles de temps et présente des limitations physiques. Les collisions entre particules sont considérées comme instantanées. Ceci implique l'hypothèse d'une durée de collision négligeable devant le temps séparant deux collisions (sinon, une même particule pourrait se retrouver sous l'influence simultanée de deux centres diffuseurs) ou autrement dit que seules les collisions binaires sont considérées. La mécanique quantique n'est utilisée que pour décrire la structure de bandes d'énergie et les collisions, c'est-à-dire seulement pour décrire des phénomènes liés à des variations rapides de potentiel dans le temps ou dans l'espace. La nature ondulatoire des porteurs n'est donc pas prise en compte et ceux-ci sont considérés comme des particules, dont la position et le moment sont parfaitement définis, et dont le mouvement est régi par la mécanique classique de Newton.

A ce jour, la méthode la plus précise pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann et donc étudier le transport électronique dans les dispositifs de taille nanométrique est la méthode particulaire de type Monte-Carlo. Le principe de cette méthode est exposé dans le paragraphe suivant.

1.2.2 Les approches de type Monte-Carlo semi-classique

La méthode Monte-Carlo particulaire résout de manière statistique l'équation de transport de Boltzmann. Pour cela, au lieu de calculer de façon déterministe l'évolution de la fonction de distribution, le mouvement de chacun des porteurs pris individuellement est calculé de façon probabiliste dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'onde. Ainsi, aucune hypothèse sur les grandeurs macroscopiques n'est faite puisque les porteurs sont suivis au niveau microscopique. Les principes de la méthode Monte-Carlo ayant été abondamment décrits dans la littérature (citons en particulier [Jacoboni 83, Fischetti 88, Kosina 00]), nous n'en rappelons que les grandes lignes. Le mouvement de chacun des porteurs est décrit en fonction du temps, dans les espaces réels et réciproques, comme une succession de temps de vols libres soumis au seul effet du champ électrique local et interrompus par des interactions supposées instantanées (cf. **Figure 1.8**). Ces interactions peuvent être dues aux imperfections du réseau cristallin (vibrations des atomes, présence d'impuretés) où à la présence d'interface rugueuse (interface oxyde-silicium).

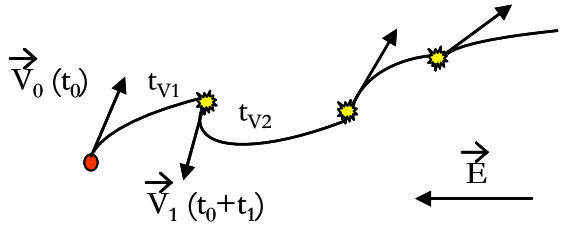


Figure 1.8 : Schématisation du principe de la méthode Monte-Carlo. Description du mouvement individuel de chaque porteur.

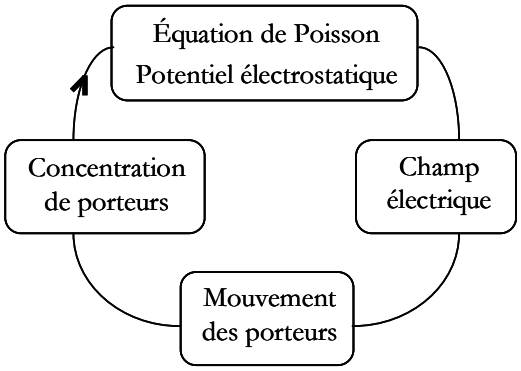


Figure 1.9 : Organigramme général de la méthode Monte-Carlo.

Le potentiel électrostatique, et donc le champ électrostatique, sont calculés par résolution de l'équation de Poisson dans un maillage, à intervalles de temps réguliers. Le calcul du mouvement des porteurs et de la distribution de champ électrostatique sont donc découplés temporellement. Ainsi, la résolution de l'équation de Poisson à chaque pas sur le temps permet d'assurer la cohérence entre le champ électrique appliqué et le mouvement des porteurs (cf. **Figure 1.9**). Le nom 'Monte-Carlo' attribué à cette méthode provient du fait que les variables aléatoires visant à déterminer la durée du vol libre, la nature de l'interaction subie à la fin du vol libre et l'effet de l'interaction sélectionnée sur l'énergie et le vecteur d'onde sont déterminés par tirage au sort sur la base de probabilités d'interaction préalablement définies (allusion aux jeux de hasards pratiqués à Monte-Carlo). La **Figure 1.10** représente l'algorithme détaillé de la résolution de l'équation de transport de Boltzmann par approche Monte-Carlo Des notions complémentaires concernant la structure de bande, le mouvement des porteurs et les fréquences d'interaction sont présentées en Annexe A.

Pour conclure, les approches de type Monte-Carlo semi-classique permettent une résolution statistique de l'équation de transport de Boltzmann. Si ce type d'approche constitue souvent une référence pour les autres simulateurs puisque qu'elle reste très proche des phénomènes physiques fondamentaux, le nombre limité de porteurs qu'il est possible de simuler peut toutefois conduire à des résultats bruités. La description rigoureuse des phénomènes physiques se fait alors au prix de temps de calcul assez longs. De plus, comme précisé dans le paragraphe 1.2.1.2, en régime de désertion ou de très faible inversion, le nombre de porteurs participant au courant est négligeable. Les approches particulaires de type Monte-Carlo ne sont donc pas bien adaptées à la description de ces régimes (pourtant possible), elles sont essentiellement limitées aux régimes d'inversion forte c'est-à-dire aux régimes pour lesquels la tension de polarisation est supérieure à la tension de seuil. Tout ceci laisse donc un certain champ libre aux approches macroscopiques comme les modèles dérive-diffusion ou hydrodynamique [Rudan 94] couramment utilisés en TCAD (pour *Technology Computer Aided Design*). Cependant, la méthode Monte-Carlo est un outil indispensable à la prise en compte des phénomènes de transport hors-équilibre et balistique qui ne peuvent plus être négligés pour les très faibles longueurs de grille. Dans toute cette étude, nous avons donc choisi de travailler avec MONACO, le

simulateur particulaire de type Monte-Carlo semi-classique développé à l'Institut d'Electronique Fondamentale de l'Université d'Orsay [Dollfus 99]. De plus, la prise en compte des effets ondulatoires s'avère désormais indispensable à l'évaluation quantitative des principales caractéristiques électriques de ces dispositifs. En effet, de par la miniaturisation des dimensions géométriques des dispositifs MOSFETs, les épaisseurs de canal ou d'oxyde de grille sont désormais proches des valeurs des longueurs d'onde des électrons λ ($\lambda = 2\pi/k = h/\sqrt{2mE}$ = 14 nm et 6,5 nm respectivement pour les porteurs à masse transverse et longitudinale dans le cas du silicium à 300K pour $E = 3/2.k_B T$). Commençons donc par définir ces effets quantiques et étudier plus précisément la manière dont ils se manifestent.

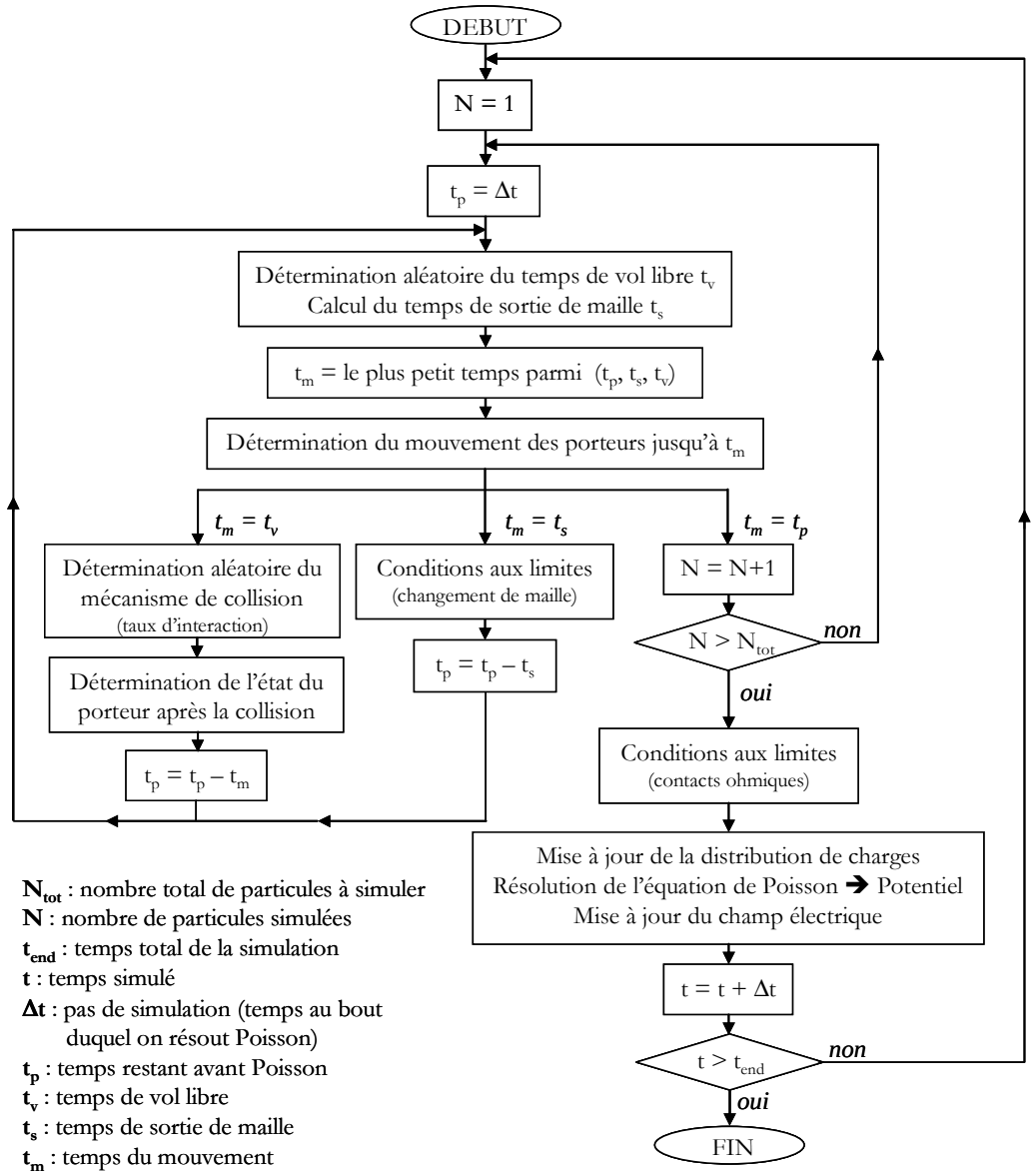


Figure 1.10 : Algorithme détaillé de la méthode Monte-Carlo semi-classique.

1.2.3 Effets quantiques

La réduction des dimensions des dispositifs jusqu'à des tailles nanométriques met en évidence des phénomènes de nature quantique, jusqu'alors considérés comme inexistants ou en grande partie négligeables. Ces effets quantiques sont essentiellement de trois ordre : les effets liés au confinement quantique, au courant tunnel ou aux phénomènes d'interférences quantiques.

1.2.3.1 Confinement quantique

Les épaisseurs de canal des dispositifs MOSFETs sont aujourd'hui proches des longueurs d'onde des électrons. En conséquence, les porteurs dans la couche d'inversion sont libres de se mouvoir parallèlement au canal de conduction. Par contre, du fait des forts champs électriques, leurs mouvements perpendiculairement à la surface du canal sont confinés dans un puits de potentiel étroit, ou puits de confinement. Ces effets de confinement se manifestent essentiellement sous deux aspects :

- ✓ la quantification de la bande d'énergie en sous-bandes (valeurs propres de l'équation de Schrödinger) dans le puits de potentiel formé à l'interface oxyde/silicium (cf **Figure 1.11**). Les porteurs dans la couche d'inversion se comportent alors comme dans un gaz à deux dimensions (au lieu d'un gaz à trois dimensions ou continuum d'énergie dans le cas classique).
- ✓ la détermination de la distribution des porteurs dans la direction transverse au transport par la superposition de fonctions d'ondes (fonctions propres de l'équation de Schrödinger) chacune associée à une sous-bande d'énergie sur lesquelles est appliquée une condition aux limites répulsive à l'interface oxyde/silicium (cf. **Figure 1.12**). Ceci a pour conséquence de décaler le maximum de la densité de porteurs à quelques nanomètres de l'interface oxyde/silicium à l'intérieur du silicium (au lieu d'un maximum à l'interface oxyde/silicium dans le cas d'une approche classique) (cf. **Figure 1.13**).

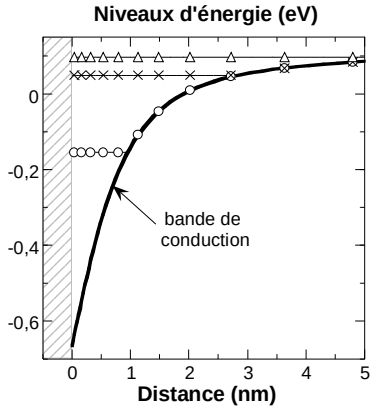


Figure 1.11 : Niveaux d'énergie dans une capacité MOS en forte inversion.

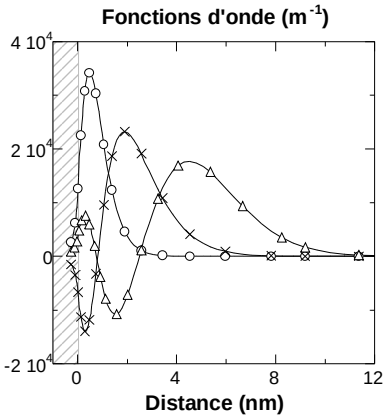


Figure 1.12 : Fonctions d'onde associées aux niveaux d'énergie dans une capacité MOS en forte inversion.

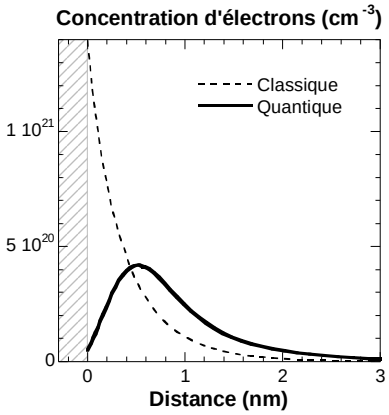


Figure 1.13 : Concentration d'électrons dans une capacité MOS en régime de forte inversion.

Ces effets de confinement ont des conséquences sur l'électrostatique du dispositif mais également sur le transport électronique. Tout d'abord les conditions aux limites appliquées sur les fonctions d'ondes aux interfaces oxyde/silicium ont pour effet de laisser apparaître une zone plus faiblement peuplée qu'en régime classique à proximité de l'interface. Il en découle une capacité d'oxyde équivalente inférieure à la capacité d'oxyde physique. Il est à noter que cet effet affecte d'autant plus l'électrostatique du dispositif que la distance de répulsion devient une part non négligeable de l'épaisseur d'oxyde physique. De plus, en raison de la quantification des niveaux d'énergie, le premier niveau d'énergie ne correspond plus au bas de la bande de conduction ; la hauteur de la bande interdite s'en trouve augmentée. De par ces deux effets, à polarisation de grille constante, lorsque les effets de confinement quantique sont pris en compte, la charge d'inversion Q_{inv} est diminuée. Il en résulte une augmentation de la tension de seuil. En ce qui concerne le transport électronique, le potentiel de surface est modifié en régime d'inversion (modification du profil de densité de porteurs) ainsi que la masse effective de conductivité des porteurs (les porteurs sont désormais répartis sur les différents niveaux d'énergie), ce qui modifie la mobilité des porteurs et donc le courant de drain.

1.2.3.2 Effet tunnel

L'effet tunnel, caractéristique de la nature ondulatoire des porteurs, est la possibilité pour une particule de traverser une barrière d'énergie même si, dans une vision classique, elle n'a pas une énergie suffisante pour la franchir. Dans les transistors MOSFETs, les porteurs ont essentiellement la possibilité de passer par effet tunnel à travers l'oxyde de grille ou bien entre les zones de source et drain à travers la barrière de potentiel du canal contrôlée par la grille.

Effet tunnel à travers l'oxyde de grille

Afin d'assurer un bon contrôle de l'électrostatique du canal de conduction par la grille, les dispositifs requièrent des oxydes de grille de plus en plus fins. Or, pour des épaisseurs d'oxyde suffisamment faibles (inférieures à 2 nm), la pénétration des fonctions d'ondes à l'intérieur de la barrière de potentiel autorise les porteurs à traverser cette barrière par effet tunnel. Ce courant tunnel dégrade profondément les caractéristiques du transistor puisque les porteurs ont la possibilité de fuir à travers l'oxyde. Le courant de fuite I_{OFF} s'en trouve augmenté et le courant de conduction I_{ON} diminué. D'autant plus important que l'épaisseur de grille est faible, le courant tunnel de grille conduit à intégrer de nouveaux diélectriques dit à haute permittivité ou *high-k* comme évoqué dans le paragraphe 1.2.1.3.

Effet tunnel entre les zones de source et de drain

La diminution extrême des longueurs de canal rend également possible le passage des porteurs par effet tunnel entre les zones de source et de drain, c'est-à-dire à travers la barrière de potentiel du canal contrôlée par la grille. Cet effet tunnel a essentiellement pour conséquence d'induire un courant de fuite supplémentaire à l'état bloqué, c'est-à-dire une augmentation du courant sous le seuil.

1.2.3.3 Interférences quantiques

Dans un traitement quantique, les porteurs sont décrits par des fonctions d'onde présentant une phase bien déterminée et qui, dans certaines conditions, sont susceptibles d'interférer, tout comme le font les ondes lumineuses en optique. Pour évaluer ces phénomènes d'interférence, appelés aussi corrélations ou cohérences, et donc les conditions dans lesquelles ils peuvent se produirent, on définit la longueur de cohérence L_ϕ comme étant la limite pour la propagation cohérente des électrons dans un solide. Les interactions qui ne modifient ni l'énergie, ni le module du vecteur d'onde de l'électron ne perturbent pas l'évolution de la phase. La valeur de L_ϕ dépend donc des processus inélastiques qui donnent lieu à la perte de cohérence de phase, c'est-à-dire essentiellement des interactions électron-phonon et électron-électron. Pour des distances plus petites que L_ϕ, les électrons ne subissent pas de processus de diffusion inélastique et leur fonction d'onde garde une phase bien définie. La cohérence de phase étant conservée, des effets d'interférences, qui généralement se traduisent sous forme d'oscillations de courant peuvent apparaître. Par contre, pour des dispositifs dont la taille est très supérieure à la longueur de cohérence, on suppose une modification aléatoire des phases par les différents processus de diffusion subis. La moyenne des interférences est alors supposée nulle. C'est dans le cas des basses températures que les processus inélastiques à l'origine de la décohérence deviennent le moins probables et conduisent alors à des longueurs de cohérence de phase atteignant typiquement quelques microns. Ainsi, à basse température (≈ 100 mK), l'exploitation de ces phénomènes d'interférences sur des échantillons de taille micrométrique est possible et est regroupée au sein de la physique qualifiée de mésoscopique.

1.2.4 Conclusion

Dans le but de diminuer leur coût de production, leur encombrement mais aussi d'améliorer leurs performances, les transistors MOSFETs, composant de base de la microélectronique, sont soumis à une miniaturisation incessante. Leurs dimensions atteignant désormais le régime nanométrique (< 100 nm), de nouveaux matériaux, voire de nouvelles architectures de dispositifs sont requis afin de minimiser la puissance dissipée mais également d'améliorer le transport électronique. Parmi ces architectures innovantes, citons en particulier le cas du dispositif à double-grille étudié au CEA-LETI et choisi comme cas test de cette étude. Outre ces améliorations que l'on pourrait qualifier de technologiques, l'un des enjeux de la miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique passe par l'étude des phénomènes de transport électronique, ce que permet notamment la simulation numérique. Cependant, pour de tels dispositifs, des phénomènes de transport comme le transport hors-équilibre, le transport balistique et les effets quantiques ne peuvent plus être négligés car ils sont susceptibles d'influencer notablement les performances électriques. Il convient donc que les modèles de simulation rendent compte de tels phénomènes. C'est pourquoi, la méthode particulaire de type Monte-Carlo semi-classique est celle retenue pour cette étude. Par la résolution statistique de l'équation de transport de Boltzmann, cette méthode est en effet très proche

des phénomènes physiques fondamentaux et permet une description précise du transport électronique hors équilibre. Cependant, dans les approches Monte-Carlo semi-classique, les effets quantiques ne sont pas pris en compte. Or, nous venons de le montrer, ces effets quantiques peuvent jouer un rôle important sur les caractéristiques électriques des dispositifs (tension de seuil, mobilité des porteurs, courant de fuite, courant de drain en régime d'inversion …). Il convient donc de développer des modèles de transport électronique incluant ces effets. En conséquence de quoi, le prochain paragraphe dresse un état de l'art des méthodes actuellement utilisées pour inclure les effets quantiques dans les approches particulaires de transport de type Monte-Carlo.

1.3 Modélisation du transport électronique avec prise en compte des effets quantiques par simulation Monte-Carlo

A ce jour, de par l'importance du rôle que peuvent jouer les effets quantiques sur les performances électriques des dispositifs, l'introduction de ces effets dans les méthodes de simulation de type Monte-Carlo semi-classique constitue un réel enjeu. C'est pourquoi différentes approches permettant de coupler les effets quantiques à une méthode particulaire de type Monte-Carlo sont proposées dans la littérature. Il est à noter qu'actuellement, aucune de ces approches ne s'avère idéale, chacune présentant ses avantages et ses inconvénients. L'objet de ce paragraphe est d'exposer brièvement les principes et les caractéristiques essentielles de chacune de ces approches mais également de justifier le choix de celle utilisée pour cette étude. Dans un premier temps, nous nous intéressons aux méthodes basées sur la résolution de l'équation de transport de Wigner. Ensuite, le couplage d'un code Monte-Carlo avec une résolution de l'équation de Schrödinger est présenté. Enfin, le principe de la résolution de l'équation de transport de Boltzmann modifiée par un potentiel de correction quantique est explicité. Pour plus de détails, nous renvoyons aux références relatives à chacune de ces approches.

1.3.1 Formalisme de Wigner

1.3.1.1 Equation de transport de Wigner

La description de l'état macroscopique d'un système à l'équilibre peut être paramétré par un certain nombre de variables locales : concentration, vitesse, énergie, ... (l'état du système est alors inconnu à l'échelle microscopique). Ces grandeurs physiques doivent être traitées comme des moyennes statistiques effectuées sur toutes les particules du système. En mécanique classique, ces moyennes statistiques sont obtenues à partir de la fonction de distribution (Boltzmann ou Fermi-Dirac). En mécanique quantique, c'est la matrice densité qui joue le rôle de la fonction de distribution [Cohen-Tannoudji 95 p.295]. La fonction de Wigner est alors définie comme la transformée de Fourier de la matrice densité.

En mécanique classique, le transport est régi par l'équation de Boltzmann (cf. équation (1.5)), c'est-à-dire l'évolution de la fonction de distribution $f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$ dans le temps. En mécanique quantique, par analogie au cas classique, l'évolution de la fonction de Wigner $f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$ dans le temps est régie par l'équation de transport de Wigner [Wigner 32, Ferry 95, Jacoboni 01] :

$$\frac{\partial f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)}{\partial t}+\vec{v}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\, f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)+Qf_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)=\left[\frac{\partial f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)}{\partial t}\right]_{coll} \tag{1.7}$$

où le deuxième terme est le terme de diffusion et le troisième terme décrit l'évolution de la fonction de Wigner f_w due au potentiel $V(\vec{r})$. Il est donné par :

$$Qf_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int V_w\left(\vec{r},\vec{k}\right)f_w\left(\vec{r},\vec{k}+\vec{k}',t\right)d\vec{k}' \tag{1.8}$$

avec le potentiel de Wigner V_w au point $\vec{r}$ défini comme la transformée de Fourier de la différence du potentiel du dispositif autour du point central $\vec{r}$

$$V_w(\vec{r},\vec{k})=i\int\left[V\left(\vec{r}+\frac{\vec{r}'}{2}\right)-V\left(\vec{r}-\frac{\vec{r}'}{2}\right)\right]\exp\left(-i\vec{k}\vec{r}'\right)d\vec{r}' \tag{1.9}$$

Bien qu'une interprétation physique de la fonction de Wigner soit difficile, son évolution dans le temps est régie par une équation de transport proche de l'équation de transport de Boltzmann (cf. équation (1.7)) mais en considérant cette fois la non-localité des porteurs et celle du potentiel. En particulier, les effets d'interférences quantiques sont présents par l'intermédiaire du potentiel non-local de l'équation (1.8). Ce potentiel redistribue la fonction de Wigner sur différents vecteurs d'ondes $\vec{k}$ à chaque position $\vec{r}$. L'importance de cette redistribution dépend du potentiel à des positions éloignées de $\vec{r}$ (cf. équation (1.9)). De cette manière les interférences entre les différents chemins parcourus par les particules sont incorporées aux équations. Ainsi la fonction de Wigner, contrairement à la fonction de distribution de Boltzmann, peut présenter des parties négatives qui caractérisent les effets d'interférences quantiques [Ferry 95, Jacoboni 01].

De par la capacité de la méthode Monte-Carlo à résoudre l'équation de transport de Boltzmann et des similitudes qui existent entre les équations de transport de Boltzmann et Wigner, il semble prometteur de résoudre l'équation de transport de Wigner par la méthode Monte-Carlo. A ce jour, deux tentatives ont été présentées. L'une, développée par l'équipe de Nedjalkov [Nedjalkov 04], repose sur la présence d'un terme de collision additionnel. L'autre, initiée par l'équipe de Ferry [Shifren 01] et améliorée par [Querlioz 06a], repose sur la notion d'affinité électronique. Le principe de chacune de ces approches est brièvement explicité ci-dessous.

1.3.1.2 Méthode du terme de collision additionnel

D'après les équations ((1.7) à (1.9)), en séparant le terme classique $q\vec{E}$ du potentiel de Wigner, l'équation de transport de Wigner peut s'exprimer sous la forme suivante [Kosina 03]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\vec{v}\vec{\nabla}_{\vec{r}}+q\vec{E}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\right)f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)=\left[\partial f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\Big/\partial t\right]_{coll}+\Theta\left[f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\right] \tag{1.10}$$

avec $\Theta[f_w]$ l'opérateur potentiel de Wigner

$$\Theta\left[f_w\left(\vec{r},\vec{k},t\right)\right]=\frac{-1}{2\pi\hbar}\int V_w\left(\vec{r},\vec{k}\right)f_w\left(\vec{r},\vec{k}+\vec{k}',t\right)\,d\vec{k}' \tag{1.11}$$

et

$$V_w'(\vec{r},\vec{k})=i\int\left[V\left(\vec{r}+\frac{\vec{r}'}{2}\right)-V\left(\vec{r}-\frac{\vec{r}'}{2}\right)+q\vec{r}'\vec{E}\right]\exp\left(-i\vec{k}\vec{r}'\right)d\vec{r}' \tag{1.12}$$

L'équation de transport de Wigner avec un terme de collision de Boltzmann (cf. éq. (1.7)) peut donc être interprétée comme l'équation de transport de Boltzmann avec un terme de collision additionnel $\Theta[f_w]$ appelé terme de génération provenant du potentiel de Wigner (éq. (1.10)). Dans la limite classique, ce terme disparaît et l'on retrouve l'équation de transport de Boltzmann.

Le potentiel de Wigner pouvant prendre des valeurs positives et négatives [Ferry 95, Jacoboni 01], ce terme de collision supplémentaire ne peut pas être interprété directement comme une probabilité d'interaction. Cependant, l'antisymétrie du potentiel de Wigner par rapport à $\vec{k}$, permet de l'exprimer comme une différence de deux fonctions positives $V_w'\left(\vec{r},\vec{k}\right)=V_w^+\left(\vec{r},\vec{k}\right)-V_w^+\left(\vec{r},-\vec{k}\right)$ avec V_w^+ égal à V_w si le potentiel de Wigner est positif et de valeur nulle autrement. L'opérateur potentiel étant désormais défini positivement, on introduit $\gamma\left(\vec{r}\right)=\int V_w^+\left(\vec{r},\vec{k}\right)d\vec{k}$ interprété comme le taux de collision dû au potentiel de Wigner. L'opérateur potentiel peut alors s'exprimer de la manière suivante [Kosina 03]:

$$\Theta\left[f_w\left(\vec{r},\vec{k}\right)\right]=\int V_w^+\left(\vec{r},\vec{k}'\right)\left[f_w\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)-f_w\left(\vec{k}+\vec{k}'\right)\right]d\vec{k}' \tag{1.13}$$

L'équation (1.13) ne décrit pas une collision dans le sens où un état initial est annihilé et un état final est créé. Elle décrit plutôt la création de deux nouveaux états, $\vec{k}-\vec{k}'$ et $\vec{k}+\vec{k}'$, la génération de ce dernier état entraînant le changement de signe du poids statistique de la particule.

Ainsi, des interactions cohérentes des porteurs avec la structure du dispositif sont prises en compte par le potentiel de Wigner et donnent lieu à la génération de paires de particules de signe opposé. Le signe de ces particules introduites numériquement les différencie des particules classiques. Ce signe est une propriété importante des particules puisque les particules positives et négatives

peuvent s'annuler entre elles. Le transport régi par l'équation de Wigner-Boltzmann est donc une succession de vols libres, interactions, générations et annulations de particules. Un tel algorithme est par conséquent numériquement complexe. Dans les régions de traitement quantique du transport, la difficulté de ce type de méthode est de gérer proprement le nombre très important de particules à traiter (rappelons qu'une collision avec le potentiel de Wigner génère deux nouvelles particules). Ceci rend difficile la convergence de la procédure.

1.3.1.3 Méthode de l'affinité électronique

Afin de décrire complètement la fonction de Wigner (parties positives et négatives) la solution présentée par Shifren et Ferry [Shifren 01, Shifren 03] et récemment améliorée par Querlioz et Dollfus [Querlioz 06a] consiste à assigner à la particule une propriété supplémentaire appelée affinité électronique. L'affinité est un poids donné à la pseudo-particule qui peut être positif ou négatif et qui caractérise la contribution de la charge d'un électron à la charge totale du système. Le système conservant une nature particulaire, il est possible de travailler avec une approche Monte-Carlo tout en autorisant les électrons à ne contribuer que de manière partielle à la densité de probabilité. Les pseudo-particules ainsi définies, évoluent comme des particules classiques dans l'espace réel et dans l'espace des phases. En effet, elles interagissent de manière classique avec les phonons et les impuretés mais l'évolution de leur amplitude ou affinité est déterminée par le potentiel de Wigner.

La fonction de Wigner, donnant l'accès aux grandeurs macroscopiques du système est calculée à partir de l'emplacement et de l'affinité des particules :

$$f_w\left(\vec{r},\vec{k}\right)=\sum_i \delta\left(\vec{r}-\vec{r_i}\right)\delta\left(\vec{k}-\vec{k_i}\right)A(i) \tag{1.14}$$

où $\vec{r_i}$, $\vec{k_i}$ et A(i) sont respectivement la position, le moment et l'affinité de la particule 'i'. Il est intéressant de remarquer que si toutes les particules ont une affinité de 1 (présence positive, une particule classique est caractérisée par une affinité constante et égale à 1), alors la fonction de Wigner $f_w\left(\vec{r},\vec{k}\right)=\sum_i \delta\left(\vec{r}-\vec{r_i}\right)\delta\left(\vec{k}-\vec{k_i}\right)A(i)$ est toujours positive et devient la fonction de distribution classique (probabilité de trouver une particule dans un état d'énergie ε pour une position $\vec{r}$).

La charge totale des porteurs est alors donnée par :

$$Q_{TOT}=\sum_{i=1}^{N} A(i) \tag{1.15}$$

qui indique que N, le nombre de particules simulées, doit être plus grand que Q_{TOT} car A(i) n'est pas toujours égal à 1. La sommation sur tous les états possibles du système donne une probabilité de trouver les particules égales à 1 pour une position $\vec{r}$ donnée. La fonction de Wigner déterminée, il devient alors possible de calculer le potentiel quantique de Wigner à partir des équations (1.11) et (1.12). Il conviendra alors de mettre à jour la position, le moment et l'affinité des porteurs.

Contrairement à la méthode du terme de collision additionnel, cette méthode à pour principaux avantages de se coupler relativement aisément à un code Monte-Carlo semi-classique et d'être naturellement auto-cohérente.

1.3.1.4 Bilan

Les deux méthodes présentées ci-dessus pour résoudre l'équation de transport de Wigner sont globalement très proches et présentent des degrés d'approximation similaires. Ces méthodes ont été principalement appliquées à des diodes tunnel résonnantes [Nedjalkov 04, Shifren 01, Shifren 03, Querlioz 06a] où elles ont été démontrées comme capables d'inclure les effets quantiques que sont l'effet tunnel et les effets d'interférences. Ces méthodes permettent donc une étude précise de la physique des dispositifs de très petites dimensions dans la direction du transport électronique puisque qu'en particulier les interactions et les effets quantiques sont pris en compte. Cependant, à ce jour et à notre connaissance, les méthodes de résolution de l'équation de transport de Wigner en deux dimensions sont encore au stade de l'étude. C'est pourquoi les approches en cours de développement pour le transistor MOSFET et utilisant l'équation de transport de Wigner consistent en fait un en couplage des résolutions de l'équation de transport de Wigner dans la direction du transport, de l'équation de Schrödinger dans la direction du confinement (cf. paragraphe suivant) et de l'équation de Poisson en deux dimensions [Sverdlov 05 (résultats sans auto-cohérence), Querlioz 06b]. Enfin, précisons que les résolutions de l'équation de transport de Wigner par méthode Monte-Carlo requièrent des temps de calcul ou temps CPU (pour *Central Computer Unit*) très importants et sont donc limités à l'étude de très petits dispositifs.

1.3.2 Couplage Monte-Carlo Schrödinger

L'approche traitée dans ce paragraphe et que nous appellerons couplage Monte-Carlo Schrödinger est actuellement plus connue en littérature sous le nom *multi-sub-band Monte-Carlo*. Initiée par les travaux de l'équipe de Fischetti [Fischetti 93], elle été reprise et complétée dans les références suivantes dont la liste n'est pas exhaustive [Williams 00, Ezaki 03, Lucci 05, Saint Martin 06]. Le principe de ce type d'approche est de découpler la direction du transport y, pour laquelle le mouvement des porteurs est supposé semi-classique, de la direction transverse au transport x, pour laquelle les porteurs sont confinés et leur énergie est supposée être quantifiée sur toute l'épaisseur du film de silicium. Ainsi donc les porteurs dans le canal étant libres de se mouvoir parallèlement au canal mais leurs mouvements perpendiculaires étant confinés dans un puits de potentiel étroit, la modélisation du transport des porteurs se fait dans un gaz 2D et non plus dans un gaz 3D comme dans le cas classique. Ceci nécessite notamment de reformuler les modèles d'interaction et les fréquences associées en gaz 2D. Afin d'expliciter le fonctionnement général d'une méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger, l'algorithme des principales étapes d'une telle méthode est présenté sur la **Figure 1.14**.

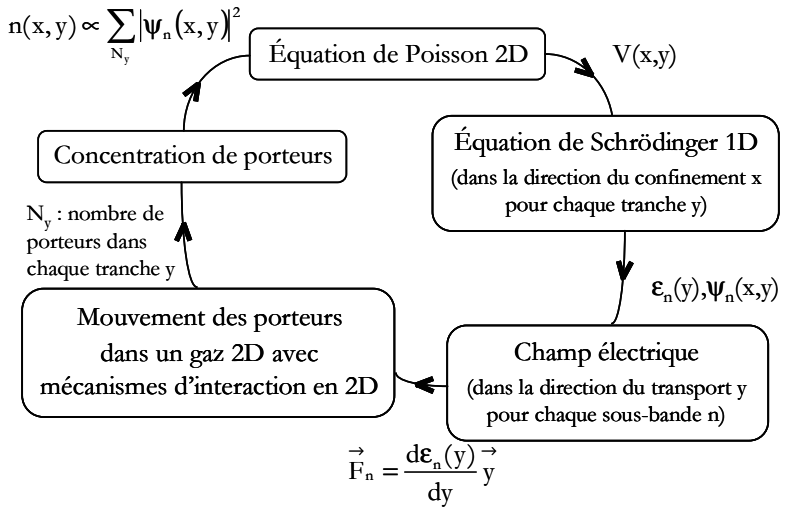


Figure 1.14 : Organigramme général de la méthode de couplage Monte-Carlo-Schrödinger.

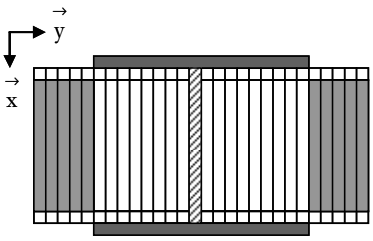


Figure 1.15 : Schéma d'une structure double-grille divisée en tranches Schrödinger.

Le dispositif simulé est divisé en tranches dans la direction du transport y appelées tranches Schrödinger (cf. **Figure 1.15**). Dans chacune de ces tranches, le profil de potentiel étant connu, l'équation de Schrödinger est résolue dans la direction du confinement x et permet d'obtenir les niveaux d'énergie $\varepsilon_n(y)$ et leur fonction d'onde associée $\psi_n(x,y)$. La connaissance de l'évolution des niveaux d'énergie dans la direction du transport permet d'accéder au champ électrique. En effet, le champ électrique subi par un porteur de la sous-bande n est donné par la dérivée première du niveau d'énergie ε_n dans la direction du transport y. Ainsi donc, le mouvement des porteurs est une succession de vols libres, régis par le champ électrique dépendant du niveau d'énergie auquel le porteur appartient, interrompus par des interactions, dont les mécanismes et les fréquences ont été reformulées pour un gaz 2D. A la fin du mouvement des porteurs, le nombre de porteurs sur chacune des sous-bandes d'énergie n dans chacune des tranches Schrödinger est connu. Pour chacune des tranches, la charge des électrons présents est repartie dans la direction du confinement x en fonction de leur probabilité de présence $|\psi_n(x,y)|^2$. La résolution de l'équation de Poisson à partir de la densité de charge donne accès au potentiel de Poisson à laquelle succède une nouvelle résolution de l'équation de Schrödinger dans chacune des tranches. Les itérations se succèdent ainsi en fonction du temps. Il y a donc auto-cohérence entre les résolutions de l'équation du transport 1D (axe y), de l'équation de Schrödinger 1D (axe x) et de l'équation de Poisson 2D.

Le principal avantage de ce type d'approche est d'avoir accès à la connaissance des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde dans la direction transverse au transport par la résolution de l'équation de Schrödinger. Les effets quantiques dans la direction du confinement sont ainsi pris en compte de manière physique et sans aucun paramètre ajustable. De plus, les mécanismes d'interaction et les fréquences associées peuvent être formulées en gaz 2D. Le transport peut ainsi être effectué dans les différentes sous-bandes. A ce jour, ce type d'approche pour la simulation du transport électronique est pour le moment seulement appliqué aux dispositifs double-grille à film très mince

[Lucci 05, Saint Martin 06]. Ceci, afin que les directions du transport et du confinement puissent être découplées et que tous les porteurs puissent être considérés comme étant dans un gaz 2D. Bien que la coexistence de gaz de porteurs de dimensionnalité 2D et 3D dans le canal ait été étudiée [Monsef 02], elle n'est pour le moment pas intégrée dans la simulation auto-cohérente de composants. Cependant, pour les longueurs de canal simulées avec ce type d'approche (L_{canal} < 10 nm), l'approximation semi-classique dans la direction du transport devient largement critiquable car le courant tunnel entre la source et le drain n'est plus négligeable [Kawaura 00]. En conséquence de quoi, des travaux récents et évoqués dans le paragraphe précédent mettent en œuvre des méthodes Monte-Carlo permettant de coupler une résolution de Schrödinger dans la direction transverse au transport avec une résolution de Wigner dans la direction du transport [Sverdlov 05, Querlioz 06b]. Cependant, tout comme la résolution de l'équation de transport de Wigner, la résolution de l'équation de Schrödinger dans un code Monte-Carlo est très fortement consommatrice en temps CPU. Le couplage de ces deux résolutions est donc limité à l'étude de dispositifs de taille extrêmement réduite (transistor à double-grille d'épaisseur de film de 3 nm et de longueur de canal de 6 nm [Querlioz 06b]).

1.3.3 Méthodes de corrections quantiques

Le principe de la méthode de potentiel de correction quantique consiste à incorporer, dans un simulateur Monte-Carlo, un terme de potentiel de correction quantique qui vient corriger le potentiel électrostatique classique vu par les particules. L'idée de ces potentiels de correction quantique vient de la formulation hydrodynamique de la mécanique quantique, tout d'abord introduite par de Broglie et Madelung [Madelung 1926] et ensuite développée par Bohm [Bohm 52] (cf. Annexe B). Le rôle de cette correction de potentiel est de reproduire le plus fidèlement possible les effets physiques induits par la quantification. Afin de déterminer précisément le principe de cette méthode et d'en comprendre le protocole de simulation, la

Figure 1.16 établit un parallèle entre la méthode bien connue de Poisson-Schrödinger et le fonctionnement d'un code Monte-Carlo corrigé par potentiel de correction quantique. Pour les deux méthodes, un potentiel et une densité de porteurs "classiques" constituent les conditions initiales (courbes en traits pointillés). Dans le cas d'une résolution Poisson-Schrödinger, à partir du potentiel de Poisson, la résolution de l'équation de Schrödinger permet de calculer les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes associées. On en déduit alors la concentration quantique de porteurs représentée en trait plein. En ce qui concerne le Monte-Carlo corrigé, le potentiel de correction quantique a pour objet de modifier le champ électrique de manière à ce que la densité de porteurs induite par ce champ électrique soit quantique, c'est-à-dire qu'elle présente une allure similaire à celle obtenue par la résolution de l'équation de Schrödinger. Le potentiel de correction responsable d'un tel mouvement de porteurs doit donc présenter une allure générale décroissante aux interfaces (courbe avec des cercles) afin de générer un champ électrique répulsif à ces interfaces. Enfin, dans le cas de Poisson-Schrödinger, la résolution de l'équation de Poisson à partir de la densité de porteurs quantique conduit à un potentiel quantique présentant une courbure aux interfaces supérieure à celle du

potentiel semi-classique et dont l'allure est représentée en trait plein. Dans le cas de Monte-Carlo corrigé, la densité de porteurs induite par la correction quantique étant semblable à celle obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger, la résolution de l'équation de Poisson conduit logiquement à un profil de potentiel quantique analogue. Dans les deux méthodes, les algorithmes sont re-bouclés jusqu'à l'obtention d'une auto-cohérence entre la densité de porteurs et l'équation de Poisson.

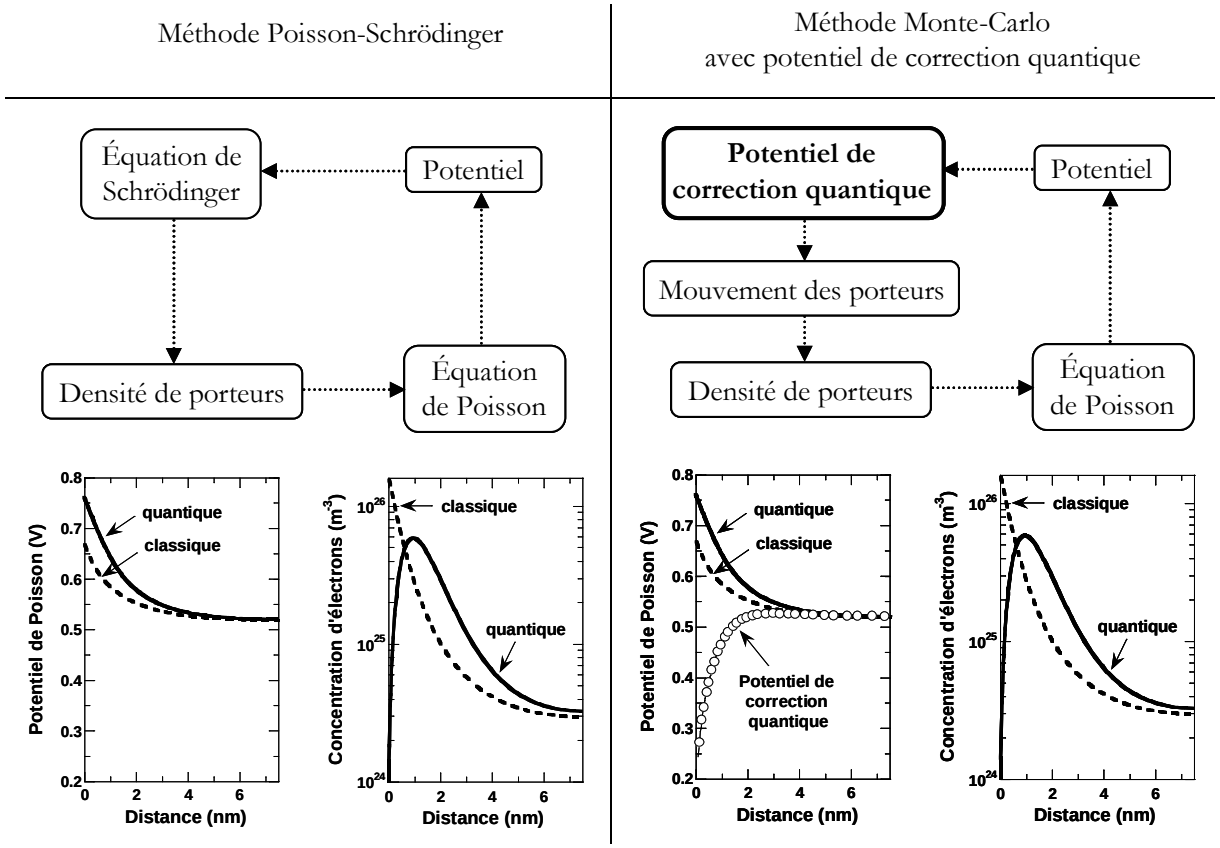


Figure 1.16 : Principe de la méthode de potentiel de correction quantique.

Ainsi, en l'absence de champ électromoteur induit par une différence de polarisation entre la source et le drain, l'algorithme Monte-Carlo avec potentiel de correction quantique devrait se comporter de manière similaire à celui d'une résolution Poisson-Schrödinger. La résolution de l'équation de Schrödinger est remplacée par le calcul du potentiel de correction et le mouvement des porteurs. Il est cependant important de noter que dans ce type d'approche, les équations du mouvement restent identiques à celles de l'approche Monte-Carlo classique. Seule la force exercée sur chaque particule pendant le temps de vol libre est modifiée :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \quad \text{et} \quad \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\, V_{corrigé} \tag{1.16}$$

Les corrections quantiques n'agissent que sur le libre parcours des porteurs. Les fréquences d'interaction restent identiques au cas classique. Notons que la simple modification des forces appliquées sur les particules résulte invariablement en une fonction de distribution positive alors que la fonction de Wigner peut être localement négative. Cette approche n'est donc pas une

représentation exacte de la mécanique statistique quantique puisqu'elle ne peut pas rendre compte des effets d'interférences quantiques. Cependant, elle permet de représenter certains effets quantiques telle que la répulsion des porteurs aux interfaces avec des barrières d'énergie. De plus, elle présente l'avantage d'être relativement aisée à mettre en œuvre dans un simulateur et à coupler au transport électronique. En effet, il ne s'agit au premier abord que d'une modification de l'expression du potentiel dans un code Monte-Carlo semi-classique. A ce jour, cette méthode de correction de potentiel en deux voire trois dimensions a été appliquée à des dispositifs à double-grille, SOI ou sur silicium massif (*bulk*) sans limitation supérieure des dimensions de ces dispositifs et sans pour autant augmenter considérablement le temps de calcul par rapport à des simulations Monte-Carlo semi-classique [Winstead 01, Kathawala 03, Palestri 03, Tang 03]. Dans la direction du confinement, les résultats obtenus ont notamment montré la capacité de cette méthode à repousser les porteurs des interfaces oxyde-silicium et à diminuer la charge d'inversion par rapport à une simulation semi-classique. Quatre formulations majeures de potentiel de correction quantique ont été identifiées dans la littérature. Elles sont détaillées et discutées dans le paragraphe 1.4.

1.3.4 Bilan

Du fait de la miniaturisation des transistors MOSFETs dans le régime nanométrique, les effets quantiques ne peuvent plus être négligés. Il devient donc nécessaire de les modéliser. Pour cela, l'approche Monte-Carlo, qui permet non seulement de prendre en compte le transport hors-équilibre, mais également le transport balistique a été retenue. En effet, cette méthode permet de rendre compte au mieux de la physique du transport dans les composants. De plus, largement utilisée ces dernières années, elle a été démontrée comme une méthode sûre et robuste pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann.

L'étude présentée dans ce manuscrit est réalisée dans le cadre d'une thèse CIFRE, le choix de la méthode de prise en compte des effets quantiques dans un code Monte-Carlo semi-classique doit donc respecter certaines contraintes liées à l'industrie et plus généralement aux centres de recherche et développement. Tout d'abord, les temps de calculs doivent être raisonnables. Ce critère doit cependant être nuancé de par la mise à disposition de puissances de calculs toujours plus importantes. Egalement, les modèles développés doivent pourvoir s'appliquer aux architectures de transistors en cours de développement comme le transistor SOI ou le transistor à double-grille, mais également aux architectures en cours de production, c'est-à-dire essentiellement le transistor sur silicium massif (*bulk*). En plus des architectures, les modèles doivent également s'appliquer aux dimensions des dispositifs en cours d'étude et de production (A ce jour (2006) les transistors MOSFETs en production ont une longueur de canal d'environ 45 nm). Enfin, le modèle utilisé doit pouvoir tenir compte des effets quantiques dans toutes les directions, c'est-à-dire qu'il doit pouvoir s'appliquer au minimum en deux voire trois dimensions. Par conséquent, dans cette étude, pour inclure les effets quantiques dans un simulateur particulaire de type Monte-Carlo, nous avons fait le choix d'utiliser la méthode de potentiel de correction quantique. Cependant, il est évident qu'une telle méthode, bien

qu'elle reproduise certains effets quantiques, ne permet pas de décrire rigoureusement l'ensemble de ces effets. Il sera alors intéressant de comparer les résultats obtenus par modification de potentiel avec ceux obtenus par des approches plus rigoureuses comme le couplage Monte-Carlo Schrödinger. Cela étant, commençons tout d'abord par détailler les différentes formulations de potentiel de correction quantique proposées dans la littérature.

1.4 Méthodes de corrections quantiques par simulation Monte-Carlo

1.4.1 Potentiel de type Wigner

L'approche du potentiel de correction de type Wigner est basée sur le formalisme de Wigner pour lequel le mouvement des porteurs est traité classiquement mais avec une force quantique non-locale. Elle a été principalement développée par l'équipe de Tsuchiya et nous renvoyons aux références suivantes pour plus de détails [Tsuchiya 99, Tsuchiya 01]. Dans cette approche, l'équation de Wigner est exprimée sous la forme suivante

$$\frac{\partial f_w}{\partial t}+\vec{v}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\,f_w-\frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{r}}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,U\left(\vec{r}\right)f_w+\sum_{\alpha=1}^{\infty}\frac{(-1)^{\alpha+1}}{\hbar 4^{\alpha}(2\alpha+1)!}\left(\vec{\nabla}_{\vec{r}}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\right)^{2\alpha+1}U\left(\vec{r}\right)f_w=\left[\frac{\partial f_w}{\partial t}\right]_{collision} \tag{1.17}$$

Par rapport à l'équation de transport de Boltzmann, elle fournit un terme supplémentaire dans la formulation du potentiel de conduction (le quatrième terme) qui caractérise la présence d'effets quantiques. Le potentiel de correction de type Wigner repose sur un développement au premier ordre de ce terme supplémentaire assimilé à une force de conduction quantique F^Q. Ainsi, l'équation de transport de Wigner sépare formellement les contributions classique et quantique dans l'équation du mouvement :

$$\frac{\partial f_w}{\partial t}+\vec{v}.\vec{\nabla}_{\vec{r}}\,f_w+\frac{1}{\hbar}\left(-\vec{\nabla}_{\vec{r}}\,U+F^Q\right).\vec{\nabla}_{\vec{k}}\,f_w=\left[\frac{\partial f_w}{\partial t}\right]_{collision} \tag{1.18}$$

Le système étant supposé proche de l'équilibre, c'est-à-dire que la fonction de distribution peut s'exprimer sous la forme d'une maxwellienne déplacée, et l'approximation des bandes paraboliques étant considérée, la force de conduction quantique F^Q s'exprime sous la forme suivante :

$$F_x^Q=\frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{-1}{24\beta}\left[\left(\gamma_x^2\Delta k_x^2-3\gamma_x\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+3\left(\gamma_y^2\Delta k_y^2-\gamma_y\right)\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\ln\left(\frac{n}{N_C}\right)\right\} \tag{1.19}$$

avec N_C la densité d'état effective, $\gamma_i=\beta\hbar^2/m_i$ où $\beta=1/k_BT$, avec $\Delta k_i=k_i-\overline{k_i}$ où $\overline{k_i}$ est le moment moyen du déplacement de la fonction de distribution et avec $i=(x,y)$.

Notons que cette formulation présente une dépendance explicite en fonction des moments. Une approximation au premier ordre des moments utilisant l'énergie thermique, c'est-à-dire

$\hbar^2\left(k_x-\overline{k_x}\right)^2/2m_x \cong \hbar^2\left(k_y-\overline{k_y}\right)^2/2m_y \cong k_B T/2$, permet d'obtenir les forces quantiques dans une direction x comme étant simplement représentées par :

$$F_x^Q = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar^2}{12m_x}\frac{\partial^2 \ln\left(n/N_C\right)}{\partial x^2}\right] \tag{1.20}$$

Pour conclure, la formulation du potentiel de correction quantique de type Wigner semble assez naturelle puisqu'elle découle de calculs relativement simples portant sur le terme supplémentaire au premier ordre de l'équation de transport de Wigner. De plus, cette correction a montré des résultats comme des profils de concentration de porteurs dans une capacité MOS en accord avec des simulations Poisson-Schrödinger [Winstead 01, Tsuchiya 03]. Précisons tout de même qu'afin d'ajuster la densité de porteurs à l'interface, un unique paramètre ajustable permettant d'assigner une faible charge à l'oxyde est nécessaire. La difficulté de ce potentiel de correction réside dans le fait qu'il s'exprime comme la dérivée troisième de la densité de porteurs. Or les résultats issus d'un code Monte-Carlo sont caractérisés par leur bruit particulaire, ce qui rend difficile le calcul d'une telle dérivée troisième. C'est pourquoi cette approche requiert soit des lissages préalables de la concentration de porteurs (avec toutes les approximations induites) soit une technique pour moyenner spatialement le potentiel de correction [Ogawa 03]. Cependant, d'une part ces méthodes ne sont pas très satisfaisantes et d'autre part, bien qu'elles améliorent considérablement les choses, l'obtention d'une stabilité numérique associée à une précision suffisante reste difficile à obtenir. C'est pour cette raison, c'est-à-dire pour s'affranchir de l'importante sensibilité au bruit, que le potentiel de correction de type Bohm a été développé.

1.4.2 Potentiel de type Bohm

Le potentiel de correction quantique de type Bohm, plus connu en littérature sous le nom *Effective Conduction Band Edge* ou ECBE [Wu 03a, Wu 03b, Tang 03] est basé sur l'interprétation de Bohm et Madelung [Bohm 52] de l'équation de Schrödinger pour une particule (cf. Annexe B). Pour un état stationnaire et pur, l'interprétation de Bohm conduit à une énergie propre ε égale à :

$$\varepsilon = V\left(\vec{r}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\sqrt{n/N_C}}{\sqrt{n/N_C}} = V\left(\vec{r}\right) - \frac{\hbar^2}{4m}\left[\nabla^2 \ln\left(\frac{n}{N_C}\right)n + \frac{1}{2}\left(\ln\left(\frac{n}{N_C}\right)\right)^2\right] \tag{1.21}$$

Cette équation est aussi connue comme décrivant le modèle *density-gradient* [Ancona 89]. De plus, on remarque que le terme $V\left(\vec{r}\right) - \frac{\hbar^2}{4m}\nabla^2 \ln\left(n/N_C\right)$ est similaire à un facteur près au potentiel de correction quantique de type Wigner présenté dans le paragraphe précédent. Pour obtenir la correction ECBE, l'énergie propre ε est remplacée par un potentiel effectif total V_{eff}. En considérant une distribution de Boltzmann à l'équilibre, c'est-à-dire $n\left(\vec{r}\right) \propto N_C \exp\left(-V_{eff}\left(\vec{r}\right)\Big/k_B T\right)$, l'équation (1.21) devient :

$$\nabla^2 V_{eff}\left(\vec{r}\right) - \frac{1}{2k_B T}\left(\nabla V_{eff}\left(\vec{r}\right)\right)^2 = \frac{4mk_B T}{\hbar^2}\left(V_{eff}\left(\vec{r}\right) - V\left(\vec{r}\right)\right) \quad (1.22)$$

L'équation (1.22), appelée ECBE, est valide à l'équilibre thermique mais une généralisation de cette équation en régime hors-équilibre a également été développée [Wu 03b]. De plus, rappelons que l'équation (1.21) n'est valide que dans le cas d'un état pur. Ainsi, l'équation (1.22) peut être vue comme la représentation d'une correction quantique au premier ordre de l'équation de transport de Boltzmann prenant en compte l'effet des porteurs occupant uniquement le niveau quantifié de plus basse énergie [Tang 03].

L'équation ECBE permet d'exprimer le potentiel de correction quantique de type Bohm comme la solution d'une équation différentielle du second ordre. Par conséquent, l'évaluation de ce potentiel de correction ne nécessite que très peu de temps CPU additionnel. De plus, par comparaison au potentiel de type Wigner, le potentiel de type Bohm présenté ici a pour principal avantage de s'affranchir du terme en gradient de densité de porteurs et donc du bruit particulaire inhérent aux simulations Monte-Carlo. Cependant, il est à noter qu'afin d'assurer la répulsion des porteurs aux interfaces oxyde-silicium, une condition aux limites « virtuelle » (non détaillée dans la littérature) est appliquée à ces interfaces [Wu 03a]. Enfin, la valeur de la masse effective dans la direction transverse au transport est considérée comme un paramètre ajustable et est calibrée par comparaison avec une résolution de Poisson-Schrödinger 1D [Wang 02].

1.4.3 Potentiel de type Schrödinger

Le potentiel de type Schrödinger, développé par l'équipe de Ravaioli [Winstead 03, Kathawala 03, Fan 04], repose sur la connaissance de la densité de porteurs quantique issue d'une résolution de l'équation de Schrödinger. Comme dans un couplage Monte-Carlo Schrödinger (cf. paragraphe 1.3.2), le dispositif est découpé en tranches dans la direction du transport y. De par l'algorithme Monte-Carlo, le potentiel de Poisson est connu en chaque point du dispositif. Dans chacune des tranches, c'est-à-dire dans la direction du confinement x, l'équation de Schrödinger est résolue en supposant une densité de porteurs régie par la distribution de Maxwell-Boltzmann et donne accès à la densité électronique quantique n_q. Il a été montré que l'utilisation de la relation de Maxwell-Boltzmann, qui ne suppose pas la prise en compte de la dégénérescence, permet tout de même de rendre compte correctement de la concentration de porteurs même dans le cas de régimes fortement dégénérés [Winstead 03]. Cette densité permet de calculer le potentiel de correction quantique de type Schrödinger V_S comme :

$$V_S(x,y) = -k_B T_t \log(n_q(x,y)) - V_P(x,y) + V_0 \quad (1.23)$$

avec V_P le potentiel de Poisson issu de la simulation Monte-Carlo, V_0 une condition aux limites arbitraire définie telle que la correction quantique soit nulle dans la limite du cas classique, k_B la constante de Boltzmann. Le paramètre local T_t a la dimension d'une température et est appelé

température transverse. Il permet de prendre en compte le couplage entre les niveaux quantifiés dans la direction transverse et le transport le long du canal. En effet, l'équation de Schrödinger traite seulement l'électrostatique dans la direction du confinement sans aucune connaissance du processus de transport. Le paramètre température transverse permet ainsi d'étendre cette correction quantique à la direction du transport. Il est important de noter que contrairement au couplage Monte-Carlo Schrödinger, dans cette approche de correction quantique, la densité de porteurs quantique $n_q(x)$ n'est utilisée que pour le calcul du potentiel de correction quantique. Une fois la correction quantique appliquée, le traitement du transport dans le canal et les fréquences d'interaction sont identiques au cas semi-classique.

Pour conclure, cette méthode permet de reproduire très précisément dans la direction du confinement les profils de densité de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger et ceci sans aucun paramètre ajustable. Notons que ce résultat est plutôt rassurant puisque l'expression du potentiel de correction quantique, dont l'objectif est de faire évoluer les porteurs vers une configuration similaire à une résolution de Poisson-Schrödinger, nécessite la connaissance même de cette configuration.

1.4.4 Potentiel Effectif de type Gaussien

Le potentiel effectif est une formulation développée à l'origine par Feynman [Feynman 65] dans le cadre d'études d'électrodynamique quantique et ensuite reprise entre autre par [Ferry 00b, Palestri 03] pour des applications MOSFETs. Cette correction repose sur le fait qu'une particule ne ressent pas seulement l'effet du potentiel local à la position où elle se trouve mais également l'effet des potentiels voisins. Contrairement aux potentiels de type Wigner et Bohm, le potentiel effectif est donc une fonction non locale. Ainsi, dans le cas classique, le paquet d'ondes de la particule peut être considéré comme un pic de distribution de Dirac positionné à l'emplacement de la particule et alors seul le potentiel à la position de cette distribution de Dirac influence la particule. Dans le cas quantique, la charge de la particule est considérée comme non locale. Son paquet d'ondes, dans le cas du potentiel effectif de type gaussien, est alors représenté par une distribution gaussienne centrée sur la position de la particule. Ainsi, la particule est non seulement influencée par le potentiel local à sa position mais également par tous les potentiels voisins, c'est-à-dire les potentiels touchés par l'étalement de la distribution gaussienne. Ceci revient à considérer le potentiel effectif de type gaussien comme étant la convolution du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne représentant le paquet d'ondes de la particule :

$$V_{eff}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int V(x').\exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{2\sigma^2}\right)dx' \qquad (1.24)$$

Le paramètre σ, étalement de la distribution gaussienne, peut être traité comme un paramètre ajustable assimilé à la taille du paquet d'ondes de la particule (paramètre discuté dans le chapitre 2).

Contrairement au potentiel de type Wigner, cette formulation est bien adaptée aux simulations Monte-Carlo car elle est insensible au bruit particulaire.

1.4.5 Bilan

Les corrections quantiques sont un moyen d'introduire les effets quantiques dans les simulateurs Monte-Carlo semi-classique. A ce jour, essentiellement quatre formulations différentes de potentiels de correction quantique ont été identifiées. Le potentiel effectif de type gaussien présente une formulation simple et a priori aisée à mettre en œuvre dans les simulateurs en plusieurs dimensions. De plus, il ne nécessite pas la résolution de l'équation de Schrödinger et est tout à fait adapté aux simulations Monte-Carlo. Le potentiel effectif de type gaussien est celui que nous avons choisi pour démarrer cette étude.

1.5 Objectifs de l'étude

Dans la première partie de ce chapitre, la simulation numérique a été présentée comme un outil désormais incontournable pour étudier le transport électronique dans les dispositifs de taille nanométrique. En effet, outre un gain de temps et d'argent lié à la limitation des réalisations technologiques de tels dispositifs en salle blanche, la simulation numérique est un puissant outil d'analyse qui permet l'étude détaillée d'objets et/ou de phénomènes physiques. Elle permet également d'accroître la capacité d'innovation en ne se limitant pas à la simulation du réel. Ceci implique que les modèles, indispensables à toute simulation, doivent être en phase voire même en avance de phase par rapport à la technologie afin d'aider à la compréhension de phénomènes dans les dispositifs existants ou à l'optimisation des générations technologiques, voire même afin d'évaluer de futures architectures.

C'est dans ce contexte qu'il convient d'introduire les effets quantiques dans les modèles de simulation. En effet, comme évoqué dans la deuxième partie de ce chapitre, ces effets sont susceptibles de jouer un rôle important sur les caractéristiques des dispositifs de taille nanométrique (< 100 nm) et ne peuvent donc plus être négligés. L'objet de l'étude présentée dans ce manuscrit est ainsi d'inclure les effets quantiques dans un simulateur particulaire de type Monte-Carlo afin d'étudier leur impact sur le fonctionnement des dispositifs. Cette étude ne cherche donc pas à améliorer les performances des transistors mais à évaluer l'influence des effets quantiques sur leurs performances. Pour cela, nous avons choisi comme dispositif test un transistor MOSFET à double-grille, architecture en cours d'étude au CEA-LETI. En effet, cette architecture permet de limiter les effets de canal court inhérents aux dispositifs de tailles nanométriques et donc de conserver de bonnes performances électriques. De plus, de par la présence non pas d'une seule mais de deux grilles, ce type d'architecture est des plus critiques pour les effets quantiques : des effets de confinement quantique ont lieu à chacune des deux interfaces oxyde-silicium. Cependant, comme nous le verrons par la suite,

les modèles présentés dans ce manuscrit ne sont pas limités aux dispositifs à double-grille mais s'appliquent également aux dispositifs SOI ou encore à des dispositifs plus conventionnels comme le transistor sur silicium massif ou *bulk*.

Comme explicité dans le premier paragraphe de ce chapitre, l'étude présentée dans ce manuscrit présente deux aspects liés à toute activité de simulation numérique. Dans un premier temps, nous nous intéressons uniquement au modèle à simuler (chapitres 2 et 3). Tout d'abord, les origines du modèle et son domaine de validité sont étudiés. Ensuite, il est traité de sa mise en œuvre dans un simulateur Monte-Carlo. Enfin, sa validité ou non pour la prise en compte des effets quantiques est déterminée. Ce n'est que dans un deuxième temps que le modèle, ainsi étudié et validé, est utilisé pour la simulation Monte-Carlo avec effets de confinement quantique de dispositifs de taille nanométrique (chapitre 4).

Parmi les différentes approches permettant d'inclure les effets quantiques dans un code Monte-Carlo, notre choix s'est porté sur les méthodes de correction quantique et plus particulièrement sur la correction par le potentiel effectif de type Gaussien. En effet, les principaux avantages de cette approche sont d'être relativement aisée à mettre en œuvre dans un simulateur Monte-Carlo et à coupler au transport électronique, de ne pas nécessiter énormément de temps CPU additionnel même en plusieurs dimensions et de s'appliquer à différentes architectures de dispositifs sans contrainte de dimensions maximales. Elle est donc tout à fait adaptée aux applications d'ingénierie. Cependant, comme déjà évoqué précédemment, l'introduction des effets quantiques dans un simulateur Monte-Carlo constitue à ce jour un réel enjeu, pour lequel aucune méthode ne s'avère idéale. Cette thèse a donc également pour objectif d'évaluer la pertinence d'une approche de potentiel de correction quantique comme le potentiel effectif de type Gaussien pour la prise en compte des effets quantiques. Le deuxième chapitre de ce manuscrit est ainsi entièrement dédié à la correction par le potentiel effectif de type Gaussien. Nous évaluerons notamment la limite de cette approche et nous en proposerons une amélioration.

Chapitre 2
Le Potentiel Effectif de type Gaussien

Pour l'étude des transistors MOSFETs de taille nanométrique il n'est plus possible de considérer comme négligeables certains effets tels que les effets quantiques. Il convient donc de mettre au point des modèles de simulation qui, tout en décrivant précisément les phénomènes physiques du transport électronique, permettent de rendre compte de l'influence des effets quantiques sur le fonctionnement de ces dispositifs. Pour introduire ces effets dans un code Monte-Carlo semi-classique applicable à différentes architectures de transistor tout en conservant des temps de calcul raisonnables, l'utilisation d'un potentiel de correction quantique est judicieuse. Parmi ces potentiels, le potentiel effectif de type gaussien est bien adapté aux simulations Monte-Carlo, présente une facilité de couplage avec le transport électronique et est aisément généralisable en plusieurs dimensions.

Ce deuxième chapitre a pour objet l'étude détaillée du Potentiel Effectif de type Gaussien couramment utilisé en tant que potentiel de correction quantique pour l'introduction des effets quantiques dans un code Monte-Carlo. Son objectif majeur est l'évaluation de la capacité de ce potentiel effectif à reproduire les effets de confinement quantique. Il est donc à noter que, dans ce chapitre, seuls des calculs de densité de porteurs et de potentiel dans des capacités double-grille sont présentés. Dans une première partie, nous présentons une étude théorique du potentiel effectif de type gaussien. La mise en œuvre de cette correction quantique dans un simulateur de type Monte-Carlo est détaillée dans la deuxième partie. La troisième partie traite de la capacité du potentiel effectif de type gaussien à reproduire les effets de confinement quantique. Enfin, la quatrième partie permet de mettre en évidence les limitations de ce potentiel de correction quantique.

CHAPITRE 2 LE POTENTIEL EFFECTIF DE TYPE GAUSSIEN

2.1 Etude théorique 59
2.1.1 Origines du Potentiel Effectif de type Gaussien 59
2.1.1.1 Introduction 59
2.1.1.2 Intégrale de chemin 62
2.1.1.3 Théorie des perturbations autour de l'équilibre thermodynamique 65
2.1.1.4 Bilan 67
2.1.2 Interprétation du Potentiel Effectif de type Gaussien 68
2.1.2.1 Fonction d'onde et paquet d'ondes 68
2.1.2.2 Paquet d'ondes et Potentiel Effectif de type Gaussien 70
2.1.2.3 Produit de convolution 71
2.1.3 Conditions aux limites 72
2.1.4 Résumé 74
2.2 Mise en œuvre dans un code Monte-Carlo 74
2.2.1 Méthodologie générale du programme 74
2.2.1.1 Introduction 74
2.2.1.2 Contraintes numériques inhérentes au calcul d'un produit de convolution par transfromée de Fourier 71
2.2.1.3 Algorithme général du code 79
2.2.2 Calcul du Potentiel Effectif de type Gaussien 80
2.2.3 Auto-cohérence entre le mouvement des porteurs et le potentiel effectif 82
2.2.4 Conclusion 83
2.3 Potentiel Effectif de type Gaussien et effets de confinement quantique 84
2.3.1 Influence des paramètres spécifiques au Potentiel Effectif de type Gaussien 84
2.3.1.1 Influence de la hauteur de barrière d'énergie : E_B 84
2.3.1.2 Influence de l'étalement du paquet d'ondes de la particule : σ_x 85
2.3.1.3 Bilan 85
2.3.2 Etat de l'art 86
2.3.3 Résultats 87
2.3.4 Conclusion 89
2.4 Limitations de Potentiel Effectif de type Gaussien 89
2.4.1 Limitations d'ordre « expérimental » 89
2.4.1.1 Méthodologie des plans d'expériences 90
2.4.1.2 Quantification de l'erreur 90
2.4.1.3 Méthodologie inspirée des plans d'expériences mise en place 92
2.4.1.4 Résultats 92
2.4.2 Limitation d'ordre « empirique » 97
2.4.3 Limitation d'ordre théorique 98
2.5 Conclusion 100

Chapitre 2
Le Potentiel Effectif de type Gaussien

Le premier chapitre de ce manuscrit introduit le potentiel effectif de type gaussien comme un potentiel de correction quantique pour les simulations Monte-Carlo. Cependant, avant d'étudier les capacités de ce potentiel effectif à prendre en compte les effets de confinement quantique, commençons par en faire une étude théorique détaillée, afin de préciser les origines mais également la signification d'une correction quantique par un tel potentiel.

2.1 Etude théorique

2.1.1 Origines du Potentiel Effectif de type Gaussien

2.1.1.1 Introduction

Opérateur densité et matrice densité

Afin d'expliciter la provenance de la formulation du potentiel effectif de type gaussien, il convient d'introduire quelques notions spécifiques à la mécanique quantique, parmi lesquelles la notion fondamentale de matrice densité. Ce paragraphe ayant été largement inspiré de [Cohen-Tannoudji 95, p. 297], nous renvoyons à cette référence pour plus de détails.

La résolution de l'équation de Schrödinger considère que le système est dans un état unique décrit par un vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \qquad \text{avec } \hat{H} \text{ l'hamiltonien du système} \tag{2.1}$$

Cet état est parfaitement connu, ce qui conduit à définir la notion d'état pur. Le vecteur d'état $|\psi\rangle$ à l'instant t est alors exprimé comme une superposition linéaire d'états :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|u_n\rangle \tag{2.2}$$

où les $\{|u_n\rangle\}$ forment une base orthonormée discrète et les coefficients c_n satisfont la relation :

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = 1 \tag{2.3}$$

qui exprime que $|\psi\rangle$ est normée.

La valeur moyenne d'une grandeur physique A dans l'état pur $|\psi\rangle$ est donnée par :

$$\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_{n,m}\langle u_n|A|u_m\rangle c_n^*(t)c_m(t) = \sum_{n,m} A_{nm}\, c_n^*(t)c_m(t) \tag{2.4}$$

Le produit $c_n^*(t)c_m(t)$ ainsi défini peut s'exprimer, d'après l'équation (2.2), sous la forme :

$$\langle u_m|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|u_n\rangle = c_n^*(t)c_m(t) \tag{2.5}$$

Il est donc naturel d'introduire l'opérateur densité, défini par :

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \tag{2.6}$$

Cet opérateur densité est représenté dans la base $\{|u_n\rangle\}$ par une matrice, appelée matrice densité, dont les éléments sont :

$$\rho_{mn}(t) = \langle u_m|\hat{\rho}(t)|u_n\rangle = c_n^*(t)c_m(t) \tag{2.7}$$

Montrons désormais que la connaissance de la matrice densité définie ci-dessus suffit à caractériser l'état quantique du système. Pour cela, écrivons les équations (2.1), (2.3) et (2.4) en fonction de l'opérateur densité. D'après l'équation (2.1), l'évolution dans le temps de l'opérateur densité est :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) &= \left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - \frac{1}{i\hbar}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\hat{H}(t)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}(t),\hat{\rho}(t)\right]\end{aligned} \tag{2.8}$$

La relation (2.3) indique que dans le cas d'un état pur, la somme des éléments diagonaux de la matrice, symbolisée par la trace de la matrice Tr, est égale à 1 :

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \rho_{nn}(t) = \mathrm{Tr}\,\rho(t) = 1 \tag{2.9}$$

Enfin, l'équation (2.4) devient :

$$\langle A\rangle(t) = \sum_{n,m}\langle u_m|\hat{\rho}(t)|u_n\rangle\langle u_n|A|u_m\rangle = \sum_m \langle u_m|\hat{\rho}(t)A|u_m\rangle = \mathrm{Tr}\{\rho(t)A\} \tag{2.10}$$

Ainsi, en terme d'opérateur densité, la conservation de la probabilité s'exprime par l'équation (2.9), la valeur moyenne d'une observable se calcule par la formule (2.10) et l'évolution dans le temps obéit à l'équation (2.8). La matrice densité, représentation de l'opérateur densité dans une base, suffit donc à décrire complètement l'état quantique d'un système.

Enfin, intéressons-nous à la signification physique de la matrice densité. D'après l'équation (2.7), les éléments diagonaux de la matrice densité s'expriment par :

$$\rho_{nn} = |c_n|^2 \tag{2.11}$$

avec $|c_n|^2$ interprété physiquement comme étant la probabilité de trouver le système dans l'état $|u_n\rangle$. On appelle pour cette raison ρ_{nn} la population de l'état $|u_n\rangle$. Quant aux éléments non-diagonaux, ils s'expriment de la manière suivante :

$$\rho_{mn} = c_n^* c_m \quad \text{avec} \quad m \neq n \tag{2.12}$$

Dans les termes $c_n^* c_m$, contrairement aux termes diagonaux où la phase s'annule, la notion de phase est conservée. Ces termes représentent donc les interférences entre les états $|u_n\rangle$ et $|u_m\rangle$ qui peuvent apparaître lorsque l'état $|\psi\rangle$ est une superposition cohérente linéaire de ces états. C'est pourquoi les éléments non-diagonaux de ρ sont souvent désignés sous le nom de cohérences.

Equilibre thermodynamique

L'équilibre thermodynamique caractérise l'état d'un système isolé qui est tel que ses grandeurs physiques macroscopiques sont égales à leurs valeurs moyennes. Ainsi, si le système est mis hors-équilibre par des actions extérieures, il reviendra obligatoirement vers son état d'équilibre après un temps appelé temps de relaxation [Landau 67]. Dans notre cas, on considère un système à l'équilibre thermodynamique lorsque l'on suppose qu'il subit un nombre suffisant d'interactions lui permettant de relaxer son énergie et sa phase. Ainsi, à l'équilibre thermodynamique à une température T, la mécanique statistique classique indique que la probabilité pour que le système soit dans un état d'énergie λ est proportionnelle à $\exp(-\lambda / k_B T)$ avec k_B la constante de Boltzmann [Feynman 65, Ahmed 05]. De plus, la phase ayant été relaxée de manière aléatoire, on suppose que la moyenne des interférences est nulle [Le Coz 03, Geva 00]. Cette hypothèse nous permet de considérer que la moyenne des termes non-diagonaux ou cohérences de la matrice densité est nulle et donc de ne pas prendre en compte ces termes traduisant les effets d'interférences quantiques. Les états classique et quantique d'un système à l'équilibre thermodynamique sont donc entièrement décrits par la trace de la matrice densité (l'équation de transport de Boltzmann peut être vue comme l'analogue semi-classique des éléments diagonaux de la matrice densité).

Principe de la correction par le potentiel effectif

En mécanique statistique quantique, l'équilibre thermodynamique est caractérisé par la matrice densité à l'équilibre et est donné par la fonction de Wigner, c'est-à-dire la transformée de Fourier de la matrice densité :

$$f_w^{eq}(x_1, k) = \int \rho\left(x_1 + \frac{x_2}{2}, x_1 - \frac{x_2}{2}\right) \exp(ikx_2)\, dx_2 \tag{2.13}$$

avec la matrice densité à l'équilibre thermodynamique qui s'exprime comme [Feynman 65, Ahmed 05] :

$$\rho(x_1,x_2)=\sum_{\lambda}\psi_\lambda(x_2)^*\psi_\lambda(x_1)\exp(-\beta\lambda) \tag{2.14}$$

avec λ les valeurs propres et $\psi_\lambda(x)$ les fonctions d'ondes normalisées de l'hamiltonien $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+qV(x)$, $\exp(-\beta\lambda)$ la probabilité que le système soit dans un état d'énergie λ et $\beta=1/k_BT$.

En mécanique statistique classique, dans l'approximation de Boltzmann, la fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique est donnée par la maxwellienne [Ahmed 05] :

$$f^{eq}(x_1,k)=\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2|k|^2}{2m}-\beta qV(x_1)\right) \tag{2.15}$$

avec $V(x)$ le potentiel de Poisson classique. Notons que V(x) est considéré comme constant dans le temps, ce qui est vérifié entre deux pas de temps lors de simulations Monte-Carlo.

L'idée de base de la correction par le potentiel effectif, originellement introduite par Feynman [Feynman 65], est de faire en sorte que l'équation de transport de Boltzmann semi-classique, non pas avec le potentiel de Poisson classique mais avec le potentiel effectif, conduise à l'état quantique de la fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique. On cherche donc à exprimer f_w^{eq} dans le cas quantique sous une forme semblable à celle du cas classique :

$$f_w^{eq}(x_1,k)=\int\rho\left(x_1+\frac{x_2}{2},x_1-\frac{x_2}{2}\right)\exp(ikx_2)\,dx_2 \;=\; \exp\left(-\frac{\beta\hbar^2|k|^2}{2m}-\beta qV_{eff}(x_1)\right) \tag{2.16}$$

Par associativité, en comparant (2.15) et (2.16), il est alors possible d'obtenir une formule du potentiel effectif V_{eff}.

La difficulté majeure de l'expression d'une grandeur quantique sous une forme classique réside dans l'évaluation de la matrice densité ou plus exactement dans l'évaluation de la trace de la matrice densité puisque l'on travaille à l'équilibre thermodynamique. Pour cela, principalement deux méthodes ont été utilisées. La méthode de l'intégrale de chemin s'intéresse à évaluer la trace de la matrice densité dans la limite classique et dans l'approche quantique. La méthode des perturbations autour de l'équilibre thermodynamique cherche à exprimer la fonction de Wigner à l'équilibre sous la forme donnée par l'équation (2.16). Chacune de ces deux méthodes fait respectivement l'objet des deux paragraphes suivants.

2.1.1.2 Intégrale de chemin

Ce paragraphe a pour objet de retranscrire succinctement le principe des travaux menés par Richard Feynman ayant abouti à la formulation du potentiel effectif de type gaussien. Notons que Feynman, par l'utilisation des intégrales de chemin, a reformulé entièrement la mécanique quantique

dans le cadre de travaux portant sur l'électrodynamique quantique. Pour plus de détails sur ces travaux nous renvoyons aux ouvrages suivants [Feynman 65, p. 267, Feynman 72, p. 72].

La matrice densité que l'on cherche à évaluer s'exprime comme :

$$\rho(x_1, x_2) = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(x_2)^* \psi_{\lambda}(x_1) \exp(-\beta\lambda) \tag{2.17}$$

La théorie de l'intégrale de chemin développée par Feynman indique alors que, pour un hamiltonien H tel que $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$, si l'on considère un chemin x(t) comme une fonction donnant une coordonnée x dépendante du paramètre t assimilé à un temps, et si on appelle $\dot{x}$ la dérivée dx/dt assimilée à une vitesse alors la matrice densité s'exprime comme :

$$\rho(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \left(\exp\left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 + V(x(t)) \right] dt \right\} \right) \mathcal{D}x(t) \tag{2.18}$$

L'intégrale $\int_{x_1}^{x_2} \mathcal{D}x(t)$ est une intégrale sur tous les chemins $x(t)$ que le système peut emprunter pour aller de la configuration initiale x_1 à la configuration finale x_2 pendant le temps $\beta\hbar$. Nous n'explicitons pas davantage ici cette notion d'intégrale de chemin.

D'après l'équation (2.18), la matrice densité est alors la somme des contributions de chacun des chemins, le poids d'un chemin individuel étant l'exponentielle de $(-1/\hbar)$ multipliée par l'intégrale sur le temps de la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle $(\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 + V(x(t)))$ pour le chemin en question.

Intéressons-nous désormais non pas à l'intégralité de la matrice densité mais simplement à ses termes diagonaux. Autrement dit, intéressons-nous à la fonction de partition Z définie comme la trace de la matrice densité :

$$Z = \int \rho(x_1, x_1) dx_1 \tag{2.19}$$

Dans la limite classique, $\hbar \to 0$, et donc le temps $\beta\hbar$ pendant lequel s'effectue le déplacement sur le chemin tend lui aussi vers la valeur nulle. Par conséquent, dans le cas des termes diagonaux de la matrice densité, le chemin ne dévie quasiment pas de son point initial x_1 qui est aussi son point final. On suppose donc $V(x(t)) \approx V(x_1)$. La matrice densité devient alors :

$$\rho(x_1, x_1) = \exp(-\beta V(x_1)) \int_{x_1}^{x_1} \left[\exp\left(\int_0^{\beta\hbar} -\frac{m}{2\hbar} \dot{x}(t)^2 \, dt \right) \right] \mathcal{D}x(t) \tag{2.20}$$

Dans ce rare cas où il est possible de calculer l'intégrale de chemin de manière exacte, on obtient la fonction de partition suivante :

$$Z = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} \int \exp[-\beta V(x_1)] dx_1 \tag{2.21}$$

avec $\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}$ la valeur exacte de l'intégrale de chemin.

Revenons désormais au cas sans approximation sur le potentiel $V(x(t))$, l'expression exacte de la fonction de partition est alors :

$$\begin{aligned} Z &= \int\left[\int \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\dot{x}(t)^2\,dt - \frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}[V(x(t))]dt\right]\mathcal{D}x(t)\right]dx_1 \\ Z &= \int\left[\int \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\dot{x}(t)^2\,dt - \frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}[V(x(t))]dt\right]\mathcal{D}x(t)\right]d\bar{x} \end{aligned} \tag{2.22}$$

avec $\bar{x}$ la position moyenne donnée par :

$$\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} x(t)dt \tag{2.23}$$

Précisons que, dans l'équation (2.22), le remplacement de l'intégrale sur x_1, c'est-à-dire l'intégrale sur tous les points de départ qui sont aussi les points d'arrivée des chemins, par l'intégrale sur la position moyenne d'un chemin $\bar{x}$, revient simplement à classifier de manière différente les chemins. Dans tous les cas, intégrale sur x_1 ou sur $\bar{x}$, les chemins sont tous pris en compte. Par ce changement de variable d'intégration, on peut espérer faire une approximation de la valeur de V(x) autour de $\bar{x}$. En effet, la fonction de partition peut alors s'exprimer comme :

$$\begin{aligned} Z &= \int\left[\int \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\dot{x}(t)^2\,dt - \frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left[V(x(t)) - V(\bar{x}) + V(\bar{x})\right]dt\right]\mathcal{D}x(t)\right]d\bar{x} \\ Z &= \int\left[\exp\left[-\beta V(\bar{x})\right]\int \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\dot{x}(t)^2\,dt - \frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left[V(x(t)) - V(\bar{x})\right]dt\right]\mathcal{D}x(t)\right]d\bar{x} \end{aligned} \tag{2.24}$$

D'après l'équation (2.24), la contribution des chemins de moyenne $\bar{x}$ à la fonction de partition peut être vue comme représentant la moyenne de la fonction $\exp(f)$, pondérée par le terme $\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int\dot{x}(t)^2dt\right)$, sur tous les chemins x(t) de moyenne $\bar{x}$ avec :

$$f = -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left[V(x(t)) - V(\bar{x})\right]dt \tag{2.25}$$

L'approximation de $\langle\exp(f)\rangle$, la moyenne de l'exponentielle de la fonction f, par $\exp(\langle f\rangle)$, l'exponentielle de la moyenne de la fonction f, ramène alors à l'évaluation de la moyenne de f toujours pondérée par $\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int\dot{x}(t)^2dt\right)$ (cette approximation sera discutée dans le paragraphe 2.4.3) :

$$\langle f\rangle = -\frac{1}{\hbar}\int\left[\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\dot{x}(t)^2\,dt\right).\int_0^{\beta\hbar}\left[V(x(t)) - V(\bar{x})\right]dt\right]\mathcal{D}x(t) \tag{2.26}$$

L'évaluation de l'intégrale de chemin, donnée par Feynman, conduit alors à :

$$Z = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} \int \exp\left[-\beta V_{eff}\left(\bar{x}\right)\right] d\bar{x} \tag{2.27}$$

avec

$$V_{eff}\left(\bar{x}\right) = \sqrt{\frac{6m}{\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} V\left(\bar{x}+y\right) \exp\left(-\frac{6my^2}{\beta\hbar^2}\right) dy \tag{2.28}$$

On remarque que la fonction de partition obtenue (équation (2.27)) est similaire à l'expression obtenue dans la limite classique (cf. équation (2.21)) ; à l'exception près que le potentiel local $V(x_1)$ est remplacé par ce que nous avons appelé le potentiel effectif V_{eff}.
En effectuant le changement de variable $x = \bar{x} + y$, l'équation (2.28) devient

$$V_{eff}\left(\bar{x}\right) = \sqrt{\frac{6m}{\pi\beta\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) \exp\left(-\frac{6m\left|x-\bar{x}\right|^2}{\beta\hbar^2}\right) dx \tag{2.29}$$

Ainsi le potentiel effectif en $\bar{x}$ s'exprime comme la valeur moyenne de V(x) sur les points à proximité de $\bar{x}$ pondérée par une distribution gaussienne dont l'écart type est donné par $2\sigma^2 = \beta\hbar^2/6m$ soit $\sigma = \sqrt{\beta\hbar^2/12m}$. Dans la limite classique, $\hbar \to 0$ et la distribution gaussienne tend vers la distribution de Dirac ; par conséquent le potentiel effectif V_{eff} tend vers le potentiel V.

2.1.1.3 Théorie des perturbations autour de l'équilibre thermodynamique

La matrice densité définit complètement l'équilibre thermodynamique :

$$\rho^{eq}(x_1, x_2) = \sum_{\lambda} \psi_\lambda(x_2)^* \psi_\lambda(x_1) \exp(-\beta\lambda) \tag{2.30}$$

Cependant, cette forme de résolution des valeurs propres λ pour les fonctions propres $\psi_\lambda(x)$ n'est pas simple à utiliser. L'équipe de l'université de l'Arizona a donc choisi de travailler à partir de l'approche basée sur la théorie des perturbations autour de l'équilibre thermodynamique afin d'exprimer la fonction de Wigner à l'équilibre sous une forme semblable à celle la fonction de distribution de Boltzmann à l'équilibre (cf. équation (2.16)). De cette manière, il est possible de déterminer une expression du potentiel effectif. Là encore, pour plus de détails, nous renvoyons aux références ci-après [Ahmed 03, Ringhofer 03, Ahmed 05].

D'un côté, la dérivée première de la matrice densité à l'équilibre thermodynamique par rapport à $\beta = 1/k_B T$ donne :

$$\left\langle x_1 \left| \frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\beta} \right| x_2 \right\rangle = \frac{\partial\rho(x_1, x_2, \beta)}{\partial\beta} = \sum_{\lambda} \exp(-\beta\lambda)(-\lambda)\psi_\lambda(x_1)\psi_\lambda(x_2)^* \tag{2.31}$$

D'un autre côté, en appliquant l'hamiltonien $\hat{H}$ à l'opérateur densité $\hat{\rho}$ et du fait que $\hat{\rho}$ commute avec $\hat{H}$, on obtient :

$$\langle x_1|\hat{H}\hat{\rho}|x_2\rangle = \sum_{\lambda} \exp[-\beta\lambda]\lambda\,\psi_\lambda(x_1)\psi_\lambda(x_2)^* = \langle x_1|\hat{\rho}\hat{H}|x_2\rangle \tag{2.32}$$

En introduisant l'équation (2.32) dans l'équation (2.31), on obtient alors :

$$\frac{\partial\rho}{\partial\beta} = -\frac{1}{2}\left[\hat{H}\hat{\rho} + \hat{\rho}\hat{H}\right] \tag{2.33}$$

$$\frac{\partial\rho(x_1,x_2,\beta)}{\partial\beta} = \frac{\hbar^2}{4m}\left(\nabla^2_{x_1} + \nabla^2_{x_2}\right)\rho(x_1,x_2,\beta) - \frac{q}{2}\left[V(x_1)+V(x_2)\right]\rho(x_1,x_2,\beta) \tag{2.34}$$

Cette expression est appelée équation de Bloch de la matrice densité à l'équilibre, elle a pour intérêt de formuler la matrice densité non plus en terme de résolution des valeurs propres d'un hamiltonien mais en solution d'équation différentielle. La transformée de Wigner-Weyl, permet alors d'exprimer la fonction de Wigner à partir de la matrice densité. Par cette transformée, l'équation (2.34) devient :

$$\frac{\partial f_W}{\partial\beta} = \frac{\hbar^2}{8m}\nabla_x f_W - \frac{|p|^2}{2m} f_W - \frac{q}{2}\left[V\left(x + \frac{i\hbar}{2}\nabla_p\right) + V\left(x - \frac{i\hbar}{2}\nabla_p\right)\right] f_W \tag{2.35}$$

Déterminer une expression de la fonction Wigner à l'équilibre thermodynamique consiste alors à résoudre cette équation. Pour cela, l'approximation de Born suppose que le potentiel V peut s'exprimer par $V = \in V_{\in}$. En négligeant les termes d'ordre supérieur à 1, la fonction de Wigner f_W peut alors s'exprimer comme $f_W = (f_0 + \in f_1)$. Les termes f_0 et f_1 sont donnés par :

$$\frac{\partial f_0}{\partial\beta} = \frac{\hbar^2}{8m}\nabla^2_x f_0 - \frac{\hbar^2|k|^2}{2m} f_0 \tag{2.36}$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial\beta} = \frac{\hbar^2}{8m}\nabla^2_x f_1 - \frac{\hbar^2|k|^2}{2m} f_1 - \frac{q}{2}\left[V\left(x + \frac{i\hbar}{2}\nabla_p\right) + V\left(x - \frac{i\hbar}{2}\nabla_p\right)\right] f_0 \tag{2.37}$$

L'équation (2.36) peut être résolue immédiatement en posant :

$$f_0 = \exp\left[-\frac{\beta\hbar^2|k|^2}{2m}\right] \tag{2.38}$$

Mais la résolution de l'équation (2.37) est plus compliquée (les auteurs utilisent notamment la transformée de Fourier dans l'espace ($x \rightarrow \xi$) de l'équation (2.37)), nous ne la détaillons pas ici et renvoyons à [Ringhofer 03] pour plus de précisions. Les termes f_0 et f_1 ayant été déterminés, la fonction de Wigner s'exprime alors comme :

$$f_W = \exp\left[-\frac{\beta\hbar^2|k|^2}{2m} - q\beta\frac{1}{(2\pi)^3}\int\int V(x')\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2|\xi|^2}{8m}\right)\frac{2m}{\beta\hbar^2 k\xi}\sinh\left(\frac{\beta\hbar^2 k\xi}{2m}\right)\exp[i\xi(x-x')]dx'\,d\xi\right] \tag{2.39}$$

Par comparaison avec l'équation (2.15), on obtient le potentiel effectif V_{eff} sous la forme suivante :

$$V_{eff}(x,k) = \int \Gamma(x-x',k)V(x')dx' \tag{2.40}$$

avec

$$\Gamma(z,k)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{2m}{\beta\hbar^2 k\xi}\sinh\left(\frac{\beta\hbar^2 k\xi}{2m}\right)\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2|\xi|^2}{8m}+i\xi z\right)d\xi \qquad (2.41)$$

Le potentiel effectif présente une dépendance en fonction du vecteur d'onde k. Les auteurs précisent alors que l'intérêt majeur de cette formulation est l'absence de paramètre ajustable. En effet, l'énergie de la particule détermine désormais l'étalement de la fonction nécessaire au calcul du potentiel effectif. Cependant, il est précisé dans [Ahmed 05] que l'évaluation d'un tel potentiel effectif est très consommateur en temps CPU. Par conséquent, des approximations sont effectuées.

A partir de l'équation (2.41), pour $k \to 0$, le sinus hyperbolique peut être développé au premier ordre $\sinh(x) \approx x$, on obtient alors :

$$\Gamma(z)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2|\xi|^2}{8m}+i\xi z\right)d\xi \qquad (2.42)$$

La distribution $\Gamma(z)$ peut alors être vue comme la transformée de Fourier inverse de $\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2|\xi|^2}{8m}\right)$ (la transformée de Fourier d'une distribution gaussienne est une distribution gaussienne) et ainsi :

$$\Gamma(z)=\sqrt{\frac{8m}{\pi\beta\hbar^2}}\exp\left(-\frac{8m}{\beta\hbar^2}|z|^2\right) \qquad (2.43)$$

D'où, d'après (2.40) :

$$V_{eff}(x)=\sqrt{\frac{8m}{\pi\beta\hbar^2}}\int V(x')\exp\left(-\frac{8m}{\beta\hbar^2}|x-x'|^2\right)dx' \qquad (2.44)$$

On retrouve ainsi une formulation de potentiel effectif similaire à celle développée par Feynman à l'aide de la théorie de l'intégrale de chemin (cf. paragraphe 2.1.1.2). C'est-à-dire que le potentiel effectif s'exprime comme l'intégrale du produit du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne d'écart type σ avec $2\sigma^2=\beta\hbar^2/8m$ soit $\sigma=\sqrt{\beta\hbar^2/16m}$.

2.1.1.4 Bilan

La méthode de l'intégrale de chemin et celle des perturbations à l'équilibre thermodynamique au premier ordre, c'est-à-dire lorsque le vecteur d'onde $k \to 0$, s'accordent sur la formulation suivante du potentiel effectif :

$$V_{eff}(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int V(x')\exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{2\sigma^2}\right)dx'=GEP(x) \qquad (2.45)$$

Ce potentiel effectif s'exprime comme l'intégrale du produit du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne, d'où la dénomination de potentiel effectif de type gaussien ou GEP (pour *Gaussian Effective Potential*) adoptée dans toute la suite de ce manuscrit. A un facteur près, les deux approches s'accordent également sur l'expression de l'écart-type de la distribution gaussienne. En effet, Feynman donne $\sigma_F = \sqrt{\beta\hbar^2/12m}$ et l'université de l'Arizona donne $\sigma_A = \sqrt{\beta\hbar^2/16m}$. Dans la direction du confinement, si l'on considère $m = m_l = 0{,}916.m_0$ avec m_0 la masse de l'électron, on obtient $\sigma_F = 0{,}517$ nm et $\sigma_A = 0{,}448$ nm. Le potentiel effectif de type gaussien défini par l'équation (2.45) fait l'objet de toute la suite de ce chapitre. Afin d'en poursuivre son étude, procédons à une interprétation de sa formulation et pour cela, commençons par redéfinir la notion de paquet d'ondes.

2.1.2 Interprétation du Potentiel Effectif de type Gaussien

2.1.2.1 Fonction d'onde et paquet d'ondes

Afin d'interpréter la formulation du potentiel effectif de type gaussien, il convient notamment d'introduire la notion fondamentale de paquet d'ondes. Ce paragraphe ayant été largement inspiré de [Cohen-Tannoudji 95, p. 18], nous renvoyons à cette référence pour plus de détails.

L'état quantique d'une particule est caractérisé par une fonction d'onde $\psi(r,t)$ qui contient toute l'information sur la particule. En particulier, le module au carré de la fonction d'onde $|\psi(r,t)|^2$ est interprété comme la densité de probabilité. Lorsqu'une particule de masse m subit l'action d'un potentiel V(r,t), sa fonction $\psi(r,t)$ obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r,t) + V(r,t)\psi(r,t) \tag{2.46}$$

Cette équation étant linéaire et homogène en ψ, il existe un principe de superposition qui, combiné avec l'interprétation de ψ comme amplitude de probabilité, autorise des effets de type ondulatoire.

Considérons une particule dont l'énergie potentielle est nulle (ou a une valeur constante) en tout point de l'espace. La particule n'est donc soumise à aucune force ; on dit qu'elle est libre. Lorsque $V(r,t) = 0$, l'équation de Schrödinger devient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r,t) \tag{2.47}$$

Cette équation différentielle admet visiblement des solutions de la forme :

$$\psi(r,t) = Ae^{i(kr-\omega t)} \tag{2.48}$$

où A est une constante, à condition que k et ω soient liés par la relation :

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{2.49}$$

Nous voyons déjà que, comme

$$|\psi(r,t)|^2 = |A|^2 \tag{2.50}$$

une onde plane de ce type représente une particule dont la probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace. Notons que ce type d'onde n'est pas physique.

Le principe de superposition indique que toute combinaison linéaire d'ondes planes vérifiant (2.49) est aussi solution de l'équation (2.47). Une telle superposition peut s'écrire :

$$\psi(r,t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i[kr-\omega(k)t]} d^3k \tag{2.51}$$

où d^3k représente par définition l'élément de volume infinitésimal dans l'espace des k.

Une fonction d'onde telle que (2.51), superposition d'ondes planes est appelée un « paquet d'ondes » à trois dimensions. Pour simplifier, intéressons-nous au cas du paquet d'ondes à une dimension, obtenu par superposition d'ondes planes se propageant toutes parallèlement à Ox ; la fonction d'onde ne dépend alors plus que de x et de t :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i[kx-\omega(k)t]} dk \tag{2.52}$$

Désormais, prenons le cas du paquet d'ondes planes à l'origine des temps. La fonction d'onde ou paquet d'ondes s'écrit alors :

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \tag{2.53}$$

Il est important de noter que cette expression n'est pas limitée au cas de la particule libre : quel que soit le potentiel, on peut toujours écrire $\psi(x,0)$ sous cette forme. Ainsi toute fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger stationnaire est un paquet d'ondes.

Venons en désormais à la forme de ce paquet d'ondes. Pour une superposition infinie d'ondes, comme c'est le cas dans l'équation (2.53), $|\psi(x,0)|$ n'admet qu'un unique maximum. Celui-ci est obtenu lorsque les fonctions d'ondes dont l'amplitude est importante interfèrent de manière constructive. Un tel paquet d'ondes représente donc l'état d'une particule dont la probabilité de présence $|\psi(x,0)|^2$, à l'instant t=0 est pratiquement nulle en dehors d'un intervalle de largeur approximative Δx. Enfin précisons que la largeur Δx du paquet d'onde $\psi(x)$ est d'autant plus grande que la largeur Δk de la fonction $|g(k)|$ est petite. On retrouve ainsi le principe d'incertitude d'Heisenberg qui stipule qu'il est impossible, à un instant donné, de définir précisément et simultanément la position et l'impulsion de la particule.

Pour conclure, toute fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger stationnaire est un paquet d'ondes, c'est-à-dire une superposition linéaire d'ondes planes. La distribution représentant un tel paquet d'ondes présente un unique maximum et est non nulle uniquement sur une largeur Δx centrée sur ce maximum. Enfin une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger étant interprétée comme une amplitude de probabilité, le paquet d'ondes traduit le fait que, dans une

approche quantique, une particule n'est pas représentée de manière ponctuelle mais de manière ondulatoire.

2.1.2.2 Paquet d'ondes et Potentiel Effectif de type Gaussien

Le potentiel effectif de type gaussien s'exprime comme l'intégrale du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne. Comme déjà mentionné au paragraphe 2.1.1.2, dans la limite classique, la distribution gaussienne tend vers une distribution de Dirac et le potentiel effectif tend alors vers le potentiel de Poisson. Or dans les approches classiques, la particule est considérée comme ponctuelle et parfaitement localisée : sa charge peut être modélisée à une position bien définie par une distribution de Dirac. Ainsi, dans la formulation du potentiel effectif de type gaussien, la distribution gaussienne, tout comme la distribution de Dirac dans la limite classique, peut être interprétée comme représentant la distribution de la charge de la particule. Celle-ci n'est alors plus localisée ponctuellement mais s'étale sur une région de l'espace définie par une distribution gaussienne centrée sur la position de la particule en question. Il en résulte que l'allure du potentiel effectif de type gaussien est essentiellement régie par l'allure de la distribution gaussienne rendant compte la non-localité de la particule.

De plus, dans le paragraphe précédent, le paquet d'ondes a été défini comme traduisant le fait que, dans une approche quantique, la particule n'est pas représentée de manière ponctuelle mais de manière ondulatoire. Par conséquent, la distribution gaussienne présente dans la formulation du potentiel effectif étant interprétée comme représentant la non localité de la particule, elle peut être considérée comme représentant le paquet d'ondes de la particule. Il est à préciser que dans toutes les études portant sur le potentiel effectif, le terme de « paquet d'ondes » est utilisé abusivement par rapport à sa définition. En effet, il ne fait pas référence directement à une amplitude de probabilité ou fonction d'onde, mais à la densité de probabilité ou module au carré de la fonction d'onde. La notion de paquet d'ondes, telle que nous l'entendons dans toute la suite de ce manuscrit, est donc assimilable à celle de densité de probabilité.

En résumé, la correction par le potentiel effectif de type gaussien est donc définie comme l'intégrale du produit du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne représentant le paquet d'ondes de la particule.

Pour finir, notons que c'est cette interprétation de la distribution gaussienne comme paquet d'ondes de la particule qui permet à l'équipe de Ferry de retrouver la formulation du potentiel effectif de type gaussien à partir de l'hamiltonien comme explicité ci-dessous [Ferry 00c]. La fonction de Hamilton classique, exprimée comme $H = T + V$ représente l'énergie totale du système, c'est-à-dire la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle. L'énergie potentielle totale du système peut s'exprimer comme la somme de l'énergie potentielle d'interaction et du potentiel des forces extérieures. Le potentiel des forces extérieures dans un système inhomogène entre dans l'hamiltonien comme :

$$H_V = \int V(x)\, n(x)\, dx \tag{2.54}$$

avec n(x) la densité de porteurs en x.

Soit la somme sur i la somme sur chacun des porteurs :

$$\frac{H_V}{q} = \int V(x) \sum_i n_i(x)\, dx \tag{2.55}$$

En utilisant la forme non locale de la charge, c'est-à-dire en ne considérant plus la charge comme ponctuelle (distribution de Dirac) mais répartie sur une distribution gaussienne d'écart-type σ, il vient :

$$\frac{H_V}{q} = \int V(x) \sum_i \int \exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{\sigma^2}\right) \partial(x'-x_i)\, dx'\, dx \tag{2.56}$$

Dans cette expression, pour chacune des positions x, on recherche la contribution à la charge totale en x de chacun des porteurs i. Pour cela, on recherche la position x' de chacun des porteurs locaux i $\partial(x'-x_i)$. x' est alors le centre de la fonction gaussienne qui se veut rendre compte de la non localité de la charge i. On calcule alors à la position x, la contribution de la charge i centrée en x'.

En remplaçant x par x' et inversement, on obtient :

$$\frac{H_V}{q} = \sum_i \int \partial(x-x_i) \int V(x') \exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{\sigma^2}\right) dx'\, dx \tag{2.57}$$

Par correspondance, on associe $\partial(x-x_i)$ à $n_i(x)$. Par comparaison avec l'équation (2.55), il vient donc que le potentiel $V(x)$ est remplacé par le potentiel effectif V_{eff} avec :

$$V_{eff}(x) = \int V(x') \exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{\sigma^2}\right) dx' = GEP(x) \tag{2.58}$$

2.1.2.3 Produit de convolution

Le produit de convolution en 1D de deux fonctions est noté $y(x) = s(x) * r(x)$ et est défini par la formule suivante :

$$y(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} s(x') \times r(x-x')\, dx' \tag{2.59}$$

D'après cette définition, il est évident que le potentiel effectif de type gaussien, dont nous rappelons ci-dessous l'équation, peut être vu comme le produit de convolution du potentiel de Poisson avec une distribution gaussienne :

$$V_{eff}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} V(x') \exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{2\sigma^2}\right) dx' \tag{2.60}$$

Afin d'expliciter ce produit de convolution, prenons le cas d'une particule positionnée en x_0 dont la charge est représentée soit par une distribution de Dirac (cas classique, cf. **Figure 2.1**(a)) soit par une distribution gaussienne (cas de la correction par le potentiel effectif, cf. **Figure 2.1**(b)). Rappelons que le produit de convolution en x_0, ou potentiel effectif de type gaussien en x_0, est donné par la somme en chaque point x du produit du potentiel de Poisson par la représentation de l'étalement de la charge.

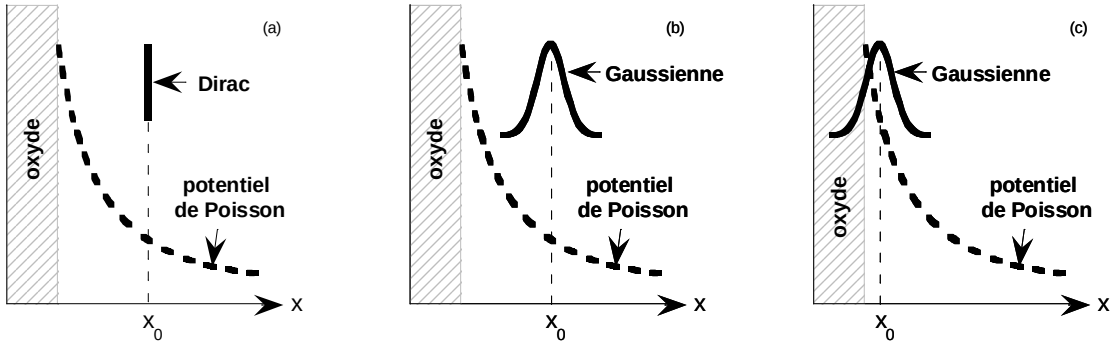


Figure 2.1 : Produit de convolution pour un paquet d'ondes représenté par un Dirac (a) ou par une distribution gaussienne (b et c) à différentes positions x_0.

Dans le cas d'une charge ponctuelle en x_0 représentée par une distribution de Dirac, il est évident que seule la valeur du potentiel en x_0 participe au produit de convolution puisque quel que soit x différent de x_0 la distribution de Dirac est nulle. Le potentiel effectif est alors identique au potentiel de Poisson. Dans le cas d'une charge non plus ponctuelle mais étalée sur une distribution gaussienne, le résultat du produit de convolution ne dépend plus seulement de la valeur du potentiel de Poisson en x_0 mais également de toutes les valeurs du potentiel aux positions x pour lesquelles la distribution gaussienne est non nulle. Les contributions respectives de toutes ces valeurs de potentiel sont déterminées par la valeur de la distribution gaussienne à la position donnée. Ainsi les valeurs du potentiel de Poisson sont d'autant plus influentes sur la valeur du potentiel effectif en x_0 qu'elles se situent à proximité de x_0. Le résultat du produit de convolution en x_0 est donc une moyenne des valeurs du potentiel de Poisson à proximité de x_0 pondérée par une distribution gaussienne. Ainsi, la convolution par une distribution gaussienne peut être assimilée à un lissage du potentiel de Poisson. Cependant, dans le cas d'une particule située en x_0 à proximité de l'interface (cf. **Figure 2.1**(c)), la distribution gaussienne associée à sa charge s'étale au delà de la zone active du dispositif, c'est-à-dire de la zone dans laquelle les valeurs du potentiel de Poisson sont connues. Il convient donc de définir des conditions aux limites adaptées sur le potentiel de Poisson. Celles-ci font l'objet du prochain paragraphe.

2.1.3 Conditions aux limites

Dans le cas d'un traitement quantique, par exemple une résolution couplée des équations de Poisson et de Schrödinger, malgré une polarisation de grille assurant un régime d'inversion, la présence de la barrière de potentiel entre l'oxyde et le silicium entraîne la répulsion du maximum de la densité de porteurs à quelques Angström à l'intérieur du silicium (cf. paragraphe 1.2.3). Dans le cas de

la correction par le potentiel effectif, afin de reproduire cet effet de répulsion des porteurs, il est nécessaire de prendre en compte la présence de l'oxyde de silicium physiquement responsable de cette répulsion. Pour cela, des conditions aux limites sont appliquées sur le potentiel de Poisson. Rappelons qu'il a été souligné au paragraphe précédent que ces conditions aux limites sont par ailleurs numériquement nécessaires au calcul du produit de convolution. Dans toute la suite de ce manuscrit, ces conditions aux limites sont aussi appelées *padding* (littéralement, rembourrage, remplissage) par référence aux méthodes de traitement numérique du signal qui consistent à ajouter, ou rembourrer, des données dans le but d'effectuer des calculs numériques. Dans notre cas, ces conditions aux limites ou *padding* dépendent de la nature de l'interface aux limites de la zone active du dispositif. Pour une interface avec un contact ohmique ou du vide, la condition aux limites est égale à la valeur du potentiel de Poisson à l'interface. Dans le cas d'une interface avec de l'oxyde, la condition aux limites est prise égale à la valeur du potentiel de Poisson V_P à l'interface diminuée d'une valeur appelée E_B pour *Energy Barrier*. Cette dernière condition aux limites est notée V_{ox} car elle est équivalente à une valeur de potentiel dans une zone qui peut être considérée comme une zone d'oxyde. Le paramètre E_B est ainsi assimilé à la hauteur de la barrière d'oxyde et vérifie l'équation suivante :

$$V_{ox} = V_P - E_B \tag{2.61}$$

Pour une telle interface, les conditions aux limites ayant été appliquées et sachant que convoluer par une distribution gaussienne signifie lisser, le potentiel effectif de type gaussien résultant présente une allure décroissante à proximité des interfaces (cf. **Figure 2.2**). Cette allure est due à l'influence du potentiel V_{ox} dans les zones assimilées à l'oxyde dans le calcul du potentiel effectif. De par la définition du produit de convolution, cette influence est d'autant plus importante que la proportion de distribution gaussienne dans les zones assimilées à l'oxyde est importante. Un potentiel effectif décroissant à proximité des interfaces, qui rappelons-le est à l'origine du champ électrique sous l'influence duquel s'effectue le mouvement des porteurs, va ainsi entraîner une répulsion des porteurs à l'interface oxyde-silicium (cf. paragraphe 1.3.3).

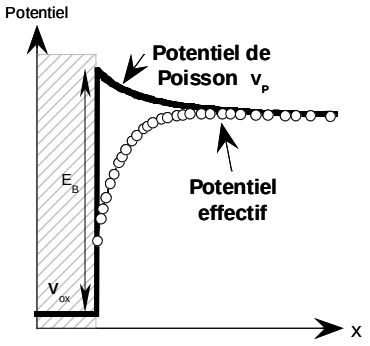


Figure 2.2 : Allures du potentiel de Poisson et de ses conditions aux limites associées dans le cas d'une interface avec de l'oxyde et potentiel effectif de type gaussien résultant.

En conclusion, comme dans le cas d'une résolution Poisson-Schrödinger, c'est la présence de la barrière d'oxyde prise en compte sous la forme de conditions aux limites sur le potentiel de Poisson qui est responsable d'un potentiel effectif de type gaussien répulsif aux interfaces oxyde-silicium. Par ailleurs, la répulsion des porteurs sera d'autant plus importante que la distribution gaussienne ou paquet d'ondes pénètrera dans la zone assimilée à l'oxyde. La correction par le potentiel effectif permet donc de rendre compte de l'effet de la barrière d'énergie entre l'oxyde et le semi-conducteur sur la distribution de charge.

2.1.4 Résumé

Le potentiel effectif de type gaussien s'exprime comme le produit de convolution du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne :

$$GEP(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} \int V_P(x') \exp\left(-\frac{|x - x'|^2}{2\sigma_x^2} \right) dx' \qquad (2.62)$$

La distribution gaussienne peut être interprétée comme le paquet d'ondes de la particule, c'est-à-dire comme représentant la non localité de la charge. Le calcul du GEP nécessite l'application de conditions aux limites sur le potentiel de Poisson. Celles-ci vont, en particulier, tenir compte de la présence d'une barrière d'énergie à l'interface oxyde-silicium par l'intermédiaire du paramètre E_B assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde. Ces conditions aux limites sont à l'origine d'un potentiel effectif répulsif pour les porteurs à proximité de l'interface oxyde-silicium. Le détail du calcul du potentiel effectif de type gaussien d'un point de vue numérique et sa mise en œuvre dans un algorithme Monte-Carlo font l'objet du paragraphe suivant.

2.2 Mise en œuvre dans un code Monte-Carlo

2.2.1 Méthodologie générale du programme

2.2.1.1 Introduction

Le potentiel effectif de type gaussien s'exprime comme la convolution du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne. Quelle que soit la position de la particule dans le silicium, la distribution gaussienne représentant le paquet d'ondes de cette particule est d'allure invariante ; seule sa position change puisqu'elle est centrée sur la position de la particule en question. Numériquement, le calcul d'un tel produit de convolution peut être effectué en utilisant l'outil transformée de Fourier. En effet, outre une grande efficacité en temps CPU, l'une des propriétés des transformées de Fourier est de changer le produit de convolution en produit simple. Plus précisément, la transformée de Fourier de la convolution de deux fonctions (data1 et data2) est égale au produit simple de leurs transformées de Fourier respectives, soit :

$$\text{data1} * \text{data2} = TF^{-1} [\, TF(\text{data1}) \,.\, TF(\text{data2}) \,] \qquad (2.63)$$

avec TF la transformée de Fourier et TF^{-1} la transformée de Fourier inverse.

Cependant, le calcul d'un produit de convolution impose des contraintes numériques. Celles-ci sont soit liées à l'utilisation de transformées de Fourier pour le calcul de ce produit de convolution, soit induites par la notion de produit de convolution en elle-même. Nous les détaillons ci-après.

2.2.1.2 Contraintes numériques inhérentes au calcul d'un produit de convolution par transformée de Fourier

Contraintes liées à l'utilisation de transformées de Fourier

L'utilisation des transformées de Fourier telle que nous l'envisageons impose essentiellement trois conditions : un échantillonnage régulier et suffisamment fin du signal à traiter, ce signal devant être constitué de 2^N échantillons, avec N entier.

✓ Echantillonnage régulier du signal

La transformée de Fourier discrète F d'une fonction f et la transformée de Fourier inverse discrète en 1D sont respectivement définies par les équations suivantes [Max 01 p.46]:

$$F(x') = \theta_x \left[\sum_{x=0}^{N_x-1} f(x) \exp\left(-\frac{2\pi j x x'}{N_x} \right) \right] \tag{2.64}$$

$$f(x) = \beta_x \left[\sum_{x=0}^{N_x-1} F(x') \exp\left(\frac{2\pi j x x'}{N_x} \right) \right] \tag{2.65}$$

avec N_x le nombre de valeurs dans la direction x, θ_x et β_x des facteurs de normalisation qui dépendent des conventions choisies. Afin d'assurer la propriété d'inversibilité entre les deux relations, β_x doit vérifier $N_x.\beta_x.\theta_x = 1$. Il est à noter que les coordonnées des abscisses du signal à transformer ne sont jamais prises en compte. Les équations ne présentent que des sommes sur les ordonnées, ce qui suppose un signal régulièrement échantillonné. Or, ceci n'est généralement pas le cas dans un maillage. Ainsi, de par les définitions des transformées de Fourier et de Fourier inverse discrètes, il est nécessaire d'interpoler les signaux à convoluer afin de disposer de signaux régulièrement échantillonnés.

✓ Théorème de Shannon

En plus d'un échantillonnage régulier, celui-ci doit être suffisamment fin afin de satisfaire le théorème de Shannon.

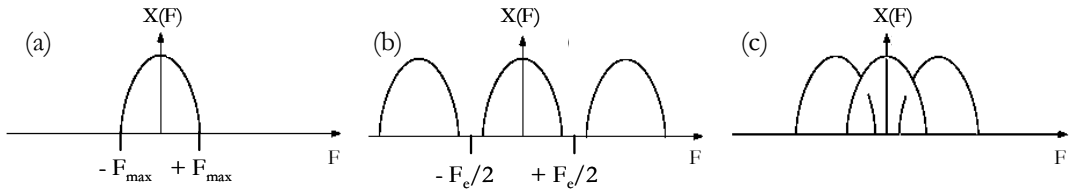


Figure 2.3 : (a) Spectre en fréquence du signal non-échantillonné. (b) Effet de l'échantillonnage sur le spectre du signal : périodisation du spectre à la fréquence $F_E=1/T_E$ (c) Répartition spectrale lorsque la cadence d'échantillonnage n'est pas suffisante : repliement de spectre.

En effet, l'échantillonnage d'un signal à la période T_E a pour conséquence de rendre périodique son spectre à la fréquence $F_E=1/T_E$ (l'explication est ici donnée en temps-fréquence mais il en est de même dans notre cas, c'est-à-dire en mètre-mètre^{-1}). En conséquence, si le signal est trop peu

échantillonné, la transformée de Fourier de ce signal présente un repliement de spectre (cf. **Figure 2.3**). Ce repliement de spectre est la cause d'une reconstruction erronée du signal par transformée de Fourier inverse puisque des informations contenues dans le signal ont été perdues ou modifiées. Pour éviter le repliement de spectre et donc la corruption des informations contenues dans le signal, celui-ci doit être échantillonné à une fréquence F_E telle que l'équation suivante soit vérifiée :

$$F_E \geq 2\,F_{max} \qquad \text{ou} \qquad T_E \leq \frac{1}{2\,F_{max}} \tag{2.66}$$

Cette condition imposée à la fréquence d'échantillonnage est dénommée théorème de Shannon. Dans notre cas, elle ne devrait, a priori, pas être trop contraignante. En effet, si le maillage de la structure simulée est correctement réalisé, les régions où des phénomènes importants ont lieu sont maillées finement, c'est-à-dire entre autre les régions où les données comme le potentiel présentent de forts gradients et donc une fréquence élevée. Pour finir, rappelons que dans le paragraphe précédent, nous avons conclu qu'il était nécessaire d'interpoler le signal afin d'obtenir un échantillonnage régulier de celui-ci. Nous pouvons désormais ajouter qu'afin d'être dans les conditions favorables au respect du théorème de Shannon, l'interpolation doit être réalisée à un pas inférieur ou égal au plus petit pas de maillage.

✓ Nombre d'échantillons = 2^N

Nous avons choisi de calculer la transformée de Fourier discrète par l'algorithme de transformation de Fourier rapide [Cooley 65], plus connu sous son abréviation anglaise de FFT (*Fast Fourier Transform*). La FFT est une version rapide de la transformée de Fourier discrète qui tire parti de la redondance apparaissant dans les calculs (pour plus de détails se reporter à [Press 96 p.498, Max 01 p.49]). Pour cela, cet algorithme impose de travailler sur un nombre de points N_b tel que $N_b=2^N$ avec N entier. En ce qui nous concerne, l'utilisation de cet algorithme nous impose donc d'utiliser des données présentant 2^N valeurs.

Contraintes liées au produit de convolution

Tout d'abord, rappelons quelques généralités sur le produit de convolution. La définition générale du produit de convolution en 1D de deux fonctions est donnée par l'équation (2.59). Dans le cas de signaux causaux, le produit de convolution vaut alors :

$$y(x) = \sum_{x'=0}^{+\infty} s(x')\,r(x-x')\,dx' \tag{2.67}$$

Ainsi, pour calculer ce produit de convolution, il suffit d'inverser le signal r(x) qui devient alors r(-x') et de le déplacer en fonction des valeurs de x, ce qui donne r(x-x'). Remarquons d'ores et déjà que l'équation (2.67) impose que la source s(x) et que la réponse r(x) du produit de convolution soient de même durée. Effectuons désormais quelques calculs simples de produits de convolution afin de

mettre en évidence, les deux principales difficultés inhérentes à la convolution que sont les effets de bord et la durée du produit de convolution. Considérons un signal source s(x) et un signal réponse r(x) tels que définis sur la **Figure 1.5**. Le résultat du produit de convolution de s(x) et r(x) est donné par y(x).

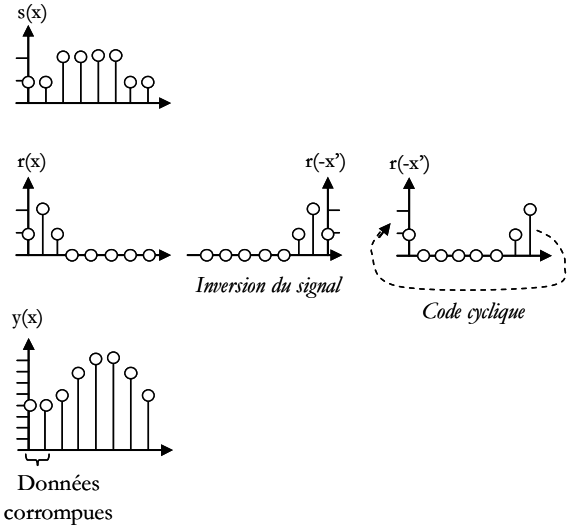


Figure 2.4 : Produit de convolution et effets de bord.

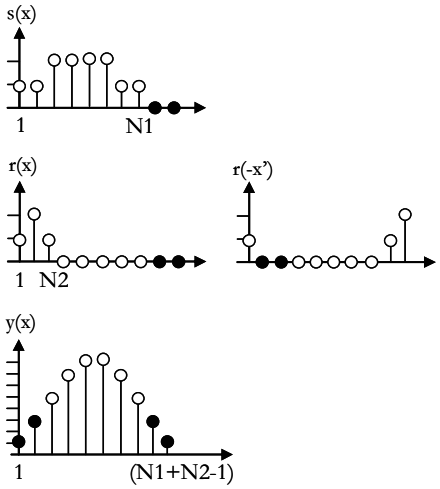


Figure 2.5 : Produit de convolution sans effets de bord grâce au zéro-*padding*.

Le produit de convolution par transformée de Fourier est un code cyclique. Comme illustré par la figure ci-dessus, cette propriété entraîne une corruption des premières (dernières) données du résultat y(x) par les dernières (premières) données de la réponse inversée r(x-x'). Ce phénomène est appelé effets de bord. Pour annihiler ces effets de bord, il est nécessaire d'imposer au signal des conditions aux limites adaptées que nous avons introduites dans le paragraphe 2.1.3 sous le terme de *padding*. Dans le cas de l'exemple ci-dessus, les conditions aux limites consistent en un ajout de valeurs nulles ou *zéro-padding* à l'extrémité du signal sur une durée minimale égale à la moitié du signal réponse r(x). Recalculons alors notre produit de convolution en effectuant cette fois-ci un *zéro-padding* de durée 2 à la fin du signal source s(x) et donc aussi à la fin du signal réponse r(x) puisque les deux signaux à convoluer doivent être de même durée (cf. **Figure 1.6**). Le *zéro-padding* sur le signal source permet de ne plus avoir de corruption de données, mais on observe alors que la durée du produit de convolution est supérieure à la durée du signal source utile. En effet, pour un signal source utile de durée N1 et un signal réponse utile de durée N2, la durée du produit de convolution est de (N1+N2-1). Il est donc nécessaire de déterminer quelles sont les données pertinentes du produit de convolution à exploiter.

✓ Durée des signaux à convoluer

Dans notre cas, le signal source ou potentiel est généralement plus long que le signal réponse ou gaussienne. Il est donc nécessaire d'ajouter des valeurs sur le signal gaussien afin de le rendre de durée égale au signal potentiel. Etant donné qu'à ses extrémités, la distribution gaussienne tend vers une valeur nulle, des valeurs nulles sont ajoutées et n'ont donc aucune influence. Il s'agit donc

simplement de prolonger naturellement la distribution gaussienne de manière à ce que la durée de ce signal soit égale à celle du potentiel.

✓ Durée du produit de convolution

La distribution gaussienne impliquée dans le calcul du produit de convolution représente le paquet d'ondes assimilé à la probabilité de présence d'une particule. Elle est centrée sur la position de cette même particule. Considérant que les particules ne peuvent se trouver que dans les zones actives (source, canal et drain) du dispositif, le maximum de la distribution gaussienne se situera uniquement dans cette zone (ce maximum ne pourra pas être dans l'oxyde de grille ou dans les électrodes source ou drain). Ainsi, seules les valeurs du produit de convolution pour lesquelles cette condition sur la gaussienne est respectée sont retenues.

✓ Effets de bord : conditions aux limites sur le potentiel

D'un point de vue purement numérique, le calcul d'un produit de convolution par transformée de Fourier sans prendre de précautions préalables induit des effets de bord. Dans le cas du calcul du potentiel effectif de type Gaussien, ceux–ci peuvent être illustrés par la **Figure 2.6** ci-dessous. Contrairement aux distributions gaussiennes en traits pleins, celles en traits pointillés sont « repliées » ce qui provoque le calcul d'un produit de convolution erroné aux interfaces. Afin d'éviter les effets de bord, des conditions aux limites sont donc nécessaires mais, comme explicité au paragraphe 2.1.3, elles sont également indispensables à l'obtention d'un potentiel effectif répulsif aux interfaces oxyde-silicium. Les conditions aux limites appliquées sur le potentiel de Poisson ne sont donc pas dénuées de sens physique. Pour le calcul du potentiel effectif de type gaussien, nous appliquons sur le potentiel de Poisson les conditions aux limites décrites au paragraphe 2.1.3 sur des zones de conditions aux limites ou zones de *padding* s'étalant sur la durée d'un demi- signal gaussien (cf. **Figure 2.7**).

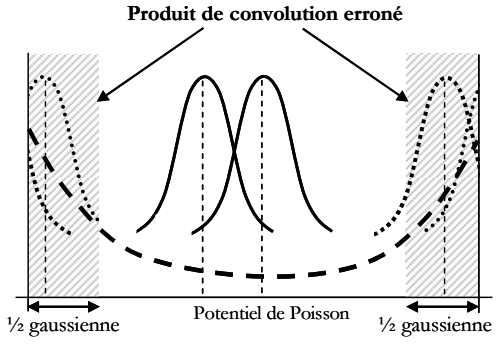


Figure 2.6 : Mise en évidence des effets de bord pour la convolution du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne.

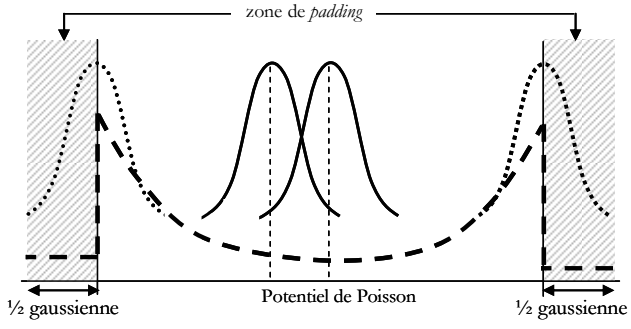


Figure 2.7 : Visualisation des zones de conditions aux limites ou *padding*.

Bilan des contraintes inhérentes au calcul du produit de convolution par transformée de Fourier

Afin de satisfaire à la condition d'échantillonnage régulier et d'être dans des conditions en accord avec le théorème de Shannon, le potentiel de Poisson intervenant dans le produit de convolution est interpolé à un pas inférieur ou égal au plus petit pas de maillage. Pour éviter les effets de bord et autoriser une répulsion des porteurs aux interfaces oxyde-silicium, ce potentiel présente des conditions aux limites adaptées, c'est-à-dire des zones de *padding* de la taille d'une demi-gaussienne et dépendant de la nature de l'interface (oxyde, contact …). Enfin l'algorithme de transformée de Fourier rapide impose un nombre de données à traiter égal à 2^N avec N entier. Les données du potentiel sont donc complétées par du *zéro-padding* jusqu'à 2^N. Ce *zéro-padding* n'a aucune influence puisqu'il agit sur des résultats non conservés. Quant à la gaussienne, ses valeurs sont calculées aux pas d'interpolation choisis et ses données sont simplement complétées jusqu'à 2^N avec du *zéro-padding*. Voyons désormais l'algorithme permettant de calculer le potentiel effectif de type Gaussien par transformée de Fourier.

2.2.1.3 Algorithme général du code

L'algorithme de calcul du Potentiel Effectif de type Gaussien à partir du potentiel de Poisson est représenté schématiquement par la **Figure 2.8**.

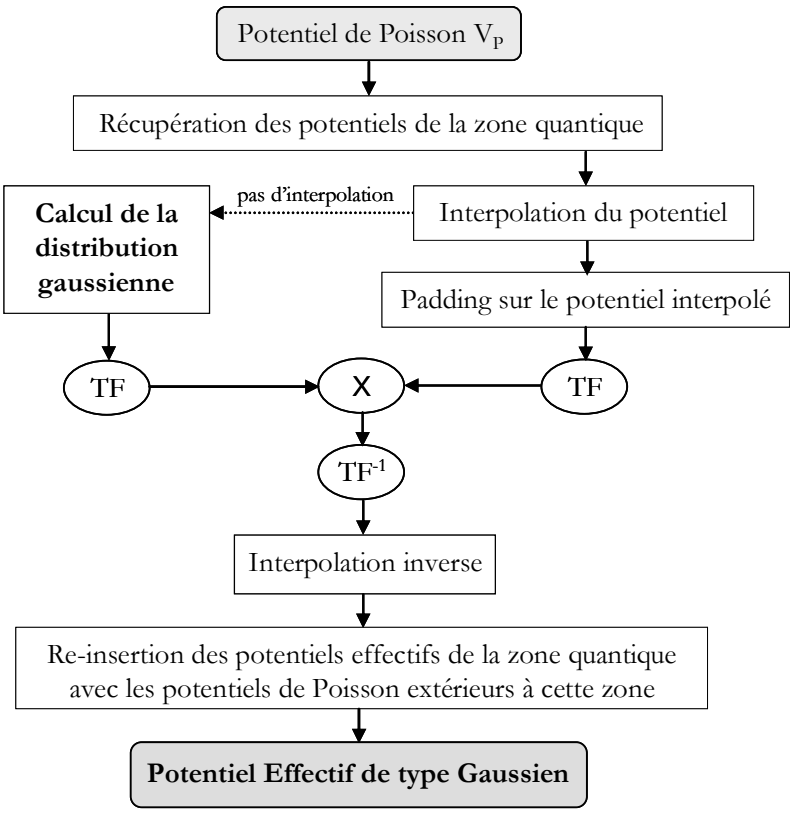


Figure 2.8 : Algorithme de calcul du potentiel effectif de type Gaussien.

A partir du potentiel de Poisson, seules les données dites de la zone quantique sont conservées. Cette zone quantique est la zone dans laquelle le potentiel de Poisson est modifié par le potentiel effectif. Concrètement, elle correspond à toute la zone active du dispositif, c'est-à-dire la source, le canal et le drain. Ensuite, la connaissance du maillage permet de choisir le pas d'interpolation comme étant le plus grand diviseur commun à toutes les mailles. De cette manière, le pas d'interpolation est inférieur ou égal au plus petit pas de maillage et prend en compte tous les points du maillage originel (aucune information concernant la structure du dispositif n'est perdue). L'interpolation et l'interpolation inverse sont effectuées par la méthode des splines cubiques d'interpolation [Press 96 p.107]. Sur ce potentiel interpolé sont ajoutées des conditions aux limites qui dépendent de la nature de l'interface aux limites de la zone quantique. Le pas de maillage étant connu, la distribution gaussienne est calculée au maillage interpolé. La précision du calcul de la distribution gaussienne a été optimisée par une étude sur le pas de maillage ainsi que sur la distance limite à partir du centre de la gaussienne au-delà de laquelle la distribution gaussienne peut être considérée comme nulle. Ceci implique que non seulement le pas de maillage doit respecter les conditions énoncées ci-dessus mais également être inférieur à une proportion définie de l'écart-type de la distribution gaussienne. Le potentiel de Poisson ayant été mis en forme et la distribution gaussienne ayant été définie, le produit de convolution est calculé par transformée de Fourier. S'ensuivent logiquement une interpolation inverse pour un retour au maillage originel de la structure Monte-Carlo puis une réinsertion des valeurs du potentiel effectif de la zone quantique au milieu des autres valeurs du potentiel. L'allure du Potentiel Effectif de type Gaussien ainsi calculé est présentée et explicitée dans le paragraphe suivant.

2.2.2 Calcul du Potentiel Effectif de type Gaussien

Dans un premier temps, étudions l'allure d'un potentiel effectif de type gaussien indépendamment de toute auto-cohérence avec le mouvement des porteurs. Pour cela, le dispositif double-grille, dont les caractéristiques sont représentées sur la **Figure 2.9** est simulé. Rappelons que l'un des objectifs majeur de ce chapitre est l'étude de la capacité du potentiel effectif de type gaussien à reproduire les effets de confinement quantique d'un point de vue électrostatique. Ainsi, afin que des comparaisons valides avec des résultats issus de simulations Poisson-Schrödinger 1D puissent être réalisées, le dispositif simulé dans ce chapitre présente une polarisation de drain nulle et une longueur de grille suffisamment grande pour que les effets dans la direction du transport n'entrent pas en jeu. Le dispositif double-grille étudié peut donc être assimilé à une capacité double-grille. Pour une polarisation de grille suffisamment élevée, autrement dit dans des conditions favorables au régime d'inversion, on choisit arbitrairement $E_B = 0{,}4$ eV et $\sigma_x = 0{,}5$ nm. La **Figure 2.10** permet alors de

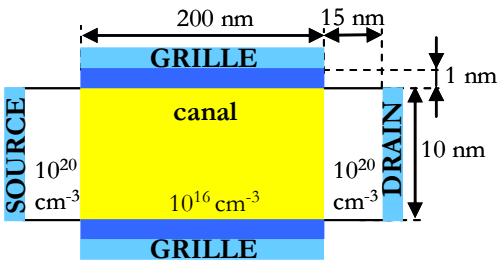


Figure 2.9 : Dispositif double-grille simulé.

visualiser globalement les allures en 3D du potentiel de Poisson (a) et de son potentiel effectif de type gaussien associé (b).

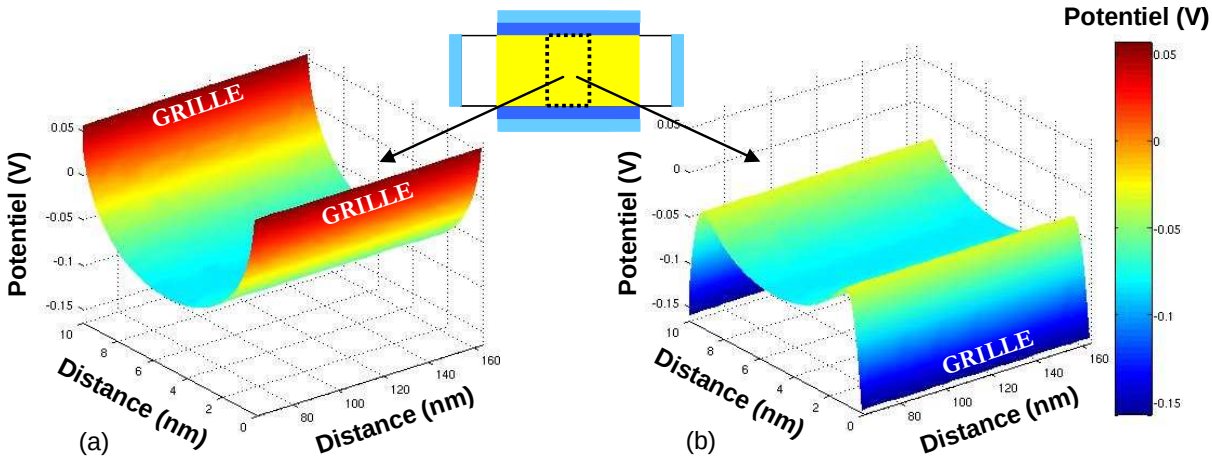


Figure 2.10 : Potentiel de Poisson (a) et potentiel effectif de type Gaussien associé (b) pour V_{GS} = 0,9 V et V_{DS} = 0V.

Contrairement au potentiel de Poisson, le potentiel effectif est fortement décroissant à proximité des interfaces oxyde-silicium. Or, dans un algorithme Monte-Carlo avec potentiel de correction quantique, le champ électrique responsable du mouvement des porteurs est déduit du potentiel de correction. Ainsi, de par l'allure du potentiel effectif, les porteurs sont soumis à un champ électrique répulsif à proximité des interfaces oxyde-silicium. Pour plus de précisions sur l'allure de ce potentiel effectif de type gaussien, la **Figure 2.11** représente les potentiels de Poisson et effectif pour une coupe effectuée au milieu du canal dans la direction du confinement. Cette coupe met en évidence que le potentiel effectif est d'autant plus proche du potentiel de Poisson que l'on s'éloigne de la grille. Au milieu du canal, c'est-à-dire lorsque que l'on est suffisamment éloigné des interfaces oxyde-silicium pour que l'influence de leurs conditions aux limites ne répercute plus sur le potentiel, le potentiel effectif est quasiment identique au potentiel de Poisson. Avant d'étudier l'influence des paramètres spécifiques au potentiel effectif de type gaussien que sont E_B et σ_x, étudions la manière dont s'effectue l'auto-cohérence entre le mouvement des porteurs et le calcul du potentiel effectif.

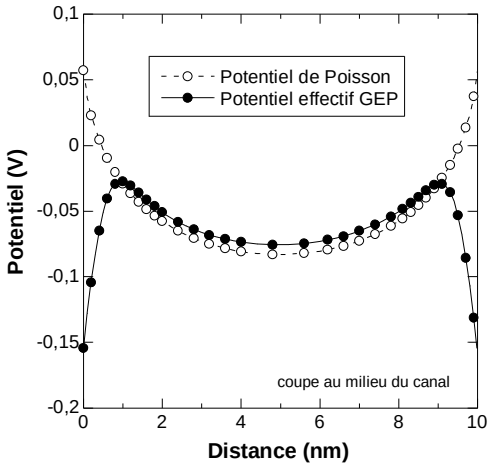


Figure 2.11 : Potentiels de Poisson et effectif de type Gaussien (GEP) pour une coupe au milieu du canal dans la direction du confinement du dispositif double-grille simulé.

2.2.3 Auto-cohérence entre le mouvement des porteurs et le potentiel effectif

Dans ce paragraphe sont présentés des résultats de l'évolution temporelle d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type gaussien jusqu'à l'état d'équilibre. L'objectif est ici de suivre l'évolution au cours du temps d'un certain nombre de valeurs caractéristiques comme la concentration de porteurs ou le potentiel afin d'étudier la convergence entre le mouvement des porteurs et le calcul du potentiel effectif. Pour cela, le potentiel de Poisson, le potentiel effectif, le champ électrique et la concentration de porteurs sont tracés après 500, 2000 et 5000 itérations quantiques ainsi qu'à l'équilibre quantique (le pas de temps utilisé est de 0,1 fs). Nous appelons ici « itération quantique » une itération pour laquelle le potentiel de Poisson est remplacé par le potentiel effectif. Afin de comparer nos résultats avec ceux d'une simulation semi-classique, les résultats à l'équilibre classique sont tracés. Tout comme pour le paragraphe précédent, les paramètres utilisés lors de la simulation sont : V_{GS} = 0,9 V / V_{DS} = 0 V / E_B = 0,4 eV / σ_x = 0,5 nm.

La **Figure 2.12** représente les potentiels issus de la résolution de Poisson (Vp) et les potentiels effectifs de type gaussien associés (GEP) après 500, 2000 et 5000 itérations quantiques ainsi qu'aux équilibres classique et quantique. Quant aux champs électriques responsables du mouvement des porteurs, ils sont tracés pour les mêmes itérations sur la **Figure 2.13**. Les coupes présentées ont été réalisées dans la direction du confinement au milieu du canal.

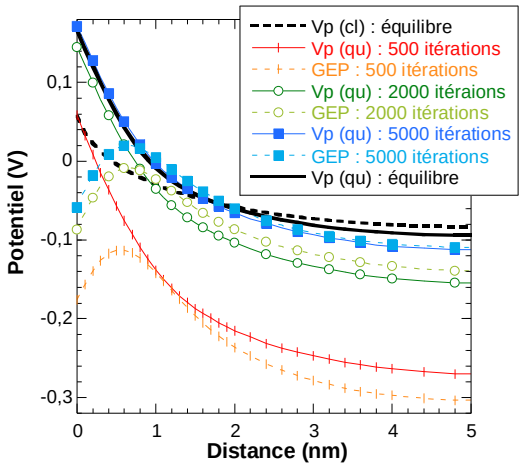


Figure 2.12 : Potentiels de Poisson (Vp) et potentiels effectifs associés (GEP) à différentes itérations pour une coupe au milieu du canal dans la direction transverse au transport.

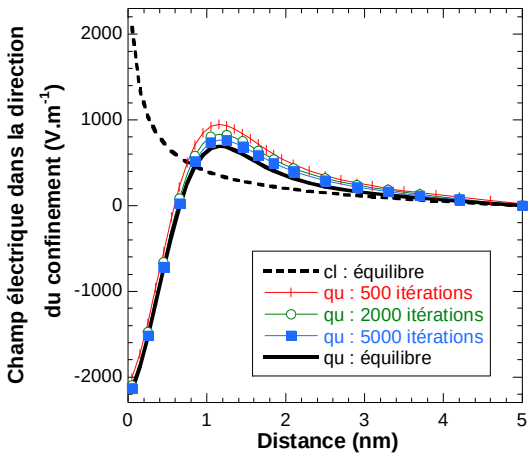


Figure 2.13 : Champ électrique dans la direction transverse au transport à différentes itérations et pour une coupe au milieu du canal dans la direction transverse au transport.

Pour les itérations quantiques, on observe nettement un champ répulsif aux interfaces. A environ 0,6 nm de l'interface, le champ électrique issu du potentiel effectif devient positif et donc attractif pour les électrons. Le maximum de ce champ se situe à environ 1,1 nm de l'interface et est de valeur inférieure au maximum du champ classique à l'interface. Cependant, cette valeur devrait être

suffisante pour attirer les électrons et former un canal de conduction. Ainsi les porteurs ne vont plus être attirés à l'interface mais à quelques Angström à l'intérieur du silicium.

Pour vérifier cela, aux mêmes itérations que précédemment, sont représentées sur la **Figure 2.14** les concentrations de porteurs moyennées sur 250 itérations (les concentrations aux équilibres classiques et quantiques sont moyennées sur 20000 itérations). Une évolution temporelle de la concentration de porteurs est assez difficile à mettre en évidence, entre autre à cause du bruit particulaire. On peut tout de même remarquer que dès les 500 premières itérations la répulsion des porteurs à l'interface est observable même si elle n'est vraiment effective qu'après 2000 itérations. Cette répulsion entraîne simultanément une augmentation de la concentration de porteurs au milieu du canal. A l'équilibre quantique, la concentration de porteurs se comporte bien comme attendu, avec un maximum de la densité de porteurs situé non pas à l'interface mais à environ 0,7 nm à l'intérieur du silicium. Sur les **Figures 2.12 à 2.14**, il est intéressant de noter que l'auto-cohérence entre le mouvement des porteurs et le potentiel effectif est atteinte relativement rapidement. En effet, après 5000 itérations quantiques, le potentiel de Poisson, le champ électrique et la concentration de porteurs sont très proches des valeurs à l'équilibre quantique.

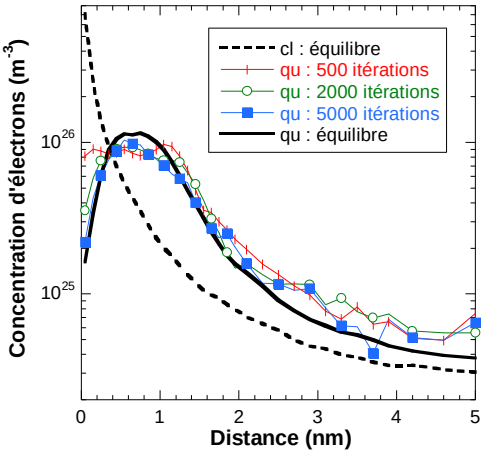


Figure 2.14 : Concentrations de porteurs à différentes itérations et pour une coupe au milieu du canal dans la direction transverse au transport.

2.2.4 Conclusion

Le calcul du potentiel effectif de type gaussien qui s'exprime sous la forme d'un produit de convolution repose d'un point de vue numérique, d'une part, sur l'utilisation d'une méthode de transformée de Fourier et, d'autre part, sur l'application de conditions aux limites dotées d'une certaine signification physique. Les quelques résultats présentés mettent tout d'abord en évidence que le potentiel effectif de type gaussien, en première approche, permet de rendre compte qualitativement d'une répulsion des porteurs aux interfaces oxyde-silicium et d'un décalage du canal de conduction à quelques Angström de l'interface. Ensuite, il a été montré que dans une simulation Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type gaussien, l'auto-cohérence entre le mouvement des porteurs et le calcul du potentiel effectif est rapidement atteinte et ceci sans l'application de conditions initiales spécifiques. En effet, seules quelques itérations suffisent à repousser les porteurs de l'interface et très rapidement l'équilibre quantique est atteint. Etudions désormais la capacité du potentiel effectif de type gaussien à reproduire quantitativement les effets quantiques d'un point de vue purement électrostatique.

2.3 Potentiel Effectif de type Gaussien et effets de confinement quantique

2.3.1 Influence des paramètres spécifiques au Potentiel Effectif de type Gaussien

Toutes les courbes présentées dans ce paragraphe sont extraites de simulations du dispositif double-grille précédemment introduit (cf. **Figure 2.9**) non polarisé sur le drain et polarisé en régime d'inversion sur les grilles : V_{DS} = 0 V et V_{GS} = 0,9 V.

2.3.1.1 Influence de la hauteur de barrière d'oxyde : E_B

Sur la **Figure 2.15**, pour différentes valeurs du paramètre E_B assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde et pour σ_x = 0,5 nm, sont représentés le potentiel de Poisson à l'équilibre classique ainsi que les potentiels effectifs de type gaussien associés à chaque valeur de E_B à la première itération quantique. Les concentrations de porteurs à l'équilibre classique et quantique sont tracées sur la **Figure 2.16**.

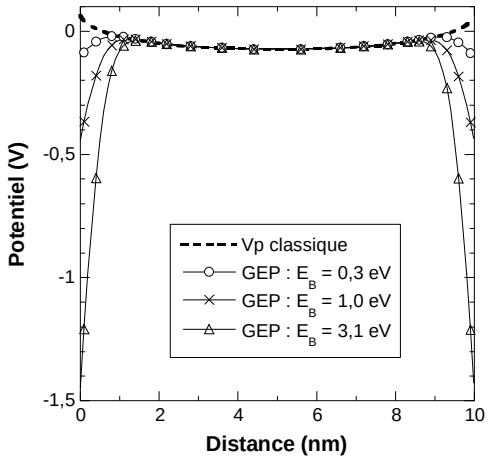


Figure 2.15 : Potentiel de Poisson à l'équilibre classique (Vp) et potentiels effectifs de type gaussien (GEP) dans la direction transverse au transport au milieu du canal pour différentes valeurs du paramètre E_B avec σ_x = 0,5 nm.

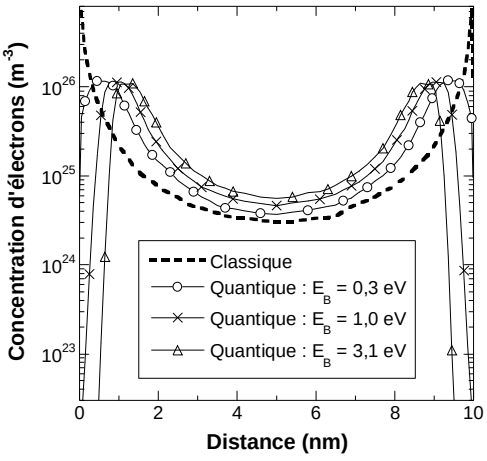


Figure 2.16 : Concentrations de porteurs à l'équilibre classique et quantique pour différentes valeurs du paramètre E_B dans la direction transverse au transport au milieu du canal avec σ_x = 0,5 nm.

De par la définition du produit de convolution, on vérifie que le potentiel effectif de type gaussien est d'autant plus décroissant à proximité des interfaces que la valeur du paramètre E_B est élevée. Il en résulte naturellement une répulsion d'autant plus importante des porteurs à l'interface oxyde-silicium. Il est à noter que le paramètre E_B agit non seulement sur la valeur de la densité de porteurs à l'interface mais également sur la position du maximum de la densité de porteurs dans le film de silicium.

2.3.1.2 Influence de l'étalement du paquet d'ondes de la particule : σ_x

Sur la **Figure 2.17**, pour différentes valeurs du paramètre σ_x assimilé à l'étalement du paquet d'ondes de la particule et pour $E_B = 0{,}3$ eV, sont représentés le potentiel de Poisson à l'équilibre classique ainsi que les potentiels effectifs de type gaussien associés à chacune des valeurs de σ_x à la première itération quantique. Les concentrations de porteurs à l'équilibre classique et quantique sont tracées sur la **Figure 2.18**.

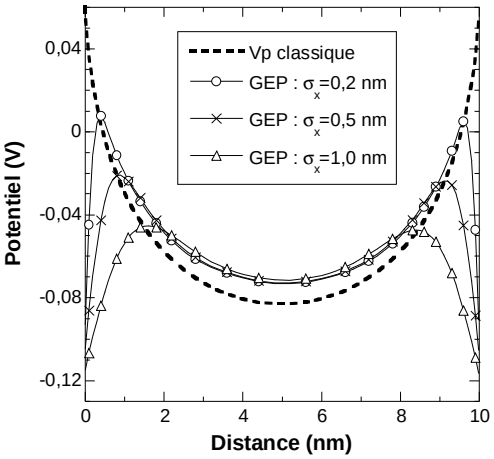


Figure 2.17 : Potentiel de Poisson à l'équilibre classique et potentiels effectifs de type gaussien (GEP) dans la direction transverse au transport au milieu du canal pour différentes valeurs du paramètre σ_x avec $E_B = 0{,}3$ eV.

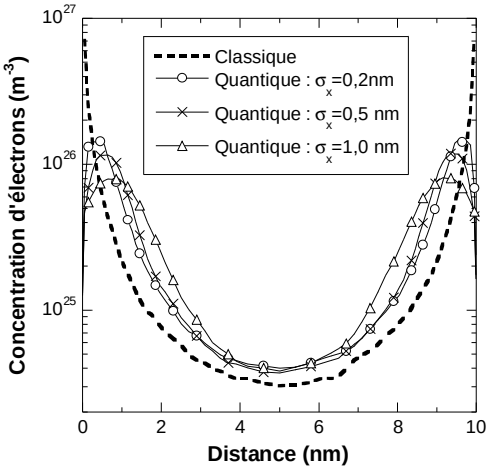


Figure 2.18 : Concentrations de porteurs à l'équilibre classique et quantique dans la direction transverse au transport au milieu du canal avec $E_B = 0{,}3$ eV.

Rappelons que le produit de convolution d'un signal, en l'occurrence le potentiel de Poisson et ses conditions aux limites associées, par une distribution gaussienne est équivalent à un lissage du signal en question. Le lissage est alors d'autant plus marqué que la distribution gaussienne présente un écart-type important. C'est pourquoi on observe une allure de potentiel effectif et une concentration de porteurs associée d'autant moins abrupte aux interfaces oxyde-silicium que la valeur de σ_x est importante. Il est à noter que le paramètre σ_x agit sur la position et la valeur du maximum de la densité de porteurs dans le film de silicium mais également sur la pente de la densité de porteurs à proximité de l'interface oxyde-silicium.

2.3.1.3 Bilan

Le potentiel effectif de type gaussien et la concentration de porteurs à l'équilibre quantique associée évoluent de manière conforme aux deux paramètres propres au potentiel effectif que sont E_B et σ_x. Cependant, rappelons que l'objectif de cette correction quantique est de reproduire les effets de confinement quantique et en particulier les conséquences de ces effets sur l'électrostatique du dispositif. Quelles sont donc les valeurs des paramètres E_B et σ_x à utiliser afin d'atteindre cet objectif ?

Pour répondre à cette question, commençons par procéder à un état de l'art des différentes études menées à ce sujet dans la littérature.

2.3.2 Etat de l'art

Depuis que la correction par le potentiel effectif de type gaussien ou GEP a été démontrée comme efficace pour reproduire les effets de confinement quantique dans un code Monte-Carlo [Ferry 00b], elle a fait l'objet de plusieurs études visant à déterminer les valeurs des paramètres E_B et σ_x permettant de reproduire le plus précisément possible ces effets d' un point de vue électrostatique. Pour cela, des résultats de simulations Poisson-Schrödinger 1D [Atlas] sont utilisés comme référence. En effet rappelons que pour le moment, seule une étude du comportement électrostatique est réalisée (le dispositif simulé est suffisamment long pour s'affranchir des effets dans la direction du transport et n'est pas polarisé sur le drain). La comparaison des résultats Monte-Carlo corrigé par le GEP et Poisson-Schrödinger est donc tout à fait justifiée.

Parmi les premiers résultats de la correction par le potentiel effectif de type gaussien, ont été rapportés ceux pour une capacité MOS d'épaisseur d'oxyde 6 nm avec un dopage substrat égal à 10^{17} et 10^{18} cm^{-3} et une polarisation de grille variant entre 1 V et 5 V [Akis 01]. Il est à noter que cet article de l'équipe de Ferry est le plus fréquemment cité comme référence de la validité de la correction par le GEP pour reproduire correctement les effets de confinement quantique. L'oxyde de la structure étant du SiO_2, 3,1 eV a été utilisé comme valeur pour le paramètre E_B assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde. Il a alors été montré que l'utilisation d'une valeur unique σ_x = 0,5 nm pouvait, dans ce cas, décrire la réduction de la charge d'inversion ainsi que le déplacement de la position moyenne des porteurs dans le film de silicium dus aux effets du confinement. La référence [Watling 01] compare notamment des profils de densités de porteurs obtenus par simulations Poisson-Schrödinger 1D et Monte-Carlo corrigé par GEP avec les paramètres donnés par [Ferry 00b]. Dans le cas de la correction par le GEP, il y est mis en évidence une répulsion trop forte des porteurs à l'interface oxyde-silicium.

Une étude plus précise, principalement centrée sur l'influence du paramètre σ_x, a été réalisée sur une structure MOS [Li 02]. Une unique valeur de σ_x a été montrée comme insuffisante pour reproduire précisément la charge d'inversion dans le cas de différentes polarisations de grille, différents dopages ou profils de dopants (uniforme, rétrograde, gaussien). Les mêmes conclusions que les études de l'équipe de Ferry réalisées précédemment ont été obtenues : même si σ_x est utilisé comme un paramètre ajustable pour reproduire la charge d'inversion, la profondeur moyenne de la charge d'inversion est systématiquement surestimée et les profils de densité de porteurs sont mal reproduits.

Dans le but d'améliorer le profil de la densité de porteurs, une étude portant sur trois couples de paramètres (σ_x, E_B) est proposée dans le cas d'une structure nMOSFET SOI simple-grille [Palestri 03]. Les résultats sur la charge d'inversion montrent qu'à E_B constant une diminution de la

valeur de σ_x entraîne une augmentation de la charge d'inversion qui s'explique par l'augmentation de la capacité d'oxyde (le maximum de la densité de porteurs est plus proche de l'interface). De même lorsque E_B diminue, une augmentation de la capacité d'oxyde entraîne une augmentation de la charge d'inversion qu'une augmentation de σ_x n'arrive pas à compenser. Notons que l'on retrouve là les évolutions présentées dans le paragraphe précédent. Cette étude non systématique a ainsi montré que, parmi les trois jeux de paramètres étudiés, le jeu de paramètres σ_x = 0,5 nm et E_B = 3,1 eV est celui permettant de reproduire au mieux la charge d'inversion. Cependant l'utilisation de ce jeu de paramètres induit une trop forte répulsion des porteurs à l'interface oxyde-silicium.

Ainsi donc, les différentes études menées sur les paramètres σ_x et E_B s'accordent sur le choix des valeurs σ_x = 0,5 nm et E_B = 3,1 eV comme étant celles permettant de reproduire au mieux les charges d'inversion. Néanmoins, toutes les études précédemment citées s'accordent également à dire et à montrer qu'un tel choix de paramètres induit une répulsion trop forte des porteurs aux interfaces oxyde-silicium et donc une mauvaise représentation du profil de la densité de porteurs. Dans le cas de notre mise en œuvre de la correction par le GEP dans le code MONACO (cf. paragraphe 2.2), voyons désormais quels résultats de simulation nous obtenons pour les valeurs des paramètres déterminées ci-dessus : σ_x = 0,5 nm et E_B = 3,1 eV. Dans toute la suite de ce chapitre, ce jeu de paramètres est dénommé « paramètres de la littérature ».

2.3.3 Résultats

Sur la **Figure 2.19** sont tracés les profils de concentrations de porteurs obtenus par simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP avec les paramètres de la littérature et par simulation Poisson-Schrödinger à V_{GS} = 0,1 V et V_{GS} = 1,0 V pour des films de 10 nm (a) et 5 nm (b). L'erreur relative commise sur la charge d'inversion est reportée dans la **Table 2.1** (la charge de référence est celle donnée par les simulations Poisson-Schrödinger).

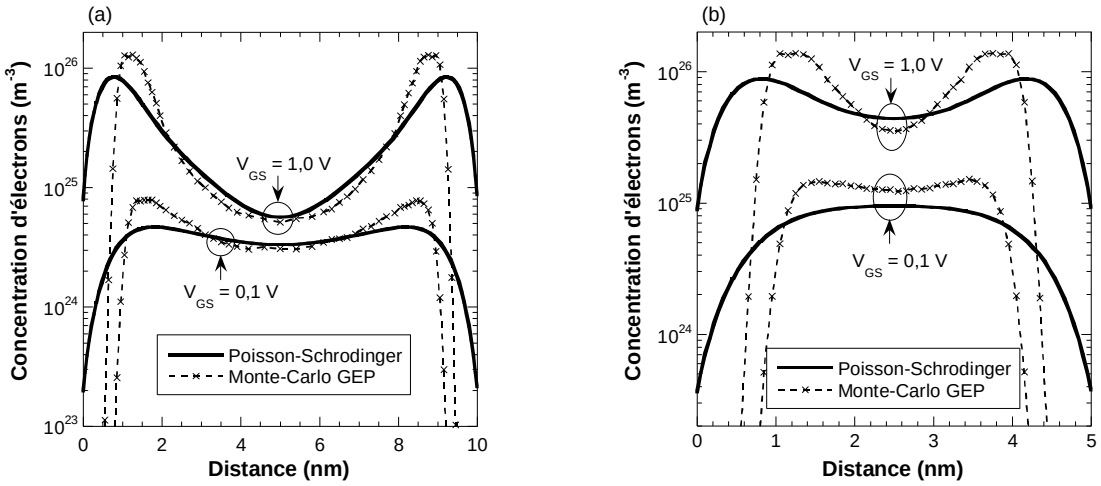


Figure 2.19 : Concentrations de porteurs obtenues par simulation Poisson-Schrödinger ou par simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP avec les paramètres de la littérature (σ_x = 0,5 nm et E_B = 3,1 eV) à V_{GS} = 0,1 V et V_{GS} = 1 V pour des films de 10 nm (a) et 5 nm (b) d'épaisseur.

Ces résultats sont similaires à ceux décrits dans la littérature. En particulier, on retrouve ce qui fait la force de la correction par le GEP avec les paramètres de la littérature, à savoir une bonne représentation de la charge d'inversion. Cependant, cette propriété du GEP avec les paramètres de la littérature est à nuancer. En effet, l'obtention d'une erreur sur la charge d'inversion de 19 % pour un dispositif de 5 nm d'épaisseur de film et polarisé à V_{GS} = 0,1 V, met en évidence que la charge d'inversion n'est pas systématiquement reproduite. Néanmoins, les quelques résultats présentés ici ne nous permettent pas de tirer de plus amples conclusions sur ce sujet. Une étude approfondie serait nécessaire afin de déterminer précisément la gamme de validité de la valeur de la charge d'inversion. En ce qui concerne les profils de densité de porteurs, ils présentent des allures similaires à ceux de la littérature. La correction par le GEP se caractérise nettement par une trop forte répulsion des porteurs aux interfaces oxyde-silicium.

	V_{GS} = 0,1 V	V_{GS} = 1,0 V
T_{Si} = 10 nm	7,5 %	2,6 %
T_{Si} = 5 nm	19 %	2,1 %

Table 2.1: Erreur sur la charge d'inversion donnée par simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP par rapport à celle donnée par simulation Poisson-Schrödinger.

Sur la **Figure 2.20**, traçons les potentiels de Poisson associés aux concentrations de porteurs de la **Figure 2.19**. Comme attendu, la correction par le GEP ne peut reproduire correctement l'allure du potentiel de Poisson.

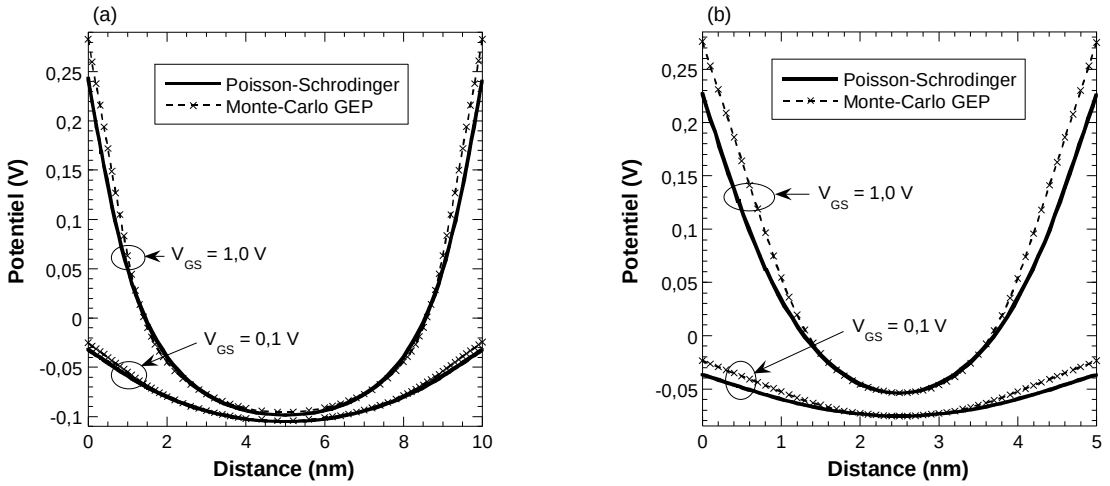


Figure 2.20 : Potentiels de Poisson obtenus par simulation Poisson-Schrödinger ou par simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP avec les paramètres de la littérature (σ_x = 0,5 nm et E_B = 3,1 eV) à V_{GS} = 0,1 V et V_{GS} = 1 V pour des films de 10 nm (a) et 5 nm (b) d'épaisseur.

Pour conclure, nous venons de reproduire les résultats de la littérature et donc dans une certaine mesure de valider notre mise en œuvre de la correction par le potentiel effectif de type gaussien dans le code MONACO. Les résultats obtenus montrent que la correction par le GEP avec les paramètres de la littérature permet, dans une certaine mesure, de correctement reproduire la charge d'inversion. Cependant, les profils de densité de porteurs et de potentiel de Poisson sont incorrects.

2.3.4 Conclusion

Le potentiel effectif de type gaussien est caractérisé par deux paramètres que sont σ_x assimilé à l'étalement du paquet d'onde de la particule et E_B assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde. Dans le paragraphe 2.2.1 il est montré que chacun de ces paramètres agit sur l'allure du potentiel effectif et de la concentration de porteurs résultante conformément à sa signification. Afin de reproduire au mieux les profils de densité de porteurs, la détermination des valeurs à donner à ces paramètres a fait l'objet d'un certain nombre d'études en littérature dont les résultats sont résumés dans le paragraphe 2.2.2. Toutes s'accordent sur le fait que le jeu de paramètres (σ_x = 0,5 nm et E_B = 3,1 eV) permet l'obtention d'une valeur correcte de la charge d'inversion. Cependant, l'utilisation d'un tel jeu de paramètres entraîne systématiquement une répulsion trop forte des porteurs à l'interface. Les résultats obtenus par notre mise en œuvre de la correction par le GEP dans le code Monte-Carlo MONACO ont donné des résultats similaires à ceux de la littérature. Par ailleurs, ils font apparaître, dans certaines conditions, des erreurs sur la charge d'inversion non acceptables qui tendent à accréditer le fait que la correction par le GEP avec les paramètres de la littérature ne permet pas de reproduire correctement la charge d'inversion de façon universelle. La correction par le GEP avec les paramètres de la littérature n'est donc pas satisfaisante car, même lorsque la charge d'inversion est correcte, elle conduit à des profils de densités de porteurs peu réalistes en particulier à proximité des interfaces oxyde-silicium. Ceci est critique notamment pour les calculs de mobilité effective dans les couches d'inversion et de rugosité de surface. Il convient donc de reproduire plus précisément les profils de densité de porteurs donnés par Poisson-Schrödinger. Pour cela une solution intéressante, qui à notre connaissance n'a jamais été mise en œuvre, est d'ajuster simultanément et de manière systématique les valeurs des paramètres σ_x et E_B par une méthodologie inspirée de celle des plans d'expériences. Cette méthodologie, ses avantages et les résultats obtenus sont présentés dans le paragraphe suivant.

2.4 Limitations du Potentiel Effectif de type Gaussien

2.4.1 Limitations d'ordre « expérimental »

Dans le cadre d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type gaussien, afin de déterminer des valeurs des paramètres σ_x et E_B permettant une représentation correcte du profil de la densité de porteurs, une méthodologie inspirée de celle des plans d'expériences est mise en place. Commençons donc par introduire ce que sont les plans d'expériences. Ensuite, notre objectif étant de reproduire correctement les profils de densité de porteurs issus d'une résolution Poisson-Schrödinger, nous verrons comment quantifier l'erreur entre les profils de densité de porteurs issus de simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP et Poisson-Schrödinger. Enfin, après avoir décrit la méthodologie mise en place, nous en présenterons et exploiterons les résultats.

2.4.1.1 Méthodologie des plans d'expériences

Pour étudier l'influence de plusieurs paramètres sur un résultat, une méthode usuelle consiste en l'évaluation de l'ensemble des combinaisons des valeurs des paramètres. Par exemple, 4 paramètres présentant chacun 5 valeurs théoriques nécessitent la réalisation de $5^4 = 625$ expériences, ce qui est extrêmement coûteux. Afin de diminuer le nombre d'expériences à réaliser, l'utilisation de plans d'expériences (ou DOE pour *Design Of Experiments*) s'avère judicieuse [Sado 91]. Grâce à cette méthodologie, la précision et la fiabilité des résultats sont grandement améliorées comparativement à un cas où le même nombre d'expériences serait défini au hasard ou sans méthode. En effet, les plans d'expériences permettent de définir un cadre mathématique strict qui, contrairement aux méthodes usuelles modifiant les paramètres un à un, proposent de modifier tous les paramètres simultanément et ceci en un minimum d'expériences. De cette manière, l'intégralité du domaine couvert par les valeurs pertinentes des paramètres est explorée de manière efficace ou rentable dans le sens où la méthodologie des plans d'expériences permet un bon compromis entre le nombre d'expériences et la qualité des résultats. Souhaitant ajuster simultanément deux paramètres, E_B et σ_x, de manière à reproduire au mieux les profils de concentration de porteurs issus de Poisson-Schrödinger et ce pour des architectures présentant différentes polarisations de grille, différentes épaisseurs de film de silicium, différents dopages … cette approche est parfaitement adaptée à la résolution de notre problème. Il est à noter que l'une des difficultés majeures de cette méthodologie est la détermination du critère permettant de définir les résultats obtenus comme plus ou moins satisfaisants. Cette quantification de l'erreur fait l'objet du prochain paragraphe.

2.4.1.2 Quantification de l'erreur

Afin que la correction par le GEP reproduise au mieux les profils de densité de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger, il convient de déterminer une grandeur qui quantifie l'erreur entre les profils de concentrations de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le GEP. La méthodologie mise en œuvre, inspirée des plans d'expériences, permet alors de déterminer efficacement les valeurs de paramètres pour lesquelles cette erreur est minimisée. Précisons que, bien que ce soit théoriquement paradoxal puisqu'un bon profil de concentration de porteurs entraîne par nature une bonne représentation de la charge d'inversion, il conviendra de s'assurer qu'une représentation plus réaliste du profil de la densité de porteurs ne se fait pas au détriment d'une perte de précision sur la valeur de la charge d'inversion.

Définir une unique fonction erreur permettant de quantifier une erreur relative à des profils de densité de porteurs n'est pas chose aisée. Nous n'avons pas choisi de caractériser cette erreur par une intégrale des différences point à point des valeurs des densités de porteurs entre des résultats Poisson-Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le GEP, mais plutôt par le calcul des trois erreurs simples citées ci-après :

✓ l'erreur absolue sur la position du maximum de la densité de porteurs :

$$\Delta x = GEP_{pos} - PS_{pos} \tag{2.68}$$

avec GEP_{pos} et PS_{pos} les positions du maximum de la densité de porteurs respectivement pour une simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP et Poisson-Schrödinger ;

✓ l'erreur relative sur la valeur du maximum de la densité de porteurs en logarithme décimal :

$$\log\left(\frac{GEP_{max}}{PS_{max}}\right) \tag{2.69}$$

avec GEP_{max} et PS_{max} les valeurs du maximum de la densité de porteurs respectivement pour une simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP et Poisson-Scrhödinger ;

✓ l'erreur relative sur la valeur de la densité de porteurs à l'interface en logarithme décimal :

$$\log\left(\frac{GEP_{inter}}{PS_{inter}}\right) \tag{2.70}$$

avec GEP_{inter} et PS_{inter} les valeurs de la densité de porteurs à l'interface oxyde-silicium respectivement pour une simulation Monte-Carlo corrigé par le GEP et Poisson-Schrödinger.

Ces trois erreurs simples étant simultanément minimisées, le profil de la densité de porteurs entre l'interface oxyde-silicium et le maximum de la densité de porteurs devrait être correctement représenté. Se limiter à des estimations d'erreurs assurant une représentation correcte du profil de la densité de porteurs sur les premiers nanomètres dans le film de silicium se justifie par le fait que la majorité des phénomènes de transport ont lieu sur ces premiers nanomètres. Afin de déterminer le jeu de paramètres minimisant au mieux et simultanément ces trois erreurs, une erreur globale découlant des trois erreurs simples précédentes est définie par :

$$Erreur_globale = \alpha\left(\frac{GEP_{pos} - PS_{pos}}{0{,}1\,nm}\right)^2 + \beta\left[\log\left(\frac{GEP_{max}}{PS_{max}}\right)\right]^2 + \gamma\left[\log\left(\frac{GEP_{inter}}{PS_{inter}}\right)\right]^2 \tag{2.71}$$

avec α, β et γ les pondérations de chacune des erreurs simples sur l'erreur globale.

On choisit de donner un poids équivalent à chacune des valeurs moyennes des erreurs simples de manière à leur donner la même importance. De plus, on considère que la somme pondérée de chacune des valeurs moyennes des erreurs simples vaut l'unité. Ceci est résumé par les équations ci-dessous :

$$\begin{cases} \alpha\overline{\left(\frac{GEP_{pos} - PS_{pos}}{0{,}1\,nm}\right)^2} = \beta\overline{\left[\log\left(\frac{GEP_{max}}{PS_{max}}\right)\right]^2} = \gamma\overline{\left[\log\left(\frac{GEP_{inter}}{PS_{inter}}\right)\right]^2} \\ \alpha\overline{\left(\frac{GEP_{pos} - PS_{pos}}{0{,}1\,nm}\right)^2} + \beta\overline{\left[\log\left(\frac{GEP_{max}}{PS_{max}}\right)\right]^2} + \gamma\overline{\left[\log\left(\frac{GEP_{inter}}{PS_{inter}}\right)\right]^2} = 1 \end{cases} \tag{2.72}$$

où la barre horizontale signifie la valeur moyenne.

A partir du système d'équations (2.72), il est possible de déterminer les pondérations α, β et γ de chacune des erreurs simples et par conséquent d'avoir accès à l'erreur globale donnée par (2.71). L'erreur globale ainsi calculée devrait alors permettre de mettre en évidence les couples de paramètres σ_x et E_B les plus judicieux pour la reproduction d'un profil correct de la densité de porteurs. Une comparaison avec l'erreur sur la charge d'inversion permettra alors de conclure quant à la capacité de la correction par le potentiel effectif de type gaussien à conserver une bonne représentation de la charge d'inversion tout en reproduisant au mieux les profils de densité de porteurs.

2.4.1.3 Méthodologie inspirée des plans d'expériences mise en place

Dans un but de simplification, nous ne traitons que d'une unique structure de dispositif double-grille caractérisée par une longueur de grille de 200 nm, une épaisseur de film de 10 nm, une épaisseur d'oxyde de 1 nm et un dopage canal de 10^{16} cm^{-3} (cf. **Figure 2.9**).

Dans un premier temps, un véritable plan d'expériences a été réalisé sur une large gamme de valeurs pour les paramètres σ_x ($0{,}3\text{ nm} < \sigma_x < 1{,}5\text{ nm}$) et E_B ($0{,}1\text{ eV} < E_B < 3{,}1\text{ eV}$) et pour $0{,}1\text{ V} < V_{GS} < 1{,}0\text{ V}$ avec V_{GS} la polarisation de grille. Ce premier plan d'expériences a mis en évidence que, pour toute la gamme de polarisations de grille étudiée, les meilleurs résultats sont obtenus pour $0{,}8\text{ nm} < \sigma_x < 1{,}4\text{ nm}$, $0{,}1\text{ eV} < E_B < 0{,}6\text{ eV}$. Ces gammes de valeurs sont tout à fait conformes à ce qui était attendu. En effet, compte tenu de la trop forte répulsion des porteurs observée avec les paramètres de la littérature (cf. paragraphe 2.3.3), notre étude de l'influence des paramètres spécifiques au GEP confirme qu'il convient de travailler avec des valeurs de σ_x supérieures et E_B inférieures à celles de la littérature (cf. paragraphe 2.3.1).

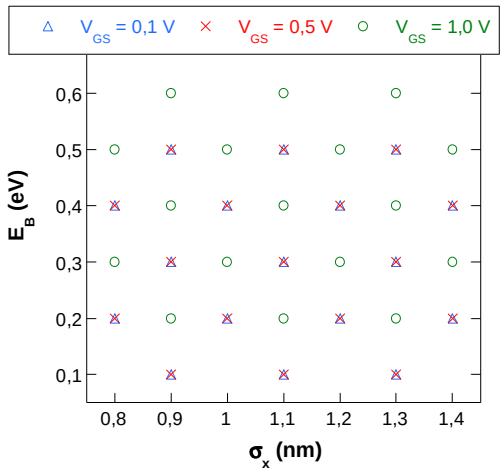


Figure 2.21 : Représentation schématique de la répartition systématique des expériences.

Dans un deuxième temps, à partir des gammes ciblées de paramètres σ_x et E_B obtenues par le plan d'expériences cité précédemment, une répartition systématique d'expériences à mener a été définie dans la philosophie des plans d'expériences. Cette répartition systématique d'expériences est résumée sur la **Figure 2.21**. Les résultats de ces expériences font l'objet du prochain paragraphe.

2.4.1.4 Résultats

Pour chacun des points de l'étude systématique décrite ci-dessus, l'erreur relative sur la charge d'inversion ainsi que l'erreur globale définie au paragraphe 2.4.1.2 ont été calculées. L'erreur sur la

charge d'inversion en fonction de l'erreur globale est tracée sur la **Figure 2.22** pour les différentes polarisations de grille étudiées. Ce premier résultat permet de conclure qu'une erreur globale minimale est compatible avec une faible erreur sur la charge d'inversion. On peut également remarquer qu'une augmentation de l'erreur globale s'accompagne simultanément d'une augmentation de l'erreur sur la charge d'inversion. Ceci est tout à fait normal, voire même rassurant, puisque profil et charge d'inversion sont généralement corrélés.

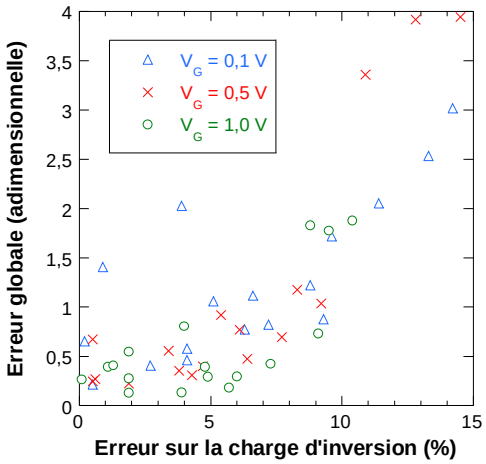


Figure 2.22 : Erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'erreur globale relative au profil de la densité de porteurs pour les différentes polarisations de grille étudiées.

Exploitons désormais plus en détail ces résultats. Afin de déterminer les couples de paramètres pour lesquels l'erreur globale ou l'erreur sur la charge d'inversion est minimale, chacune de ces erreurs a été interpolée à l'aide de splines polyharmoniques d'interpolation [Iske 02] en fonction de σ_x, E_B et V_{GS}. Pour chacune des polarisations de grille étudiées, les cartographies de l'erreur globale ainsi interpolée en fonction des paramètres σ_x et E_B sont présentées sur la **Figure 2.23**. Les croix situent le minimum de cette erreur globale pour chaque V_{GS}.

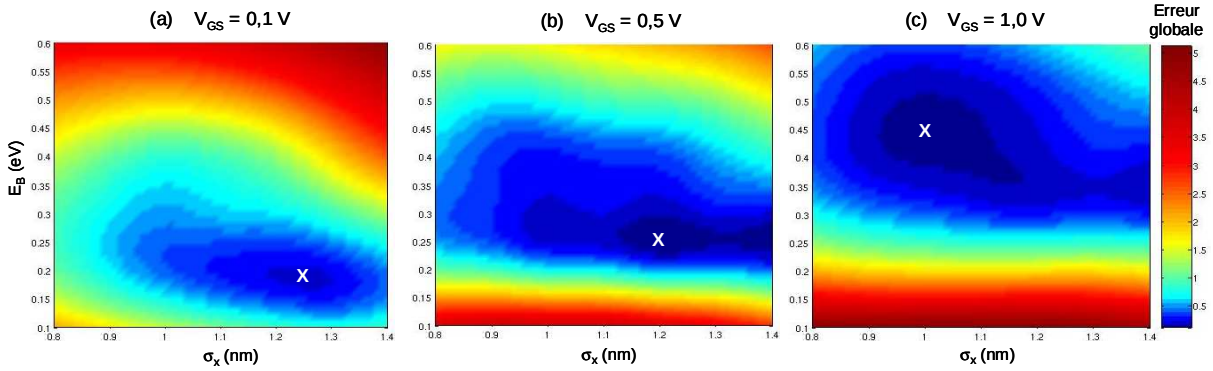


Figure 2.23 : Cartographies de l'erreur globale en fonction de σ_x et E_B pour $V_{GS} = 0{,}1$ V (a), $V_{GS} = 0{,}5$ V (b) et $V_{GS} = 1{,}0$ V (c). Les croix situent le minimum de cette erreur globale pour chaque V_{GS}.

Tout d'abord, on observe que le minimum de l'erreur globale, qui rappelons-le caractérise la capacité à reproduire le profil de la concentration de porteurs, se situe dans le domaine de définition de la répartition systématique des expériences. On vérifie ainsi que les restrictions de gammes de valeurs de chacun des paramètres $0{,}8\text{ nm} < \sigma_x < 1{,}4\text{ nm}$, $0{,}1\text{ eV} < E_B < 0{,}6\text{ eV}$ ont été correctement choisies. Ensuite, on remarque que les courbes de niveau de l'erreur globale se présentent sous une forme allongée parallèlement à l'axe du paramètre σ_x. Le facteur le plus influent de l'erreur globale est donc très nettement le paramètre E_B assimilé à la hauteur de la barrière d'énergie à l'interface oxyde-silicium. Enfin, les minima locaux de l'erreur globale sont donnés pour les valeurs ci-dessous :

- V_{GS} = 0,1 V : E_B = 0,19 eV et σ_x = 1,25 nm
- V_{GS} = 0,5 V : E_B = 0,26 eV et σ_x = 1,20 nm
- V_{GS} = 1,0 V : E_B = 0,45 eV et σ_x = 1,00 nm

Lorsque la polarisation de grille augmente, les effets de confinement quantique s'accentuent et en particulier la répulsion des porteurs à l'interface. Ceci se traduit notamment par une augmentation de la pente de la densité de porteurs à l'interface oxyde-silicium et une diminution de la distance entre l'interface et le maximum de la densité de porteurs. Il est donc tout à fait cohérent que, lorsque V_{GS} augmente, il soit nécessaire d'augmenter E_B de manière à conserver un profil réaliste de densité de porteurs à proximité des interfaces. De même, il est tout à fait cohérent que, lorsque V_{GS} augmente, il soit nécessaire de diminuer σ_x de manière à assurer une position réaliste du maximum de la densité de porteurs.

De la même manière que pour l'erreur globale, les cartographies de l'erreur sur la charge d'inversion sont tracées sur la **Figure 2.24**. Comme précédemment, les croix situent le minimum de l'erreur globale.

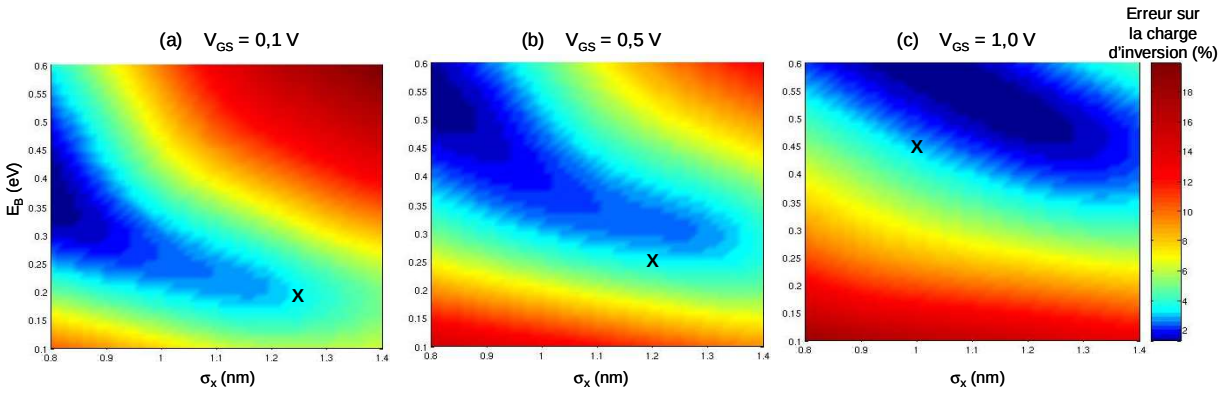


Figure 2.24 : Cartographies de l'erreur sur la charge d'inversion en fonction de σ_x et E_B pour V_{GS} = 0,1 V (a), V_{GS} = 0,5 V (b) et V_{GS} = 1,0 V (c). Les croix situent le minimum de cette erreur globale pour chaque V_{GS}.

Pour chacune des polarisations de grille étudiées, comparons les cartographies des erreurs globales avec celles des erreurs sur la charge d'inversion. On observe certes que les minima de l'erreur sur la charge d'inversion ne sont pas identiques à ceux de l'erreur globale, cependant ils ne sont pas non plus incompatibles entre eux puisque l'optimisation de l'erreur globale entraîne une erreur sur la charge d'inversion inférieure à 5 %. Précisons que les minima de l'erreur sur la charge d'inversion sont systématiquement en frontière de domaine, ce qui signifie que ces résultats présentés ici ne permettent pas de les connaître précisément. Notons également que les allures générales des cartographies ne sont pas correctement corrélées. En effet, en ce qui concerne l'erreur sur la charge d'inversion, une augmentation de la valeur de σ_x est prédite lorsque V_{GS} augmente ce qui est contraire aux résultats obtenus avec l'erreur globale. Nuançons cependant ces tendances opposées par le fait que σ_x présente une faible dépendance sur l'erreur globale et dans une moindre mesure sur l'erreur sur la charge d'inversion. Par contre, quelle que soit l'erreur, une augmentation de la valeur de E_B est prédite lorsque V_{GS} augmente.

Sur la **Figure 2.25**, pour chacune des polarisations étudiées, traçons les profils de densités de porteurs obtenus par simulation Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP avec les valeurs des paramètres minimisant l'erreur globale à la polarisation en question ainsi qu'avec les valeurs des paramètres moyennées sur les trois polarisations (E_B = 0,30 eV et σ_x = 1,15 nm). L'idée est ici de tester si un unique jeu de paramètres ne serait pas suffisant pour décrire le profil de la densité de porteurs à toutes les polarisations.

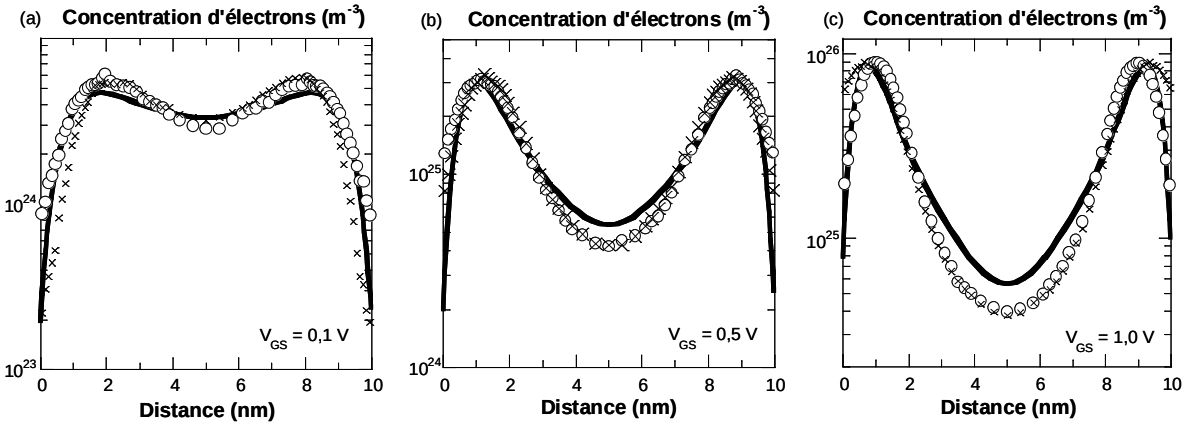


Figure 2.25 : Profils de concentrations de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger (traits pleins) et Monte-Carlo corrigé par le GEP avec les paramètres donnés par la minimisation de l'erreur globale à la polarisation étudiée (ronds) ou avec les valeurs moyenne de chacun des paramètres (croix) pour V_{GS} = 0,1 V (a), V_{GS} = 0,5 V (b) et V_{GS} = 1,0 V (c).

Tout d'abord, il est évident que l'utilisation de paramètres optimisés pour minimiser l'erreur globale permet une grande amélioration des profils de densité de porteurs par rapport à ceux obtenus avec les paramètres de la littérature (cf. paragraphe 2.3.3). En particulier, on observe des positions et valeurs de maxima de la densité de porteurs et des profils à proximité des interfaces oxyde-silicium très réalistes. Ceci est plutôt logique puisque ce sont les critères portant sur la position et la valeur du maximum de la densité de porteurs ainsi que sur la valeur de la densité de porteurs à l'interface qui ont contribué au calcul de l'erreur globale. A V_{GS} = 0,1 V et V_{GS} = 0,5 V, l'utilisation d'un jeu de paramètres unique induit des résultats comparables à ceux obtenus pour le jeu de paramètres optimisé. On observe même une diminution de la surcharge aux interfaces oxyde-silicium du fait d'une valeur de E_B moyenne légèrement supérieure au E_B optimisé. Par contre, à V_{GS} = 1,0 V, l'utilisation du jeu de paramètres unique entraîne une surcharge non négligeable à l'interface. Celle-ci est le fait d'une valeur de E_B nettement sous-estimée ($E_{B\text{-}moy}$ = 0,30 eV << $E_{B\text{-}1,0}$ = 0,45 eV). La densité de porteurs avec les valeurs moyennes des paramètres à V_{GS} = 1,0 V est par conséquent irréaliste.

Tous ces différents résultats mettent en évidence que tenter de considérer un jeu de paramètres unique pour toutes les polarisations n'est pas envisageable. Ceci est notamment la conséquence de l'influence non négligeable du paramètre E_B sur les profils de densité de porteurs. Il est donc nécessaire d'envisager une dépendance de la valeur de chacun des paramètres (ou au moins de E_B) en

fonction de la polarisation de grille mais également en fonction par exemple du dopage ou de l'épaisseur d'oxyde puisque tous deux agissent sur le fonctionnement du dispositif comme une modification de polarisation de grille. Ainsi donc, afin que la correction par le potentiel effectif de type gaussien ne soit pas réduite à la description d'un dispositif unique mais puisse s'appliquer sur des dispositifs présentant différentes caractéristiques, les équations analytiques pour le calcul E_B et σ_x vont devoir présenter de nombreuses dépendances. De ce fait, l'obtention de ces équations analytiques ne va pas être chose aisée.

De plus, ces dernières remarques mettent à jour le problème des dispositifs non symétriques. En effet, pour un dispositif donné, dans la correction par le potentiel effectif de type gaussien, les valeurs des paramètres sont constantes. Quelles sont donc les valeurs des paramètres à prendre pour un dispositif double-grille polarisé différemment sur chacune de ses grilles ou tout simplement pour un dispositif SOI simple grille ?

Enfin, la **Figure 2.25** montre que les profils de densité de porteurs optimisés pour la minimisation de l'erreur globale, ne reproduisent pas très précisément ceux des simulations Poisson-Schrödinger. En particulier, pour les faibles V_{GS}, on observe une surcharge à l'interface oxyde-silicium. De plus, quelle que soit la polarisation de grille, une surcharge est systématiquement présente au niveau du maximum de la densité de porteurs bien souvent compensée par une sous-charge au milieu du film de silicium. Ceci met notamment en évidence, que malgré l'optimisation de l'allure du profil de la densité de porteurs, la correction par le potentiel effectif de type gaussien ne permet pas de reproduire précisément les profils de densités de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger. Cette limitation du potentiel effectif de type gaussien, que l'on vient de mettre en évidence d'un point de vue que l'on pourrait qualifier d'expérimental, est explicitée respectivement d'un point de vue empirique et d'un point de vue théorique dans les deux prochains paragraphes.

2.4.2 Limitation d'ordre « empirique »

Commençons par rappeler que, d'une part, la distribution gaussienne présente dans la formulation du potentiel effectif de type gaussien peut être vue comme le paquet d'ondes de la particule (cf. paragraphe 2.1.2.2). Cette distribution gaussienne a donc la signification d'une densité de probabilité. Elle est ainsi comparable au module au carré d'une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger stationnaire. D'autre part, dans la formulation de la correction par le potentiel effectif de type gaussien, quelle que soit la position de la particule, son paquet d'ondes est systématiquement représenté par une distribution gaussienne centrée sur la position de la particule en question.

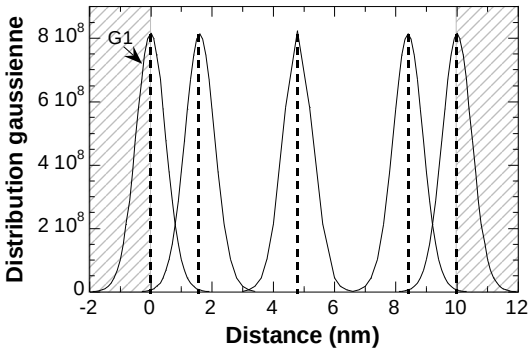


Figure 2.26 : Paquets d'ondes gaussien de particules situées à différentes positions symbolisées par les traits en pointillés dans la direction du confinement d'un dispositif double-grille.

Traçons désormais, sur la **Figure 2.26,** l'allure d'un tel paquet d'ondes pour des particules situées à différentes positions matérialisées par les traits en pointillés dans la direction transverse au transport d'un dispositif double-grille. Prenons le cas d'une particule positionnée à l'une des interfaces oxyde-silicium et dont le paquet d'ondes est alors représenté par la distribution gaussienne G1. Cette particule, d'après son paquet d'ondes associé, a une probabilité maximale de se trouver à l'interface oxyde-silicium et une probabilité de 50 % de se trouver dans l'oxyde, ce qui est tout à fait incompatible avec le comportement physique des fonctions d'onde (cf. **Figure 1.12**).

Rappelons également que les résultats de la correction par le GEP avec les paramètres de la littérature (cf. paragraphe 2.3.3), c'est-à-dire, avec la valeur physique $E_B = 3{,}1$ eV pour du SiO_2, montrent une trop forte répulsion des porteurs à l'interface. De plus, il a été mentionné dans le paragraphe 2.1.3 que le potentiel effectif est d'autant plus décroissant aux interfaces oxyde-silicium que la proportion de distribution gaussienne dans les zones assimilées à l'oxyde est importante. C'est ainsi que la pénétration irréaliste de la distribution gaussienne dans la zone assimilée à l'oxyde est responsable de la trop forte répulsion des porteurs à l'interface oxyde-silicium dans le cas de la correction par le GEP avec les paramètres de la littérature.

En conclusion, le modèle de distribution gaussienne centrée sur la position de la particule comme représentation systématique du paquet d'ondes de la particule en question est largement critiquable à proximité de barrières d'énergie, ce qui est le cas à l'interface oxyde-silicium d'un dispositif MOSFET. Ce résultat est mis en évidence dans le paragraphe suivant par l'étude de l'approximation majeure faite par Feynman dans son raisonnement aboutissant à la formulation du GEP par la méthode de l'intégrale de chemin.

2.4.3 Limitation d'ordre théorique

Afin de déterminer quelles peuvent être les limitations inhérentes à la formulation même du potentiel effectif de type gaussien, il nous faut revenir sur le paragraphe 2.1.1.2. Dans ce paragraphe est succinctement décrite la manière dont Feynman parvient à exprimer le potentiel effectif de type gaussien à partir de la théorie de l'intégrale de chemin. Rappelons ici l'un des points clés de cette formulation constituant la base de tout le raisonnement mis en œuvre dans ce paragraphe : la contribution des chemins de moyenne $\bar{x}$ à la fonction de partition peut être vue comme représentant la moyenne de la fonction $\exp(f)$, pondérée par le terme $\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int \dot{x}(t)^2 dt\right)$, sur tous les chemins x(t) de moyenne $\bar{x}$ avec $f = -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left[V(x(t)) - V(\bar{x})\right]dt$ et $\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} x(t)dt$. L'approximation de $\langle \exp(f) \rangle$ par $\exp(\langle f \rangle)$ permet alors d'aboutir à la formulation du potentiel effectif de type gaussien. L'objectif de ce paragraphe est de démontrer que cette approximation, et donc la formulation du potentiel effectif de type gaussien, n'est pas valide dans le cas de barrières de potentiel abruptes comme c'est le cas à l'interface oxyde-silicium d'un dispositif MOSFET.

Dans un premier temps, intéressons nous au terme de pondération $\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar} \dot{x}(t)^2 dt\right)$. Celui-ci permet de déterminer aisément pourquoi certains chemins ne contribuent que très peu à l'intégrale et peuvent donc être considérés comme peu probables. En effet, les chemins partant de x_1, s'éloignant grandement de x_1 et revenant à x_1 pendant le court laps de temps $\beta\hbar$ requièrent une grande vitesse. Ceci implique un terme de pondération de très faible valeur et donc une faible contribution à l'intégrale. Plus précisément, un chemin sur lequel on suppose la vitesse constante va contribuer de manière significative à l'intégrale si :

$$\beta\hbar v^2 \underset{\sim}{<} \frac{2\hbar}{m} \tag{2.73}$$

Soit L la longueur du chemin parcouru pendant le temps $\beta\hbar$ à la vitesse v, l'inégalité (2.73) devient alors :

$$\left(\frac{L}{\beta\hbar}\right)^2 \underset{\sim}{<} \frac{2}{\beta m} \qquad \text{soit} \qquad L \underset{\sim}{<} \sqrt{\frac{2\beta\hbar^2}{m}} \tag{2.74}$$

Il est intéressant de remarquer, qu'à un facteur près, cette valeur est similaire à celle de l'écart type σ de la distribution gaussienne présente dans la formulation du potentiel effectif donnée par Feynman $\sigma = \sqrt{\beta\hbar^2/12m}$. De plus, notons que les variations de potentiel aux interfaces entre l'oxyde de grille et le silicium d'un dispositif MOS s'effectuent sur des distances bien inférieures à l'ordre de grandeur de l'écart-type de la distribution gaussienne. Les chemins présentant des parties de part et d'autre d'une telle barrière de potentiel sont donc susceptibles de contribuer de manière significative à l'intégrale.

Dans un deuxième temps, supposons l'exemple d'un profil de potentiel 1D présentant une barrière abrupte en $x = 0$. La représentation schématique d'une telle barrière de potentiel est donnée sur la **Figure 2.27**. Considérons alors quelques chemins et caractérisons la fonction f. On suppose des chemins symétriques autour de la valeur $\bar{x}$ et on note L la distance sur laquelle s'étale le chemin en question. Pour le chemin L_1 tel que représenté sur la **Figure 2.27**, c'est-à-dire pour tout chemin tel que $L/2 < |\bar{x}|$, quel que soit x sur un tel chemin, $V(x(t)) = 0$. Ainsi $f = -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left[V(x(t)) - V(\bar{x})\right]dt = 0$ car $V(\bar{x}) = 0$. Par contre, pour le chemin L_2, c'est-à-dire pour tout chemin tel que $L/2 > |\bar{x}|$, la situation est plus complexe. En effet, si l'on suppose que le temps passé sur un segment dépend uniquement de la longueur du segment alors $V(x(t)) = 0$ sur une durée proportionnelle à $(L_2/2 + \bar{x})/L_2$ et $V(x(t)) = V_0$ sur une durée proportionnelle à $(L_2/2 - \bar{x})/L_2$. Ainsi, la valeur moyenne du potentiel sur le chemin L_2 est égale à $\langle V(x(t))\rangle = V_0.(L_2/2 - \bar{x})/L_2$ et $f = -\beta V_0\left(\frac{1}{2} - \frac{\bar{x}}{L_2}\right)$. Traçons donc dans le cas de cet exemple l'évolution de la fonction f en fonction de L sur la **Figure 2.28**. Précisons que dans le cas où $\bar{x}$ est positionné tel que $V(\bar{x}) = V_0$, la fonction f est la symétrique par rapport à l'axe L de la fonction f représentée sur la **Figure 2.28**. Revenons au cas où $V(\bar{x}) = 0$. Dans la limite où $\bar{x}$ est très éloigné de la barrière d'énergie, c'est-à-dire dans la limite où $\bar{x} \to +\infty$ ou encore dans la limite d'un potentiel constant, alors la fonction f est constante et l'approximation de $\langle \exp(f)\rangle$ par $\exp(\langle f\rangle)$ est justifiée. Mais dans le cas où $\bar{x}$ est à proximité de la barrière d'énergie, c'est-à-dire dans la limite où $\bar{x} \to 0$, alors l'approximation précédente n'est plus valide puisque f est susceptible de varier entre 0 et $-\beta V_0/2$. L'erreur commise est de l'ordre de la différence entre $\langle f\rangle^2$ et $\langle f^2\rangle$, erreur qui s'accentue d'autant plus que la hauteur de barrière de potentiel est importante. Pour expliciter qualitativement l'erreur commise, considérons le terme de pondération étudié précédemment $\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int \dot{x}(t)^2 dt\right)$ comme constant et de valeur égale à l'unité. Dans ce cas, la moyenne $\langle \exp(f)\rangle$ est réduite à la somme des $\exp(f)$. Pour un $\bar{x}$ donné, le terme $\exp(f)$ est dépendant de L et V_0, comme montré sur la **Figure 2.28**. Il est petit pour certains chemins, dont en particulier ceux présentant un L suffisamment grand pour s'autoriser à passer la

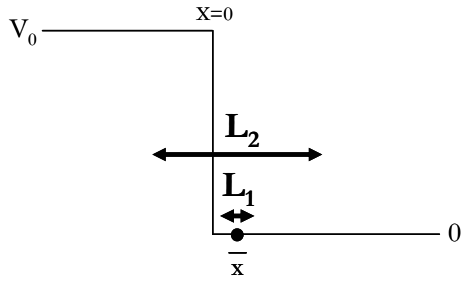


Figure 2.27 : Profil d'énergie potentielle.

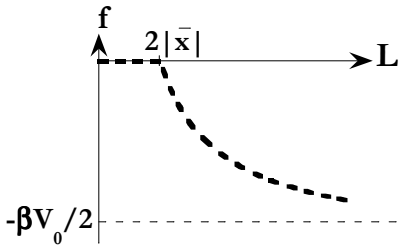


Figure 2.28 : Allure de la fonction f en fonction de la longueur du chemin L.

barrière de potentiel. Il est grand pour d'autres, en particulier pour ceux présentant un L petit ne leur permettant pas de franchir la barrière de potentiel. Naturellement, les chemins passant la barrière de potentiel ne participent donc que peu à l'intégrale. Par contre l'évaluation du terme $\exp(\langle f \rangle)$ consiste en une moyenne préalable sur tous les chemins. Ceci est équivalent à considérer que tous les chemins présentent une probabilité équivalente et donc à ne pas tenir compte correctement de la présence de la barrière de potentiel. Il est ainsi donné aux chemins franchissant la barrière de potentiel un poids surestimé. C'est pour cette raison que dans la formulation du potentiel effectif de type gaussien le paquet d'ondes d'une particule située à l'interface oxyde-silicium s'étale de manière symétrique dans le silicium et dans l'oxyde.

En conclusion, l'une des approximations permettant d'obtenir la formulation du potentiel effectif de type gaussien à partir de la théorie de l'intégrale de chemin met en évidence que cette formulation n'est pas valide à proximité d'une barrière de potentiel abrupte. Les évaluations d'ordre de grandeur effectuées dans ce paragraphe permettent de dire que la représentation du paquet d'ondes d'une particule par une distribution gaussienne centrée sur la position de cette particule n'est plus acceptable lorsque la particule en question se situe au voisinage d'une barrière de potentiel abrupte et à une distance inférieure à l'ordre de grandeur de l'écart-type de la gaussienne. La correction par le potentiel effectif de type gaussien n'est donc pas adaptée pour les effets de confinement quantique dans un dispositif MOS, c'est-à-dire pour les effets à proximité des interfaces oxyde-silicium. Feynman lui-même admet cette limitation puisqu'il écrit à propos du potentiel effectif de type gaussien « *it fails in its presents form when the potential V(y) has a very large derivative* » avec V(y) le potentiel de Poisson [Feynman 72 p.96].

2.5 Conclusion

D'un point de vue électrostatique, la correction par le potentiel effectif de type gaussien caractérisée par ses deux paramètres que sont E_B assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde et σ_x assimilé à l'étalement du paquet d'ondes, est limitée quant à la reproduction correcte des effets de confinement quantique. Même si plusieurs études en littérature ont montré que l'utilisation d'un jeu de paramètres unique permet de reproduire, dans une certaine mesure, la charge d'inversion, les profils de densité de porteurs près des interfaces oxyde-silicium sont incorrects. De plus, nous avons montré, à l'aide d'une méthodologie inspirée des plans d'expériences, que même si l'allure du profil de la densité de porteurs est grandement améliorée, elle n'en reste pas moins approximative. Par ailleurs, afin que cette correction optimisée s'applique à une large gamme d'architectures symétriques, une très lourde calibration va être nécessaire. On se limite au cas d'architectures symétriques car la correction optimisée a été montrée comme inapplicable en son état aux cas des architectures non symétriques.

En revanche, d'un point de vue numérique et de mise en œuvre dans les simulateurs, le potentiel effectif de type gaussien comme potentiel de correction quantique présente de nombreux

atouts. En effet, il s'exprime simplement sous la forme du produit de convolution du potentiel de Poisson par une distribution gaussienne assimilée au paquet d'ondes d'une particule. Cette formulation est aisément généralisable en plusieurs dimensions et est calculable par la méthode de transformée de Fourier très peu consommatrice de temps CPU. En moyenne, une itération quantique avec correction par le potentiel effectif de type gaussien est donc seulement 2 fois plus consommatrice en temps CPU qu'une itération classique. Ce potentiel de correction quantique a été mis en œuvre dans le code Monte-Carlo MONACO. Il a notamment été montré que l'auto-cohérence entre le calcul du potentiel effectif et le mouvement des porteurs est rapidement atteinte.

Les limitations de la correction par le potentiel effectif de type gaussien pour la reproduction des effets de confinement quantique sont la conséquence d'une représentation systématique du paquet d'ondes d'une particule par une distribution gaussienne centrée sur la position de cette même particule. Nous avons en effet montré, d'un point de vue empirique et théorique, que cette représentation est particulièrement erronée à proximité de barrières de potentiel abruptes comme c'est le cas dans un dispositif MOSFET à proximité d'une interface oxyde-silicium. Or, dans ces dispositifs, c'est à proximité de l'interface oxyde-silicium que les effets de confinement quantique que nous cherchons à représenter ont lieu. Afin d'améliorer la correction par le potentiel effectif de type gaussien, il convient donc d'affiner la description du paquet d'ondes d'une particule à proximité d'une telle interface. Ceci fait l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 3
Le Potentiel Effectif de type Pearson

La correction d'un code Monte-Carlo par le potentiel effectif de type gaussien induit une répulsion des porteurs à l'interface. Le principe du potentiel effectif comme potentiel de correction quantique pour reproduire les effets de confinement quantique est donc valide. Cependant, le potentiel effectif de type gaussien ne permet pas de reproduire avec une précision acceptable les profils de densité de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger. Ceci est dû au fait que, à proximité des barrières de potentiel comme par exemple à proximité d'une interface oxyde-silicium, une distribution gaussienne centrée sur la position de la particule n'est pas adaptée pour représenter le paquet d'ondes de cette particule. Le potentiel effectif de type gaussien est donc limité quant à la prise en compte correcte des effets de confinement quantique dans un dispositif MOSFET.

Ce troisième chapitre a pour objet de présenter une formulation originale de potentiel effectif : le Potentiel Effectif de type Pearson. Conséquence de l'étude détaillée menée sur le potentiel effectif de type gaussien, l'idée majeure de cette approche originale est de conserver une formulation de type potentiel effectif tout en améliorant la description du paquet d'ondes de la particule. Dans la première partie de ce chapitre est présenté le principe de la formulation du potentiel effectif de type Pearson. Les distributions de type Pearson, et plus particulièrement de type Pearson IV, qui ont inspiré la dénomination de notre formulation originale de potentiel effectif sont introduites dans la deuxième partie. Les troisième et quatrième parties traitent respectivement de la calibration de la correction par le potentiel effectif de type Pearson et de sa mise en œuvre dans un code Monte-Carlo. Enfin la cinquième et dernière partie évalue la capacité du potentiel effectif de type Pearson à reproduire les effets de confinement quantique. Tout comme dans le deuxième chapitre, il est donc à noter que seuls des calculs de densité et de potentiel dans des capacités sont présentés.

CHAPITRE 3 LE POTENTIEL EFFECTIF DE TYPE PEARSON

3.1 Principe de la formulation 105
3.1.1 Paquets d'ondes solutions de l'équation de Schrödinger 105
3.1.2 Description originale du paquet d'ondes d'une particule 107
3.2 Les distributions de type Pearson IV 109
3.3 Calibrage des paramètres de la distribution Pearson IV 111
3.3.1 Densités de probabilité d'une résolution Poisson-Schrödinger 111
3.3.2 Asymétrie 114
3.3.3 Aplatissement 115
3.3.4 Position moyenne 116
3.3.5 Ecart-type 121
3.3.6 Application à d'autres architectures 124
3.3.6.1 Architecture sur substrat massif (*bulk*) 124
3.3.6.2 Architecture SOI 125
3.3.7 Bilan 126
3.4 Mise en œuvre dans un code Monte-Carlo 127
3.4.1 Méthodologie générale du programme 127
3.4.1.1 Algorithme 127
3.4.1.2 Méthode d'intégration numérique 128
3.4.1.3 Nécessité d'une étape d'interpolation 129
3.4.2 Calcul du potentiel effectif 130
3.5 Potentiel Effctif de type Pearson et effets de confinement quantique 133
3.5.1 Dispositifs double-grille 134
3.5.2 Dispositifs sur substrat massif (*bulk*) 139
3.5.3 Dispositifs SOI 141
3.6 Conclusion 142

Chapitre 3
Le Potentiel Effectif de type Pearson

3.1 Principe de la formulation

La formulation originale du Potentiel Effectif de type Pearson (PEP pour *Pearson Effective Potential*) repose sur :

- ✓ la conservation de la formulation usuelle d'un potentiel effectif, c'est-à-dire la convolution du potentiel de Poisson avec une distribution représentant le paquet d'ondes de la particule ;
- ✓ une description plus réaliste du paquet d'ondes de la particule (comparée à une description systématique par une distribution gaussienne comme dans le cas de la correction par le potentiel effectif de type gaussien).

Ainsi, toute l'originalité de la correction par le potentiel effectif de type Pearson repose sur ce dernier point : la détermination d'une fonction de distribution pour une description réaliste du paquet d'ondes d'une particule. De manière à choisir judicieusement cette fonction de distribution, il convient notamment de mettre à jour les critères majeurs que celle-ci doit respecter. Il est également nécessaire de statuer sur la nécessité ou non de donner des dépendances à cette fonction de distribution, et si oui, de déterminer lesquelles. Dans ce but, la notion de paquet d'ondes introduite dans la formulation du potentiel effectif étant assimilée à celle de densité de probabilité (cf. paragraphe 2.1.2.2), commençons par étudier quelques aspects du module au carré des fonctions d'onde solution de l'équation de Schrödinger stationnaire. En effet, quoi de plus réaliste pour décrire le paquet d'ondes de la particule, et la densité de particules, que de s'inspirer du module au carré de ces fonctions d'onde ?

3.1.1 Paquets d'ondes solutions de l'équation de Schrödinger

Sous l'action d'un potentiel, l'état quantique d'une particule est entièrement décrit par une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger. La résolution couplée des équations de Poisson et Schrödinger 1D donne ainsi accès aux différents niveaux d'énergie (valeurs propres de

l'équation de Schrödinger) et à leur fonction d'onde associée. A titre d'exemple, les niveaux d'énergie et leur densité de probabilité associée (module au carré des fonctions d'onde) sont tracés sur la **Figure 3.1** dans le cas d'une capacité MOS sur substrat massif (*bulk*) en régime de forte inversion.

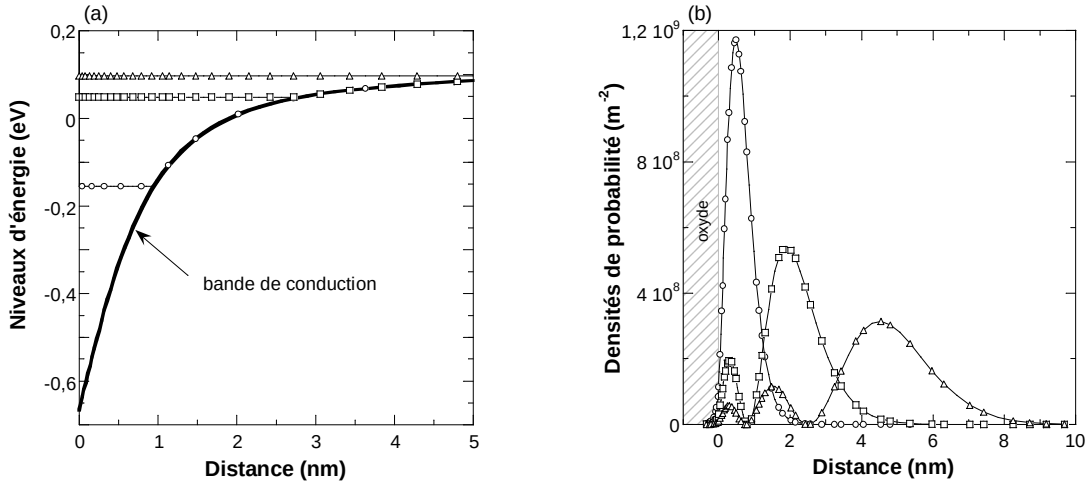


Figure 3.1 : Bande de conduction, 3 premiers niveaux d'énergie (a) et densités de probabilité associées (b) calculés par simulation Poisson-Schrödinger dans une capacité MOS en forte inversion.

Quel que soit le niveau d'énergie sur lequel se trouve la particule, celle-ci ne peut en aucun cas avoir une probabilité maximale de se trouver à l'interface oxyde-silicium et sa probabilité de pénétration dans l'oxyde est très faible. Comme décrit dans le paragraphe 1.2.3, un tel comportement traduit les effets de confinement quantique qui ont notamment pour conséquence de repousser le maximum de la densité de porteurs à quelques Angströms de l'interface oxyde-silicium. On remarque également que seule la densité de probabilité de la première sous-bande d'énergie ou niveau d'énergie fondamental se caractérise par un unique maximum. De plus, dans le cas de porteurs non fortement énergétiques, ce niveau d'énergie est celui qui est majoritairement peuplé. Souhaitant représenter l'allure globale du paquet d'ondes d'une unique particule par une fonction de distribution restant mathématiquement assez simple, il est donc cohérent de ne considérer que le niveau d'énergie fondamental. Ainsi, dans toute la suite de ce manuscrit, seul le module au carré de la fonction d'onde associée à la première sous-bande d'énergie est considéré et est noté $\left|\psi_0\right|^2$.

Comme énoncé précédemment, la résolution de l'équation de Schrödinger et donc l'allure des fonctions d'onde dépendent du potentiel auquel est soumis la particule. Dans les dispositifs de très petites épaisseurs de film, peut s'ajouter à cet effet de confinement dû au profil de potentiel un effet de confinement dû à la boîte, ou autrement dit à l'épaisseur de film de silicium du dispositif considéré. Afin d'illustrer ces effets, représentons sur la **Figure 3.2** le profil de potentiel ainsi que la densité de probabilité du niveau d'énergie fondamental dans le cas d'une capacité MOS pour différentes polarisations de grille (a) et d'une capacité double-grille pour différentes épaisseurs de film (b). Il apparaît clairement sur la **Figure 3.2**(a) que l'allure des densités de probabilité est dépendante du profil de potentiel. En effet, lorsque le potentiel se courbe sous l'effet d'une augmentation de la polarisation de la grille, les densités de probabilité se rapprochent de l'interface et leur écart-type

diminue. De plus, alors qu'à faible polarisation de grille les allures des densités de probabilité tendent vers une distribution gaussienne, c'est-à-dire entre autre symétrique, à forte polarisation de grille, elles présentent une dissymétrie nettement marquée. Cependant, les fonctions d'onde ne sont pas seulement dépendantes du profil de potentiel puisque, sur la **Figure 3.2**(b), bien que les profils de potentiel soient similaires sur plusieurs nanomètres, les densités de probabilité ne sont pas identiques du fait d'épaisseurs de film différentes. Pour de grandes épaisseurs de film, les puits de potentiel à chacune des interfaces sont indépendants l'un de l'autre et leurs fonctions d'onde associées sont alors nettement différenciées. Par contre, pour de faibles épaisseurs de film, les puits de potentiel à chacune des interfaces ne sont plus indépendants. On observe alors, au milieu du film, un recouvrement des fonctions d'onde, traduisant un effet de confinement par la boîte ou couplage entre les canaux.

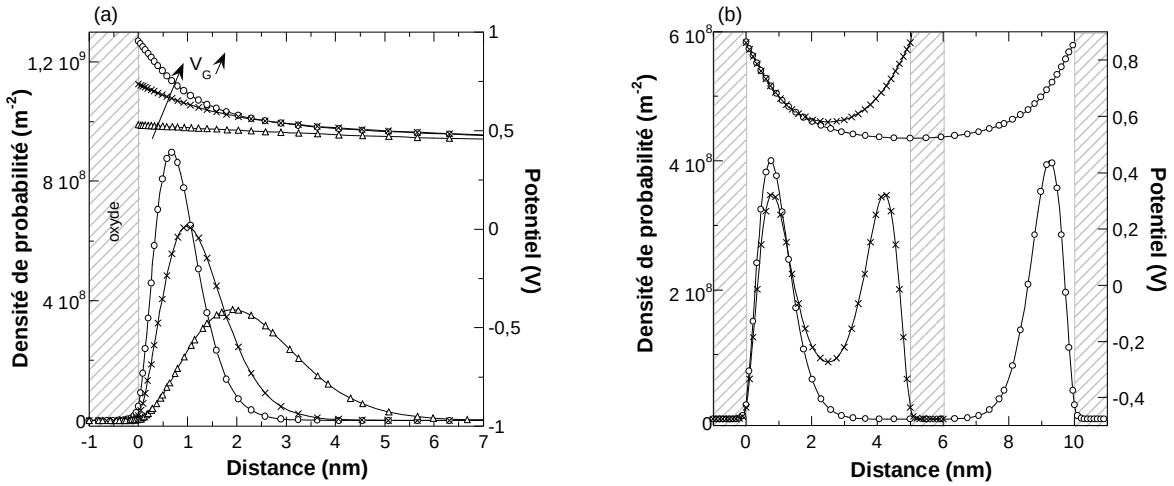


Figure 3.2 : Profils de potentiel et densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie obtenus par simulation Poisson-Schrödinger dans le cas d'une capacité MOS sur substrat massif à différentes polarisations de grille (a) et de capacités MOS de type double-grille d'épaisseurs de film 5 et 10 nm (b).

En conclusion, le profil de potentiel de Poisson étant une donnée nécessaire et essentielle de la résolution de l'équation de Schrödinger, les modules au carré des fonctions d'onde de la première sous-bande d'énergie présentent une allure fortement dépendante de ce profil. De plus, pour les dispositifs à faible épaisseur de film, cette épaisseur influence l'allure des fonctions d'onde. Il faudra donc en tenir compte dans la détermination du potentiel effectif.

3.1.2 Description originale du paquet d'ondes d'une particule

Afin de définir une manière réaliste de décrire le paquet d'ondes d'une particule, reprenons les principaux résultats de l'étude menée dans le paragraphe précédent concernant l'allure globale des densités de probabilité du niveau d'énergie fondamental.

Commençons par discuter des dépendances à donner à la fonction de distribution représentant le paquet d'ondes. Tout d'abord, étant donné que les densités de probabilité de Schrödinger sont très fortement dépendantes du profil de potentiel, il convient de donner une dépendance en potentiel à la fonction de distribution décrivant le paquet d'ondes. Cependant, dans le cas d'une résolution Poisson-

Schrödinger, c'est l'allure globale du profil de potentiel sur toute l'épaisseur de film de silicium qui détermine les densités de probabilité ; alors que dans le cas d'une correction par le potentiel effectif, il est supposé la présence d'une particule à chacune des positions du maillage, et il faut décrire son paquet d'ondes. Par conséquent, on choisit de rendre la fonction de distribution décrivant le paquet d'ondes dépendante, non pas du profil de potentiel global, mais de la dérivée première locale du potentiel ou champ électrique local dans la direction du confinement. De cette manière, contrairement au cas de la correction par le GEP, le paquet d'ondes d'une particule éloignée de l'interface oxyde-silicium (potentiel peu pentu donc champ électrique local faible) présentera une allure différente de celui affecté à une particule à proximité de cette interface (potentiel fortement pentu donc champ électrique local fort). Notons par ailleurs que le potentiel, ou sa dérivée première c'est-à-dire le champ électrique, est une donnée majeure rendant compte des principales caractéristiques et de l'état du dispositif étudié. En effet, que ce soit l'épaisseur de film, l'épaisseur d'oxyde, le niveau de dopage, les tensions de polarisation … une modification d'une de ces grandeurs se traduit par une modification du profil de potentiel. En présentant une dépendance en champ électrique local dans la direction du confinement, la correction par le potentiel effectif de type Pearson devrait donc présenter une certaine universalité puisqu'elle devient ainsi indépendante de toutes les grandeurs citées ci-dessus. Plus exactement, l'influence implicite de tous ces paramètres sur la correction devrait être contenue dans la seule influence explicite du champ local. Enfin, comme souligné au paragraphe précédent, une dépendance en épaisseur de film est également nécessaire afin de rendre compte des effets de confinement par la boîte.

Venons-en désormais aux critères pour le choix de la fonction de distribution représentant le paquet d'ondes d'une particule. Tout d'abord, il doit être possible de contrôler la position moyenne mais aussi l'écart-type de cette distribution (cf. **Figure 3.2**). Le contrôle de la position moyenne permet notamment d'éviter qu'une particule située à l'interface oxyde-silicium soit représentée par un paquet d'ondes dont la moitié se situe dans l'oxyde. Il est à noter que ce contrôle de la position moyenne et de l'écart-type est possible avec une distribution gaussienne, mais n'est pas utilisé dans le cas de la correction par le GEP. En effet, dans ce cas, la position moyenne est fixée à la position où est calculé le GEP et l'écart-type est pris de valeur constante. Ensuite, la fonction de distribution représentant le paquet d'ondes de la particule doit être une généralisation de la distribution gaussienne puisque pour les faibles polarisations de grille, l'allure de la densité de probabilité tend vers une distribution gaussienne. Enfin, elle doit être susceptible de présenter une asymétrie non nulle puisqu'à fortes polarisations de grille, les allures des densités de probabilité sont fortement dissymétriques (par définition, la distribution gaussienne présente une asymétrie nulle). Précisons que de cette manière, la valeur de la position moyenne du paquet d'ondes d'une particule située à proximité de l'interface oxyde-silicium peut être réaliste tout en proscrivant une trop grande pénétration de ce même paquet d'ondes dans l'oxyde. Les fonctions de distribution de type Pearson IV répondent à tous ces critères : elles sont une généralisation des distributions gaussiennes et autorisent entre autres le contrôle de leur position moyenne, de leur écart-type et de leur asymétrie. De plus, ces distributions sont très bien

connues du monde de la microélectronique puisqu'elles sont largement utilisées pour la description de profils d'implantation de dopants [Selberherr 84 p.46, Sze 88 p.332].

En conclusion, nous nous proposons dans la correction quantique par le Potentiel Effectif de type Pearson d'améliorer le modèle du paquet d'ondes de la particule, afin que celui-ci soit plus proche du module au carré des fonctions d'onde. Pour cela, nous avons choisi de décrire le paquet d'ondes par des distributions de type Pearson IV et de donner à ces distributions une dépendance en champ électrique local dans la direction du confinement ainsi qu'en épaisseur de film. La description ainsi que les justifications du choix d'une telle famille de distributions sont présentées dans le paragraphe suivant.

3.2 Les distributions de type Pearson IV

D'une manière générale, une distribution f(x) se caractérise en fonction de ses moments. Le moment d'ordre 1, μ_1 est défini par :

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x\, f(x)\, dx \tag{3.1}$$

où μ_1 correspond à la position moyenne de la distribution, on le note en général R_p.

Les moments d'ordres supérieurs μ_i (i = 2, 3, …), s'expriment en fonction de R_p de la manière suivante :

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x\text{-}R_p)^i\, f(x)\, dx \tag{3.2}$$

Les distributions de type Pearson sont solutions de l'équation différentielle [Selberherr 84 p.54] :

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(x\text{-}a)\, f(x)}{b_0 + b_1\, x + b_2\, x^2} \tag{3.3}$$

où les quatre coefficients a, b_0, b_1 et b_2 s'expriment par :

$$a = b_1 = -\frac{\gamma\ \sigma_P\ (\beta+3)}{A} \qquad b_0 = -\frac{{\sigma_P}^2\ (4\ \beta - 3\ \gamma^2)}{A} \qquad b_2 = -\frac{2\beta - 3\gamma^2 - 6}{A} \tag{3.4}$$

où $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$ et σ_P représente l'écart type de la distribution.

Le coefficient γ mesure l'asymétrie (*skewness*) de la distribution. Une valeur positive, respectivement négative, de γ place le maximum de la distribution à gauche, respectivement à droite, de la position moyenne R_P (**Figure 3.3)**. Le coefficient β mesure l'aplatissement (*kurtosis*) de la distribution (**Figure 3.4**). Notons d'ores et déjà que les distributions de type Pearson permettent non seulement un contrôle de la position moyenne et de l'écart type mais aussi de l'asymétrie.

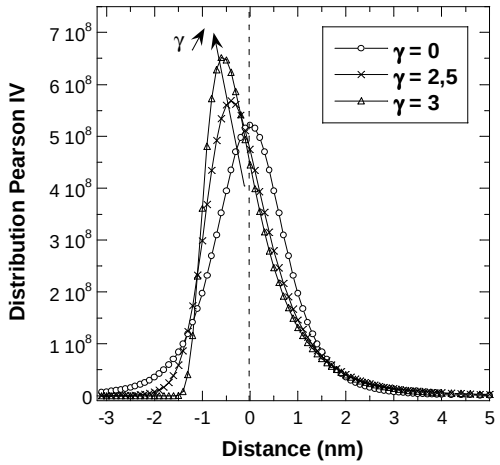


Figure 3.3 : Effet du paramètre asymétrie γ sur une distribution Pearson caractérisée par les coefficients R_P = 0 nm, σ_P = 1 nm et β = 30.

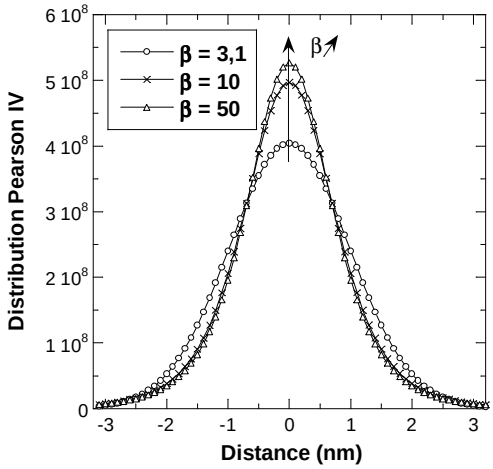


Figure 3.4 : Effet du paramètre aplatissement β sur une distribution Pearson caractérisée par les coefficients R_P = 0 nm, σ_P = 1 nm et γ = 0.

Les coefficients position moyenne R_P, écart-type σ_P, asymétrie γ et aplatissement β de la distribution Pearson s'expriment en fonction de ses quatre premiers moments :

$$R_P = \mu_1 \qquad \sigma_P = \sqrt{\mu_2} \qquad \gamma = \frac{\mu_3}{\sigma_P^{\,3}} \qquad \beta = \frac{\mu_4}{\sigma_P^{\,4}} \tag{3.5}$$

Selon la valeur de ces coefficients, nous pouvons distinguer sept types de distributions Pearson. Dans notre cas nous utiliserons la distribution Pearson de type IV car elle est définie pour tout x tel que $-\infty < x < +\infty$, alors que les autres types sont définis sur des domaines restreints. De plus, elle présente un unique maximum à la profondeur $x = R_P + a$, avec a le coefficient défini par l'équation (3.4)) et décroît de manière monotone vers 0 de chaque côté de ce maximum. Dans le cas des distributions Pearson IV, les coefficients asymétrie γ et aplatissement β doivent satisfaire les conditions énoncées ci-dessous et représentées sur la **Figure 3.5** :

$$0 < \gamma^2 < 32 \qquad \text{et} \qquad \beta > \frac{39\,\gamma^2 + 48 + 6\left(\gamma^2 + 4\right)^{\frac{3}{2}}}{32 - \gamma^2} \tag{3.6}$$

L'expression de la distribution Pearson IV se présente alors sous la forme :

$$f(x) = K\left[b_0 + b_1(x-R_P) + b_2(x-R_P)^2\right]^{\frac{1}{2b_2}} \exp\left[-\frac{\frac{b_1}{b_2} + 2a}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^{\,2}}}\ a\tan\left(\frac{2b_2(x-R_P) + b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^{\,2}}}\right)\right] \tag{3.7}$$

avec K une constante de normalisation dont la valeur est fixée de manière à ce que la relation suivante soit vérifiée :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx = 1 \tag{3.8}$$

Notons que les distributions gaussiennes ne vérifient pas l'équation différentielle (3.3) mais présentent une asymétrie $\gamma = 0$ et un aplatissement $\beta = 3$. La **Figure 3.5** met alors en évidence que les distributions de type Pearson IV peuvent être considérées comme une généralisation des distributions gaussiennes, c'est-à-dire qu'elles permettent de contrôler dans une certaine mesure les valeurs de l'asymétrie et de l'aplatissement.

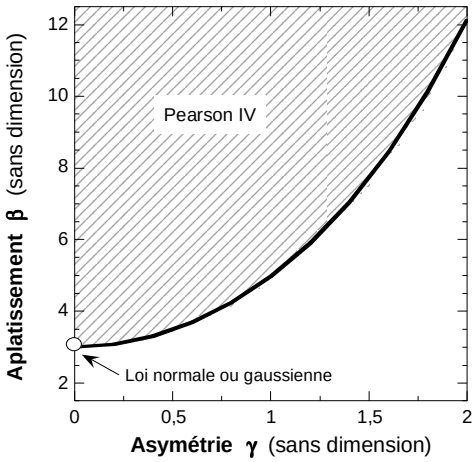


Figure 3.5 : Domaine des valeurs de l'aplatissement β des distributions Pearson IV en fonction de l'asymétrie γ.

En conclusion, les distributions de type Pearson IV sont définies par 4 paramètres : la position moyenne (R_P), l'écart-type (σ_P), l'asymétrie (γ) et l'aplatissement (β). Ces 4 paramètres s'expriment en fonction des 4 premiers moments de la distribution. De telles distributions devraient donc permettre de rendre compte des plus importantes caractéristiques du module au carré des fonctions d'onde du niveau d'énergie fondamental. La correction par le Potentiel Effectif de type Pearson ayant pour objectif de reproduire correctement les résultats issus de simulations Poisson-Schrödinger, tout l'enjeu de cette correction quantique réside dans la détermination ou calibrage des paramètres de la Pearson IV. Ceci fait l'objet du prochain paragraphe.

3.3 Calibrage des paramètres de la distribution Pearson IV

3.3.1 Densités de probabilité d'une résolution Poisson-Schrödinger

La correction par le potentiel effectif de type Pearson a pour objectif d'améliorer la description du paquet d'ondes de la particule en rendant son allure plus proche de celle du module au carré des fonctions d'onde, ou densité de probabilité, de la première sous-bande d'énergie d'une résolution Poisson-Schrödinger. L'analyse de ces densités de probabilité a conduit au choix des distributions de type Pearson IV, sur lesquelles sont appliquées des dépendances en champ électrique local dans la direction du confinement E_x et en épaisseur de film T_{Si}, pour représenter les paquets d'ondes. Rappelons que ces distributions sont définies par les 4 paramètres suivants : la position moyenne (R_P), l'écart-type (σ_P), l'asymétrie (γ) et l'aplatissement (β). Afin de calibrer ces paramètres de manière à ce que les distributions Pearson IV aient une allure similaire à celle des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie, commençons par caractériser ces densités de probabilité en fonction de chacun de ces 4 paramètres (cf. équation (3.5)). Dans le cas d'une capacité *bulk* et de capacités double-grille d'épaisseur de film $T_{Si} = 10$ nm et $T_{Si} = 5$ nm, la **Figure 3.6** représente la position

moyenne (a), l'écart-type (b), l'asymétrie (c) et l'aplatissement (d) des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie en fonction de la valeur absolue du champ électrique local à l'interface oxyde-silicium dans la direction du confinement.

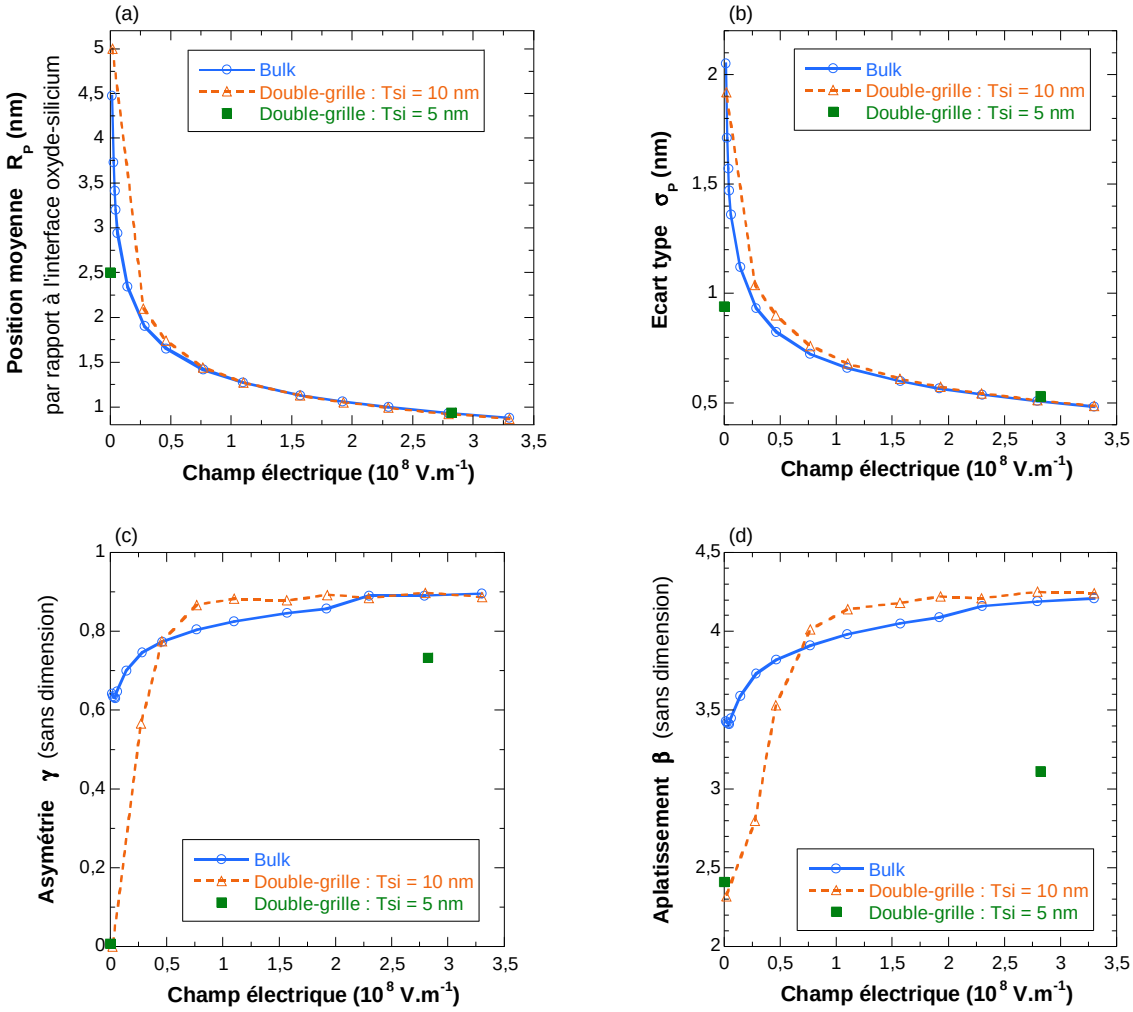


Figure 3.6 : Position moyenne (a), écart-type (b), asymétrie (c) et aplatissement (d) des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie obtenus par simulations Poisson-Schrödinger en fonction de la valeur absolue du champ électrique local à l'interface oxyde-silicium dans la direction du confinement pour une capacité *bulk* et des capacités double-grille de T_{Si} = 10 nm et T_{Si} = 5 nm.

Le choix du champ électrique local à l'interface oxyde-silicium s'explique par le fait qu'une correction quantique de type potentiel effectif nécessite de déterminer en chaque point du maillage le paquet d'ondes d'une particule située en ce point. Dans ce but, le calibrage des distributions Pearson IV est effectué en fonction du champ électrique local. Afin de comparer des grandeurs comparables, nous avons donc choisi de caractériser les densités de probabilité en fonction d'un champ électrique local et plus particulièrement en fonction du champ électrique local à l'interface. En effet, c'est l'allure du potentiel à proximité de l'interface qui détermine majoritairement le confinement quantique et donc l'allure des densités de probabilité. Bien entendu se pose d'ores et déjà la question de la validité d'une caractérisation des densités de probabilité en fonction du champ électrique à l'interface oxyde-silicium appliquée ensuite au calibrage de distributions Pearson IV en fonction, cette fois-ci, du champ

électrique local. Ce point est discuté dans la suite de ce paragraphe. De plus, précisons que les capacités double-grille sont polarisées de manière identique sur chacune de leur grille, elles sont donc parfaitement symétriques. Par conséquent, la caractérisation ne concernant que la partie de la densité de probabilité associée à la présence d'une unique interface, seule la densité de probabilité sur une demi-épaisseur de film est prise en compte. Pour les capacités double-grille de 5 nm d'épaisseur de film, seules les valeurs pour de forts champs électriques et pour un champ électrique nul sont données. Pour des valeurs intermédiaires du champ électrique, les fonctions d'onde de la première sous-bande d'énergie associées à chacune des interfaces se superposent (cf. **Figure 3.2** (b)), il est donc difficile de les caractériser simplement.

Plusieurs remarques peuvent être faites quant aux résultats présentés dans ces graphes. Tout d'abord, la position moyenne est d'autant plus éloignée de l'interface oxyde-silicium, l'écart-type est d'autant plus important et l'asymétrie d'autant plus faible que le champ électrique est faible, ce qui traduit des effets de confinement quantique d'autant moins prononcés. Quant à l'aplatissement, il présente une évolution en fonction du champ électrique similaire à celle de l'asymétrie. Ensuite, en ce qui concerne les capacités double-grille, étant donné qu'elles sont polarisées symétriquement, il est tout à fait logique d'observer à champ électrique nul une position moyenne égale à la moitié de l'épaisseur du film et une asymétrie nulle. Pour un champ électrique à l'interface oxyde-silicium nul, l'asymétrie est donc nulle, l'aplatissement est minimal et l'écart-type est maximal. Notons que ces tendances sont par ailleurs celles attendues pour toute particule située en champ électrique nul quelle que soit la position de la particule. Autrement dit, ces tendances ne sont pas dues à la présence ou non d'une interface oxyde-silicium mais au profil de potentiel (certes dépendant de la présence d'une interface oxyde-silicium). Ceci n'est pas vérifié pour le paramètre position moyenne. En effet, dans le cas d'une capacité double-grille, pour une particule située en champ électrique nul, la position moyenne du paquet d'ondes de cette particule n'est pas donnée, comme attendu, par la position de la particule en question mais par la position de l'interface oxyde-silicium additionnée de la moitié de l'épaisseur du film de silicium. En résumé, contrairement au calibrage de la position moyenne, pour le calibrage de l'écart-type, de l'asymétrie et de l'aplatissement, le champ électrique à l'interface oxyde-silicium caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ peut être considéré comme représentatif d'un champ électrique local à la position d'une particule, quelle que soit la position de cette particule. En conséquence de quoi, la caractérisation de densités de probabilité en fonction du champ électrique à l'interface oxyde-silicium appliquée ensuite au calibrage de distributions Pearson IV en fonction du champ électrique local est justifié pour les paramètres écart-type, asymétrie et aplatissement mais pas pour la position moyenne. Enfin, il est intéressant de remarquer que l'écart-type pour une capacité *bulk* et une capacité double-grille de T_{Si} = 10 nm présentent des valeurs similaires quel que soit le champ électrique à l'interface. Il en est de même pour l'asymétrie et l'aplatissement à fort champ (à champ nul, l'asymétrie d'une capacité double-grille est nulle de par la symétrie de la structure). Ainsi, une capacité double-grille présentant une épaisseur de film supérieure ou égale à 10 nm semble se comporter comme l'association de deux capacités *bulk* fonctionnant indépendamment. Par contre,

dans le cas de la capacité double-grille de T_{Si} = 5 nm, les valeurs de l'asymétrie et de l'aplatissement sont nettement inférieures à celles des deux autres structures. Il en est de même pour l'écart-type à champ électrique faible. Une capacité double-grille de 5 nm d'épaisseur de film de silicium semble donc présenter un couplage entre les phénomènes relatifs à chacune des interfaces. Ceci peut être interprété comme un effet de confinement supplémentaire induit par la faible épaisseur du film de silicium ou confinement par la boîte. Cette dernière remarque justifie que dans la calibration des paramètres de la distribution Pearson IV, les cas où l'épaisseur de film est supérieure à 10 nm soient différenciés des cas où l'épaisseur de film est inférieure à 10 nm. Dans les quatre prochains paragraphes, le calibrage de chacun des quatre paramètres permettant de définir les distributions Pearson IV est explicité. Précisons que ces paragraphes traitent spécifiquement du cas des dispositifs double-grille (en particulier le paragraphe 3.3.4 portant sur la position moyenne). Cependant, comme il est détaillé dans le paragraphe 3.3.6, cette méthode de calibrage est aisément applicable à d'autres architectures que le double-grille comme par exemple les architectures *bulk* ou SOI simple grille.

3.3.2 Asymétrie

L'asymétrie γ de la distribution Pearson IV est calibrée en fonction de l'épaisseur du film T_{Si} et du champ électrique local dans la direction du confinement $E_x = \partial V_P / \partial x$ de manière à reproduire l'asymétrie des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie d'une résolution Poisson-Schrödinger $|\psi_0|^2$. L'asymétrie calibrée des distributions Pearson IV est régie par l'équation suivante :

$$\gamma = \gamma_{max} \times \tanh\left[\frac{T_{Si}}{10^{-9}} \times \frac{|E_x|}{|E_x|_{max}} \right] \tag{3.9}$$

avec γ et γ_{max} adimensionnels, T_{Si} en mètre, $|E_x|$ en V.m^{-1}, $|E_x|_{max} = 3{,}5 \times 10^8$ V.m^{-1} et γ_{max} vérifiant :

$$\begin{array}{l} \text{Si} \quad T_{Si} \geq 10.10^{-9} \text{ m} \\ \quad \text{alors} \quad \gamma_{max} = 0{,}9 \\ \quad \text{sinon} \quad \gamma_{max} = 0{,}03 \times T_{Si} / 10^{-9} + 0{,}6 \\ \text{Fin Si} \end{array} \tag{3.10}$$

De plus, de par la définition des distributions de type Pearson IV, leur asymétrie γ doit vérifier l'inégalité de l'équation (3.6) rappelée ci-dessous :

$$0 < \gamma^2 < 32 \tag{3.11}$$

Cette inégalité peut être réécrite de la manière suivante : $0 < |\gamma| < 5{,}657$. D'après la **Figure 3.6**(c), l'asymétrie des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ est majorée par la valeur 1. Ainsi, l'asymétrie des distributions Pearson IV ayant été calibrée de manière à rester proche de celle des densités de probabilité $|\psi_0|^2$, la condition (3.11) devrait toujours être vérifiée.

Sur la **Figure 3.7** sont tracées l'asymétrie γ des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ en fonction du champ électrique à l'interface oxyde-silicium et l'asymétrie déterminée suivant les équations (3.9) et (3.10) pour les mêmes valeurs du champ électrique. Les valeurs de l'asymétrie calibrées sont identiques à celles caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$. Enfin, rappelons qu'une valeur positive, respectivement négative, de l'asymétrie place le maximum de la distribution Pearson IV du côté gauche, respectivement du côté droit, de sa position moyenne. Le signe de l'asymétrie de la Pearson IV est donc déterminé en fonction du signe du champ électrique local de manière à ce que le maximum de la Pearson IV soit toujours du côté de l'interface oxyde-silicium responsable de son asymétrie.

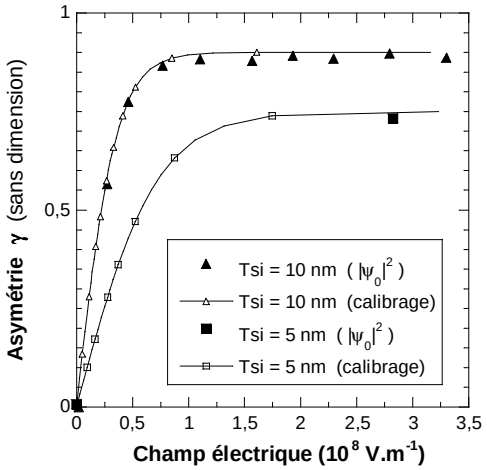


Figure 3.7 : Asymétrie des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ obtenue par simulation Poisson-Schrödinger et déterminée suivant les équations (3.9) et (3.10) pour des capacités double-grille de T_{Si} = 10 nm et T_{Si} = 5 nm.

3.3.3 Aplatissement

L'aplatissement β d'une distribution Pearson IV est un paramètre dépendant de l'asymétrie γ puisqu'il doit vérifier l'inégalité (3.6) rappelée ci-dessous et illustrée par la **Figure 3.5** du paragraphe 3.2 :

$$\beta > \frac{39\gamma^2 + 48 + 6\left(\gamma^2 + 4\right)^{\frac{3}{2}}}{32 - \gamma^2} \qquad (3.12)$$

Supposons maintenant que l'asymétrie γ des distributions Pearson IV soit celle des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie d'une capacité double-grille avec T_{Si} = 10 nm (cf. **Figure 3.6**(c)). L'asymétrie γ en fonction du champ électrique étant connue, représentons alors sur la **Figure 3.8** le domaine des valeurs de l'aplatissement β pour lequel sont définies les distributions Pearson IV en fonction du champ électrique (zone hachurée). Sur cette même figure, représentons également par des triangles les valeurs de l'aplatissement β déterminées par la caractérisation des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ (cf. **Figure 3.6**(d)). La **Figure 3.8** met en évidence que les distributions Pearson IV sont dans l'impossibilité de reproduire exactement les caractéristiques des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ car les valeurs de l'aplatissement de ces densités ne vérifient pas les conditions imposées par la définition des distributions Pearson IV. Cependant, afin de rester au plus proche des distributions gaussiennes ou lois normales, d'une part (cf. **Figure 3.5**), et des valeurs théoriques de l'aplatissement données par la caractérisation des densités de probabilité $|\psi_0|^2$, d'autre part (cf. **Figure 3.8**), on choisit de calculer l'aplatissement β à sa valeur

minimale. En conséquence de quoi, dans toute la suite de ce manuscrit, l'aplatissement β est déterminé uniquement à partir de la valeur de l'asymétrie γ d'après l'équation suivante :

$$\beta = \frac{39\,\gamma^2 + 48 + 6\left(\gamma^2 + 4\right)^{\frac{3}{2}}}{32 - \gamma^2} + \varepsilon \tag{3.13}$$

avec $\varepsilon > 0$ pour vérifier l'inégalité stricte (3.12) et se préserver de soucis numériques.

L'aplatissement β ainsi calculé est représenté en trait plein en fonction du champ électrique sur la **Figure 3.8**. Il évolue de manière similaire à l'aplatissement des densités de probabilité $|\psi_0|^2$.

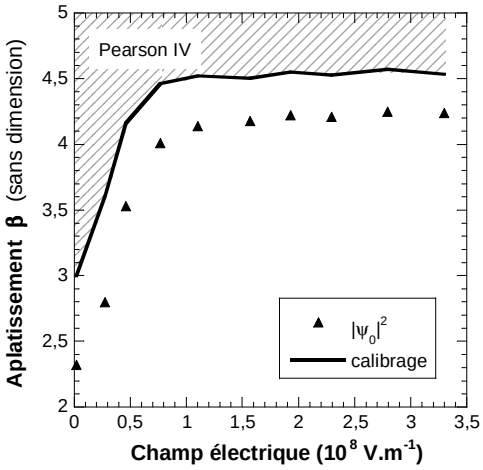


Figure 3.8 : Domaine des valeurs de l'aplatissement β pour lequel sont définies les distributions Pearson IV en fonction du champ électrique dans le cas où l'asymétrie est celle des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ (zone hachurée). Aplatissement β en fonction du champ électrique caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ (triangles) et calculé suivant l'équation (3.13) à partir des valeurs de l'asymétrie γ caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ (trait plein). Cas d'une capacité double-grille de T_{Si} = 10 nm.

Pour conclure, bien que la valeur de l'aplatissement β des distributions Pearson IV, de par la définition de ces distributions, ne puisse pas reproduire exactement celle des densités de probabilité, elle en reste tout de même très proche. Ceci ne devrait donc pas être un point bloquant puisque, d'une part, l'aplatissement s'exprime en fonction du moment d'ordre quatre, donc est assez peu influent et que, d'autre part, l'idée des distributions Pearson IV pour la représentation du paquet d'ondes d'une particule n'est pas de reproduire exactement les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ d'une résolution Poisson-Schrödinger mais leur allure globale.

3.3.4 Position moyenne

Le moment d'ordre 1 des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie est assimilé à la position moyenne du paquet d'ondes par rapport à l'interface oxyde-silicium. Ainsi, dans un dispositif double-grille polarisé sur chacune de ses grilles en régime d'inversion, la position moyenne d'une distribution Pearson IV est déterminée par rapport à l'une ou l'autre des interfaces oxyde-silicium selon le signe du champ électrique. En effet, dans un tel dispositif, le champ électrique dans la direction transverse au transport est de signe opposé à chacune des interfaces et passe donc par une valeur quasi-nulle dans le film à la position R_{Pmin}. Par conséquent, pour toutes les valeurs de la position x telles que $x_{interface1} < x < R_{Pmin}$, respectivement $R_{Pmin} < x < x_{interface2}$, alors la position moyenne de la distribution Pearson IV est donnée par $x_{interface1} + R_p$, respectivement $x_{interface2} - R_p$. Remarquons que ce sont les positions des interfaces physiques $x_{interface}$ qui servent d'origine et non pas la position x

à laquelle est calculée le potentiel effectif. Procéder de la sorte met donc en évidence que ce modèle, bien qu'il soit calibré à partir de champs électriques à l'interface, ne considère pas une interface à chacune des positions à laquelle est calculée le potentiel effectif. La position R_{Pmin} pour laquelle le champ électrique est nul est déterminée par l'étude du signe de ce même champ. Si le produit du champ électrique à deux positions successives x est positif, respectivement négatif, cela signifie que les champs électriques sont de même signe, respectivement de signe opposé. Ainsi le nombre de changement de signe du champ électrique est comptabilisé. Dans le cas où un seul changement de signe a lieu sur toute l'épaisseur du film, alors R_{Pmin} est la coordonnée milieu des deux positions x successives pour lesquelles le changement de signe est détecté. La position moyenne des distributions Pearson IV par rapport à une interface oxyde-silicium est calibrée, en fonction de l'épaisseur du film T_{Si} et du champ électrique local dans la direction du confinement $E_x = \partial V_P / \partial x$, de manière à reproduire celle des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie. Elle est régie par les équations suivantes :

$$R_P = \frac{T_{Si}}{2} - \frac{1}{\log(10^{R_{Pa}})}\left(\frac{T_{Si}}{2} - R_{P\max}\right) \times \log\left[\frac{10^{R_{Pa}} \times |E_x|}{|E_x|_{\max}} + 1\right] \qquad (3.14)$$

avec R_P, R_{Pmax} et T_{Si} en mètre, R_{Pa} adimensionnel, $|E_x|$ en V.m^{-1}, $|E_x|_{\max} = 3{,}5 \times 10^8$ V.m^{-1} et R_{Pa} et $R_{P\max}$ vérifiant :

$$\begin{aligned} &\text{Si} \quad T_{Si} \geq 10.10^{-9} \text{ m} \\ &\quad \text{alors} \quad R_{Pa} = \xi(0{,}7 \times T_{Si} / 10^{-9} - 2) \quad \text{et} \quad R_{P\max} = 0{,}83 \times 10^{-9} \\ &\quad \text{sinon} \quad R_{Pa} = 5 \quad \text{et} \quad R_{P\max} = -0{,}034 \times T_{Si} + 1{,}17 \times 10^{-9} \\ &\text{Fin Si} \end{aligned} \qquad (3.15)$$

avec ξ la partie entière.

Sur la **Figure 3.9** est tracée la position moyenne R_P de la densité de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ en fonction du champ électrique à l'interface oxyde-silicium ainsi que R_P déterminé suivant les équations (3.14) et (3.15) pour les mêmes valeurs du champ électrique.

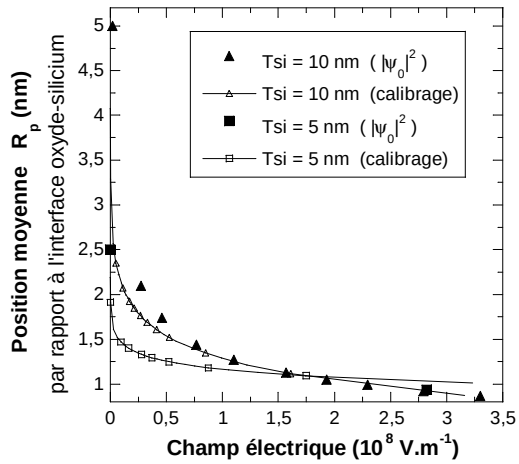


Figure 3.9 : Position moyenne par rapport à l'interface oxyde-silicium en fonction du champ électrique à l'interface des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ d'une résolution Poisson-Schrödinger et calculée selon les équations (3.14) et (3.15) pour les mêmes valeurs du champ électrique. T_{Si} = 10 nm et T_{Si} = 5 nm.

Supposons maintenant une capacité double-grille de 10 nm d'épaisseur de film et polarisée en régime d'inversion. Sur la **Figure 3.10** est tracé le profil de la concentration de porteurs obtenu par simulation Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson ou PEP pour lequel la position moyenne des distributions Pearson IV est déterminée selon les équations (3.14) et (3.15). Il est évident que le résultat obtenu est loin d'être satisfaisant et n'a aucune signification physique. Cependant, afin d'analyser comment un tel résultat a pu être obtenu, traçons sur la **Figure 3.11** le potentiel de Poisson, le PEP ainsi que la position moyenne de la distribution Pearson IV à la première itération quantique en fonction de la distance.

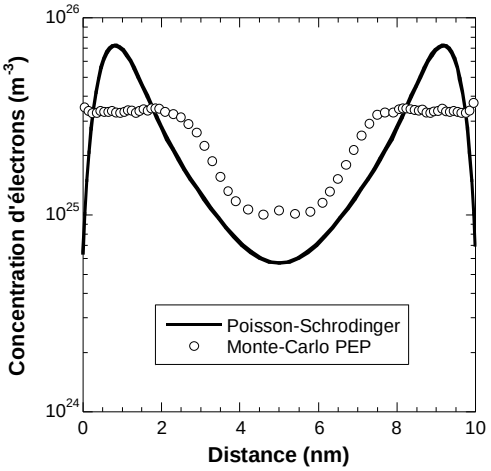


Figure 3.10 : Concentrations de porteurs issues de simulations Poisson-Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP.

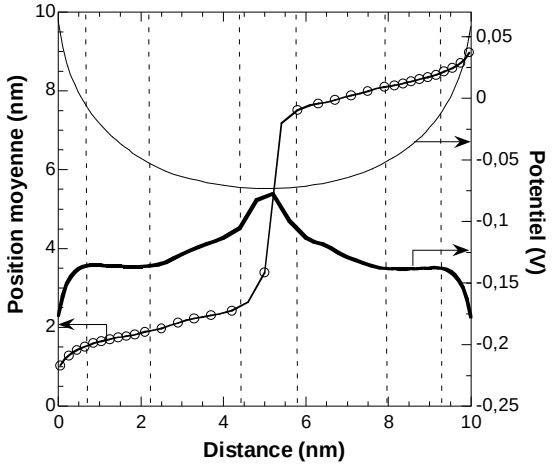


Figure 3.11 : Potentiel de Poisson (normal), PEP (gras) et position moyenne de la distribution Pearson IV (ronds) en fonction de la distance.

On remarque sur la **Figure 3.11** que l'évolution du PEP en fonction de la distance n'est pas régulière, sa pente présente de rapides et fortes variations. Or c'est ce PEP qui est à l'origine du champ électrique régissant le mouvement des porteurs. Ceci explique qu'après quelques itérations, le système soit devenu instable et ait évolué vers un état dénué de tout sens physique. En comparant le PEP et la position moyenne en fonction de la distance, il est intéressant de remarquer que, même si tous les moments de la Pearson IV interviennent dans le calcul du PEP, les principaux changements de pente du PEP correspondent à des variations plus ou moins brusques de la position moyenne. Par exemple, à proximité des interfaces, la position moyenne augmente rapidement, ce qui induit une réduction significative de la proportion de Pearson IV à l'intérieur du dispositif. Il en résulte un PEP fortement croissant. Ensuite, la position moyenne en fonction de la distance présente une pente moins importante, ce qui se traduit par un PEP moins fortement croissant. Ainsi, la position moyenne de la distribution Pearson IV a une très forte influence sur l'allure du PEP. Elle doit donc être traitée de manière à assurer un champ électrique régulier permettant d'atteindre un régime d'auto-cohérence entre le PEP et le mouvement des porteurs. Pour cela, et contrairement aux autres moments de la distribution Pearson IV, le moment d'ordre 1 ou position moyenne R_p de la distribution Pearson IV se doit obligatoirement d'être continûment et régulièrement croissant non pas en fonction du champ électrique dans la direction du confinement mais en fonction de la position x dans le film. Cette

croissance régulière est la garantie d'une certaine stabilité numérique du code indispensable à sa convergence.

De plus, comme il a déjà été mentionné au paragraphe 3.3.1, la position moyenne caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ en fonction du champ électrique à l'interface ne peut être utilisée pour le calibrage de la position moyenne de la distribution Pearson IV en fonction du champ électrique local. En effet, supposons un dispositif double-grille polarisé symétriquement sur ses grilles. En régime d'inversion, le champ électrique local est nul au milieu du film. La caractérisation des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ indique alors que la position moyenne du paquet d'ondes d'une particule positionnée en champ électrique nul est la demi-épaisseur du film. La position moyenne du paquet d'ondes d'une particule située en champ électrique nul est donc la position même de cette particule. Considérons désormais une polarisation fortement dissymétrique des grilles. La position où le champ électrique s'annule ne se trouve alors pas au milieu du film mais est largement décentrée vers la grille la moins fortement polarisée. Cependant, la caractérisation des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ indique toujours, pour une particule positionnée en champ électrique nul, une position moyenne de son paquet d'ondes située au milieu du film de silicium. Dans ce cas, la position moyenne du paquet d'ondes d'une particule située en champ électrique local nul, n'est pas la position même de cette particule, ce qui est tout à fait incompatible avec un comportement physique.

La caractérisation de la densité de probabilité $|\psi_0|^2$ en fonction du champ électrique à l'interface oxyde-silicium appliquée ensuite au calibrage de la position moyenne des distributions Pearson IV n'étant pas valide et la stabilité numérique de la correction par le PEP devant être assurée, le calcul de la position moyenne R_P des distributions Pearson IV est réalisé comme suit. R_{Pdeb} et R_{Pfin} sont définis comme étant respectivement, dans le cas d'un dispositif double-grille, les positions moyennes des distributions Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule située à l'une et l'autre des interfaces oxyde-silicium. Ces R_{Pdeb} et R_{Pfin} sont calibrés de manière à reproduire, en fonction de l'épaisseur du film T_{Si} et du champ électrique à l'interface oxyde-silicium, le moment d'ordre 1 des densités de probabilité $|\psi_0|^2$. Ce calibrage est valide puisque seules des particules situées à l'interface oxyde-silicium, et donc les champs électriques aux interfaces oxyde-silicium, sont considérées. R_{Pdeb} et R_{Pfin} sont régis par les équations (3.14) et (3.15). De plus, dans un dispositif double-grille en régime d'inversion, le champ électrique dans la direction transverse au transport est de signe opposé à chacune des interfaces et passe donc par une valeur quasi nulle dans le film à la position R_{Pmin}. Or, pour une particule située en champ électrique nul, il convient d'assurer que la position moyenne de son paquet d'ondes est la position même de cette particule. Pour résumer, pour une particule située à la première interface, la position moyenne de son paquet d'ondes est $R_P=R_{Pdeb}$, pour une particule située à la deuxième interface $R_P=R_{Pfin}$ et pour une particule située à la position R_{Pmin} pour laquelle le champ électrique est nul alors $R_P=R_{Pmin}$. Ces « positions limites » étant connues, deux équations similaires données par l'équation (3.16) et dépendantes de l'épaisseur du film de silicium (cf. équation (3.17)) permettent de déterminer l'évolution de la position moyenne de la Pearson IV située entre R_{Pdeb} et R_{Pmin} ou entre R_{Pmin} et R_{Pfin} en fonction de la distance. En assurant

ainsi une évolution régulière de la position moyenne en fonction de la distance, on garantit une certaine stabilité numérique du code Monte-Carlo corrigé par le PEP.

$$\begin{aligned}
&\text{Si} \quad x \le R_{Pmin} \\
&\quad \text{alors} \quad R_P = R_{Pmin} + (R_{Pmin} - R_{Pdeb} - x_{interface1}) \times \frac{\tanh\left(\frac{(x - R_{Pmin})}{R_{Pdiv}}\right)}{\left|\tanh\left(\frac{(x_{interface1} - R_{Pmin})}{R_{Pdiv}}\right)\right|} \\
&\quad \text{sinon} \quad R_P = R_{Pmin} - (R_{Pmin} + R_{Pfin} - x_{interface2}) \times \frac{\tanh\left(\frac{(x - R_{Pmin})}{R_{Pdiv}}\right)}{\left|\tanh\left(\frac{(x_{interface2} - R_{Pmin})}{R_{Pdiv}}\right)\right|} \\
&\text{Fin Si}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

avec R_P, R_{Pmin}, R_{Pdeb}, R_{Pfin}, R_{Pdiv}, x, $x_{interface1}$ et $x_{interface2}$ en mètre et R_{Pdiv} vérifiant :

$$\begin{aligned}
&\text{Si} \quad T_{Si} \ge 10.10^{-9} \text{ m} \\
&\quad \text{alors} \quad R_{Pdiv} = 0{,}4 \times T_{Si} + 2 \times 10^{-9} \\
&\quad \text{sinon} \quad R_{Pdiv} = 6 \times 10^{-9} \\
&\text{Fin Si}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

avec T_{Si} en mètre.

Reprenons l'exemple des **Figure 3.10** et **Figure 3.11** et traçons sur la **Figure 3.12** la position moyenne de la distribution Pearson IV calculée comme décrit ci-dessus, le potentiel de Poisson et le potentiel effectif de type Pearson ainsi obtenu dans le cas d'une polarisation symétrique des grilles (a) et dans le cas d'une polarisation dissymétrique des grilles (b).

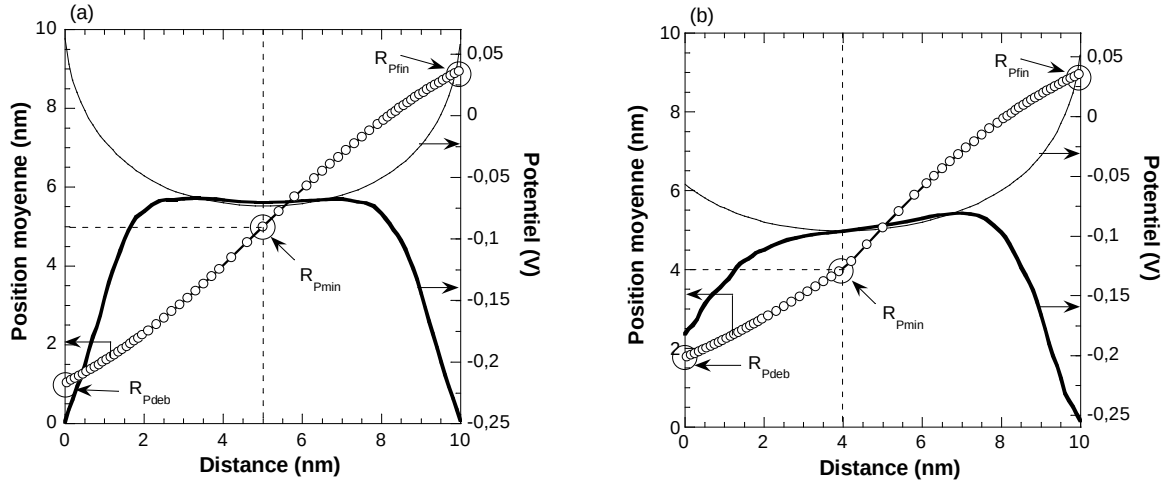


Figure 3.12 : Potentiel de Poisson (normal), PEP (gras) et position moyenne de la distribution Pearson IV en fonction de la distance dans le cas d'une polarisation symétrique des grilles (a) et dans le cas d'une polarisation dissymétrique des grilles (b).

Il est aisé de vérifier que, quelle que soit la polarisation des grilles, à la position R_{Pmin} à laquelle le champ électrique s'annule la position moyenne de la distribution Pearson IV vaut R_{Pmin}. De plus, la position moyenne, calculée de manière à être continûment et régulièrement croissante tout au long du film de silicium, permet l'obtention d'un profil de potentiel effectif de type Pearson régulier, condition nécessaire à la convergence de la simulation.

Justifions désormais la dépendance de l'équation (3.16) en épaisseur de film de silicium. Cette dépendance est donnée par le paramètre R_{Pdiv} dont la valeur est régie par l'équation (3.17). Sur la **Figure 3.13** sont tracés les potentiels de Poisson (a) et les positions moyennes (b) pour des capacités double-grille de $T_{Si} = 10\,nm$ et $T_{Si} = 20\,nm$ lorsque R_{Pdiv} est déterminé par l'équation (3.17).

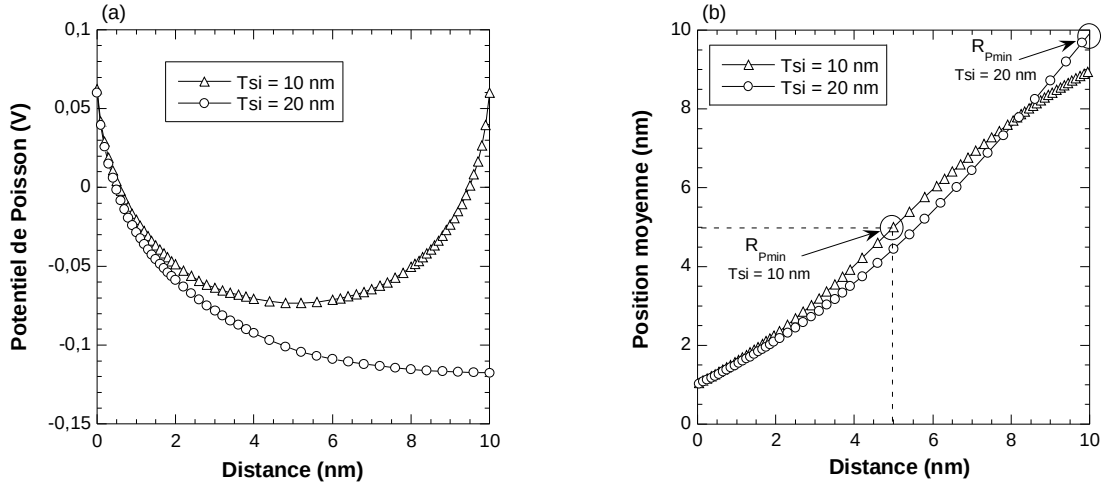


Figure 3.13 : Potentiel de Poisson (a) et position moyenne de la distribution Pearson IV (b) pour des capacités double-grille de $T_{Si} = 10\,nm$ et $T_{Si} = 20\,nm$ lorsque R_{Pdiv} est déterminé par l'équation (3.17).

L'évolution de R_{Pdiv} en fonction de l'épaisseur du film, pour des films dont l'épaisseur est supérieure à 10 nm, permet, à R_{Pdeb} et R_{Pfin} constants, de conserver une évolution similaire de la position moyenne en fonction de la distance à proximité des interfaces oxyde-silicium quelle que soit l'épaisseur du film. Ceci se justifie par le fait que l'étude des moments des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie a montré des résultats sensiblement similaires sur des capacités double-grille avec $T_{Si} = 10\,nm$ et sur des capacités *bulk*. Pour les épaisseurs de film supérieures à 10 nm, les phénomènes de confinement aux interfaces sont donc similaires puisque les fonctions d'onde présentent les mêmes caractéristiques. Il convient donc, quelle que soit l'épaisseur du film supérieure à 10 nm, d'assurer à proximité de l'interface une même évolution de la position moyenne en fonction de la position x, ce que permet de faire R_{Pdiv}.

3.3.5 Ecart-type

Supposons l'écart-type des distributions Pearson IV déterminé de manière à reproduire celui caractérisant les densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ d'une résolution Poisson-Schrödinger et représentons ces écarts-types sur la **Figure 3.14** en fonction du champ

électrique dans le cas d'une capacité double-grille d'épaisseur de film $T_{Si} = 10\,nm$. Pour ce même dispositif, effectuons une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP dont l'écart-type des distributions Pearson IV est celui présenté sur la **Figure 3.14**. Sur la **Figure 3.15**, traçons les distributions Pearson IV représentant le paquet d'ondes de particules situées à l'une et l'autre des interfaces et comparons-les aux densités de probabilité $|\psi_0|^2$ d'une résolution Poisson-Schrödinger.

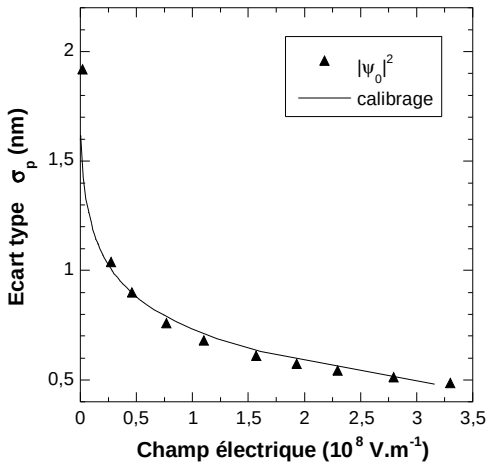


Figure 3.14 : Ecart-type caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ et calibré en fonction de la valeur absolue du champ électrique dans le cas d'une capacité double-grille de T_{Si} = 10 nm.

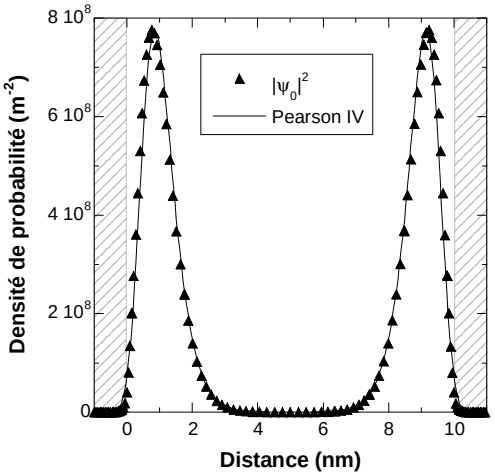


Figure 3.15 : Distributions Pearson IV représentant le paquet d'ondes de particules situées à l'une et l'autre des interfaces et densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ d'une simulation Poisson-Schrödinger.

L'asymétrie des distributions Pearson IV est définie comme étant très proche de celle des densités de probabilité $|\psi_0|^2$. L'aplatissement, de par la définition mathématique des Pearson IV, n'est pas exactement de valeur égale à celle des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ mais en reste proche. En ce qui concerne la position moyenne des Pearson IV, pour des porteurs situés aux interfaces, elle est déterminée par R_{Pdeb} et R_{Pfin} et est donc égale à celle des densités de probabilité $|\psi_0|^2$. En conséquence de quoi, l'écart-type étant correctement reproduit (cf. **Figure 3.14**), il est tout à fait normal de constater que la distribution Pearson IV représentant le paquet d'ondes de porteurs situés à l'une ou l'autre des interfaces soit d'allure similaire à la densité de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$. Ce résultat valide le choix des distributions Pearson IV comme étant un bon compromis simplicité / précision pour la représentation du profil des densités de probabilité $|\psi_0|^2$.

Sur la **Figure 3.16** est présentée la concentration de porteurs résultant d'une simulation Poisson-Schrödinger et d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP avec l'écart-type donné par la **Figure 3.14**. Bien que les distributions Pearson IV reproduisent correctement les densités de probabilité, aucune répulsion des porteurs à l'interface oxyde-silicium n'est observée. Ceci s'explique simplement par le fait que la répulsion des porteurs n'est pas déterminée de la même manière dans une simulation Poisson-Schrödinger et dans une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP. Dans le cas d'une résolution Poisson-Schrödinger, les fonctions d'onde et leurs niveaux d'énergie associés contiennent l'intégralité de l'information sur le système et permettent d'avoir directement accès au

profil de la densité de porteurs. Les fonctions d'onde respectent une condition d'annulation aux interfaces oxyde-silicium, ce qui explique qu'elles présentent une très faible pénétration dans l'oxyde et que leur maximum soit situé non pas à l'interface mais à quelques angströms de l'interface. Dans le cas d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP, les distributions Pearson IV, assimilées à la représentation du paquet d'ondes d'une particule, ne permettent pas d'avoir directement accès au profil de la densité de porteurs. Le potentiel effectif de type Pearson, défini comme la convolution du potentiel de Poisson par les distributions Pearson IV, sert d'intermédiaire. Ce potentiel effectif est à l'origine du champ électrique responsable du mouvement des porteurs. Par conséquent, le degré de répulsion des porteurs aux interfaces est l'image du degré de répulsion du potentiel effectif aux interfaces, qui lui-même est l'image du degré de pénétration des distributions Pearson IV dans l'oxyde (cf. paragraphe 2.1.2.3). Ainsi, que ce soit dans une simulation Poisson-Schrödinger ou Monte-Carlo corrigé par le PEP, ce sont respectivement les fonctions d'onde par leur condition d'annulation ou les distributions Pearson IV par leur degré de pénétration dans l'oxyde qui déterminent la répulsion des porteurs aux interfaces. Toutefois, dans le cas d'une simulation Poisson-Schrödinger, une faible pénétration des fonctions d'onde dans l'oxyde traduit une faible probabilité de présence dans l'oxyde et donc une forte répulsion des porteurs à l'interface. Au contraire, dans le cas d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP, une faible pénétration des Pearson IV dans l'oxyde induit un potentiel effectif faiblement répulsif et donc une faible répulsion des porteurs à l'interface. Il est donc évident qu'une distribution Pearson IV, reproduisant les densités de probabilité d'une simulation Poisson-Schrödinger (cf. **Figure 3.15**) ne va pas permettre une répulsion suffisante des porteurs de l'interface (cf. **Figure 3.16**). De par cette différence de méthode pour la prise en compte de la répulsion, les valeurs de l'écart-type des distributions Pearson IV ne sont pas prises identiques à celles des densités de probabilité $|\psi_0|^2$ mais légèrement supérieures. De cette façon, les distributions Pearson IV s'étalent de manière plus importante dans l'oxyde et permettent ainsi l'obtention d'un potentiel effectif suffisamment répulsif. L'écart-type des distributions Pearson IV est donc un paramètre du modèle calibré de manière à régler le degré de la répulsion des porteurs et est régi par l'équation suivante en fonction du champ électrique local dans la direction du confinement $E_x = \partial V_P / \partial x$ et de l'épaisseur de film T_{Si} :

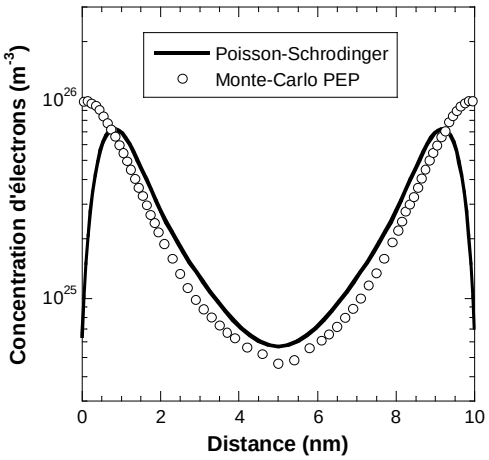


Figure 3.16 : Concentrations de porteurs issues de simulations Poisson-Schrodinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP. L'écart-type des distributions Pearson IV est pris égal à celui caractérisant les densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie (cf. Figure 3.14).

$$\sigma_P = \frac{1}{\alpha_1} \times \left(\log(T_{Sis}) + \frac{T_{Sis} + 1{,}5}{50} \right) - \frac{1}{\alpha_2} \times (T_{Sis})^3 \times \log\left[\frac{(-8 \times T_{Sis} + 90) \times |E_x|}{|E_x|_{max}} + 1 \right] \qquad (3.18)$$

avec σ_p en mètre, T_{Sis} adimensionnel, $\alpha_1 = 10^9\ m^{-1}$, $\alpha_2 = 17.10^{11}\ m^{-1}$, $|E_x|$ en $V.m^{-1}$, $|E_x|_{max} = 3{,}5\times10^8\ V.m^{-1}$ et T_{Sis} vérifiant :

$$\begin{aligned} &\text{Si} \quad T_{Si} \geq 10.10^{-9}\ m \\ &\quad \text{alors} \quad T_{Sis} = 10 \\ &\quad \text{sinon} \quad T_{Sis} = T_{Si} / 10^{-9} \\ &\text{Fin Si} \end{aligned} \tag{3.19}$$

avec T_{Si} en mètre.

Sur la **Figure 3.17** sont tracés l'écart-type des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ ainsi que l'écart-type des distributions Pearson IV déterminé par les équations (3.18) et (3.19) en fonction du champ électrique.

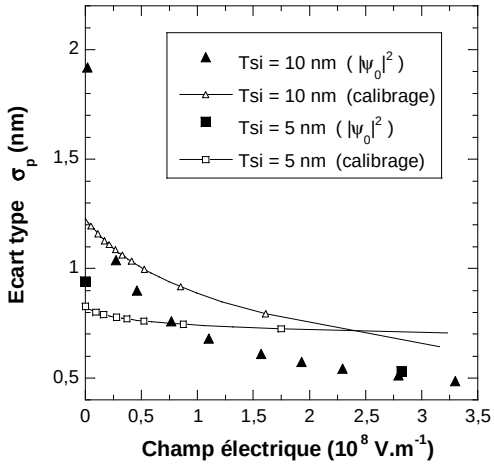


Figure 3.17 : Ecart-type des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ et calibré suivant les équations (3.18) et (3.19) en fonction de la valeur absolue du champ électrique dans le cas de capacités double-grille de $T_{Si} = 10$ nm et $T_{Si} = 5$ nm.

Le calibrage de l'écart-type des distributions Pearson IV est validé dans le paragraphe 3.5 sur une large gamme d'épaisseurs de film, mais aussi de champs effectifs et même sur différentes architectures.

3.3.6 Application à d'autres architectures

3.3.6.1 Architectures sur substrat massif (*bulk*)

Les architectures MOSFETs sur substrat massif (*bulk*) sont traitées de manière similaire aux architectures double-grille, c'est-à-dire que les paramètres de la distribution Pearson IV sont calculés en chaque point en fonction du champ électrique local à partir des équations présentées précédemment. Seul le paramètre position moyenne R_p subit un traitement particulier explicité ci-après. On suppose l'architecture *bulk* divisée en deux parties comme schématisé sur la **Figure 3.18**. La partie du dispositif *bulk* en contact avec la grille est définie comme ayant une épaisseur de film de 10 nm. Le calcul de R_p dans cette partie se fait alors de la même manière que dans le cas d'un demi-dispositif double-grille d'épaisseur 20 nm polarisé symétriquement sur ses grilles, autrement dit, dont la position X_{min} pour laquelle le champ électrique est nul se trouve à 10 nm de l'interface oxyde-silicium. Le choix d'une épaisseur de 10 nm correspond simplement à l'équivalent du plus épais des

dispositifs double-grille calibrés. De plus, 10 nm est une épaisseur suffisante à la description de la majorité des effets puisqu'en général le canal de conduction se trouve à environ 1 nm de l'interface. Dans toute la partie du dispositif *bulk* correspondant au fond du dispositif, la position moyenne R_p est imposée comme la position à laquelle on calcule le PEP, c'est-à-dire $R_p(x) = x$.

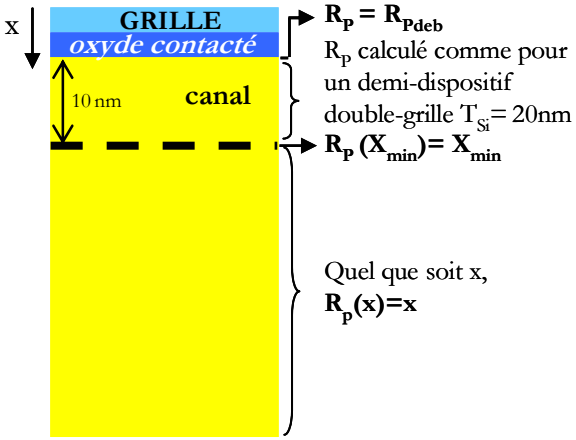


Figure 3.18 : Représentation schématique d'un empilement MOSFET sur substrat massif pour la correction par le potentiel effectif de type Pearson et plus particulièrement pour le calcul de la position moyenne des distributions Pearson IV.

3.3.6.2 Architectures SOI

De même que pour les architectures *bulk*, il est nécessaire de diviser les architectures SOI en deux parties comme schématisé sur la **Figure 3.19**. Cette division vient du fait que des effets de confinement quantique ont lieu à chacune des deux interfaces avec l'oxyde. Cependant, ces interfaces sont de nature différente : oxyde contacté et oxyde non contacté. Elles sont donc modélisées différemment afin de rendre compte correctement des effets de confinement quantique. Là encore, la partie supérieure du dispositif, en contact avec de l'oxyde contacté ou oxyde de grille est traitée de manière similaire à un demi-dispositif double-grille d'épaisseur de film $2\times T_1$. Par contre, en ce qui concerne la partie inférieure du dispositif, c'est-à-dire la partie en contact avec l'oxyde non contacté ou oxyde enterré de substrat, elle est traitée de manière spécifique comme explicité dans le paragraphe 4.1. Un calibrage a montré que pour des dispositifs SOI d'épaisseur de film 5 et 10 nm, la séparation en deux parties égales du film de silicium, l'une influencée par l'oxyde contacté et l'autre influencée par l'oxyde non contacté, permet de décrire correctement les effets de confinement quantique sur toute l'épaisseur du film.

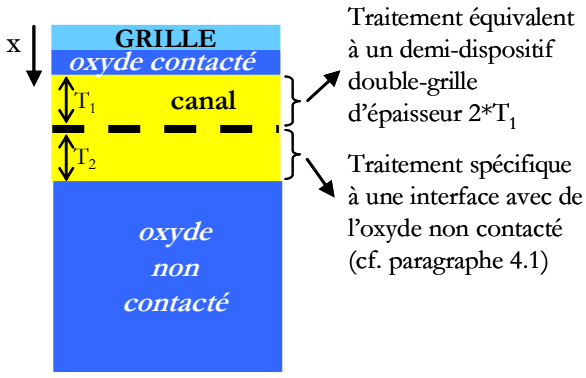


Figure 3.19 : Représentation schématique d'un empilement MOSFET de type SOI pour la correction par le potentiel effectif de type Pearson.

3.3.7 Bilan

Commençons tout d'abord par rappeler qu'au cours de la phase de calibrage du potentiel effectif de type Pearson, le choix des distributions de type Pearson IV a été validé comme un bon compromis simplicité / précision pour reproduire le profil des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie d'une résolution Poisson-Schrödinger $|\psi_0|^2$. Le calibrage de chacun des quatre paramètres de la Pearson IV a été effectué de la manière suivante :

- ✓ l'asymétrie γ en fonction du champ électrique local dans la direction du confinement est prise égale à l'asymétrie caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ en fonction du champ électrique à l'interface.
- ✓ l'aplatissement β est uniquement dépendant de la valeur de l'asymétrie γ préalablement calculée et est pris à sa valeur minimale. De cette manière la valeur de l'aplatissement reste au plus proche de celle d'une loi normale et des valeurs caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ en fonction du champ du électrique à l'interface.
- ✓ la position moyenne R_P de la Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule située à une interface est prise égale à la position moyenne caractérisant les densités de probabilité $|\psi_0|^2$ en fonction du champ du électrique à l'interface. De plus, la valeur de la position moyenne de la Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule située à un champ électrique nul est prise égale à la position même de cette particule. Ces valeurs limites de la position moyenne étant connues, la position moyenne est déterminée en fonction de la position dans le film de manière à être continûment et régulièrement croissante. Ceci est indispensable à l'obtention d'un profil régulier de PEP nécessaire à la convergence de la simulation.
- ✓ l'écart-type σ_P est le seul paramètre ajustable du modèle. Il est calibré en fonction du champ électrique de manière à ce que la pénétration de la distribution Pearson IV dans l'oxyde induise un champ électrique répulsif reproduisant correctement le profil de la densité de porteurs d'une simulation Poisson-Schrödinger. En effet, rappelons que, dans le cas d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP, le degré de répulsion des porteurs est fonction du degré de pénétration de la distribution Pearson IV dans la zone assimilée à l'oxyde.

Notons également que les paramètres écart-type, asymétrie et par conséquent aplatissement en fonction du champ électrique local sont pris identiques pour tous les dispositifs présentant des épaisseurs de film supérieures à 10 nm. Seul le calcul de la position moyenne diffère car celui-ci impose de balayer toute l'épaisseur du film. Ceci résulte de l'étude du module au carré des fonctions d'onde de la première sous-bande d'énergie $|\psi_0|^2$ d'une résolution Poisson-Schrödinger qui a montré un comportement similaire de ces $|\psi_0|^2$ pour des capacités *bulk* et double-grille de $T_{Si} = 10\,\text{nm}$. Les capacités double-grille d'épaisseur de film supérieure à 10 nm ayant alors été interprétées comme se comportant comme deux capacités *bulk* associées, il est naturel de choisir des valeurs identiques de paramètres en fonction du champ électrique pour toutes ces capacités.

Le calibrage des paramètres de la Pearson IV ayant été présenté, avant de passer aux résultats de simulations Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson ou PEP, intéressons-nous à la manière dont la correction par le PEP a été mise en œuvre dans un code Monte-Carlo et illustrons ceci par un exemple complet de calcul de PEP.

3.4 Mise en œuvre dans un code Monte-Carlo

3.4.1 Méthodologie générale du programme

3.4.1.1 Algorithme

L'algorithme de calcul du Potentiel Effectif de type Pearson ou PEP à partir du potentiel de Poisson est représenté schématiquement par la **Figure 3.20**.

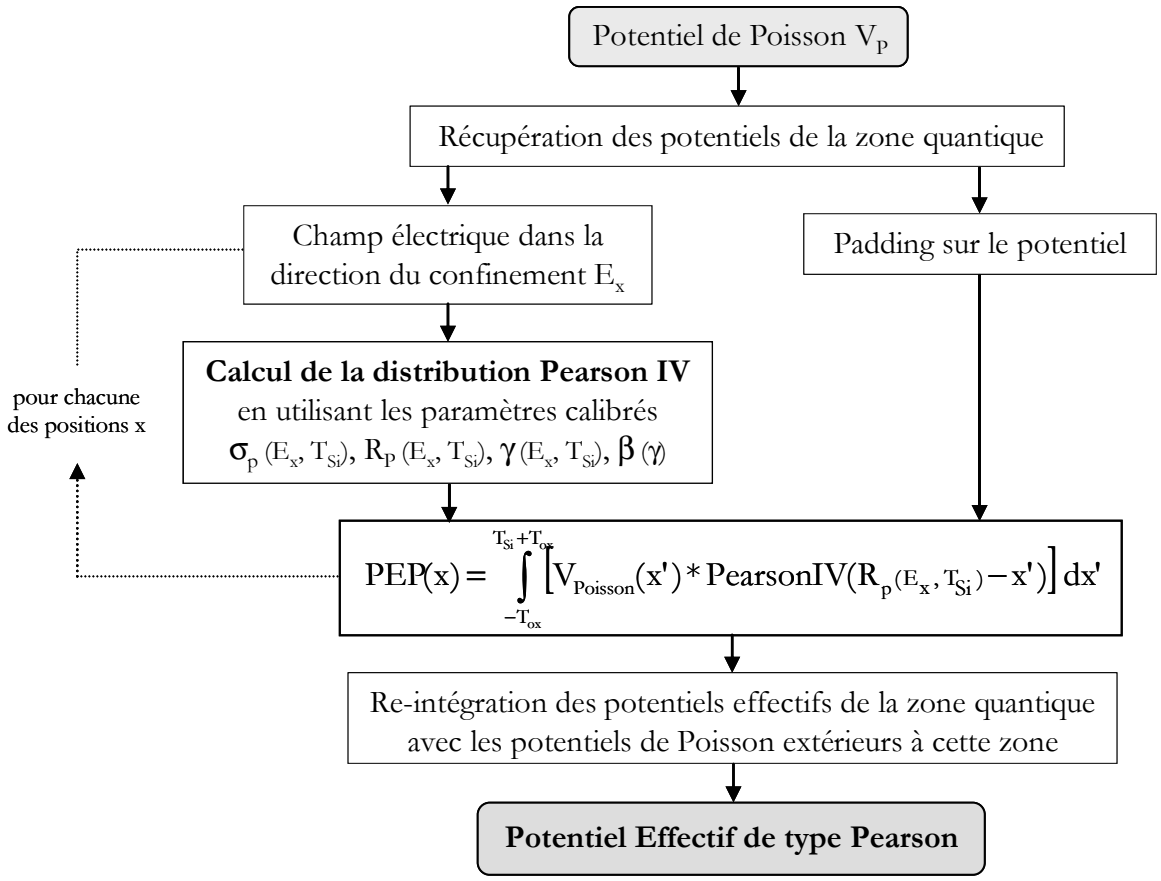


Figure 3.20 : Algorithme de calcul du potentiel effectif de type Pearson ou PEP.

Cet algorithme se présente sous une forme similaire à celui du calcul du GEP présenté au paragraphe 2.2. Dans un premier temps, seules les données de la zone quantique du potentiel de Poisson sont conservées. D'un côté, sur ces données de potentiel sont ajoutées des conditions aux

limites dépendantes de la nature de l'interface aux limites de la zone quantique (cf. paragraphe 2.1.3). En particulier, rappelons que, dans le cas d'une interface oxyde-silicium, la condition aux limites consiste à fixer le potentiel à la valeur du potentiel de Poisson diminuée de la valeur du paramètre E_B assimilé à la hauteur de barrière d'oxyde. Dans toute cette étude, le paramètre E_B caractérise une interface SiO_2/Si, il est donc pris constant et égal à 3,1 eV, c'est-à-dire à la valeur de la différence des bandes de conduction. D'un autre côté, la connaissance du potentiel de Poisson donne accès au champ électrique local dans la direction du confinement. Ainsi, le champ électrique local E_x et l'épaisseur du film T_{Si} inhérente à la structure du dispositif étant connus, en chaque position x sont calculés les paramètres de la distribution Pearson IV comme explicité dans le paragraphe précédent. Il est à noter qu'en aucun cas l'équation de Schrödinger n'est résolue ; les valeurs des paramètres sont simplement calculées en fonction de E_x et T_{Si} à partir des équations résultant du calibrage, calibrage qui n'a été effectué qu'une seule et unique fois. Le potentiel de Poisson ayant été mis en forme et les distributions Pearson IV ayant été définies à chacune des positions, le Potentiel Effectif de type Pearson est calculé en chaque point comme le produit de convolution du potentiel de Poisson par la distribution de type Pearson IV au point considéré. S'ensuit logiquement une réinsertion des valeurs du potentiel effectif de type Pearson de la zone quantique au milieu des autres valeurs de potentiel. Par rapport à l'algorithme de calcul du GEP, il est à remarquer qu'il n'est plus question d'utilisation de transformée de Fourier ni même d'interpolation puis d'interpolation inverse. Ces points sont traités successivement dans les deux prochains paragraphes.

3.4.1.2 Méthode d'intégration numérique

Dans le cas du potentiel effectif de type gaussien, peu importe la position de la particule dans le film, l'allure de la distribution gaussienne est constante ; seule sa position change puisqu'elle est centrée sur la position de la particule dont elle représente le paquet d'ondes. L'utilisation d'une méthode de transformée de Fourier pour le calcul de ce produit de convolution s'avère alors tout à fait adaptée et recommandée pour une optimisation du temps de calcul. Par contre, dans le cas du potentiel effectif de type Pearson, les distributions Pearson IV n'ont pas une allure constante tout au long du film de silicium. En effet, comme explicité précédemment, les paramètres définissant les distributions Pearson IV sont notamment dépendants du champ électrique local dans la direction du confinement. Les méthodes de transformée de Fourier pour le calcul du produit de convolution ne sont donc plus envisageables et le produit de convolution doit être calculé comme une intégrale 1D usuelle. Mais il ne faut pas perdre de vue que cette correction quantique doit pouvoir facilement être généralisable en 2D et même en 3D tout en conservant un temps de calcul raisonnable. Il convient donc de choisir une méthode d'intégration numérique qui allie précision du calcul, facilité de mise en œuvre en plusieurs dimensions et efficacité en temps de calcul.

Le domaine à intégrer (zone quantique élargie aux zones de *padding*) étant simple et la fonction à intégrer (produit du potentiel de Poisson par une distribution Pearson IV) étant assez régulière, la méthode d'intégration de Gauss est choisie pour son efficacité et sa relative rapidité. En effet, une

telle méthode présente l'énorme avantage de n'utiliser que peu de points d'intégration s'ils sont judicieusement choisis, tout en fournissant un résultat d'une grande précision. De plus, elle est très facilement généralisable en plusieurs dimensions puisque qu'elle consiste à utiliser dans chacune des directions une intégration numérique à une dimension. Son principe général est le suivant : r coefficients de pondération w_i (*weight*) associés à r abscisses des points d'intégration x_i sont déterminés de manière à intégrer exactement les polynômes d'ordre $m \leq 2r-1$. Ainsi, l'intégrale d'une fonction polynomiale f(x) peut être remplacée par une combinaison linéaire de ses valeurs aux points d'intégration x_i :

$$\int_{-1}^{+1} f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{r} w_i f(x_i) \tag{3.20}$$

Notons que les abscisses x_i sont les racines des polynômes de Legendre d'ordre r et qu'il existe dans la littérature de nombreuses tables donnant les coefficients w_i et les abscisses x_i en fonction du nombre de points d'intégration r. Cette méthode d'intégration numérique étant très utilisée et bien connue nous ne la détaillons pas et renvoyons à la référence suivante pour plus de précisions [Dhatt 05 p. 345-383].

3.4.1.3 Nécessité d'une étape d'interpolation

Rappelons que l'interpolation à un maillage uniforme est imposée dans le calcul du GEP de par l'utilisation d'algorithmes de transformée de Fourier rapide (cf. paragraphe 2.2.1.2). Dans le cas du PEP, la conservation de cette étape d'interpolation pourrait se justifier par la volonté de conserver un calcul de grande précision. Toutefois, l'interpolation est très consommatrice en temps CPU, non seulement au niveau des étapes d'interpolation et d'interpolation inverse en elles-mêmes, mais surtout parce que l'interpolation augmente considérablement le nombre de points à prendre en compte dans le calcul du PEP. En effet, le PEP s'exprime sous la forme d'un produit de convolution, c'est-à-dire que le calcul du PEP en un point du maillage impose de balayer l'intégralité des points de maillage. Effectuons une rapide étude comparative de calculs de PEP 1D avec et sans étape d'interpolation afin de statuer sur l'utilité de cette étape. La méthode d'interpolation utilisée est la même que celle mise en œuvre dans le calcul du GEP, nous renvoyons donc au paragraphe 2.2.1.2 et à la référence [Press 96 p.107]. Les caractéristiques des simulations réalisées (nombre de nœuds de maillage et nombre d'itérations Monte-Carlo par heure) sont récapitulées dans la **Table 3.1**. Sur la **Figure 3.21** sont tracés les PEP calculés avec et sans étape d'interpolation. Le calcul du PEP 1D sans interpolation induit une réduction de 19 % du nombre de nœuds de maillage et une augmentation de 85% du nombre d'itérations Monte-Carlo effectuées par heure. De plus, la suppression de l'étape d'interpolation n'engendre pas de différence majeure sur le résultat du calcul du PEP par rapport à un calcul avec interpolation. Par conséquent, une économie non négligeable de temps CPU ainsi qu'une précision non altérée du calcul du PEP justifient la suppression de l'étape d'interpolation.

	AVEC interpolation	SANS interpolation
Nombre de nœuds de maillage	23973	19388
Nombre d'itérations par heure	1300	2400

Table 3.1 : Comparaison du nombre de nœuds de maillage et du nombre d'itérations Monte-Carlo par heure pour le calcul du PEP 1D avec et sans interpolation

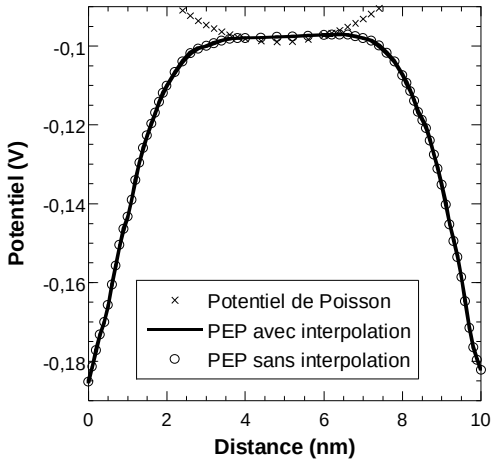


Figure 3.21 : Potentiel de Poisson et PEP calculés avec et sans étape d'interpolation dans une capacité double-grille.

3.4.2 Calcul du potentiel effectif

Après nous être intéressés à la mise en œuvre de la correction par le potentiel effectif de type Pearson, illustrons ceci par un exemple détaillé de calcul de ce potentiel. Pour cela, le dispositif double-grille dont les caractéristiques sont représentées sur la **Figure 2.9** est simulé. Tous les résultats présentés dans ce paragraphe ont été obtenus pour une polarisation de drain nulle et des polarisations de grille symétriques en régime d'inversion. La cartographie 2D du potentiel de Poisson dans le canal d'un tel dispositif est représentée sur la **Figure 3.23**. Au milieu du canal de ce dispositif, effectuons une coupe dans la direction transverse au transport et traçons sur la **Figure 3.24** le potentiel de Poisson et le champ électrique ainsi obtenus en fonction de la distance. La correction par le potentiel effectif de type Pearson nécessite de définir pour chaque position x le long du film de silicium, une distribution Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule située en x. Chacun des quatre paramètres de cette distribution est calculé en fonction de l'épaisseur du film de silicium et du champ électrique local en x dans la direction du confinement comme explicité dans le paragraphe 3.3. Connaissant l'épaisseur du film de silicium et étant donné le champ électrique local dans la direction du confinement représenté sur la **Figure 3.24**, traçons sur la **Figure 3.25** l'évolution de chacun des paramètres de la Pearson IV dans la direction du confinement.

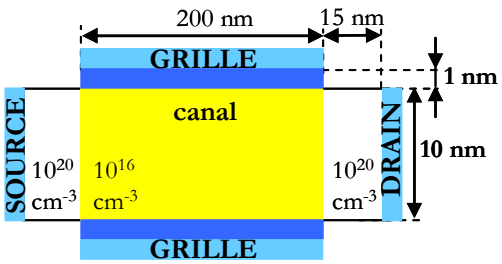


Figure 3.22 : Dispositif double-grille simulé

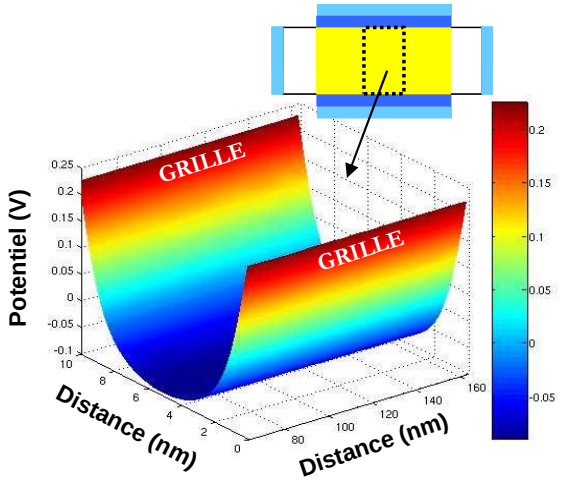


Figure 3.23 : Cartographie 2D du potentiel de Poisson dans le canal.

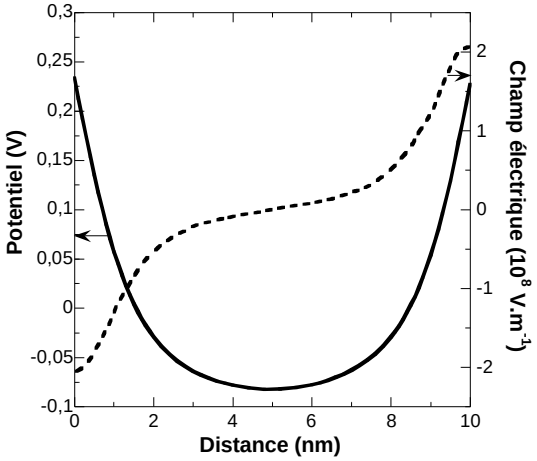


Figure 3.24 : Potentiel de Poisson et champ électrique en fonction de la distance.

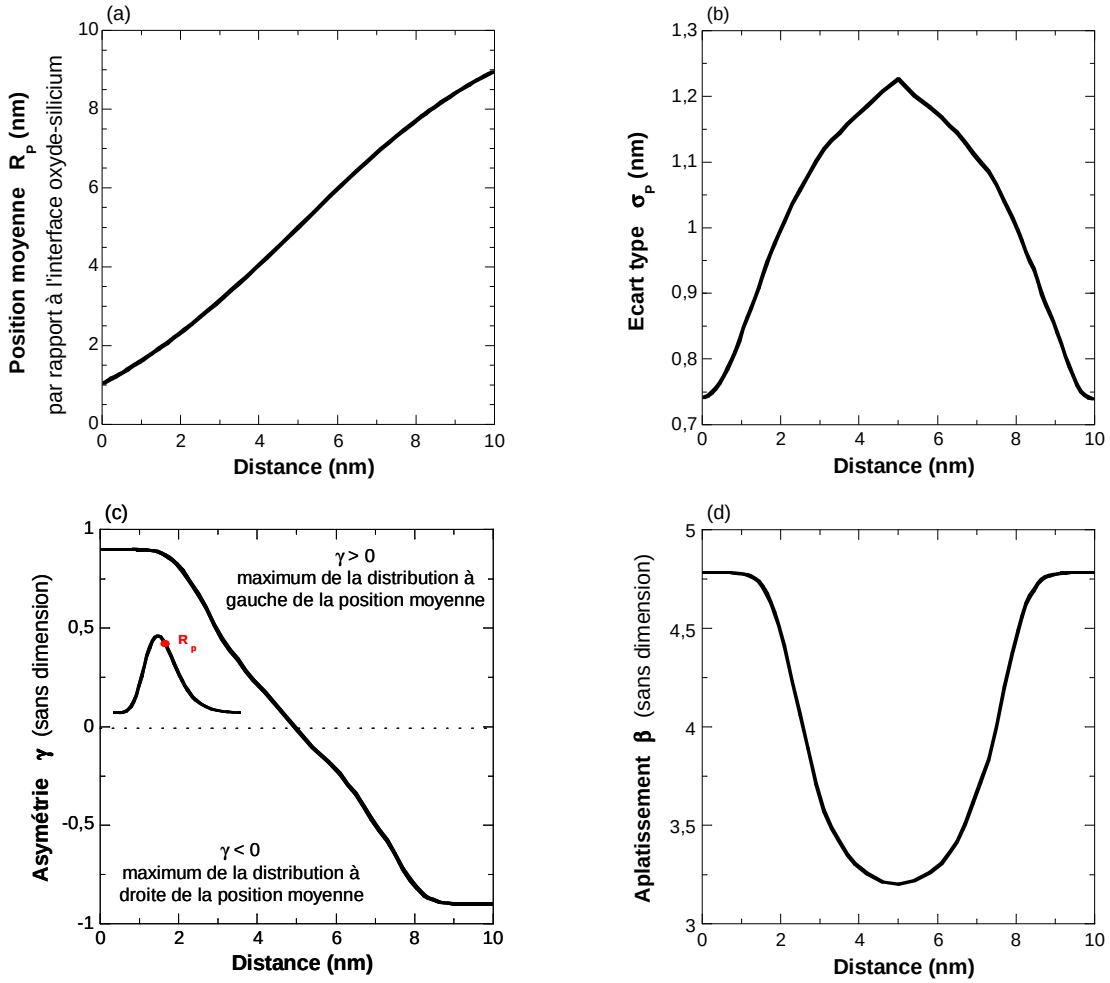


Figure 3.25 : Position moyenne (a), écart-type (b), asymétrie (c) et aplatissement (d) en fonction de la distance x caractérisant la distribution Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule située en x.

Remarquons tout d'abord que l'évolution de chacun des paramètres en fonction de la distance dans la direction du confinement présente une symétrie par rapport à la position du milieu du film. Ceci est la

conséquence d'une polarisation symétrique des grilles du dispositif étudié. En ce qui concerne la position moyenne, contrairement à la correction par le GEP, la position moyenne d'une particule située à l'interface ne se trouve pas à l'interface mais à environ 1 nm de cette interface. Comme imposé par la méthode de calcul de la position moyenne, on observe bien une position moyenne continûment et régulièrement croissante en fonction de la distance, condition nécessaire à la stabilité numérique de la correction quantique. Pour une particule située à champ électrique nul, c'est-à-dire au milieu du film puisque la capacité double-grille est polarisée symétriquement, on retrouve bien une position moyenne de la Pearson située au milieu du film. Pour ce qui est de l'écart-type, sa valeur est la plus petite aux interfaces oxyde-silicium et la plus grande au milieu du film, ce qui traduit des particules d'autant moins confinées qu'elles s'éloignent des interfaces. De même, l'asymétrie est d'autant moins prononcée que l'on s'éloigne des interfaces. Au milieu du film, l'asymétrie est nulle, ce qui, ajoutée à la méthode de calcul de l'aplatissement, définit le paquet d'ondes d'une particule située au milieu du film comme étant gaussien. De plus, notons que l'asymétrie change de signe en fonction du signe du champ électrique local. De cette manière, le maximum de la distribution Pearson IV se trouve du côté de l'interface oxyde-silicium responsable de son asymétrie. Quant à l'aplatissement, étant donné qu'il est uniquement calculé à partir de la valeur de l'asymétrie on vérifie qu'il évolue de manière cohérente à celle-ci. Les valeurs des paramètres des Pearson IV ayant été définies en chaque position, pour quelques positions x matérialisées par un trait en pointillés, traçons sur la **Figure 3.26** les distributions Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule située à ces positions.

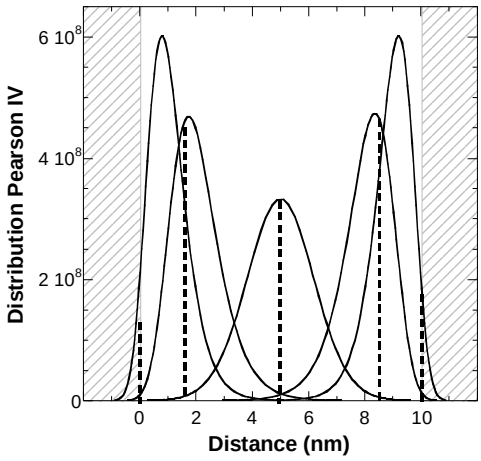


Figure 3.26 : Allure du paquet d'ondes d'une particule représenté par une distribution Pearson IV pour différentes positions de la particule symbolisées par les traits en pointillés dans la direction du confinement d'un dispositif double-grille.

Enfin, la connaissance de la distribution Pearson associée à chacune des positons permet de calculer le potentiel effectif de type Pearson. Le profil du Potentiel effectif de type Pearson instantané ainsi obtenu et sa cartographie 2D sont tracés sur la **Figure 3.27**. On observe sur la coupe dans la direction du confinement que, contrairement au potentiel effectif de type gaussien (GEP), le potentiel effectif de type Pearson (PEP) n'est pas véritablement un lissage du potentiel de Poisson et de ses conditions aux limites associées. En effet, dans le cas de la correction par le GEP, le GEP est semblable au potentiel de Poisson jusqu'au moment où il commence à décroître. Ainsi, avec les paramètres de la littérature, une position réaliste du maximum de la densité de porteurs implique systématiquement une surcharge de la densité de porteurs à cette position du fait que le GEP est similaire au potentiel de Poisson jusqu'à son maximum. En ce qui concerne le PEP, tout comme le

GEP, au milieu du film, il est similaire au potentiel de Poisson. Par contre, il présente un maximum détaché du potentiel de Poisson et une décroissance aux interfaces bien plus réaliste que le GEP avec les paramètres de la littérature. L'allure du potentiel effectif de type Pearson est donc valide pour reproduire les effets de confinement quantique puisqu'il est similaire au potentiel de Poisson sauf à proximité des interfaces où il présente un maximum à quelques Angström de l'interface (présence du canal de conduction) et une décroissance réaliste aux interfaces (répulsion des porteurs).

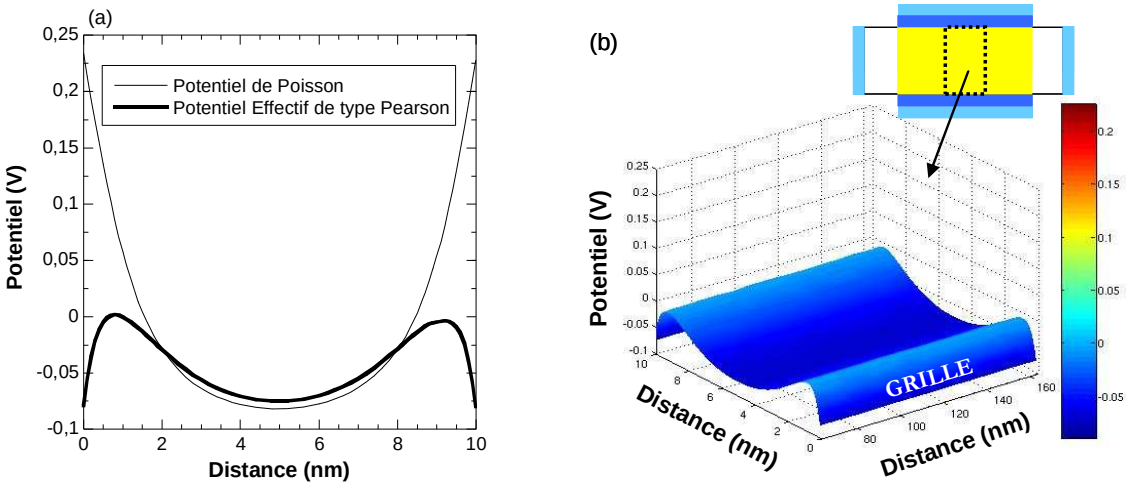


Figure 3.27 : Potentiel effectif de type Pearson et potentiel de Poisson selon une coupe au milieu du canal dans la direction du confinement (a) et cartographie 2D du potentiel effectif de type Pearson dans le canal (b).

3.5 Potentiel Effectif de type Pearson et effets de confinement quantique

La correction par le Potentiel Effectif de type Pearson ayant été explicitée, testons désormais sa capacité à reproduire les effets de confinement quantique. Pour cela, comme dans le cas de la correction par le GEP, les résultats de simulations Monte-Carlo corrigé par le PEP sont comparés aux résultats d'une résolution couplée Poisson-Schrödinger 1D. Afin que ces comparaisons soient valides, les simulations Monte-Carlo sont réalisées sur des dispositifs non polarisés sur le drain et présentant une longueur de grille suffisamment longue pour que les effets dans la direction du transport n'entrent pas en jeu. Pour une étude comparative complète, sont également présentés les résultats issus de simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP avec les paramètres habituellement utilisés en littérature (E_B = 3,1 eV et σ_x = 0,5 nm (cf. paragraphe 2.3.2)). De plus, des résultats de simulation pour des champs effectifs dans la direction du confinement compris entre 10^5 et 10^6 V.cm^{-1} sont présentés. Cette gamme est représentative des champs effectifs utilisés pour les calculs de mobilité effective dans les couches d'inversion de canaux longs. Précisons tout de même qu'une gamme étendue à des champs effectifs plus faibles a été testée. Cependant, bien que les comportements soient corrects, on se heurte à des soucis de bruit particulaire. Par conséquent, nous nous limitons à

des résultats sur la gamme de champs effectifs précédemment évoquée. Le champ effectif est défini comme :

$$E_{eff} = \frac{\int_0^{Tsi} (n(x) \times |E_x|)\, dx}{\int_0^{Tsi} n(x)\, dx} \qquad (3.21)$$

avec n(x) la densité de porteurs en x dans la direction transverse au transport et E_x le champ électrique local dans la direction transverse au transport. Enfin, en plus de résultats sur les dispositifs double-grille, qui constituent nos dispositifs de référence, des résultats sur un dispositif sur substrat massif (*bulk*) ainsi que sur un dispositif SOI-FD (*Silicon On Insultor Fully Depleted*) sont également présentés.

3.5.1 Dispositifs double-grille

Le dispositif double-grille simulé présente les caractéristiques indiquées sur la **Figure 3.28**.

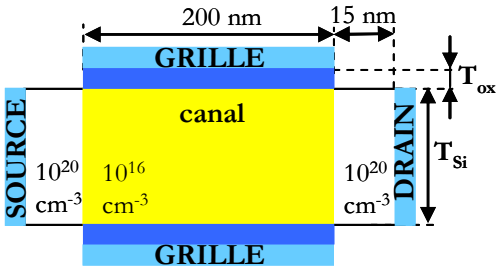
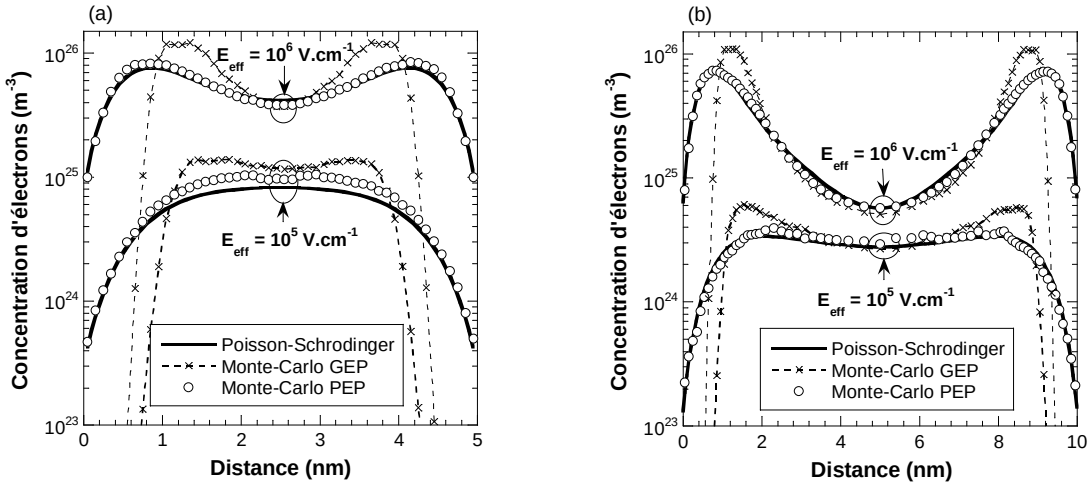


Figure 3.28 : Dispositif double-grille simulé.

Dispositifs double-grille polarisés symétriquement : Variation sur l'épaisseur de film T_{Si}

Dans un premier temps, les paramètres de la distribution Pearson IV ayant été calibrés sur des dispositifs double-grille d'épaisseur d'oxyde $T_{ox} = 1$ nm et d'épaisseur de film $T_{Si} = 5$ nm, $T_{Si} = 10$ nm et $T_{Si} = 20$ nm, présentons sur la **Figure 3.29** les résultats obtenus sur ces dispositifs pour des champs effectifs dans la direction du confinement de 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1} (cf. équation (3.21)).



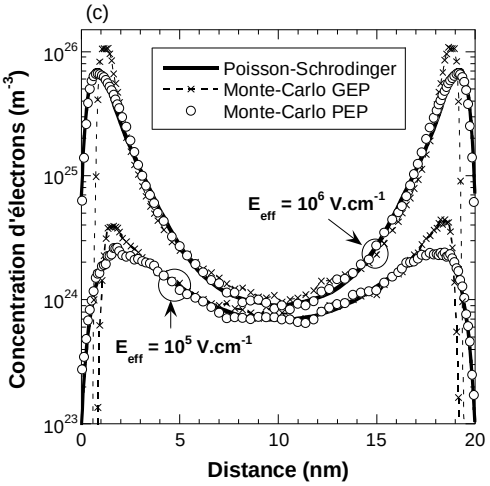


Figure 3.29 : Profils de concentration de porteurs dans la direction du confinement obtenus par simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des champs effectifs de 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}. T_{Si} = 5 nm (a), T_{Si} = 10 nm (b) et T_{Si} = 20 nm (c). T_{ox} = 1 nm

Quels que soient l'épaisseur de film de silicium ou le champ effectif appliqué, les résultats des simulations Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson sont très proches de ceux obtenus par résolution couplée des équations de Poisson et Schrödinger. En particulier, les profils de concentration de porteurs à proximité des interfaces oxyde-silicium sont désormais réalistes. Comme déjà souligné dans le chapitre 2, ceci n'est pas le cas dans la correction par le GEP pour laquelle une répulsion trop importante des porteurs à l'interface est systématiquement observée. Prenons le cas du dispositif double-grille de T_{Si} = 10 nm et polarisé à un champ effectif de $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1} sur ses grilles. Traçons sur la **Figure 3.30** les potentiels de correction GEP et PEP à l'équilibre quantique ainsi que les champs électriques générés par chacun de ces potentiels. Rappelons que dans le cas des simulations Monte-Carlo corrigé par un potentiel de correction quantique, les porteurs se déplacent non pas sous l'influence du potentiel de Poisson mais sous l'influence du potentiel de correction quantique. Sur le même exemple, traçons également sur la **Figure 3.31** les potentiels de Poisson issus de simulations Monte-Carlo semi-classique, Poisson-Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP.

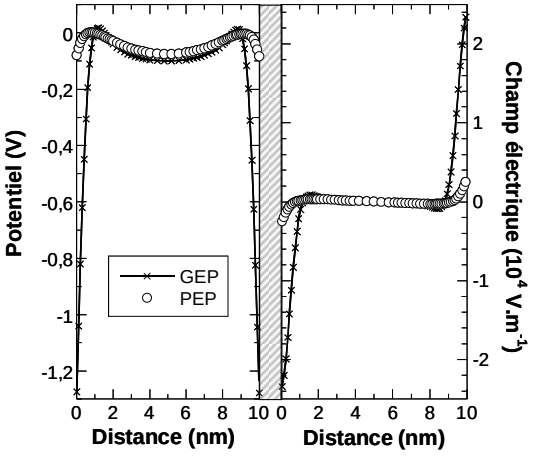


Figure 3.30 : Potentiel effectif GEP et PEP à l'équilibre quantique et champ électrique associé en fonction de la distance dans le canal. T_{si} = 10 nm, T_{ox} = 1 nm et à $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}.

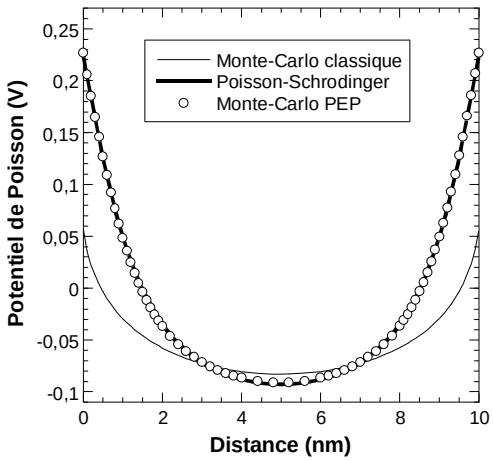


Figure 3.31 : Potentiel de Poisson issu de simulations Monte-Carlo semi-classique, Poisson-Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP en fonction de la distance dans le canal. T_{si} = 10 nm, T_{ox} = 1 nm et $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}.

Sur la **Figure 3.30**, on observe que le PEP présente clairement un aspect répulsif aux interfaces avec des valeurs de champs électriques aux interfaces bien plus réalistes que celles de la correction par le GEP. En ce qui concerne la **Figure 3.31**, le potentiel de Poisson obtenu par la correction en PEP est strictement similaire à celui obtenu par simulation Poisson-Schrödinger.

La correction par le PEP ayant été calibrée sur les épaisseurs de film présentées ci-dessus, prenons désormais le cas d'épaisseurs de film intermédiaires n'ayant pas été utilisées pour le calibrage. Sur la **Figure 3.32** sont tracés les résultats issus de simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des épaisseurs de film de T_{Si} = 8 nm (a) et T_{Si} = 15 nm (b).

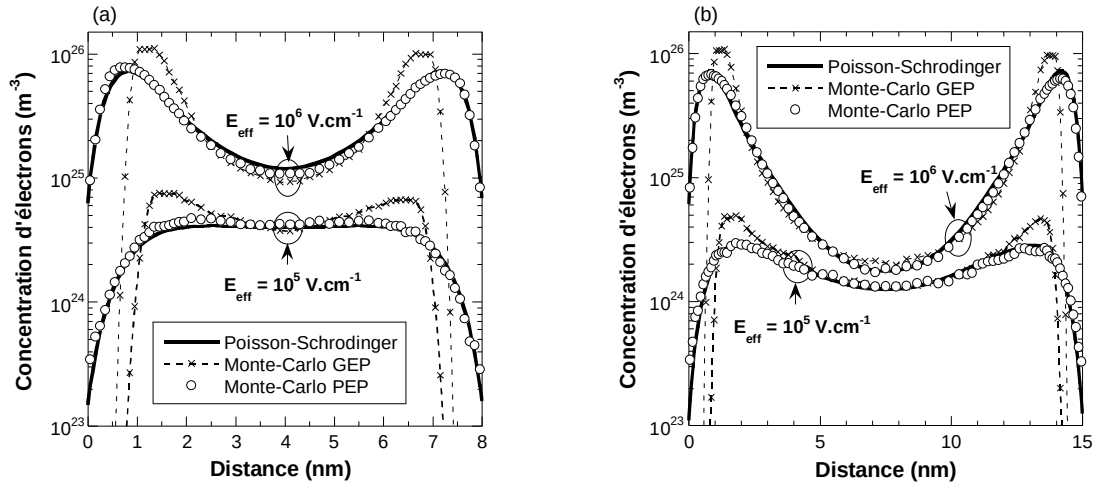


Figure 3.32 : Profils de concentration de porteurs dans la direction du confinement obtenus par simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des champs effectifs de 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}. T_{Si} = 8 nm (a) et T_{Si} = 15 nm (b). T_{ox} = 1 nm

La encore, un accord quasi-parfait entre les simulations Poisson-Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP est obtenu.

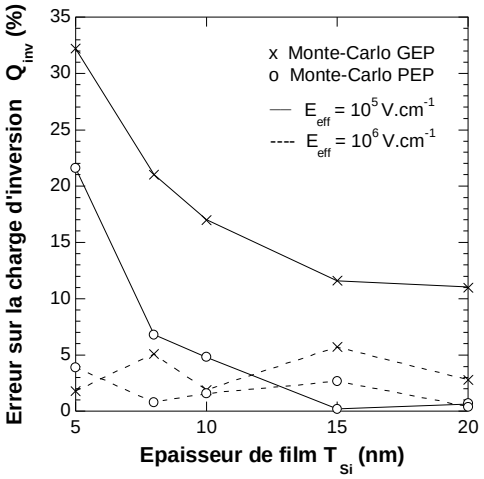


Figure 3.33 : Erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur du film pour des simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP et le PEP. L'erreur est calculée pour des champs effectifs de 10^5V.cm^{-1} et 10^6V.cm^{-1}.

Afin de conclure, traçons sur la **Figure 3.33** le pourcentage d'erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur du film de silicium à champs effectifs faible et fort pour les simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP. La charge d'inversion obtenue par résolution couplée des

équations de Poisson et de Schrödinger est considérée comme la charge d'inversion de référence. A champ effectif fort les erreurs sur les charges d'inversion obtenues avec l'une ou l'autre des corrections quantiques sont similaires et de valeurs inférieures à 6 %. Par contre à champ effectif faible, les erreurs obtenues avec le GEP comme avec le PEP sont d'autant plus importantes que l'épaisseur de film est mince. Cependant, quelle que soit l'épaisseur du film, l'utilisation du PEP permet d'obtenir une erreur de plus de 10 % inférieure à celle obtenue avec le GEP. Il en résulte que pour des épaisseurs de films supérieures à 8 nm, l'erreur sur la charge d'inversion induite par le PEP est inférieure à 7 % alors que, quelle que soit l'épaisseur du film de silicium, elle est comprise entre 11 % et 21 % avec le GEP.

Dispositifs double-grille polarisés symétriquement : Variation sur l'épaisseur d'oxyde T_{ox}

Le Potentiel Effectif de type Pearson, tel que défini dans les paragraphes précédents, présente une dépendance en champ électrique local dans la direction du confinement et en épaisseur de film de silicium. C'est pourquoi différentes épaisseurs de film et différentes polarisations de grille ont été testées. Toutefois, les manières d'agir sur le champ électrique sont nombreuses. Différentes valeurs de tensions de polarisation ayant été testées, jouons désormais également sur la géométrie du dispositif pour faire varier le champ électrique. Pour cela, la **Figure 3.34** présente les résultats obtenus pour un dispositif double-grille avec T_{Si} = 10 nm et pour des épaisseurs d'oxyde T_{ox} = 0.5 nm (a) et T_{ox} = 2 nm (b) (le cas T_{ox} = 1 nm a déjà été traité sur la **Figure 3.29**(b)).

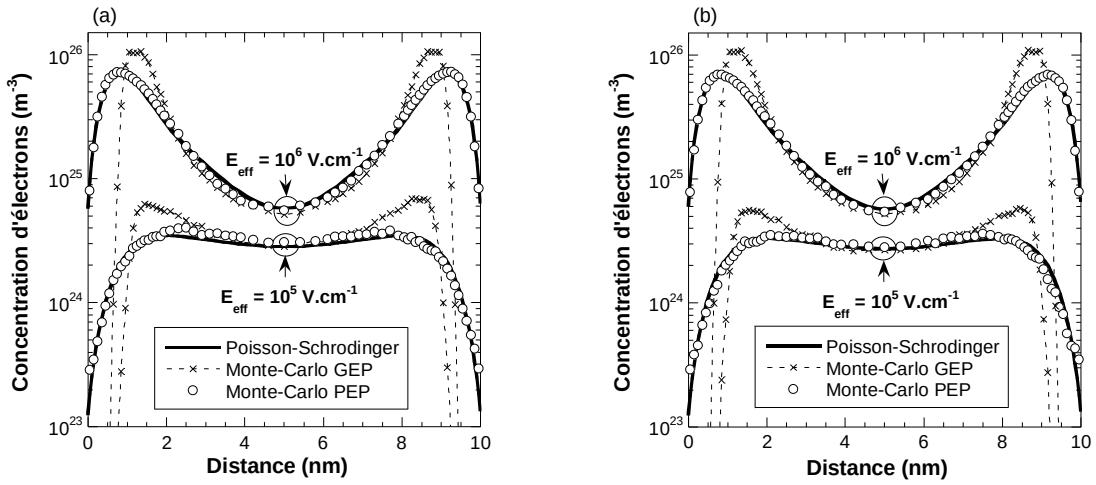


Figure 3.34 : Profils de concentration de porteurs dans la direction du confinement obtenus par simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des champs effectifs de 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}. T_{ox} = 0.5 nm (a) et T_{ox} = 2 nm (b). T_{Si} = 10 nm.

Encore une fois, un accord quasi-parfait entre les résultats issus de simulations Monte-Carlo corrigé par le Potentiel Effectif de type Pearson et Poisson-Schrödinger est obtenu. Ce résultat était prévisible étant donné qu'une modification de l'épaisseur d'oxyde se traduit par une modification du potentiel dans la direction du confinement et donc du champ électrique. Il est mis ici en évidence un des atouts de la correction par le potentiel effectif de type Pearson. En effet, le calibrage en fonction du champ

électrique local donne à ce potentiel de correction quantique une certaine universalité dans le sens où elle est indépendante de paramètres comme l'épaisseur d'oxyde ou encore le niveau de dopage puisque ces paramètres se traduisent directement sur le profil de potentiel.

Comme précédemment traçons sur la **Figure 3.35** le pourcentage d'erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur d'oxyde à champs effectifs faible et fort pour les simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP. Quels que soient l'épaisseur d'oxyde et le champ effectif appliqué, la correction par le PEP donne des erreurs sur la charge d'inversion inférieures à 6 %, alors qu'à champ électrique faible la correction par le GEP donne systématiquement des erreurs supérieures à 13 % et allant jusqu'à 23 % pour les faibles épaisseurs d'oxyde.

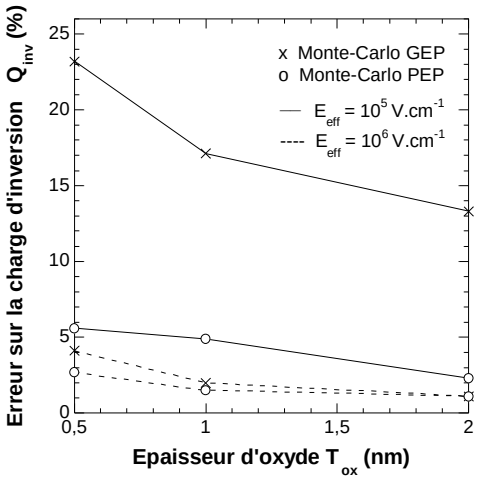


Figure 3.35 : Erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur d'oxyde pour des simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP et le PEP. L'erreur est calculée pour des champs effectifs de 10^5V.cm^{-1} et 10^6V.cm^{-1}.

Dispositifs double-grille polarisés de manière dissymétrique

Seuls des résultats obtenus sur des dispositifs présentant une symétrie dans la direction du confinement ont été présentés jusqu'à présent. Allons désormais plus loin en vérifiant que la correction par le potentiel effectif de type Pearson permet également de rendre compte correctement de dispositifs non symétriques. Pour cela, les résultats obtenus sur des dispositifs double-grille d'épaisseur d'oxyde T_{ox} = 1 nm et d'épaisseur de film T_{Si} = 5 nm, T_{Si} = 10 nm et T_{Si} = 20 nm polarisés de manière fortement dissymétrique sont tracés sur la **Figure 3.36**. La polarisation appliquée à la première grille, respectivement deuxième grille, est celle nécessaire à l'obtention d'un champ effectif de 10^5 V.cm^{-1}, respectivement 10^6 V.cm^{-1} dans le cas d'un dispositif symétriquement polarisé. Les erreurs sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur du film T_{Si} sont présentées sur la **Figure 3.36**(d). Quelle que soit l'épaisseur de film, le calibrage de la correction par le potentiel effectif de type Pearson permet de reproduire correctement les profils de densité de porteurs même dans le cas d'une polarisation fortement dissymétrique des grilles. L'erreur sur la charge d'inversion est, quant à elle, systématiquement inférieure à 7 % quelle que soit la correction quantique utilisée, GEP ou PEP. En effet, bien qu'il y ait de fortes erreurs induites par la correction par le GEP à proximité de la grille faiblement polarisée, celles-ci sont absorbées par les fortes concentrations de porteurs présentes à proximité de la grille fortement polarisée.

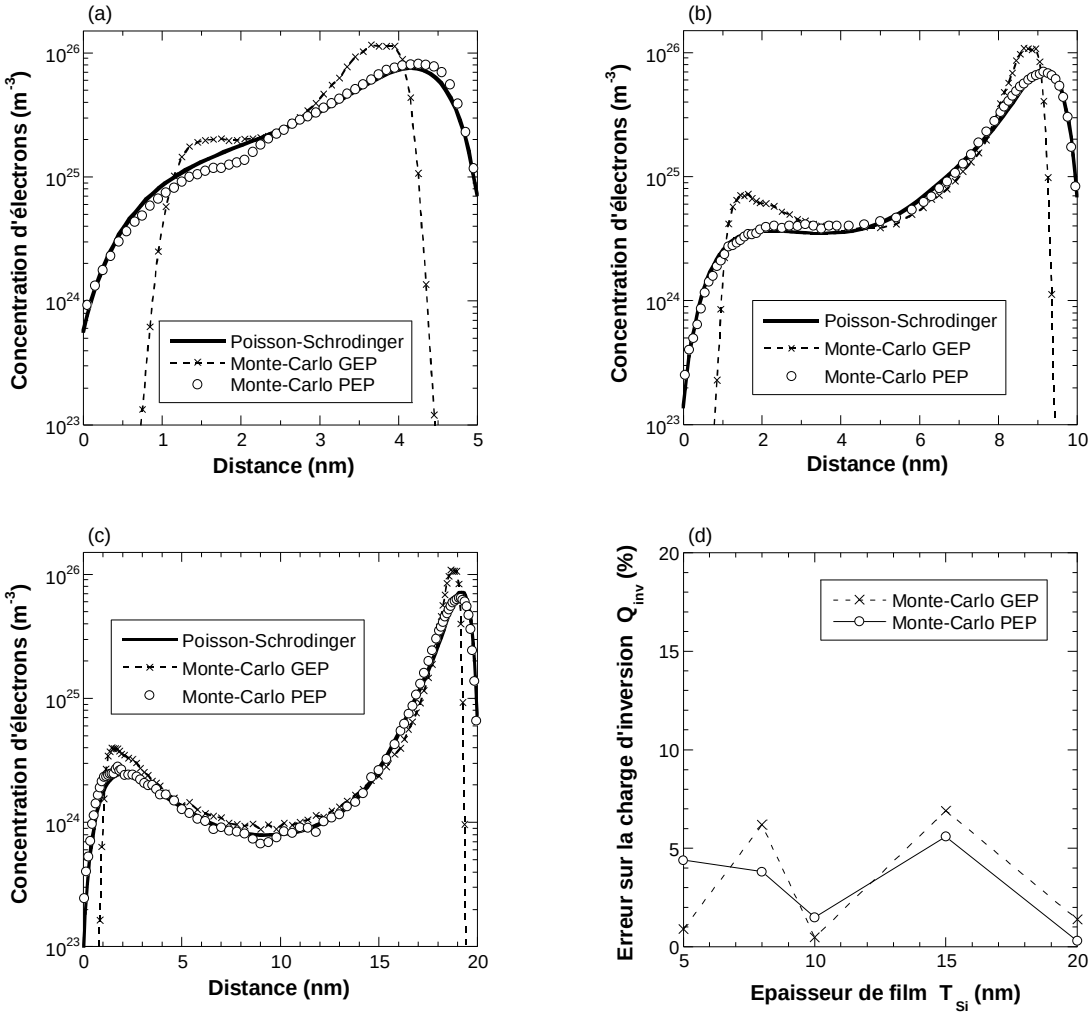


Figure 3.36 : Profils de concentrations de porteurs dans la direction du confinement issus de simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des dispositifs double-grille de T_{Si} = 5 nm (a), T_{Si} = 10 nm (b) et T_{Si} = 20 nm (c) polarisés de manière fortement dissymétrique. Erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur du film de silicium T_{Si} (d). T_{ox} = 1 nm.

Ces résultats sur les dispositifs double-grille polarisés de manière non symétrique encouragent à tester la correction par le potentiel effectif de type Pearson dans le cas de dispositifs dont la structure elle-même est asymétrique. Dans les deux prochains paragraphes sont respectivement présentés des résultats obtenus sur dispositifs sur substrat massif et SOI.

3.5.2 Dispositifs sur substrat massif (*bulk*)

L'architecture du dispositif MOSFET sur substrat massif (*bulk*) simulé est représentée schématiquement sur la **Figure 3.37**. Ses principales caractéristiques sont une épaisseur d'oxyde $T_{ox} = 1\,nm$ et un dopage $N_A = 10^{18}\,cm^{-3}$ (notons que toutes les architectures simulées jusqu'à présent présentaient un dopage de $N_A = 10^{16}\,cm^{-3}$). Sur la **Figure 3.38** sont représentées les profils de densités de porteurs obtenus sur ce dispositif par simulation Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson et de type Gaussien pour des champs effectifs E_{eff} de $5{,}8.10^5$ V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}. Rappelons que, comme explicité dans le paragraphe 3.3.6.1, à l'exception d'une

adaptation du calcul de la position moyenne R_P, la correction par le potentiel effectif de type Pearson est calculée de la même manière que dans le cas d'une architecture double-grille pour laquelle cette correction a été mise au point.

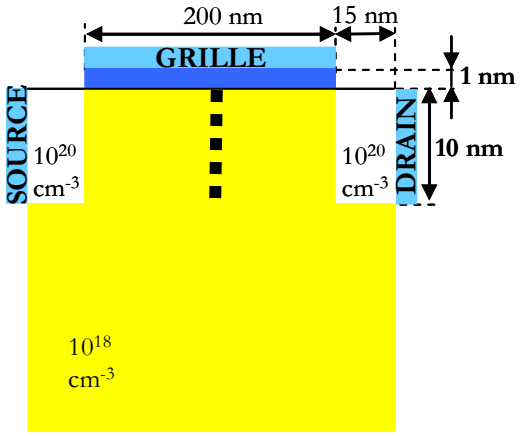


Figure 3.37 : Représentation schématique de l'architecture MOSFET sur substrat massif simulée.

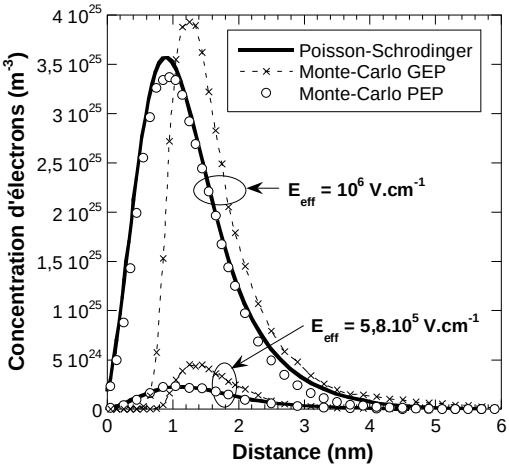


Figure 3.38 : Profils de concentration de porteurs dans la direction du confinement obtenus par simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des champs effectifs de $5{,}8.10^5$ V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}.

Sur une architecture sur substrat massif, les profils de concentration de porteurs issus de simulations Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson reproduisent très correctement ceux obtenus par simulation Poisson-Schrödinger. Notons que, tout comme la modification de l'épaisseur d'oxyde sur les dispositifs double-grille, la modification du niveau de dopage du substrat est transparente pour la correction par le PEP car celle-ci a été calibrée en fonction du champ électrique local. En ce qui concerne l'erreur sur la charge d'inversion, à fort champ effectif, respectivement faible champ effectif, elle est de 9,7 %, respectivement 7,87 %, pour la correction par le PEP et de 13,1 %, respectivement 23,5 %, pour la correction par le GEP. Comme précédemment, la correction par le PEP permet donc une bonne conservation de la charge d'inversion, et ceci même pour les faibles champs effectifs.

3.5.3 Dispositifs SOI

L'architecture du dispositif MOSFET de type SOI simulé est représentée schématiquement sur la **Figure 3.39**. Ses principales caractéristiques sont une épaisseur d'oxyde $T_{ox} = 1$ nm et un dopage $N_A = 10^{16}$ cm^{-3}. Sur la **Figure 3.40** sont représentés les profils de densité de porteurs dans la direction du confinement obtenus par simulation Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson et de type Gaussien pour des épaisseurs de film de $T_{Si} = 10$ nm (a) et $T_{Si} = 5$ nm (b) et des champs effectifs de $E_{eff} = 10^5$ V.cm^{-1} et $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}.

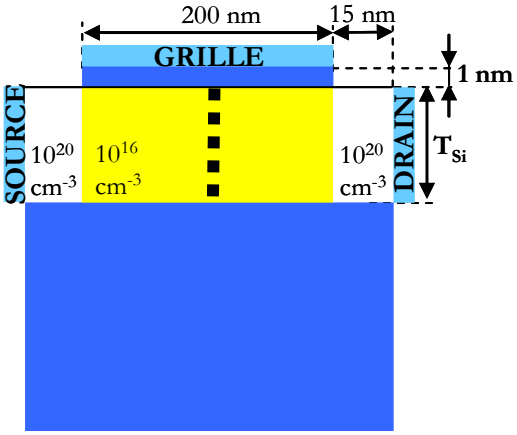


Figure 3.39 : Représentation schématique de l'architecture MOSFET de type SOI simulée.

Rappelons que, comme explicité dans le paragraphe 3.3.6.2, la correction par le potentiel effectif de type Pearson nécessite de diviser le dispositif SOI en deux parties. La partie en contact avec l'oxyde de grille ou oxyde contacté d'épaisseur $T_1 < T_{Si}$ est traitée comme un demi-dispositif double-grille d'épaisseur de film $2 \times T_1$. La partie en contact avec l'oxyde enterré ou oxyde non contacté d'épaisseur de film $T_2 = T_{Si} - T_1$ est traitée de manière spécifique comme explicité dans le paragraphe 4.1. Les résultats présentés ci-dessous ont été obtenus pour $T_1 = T_2 = T_{Si}/2$.

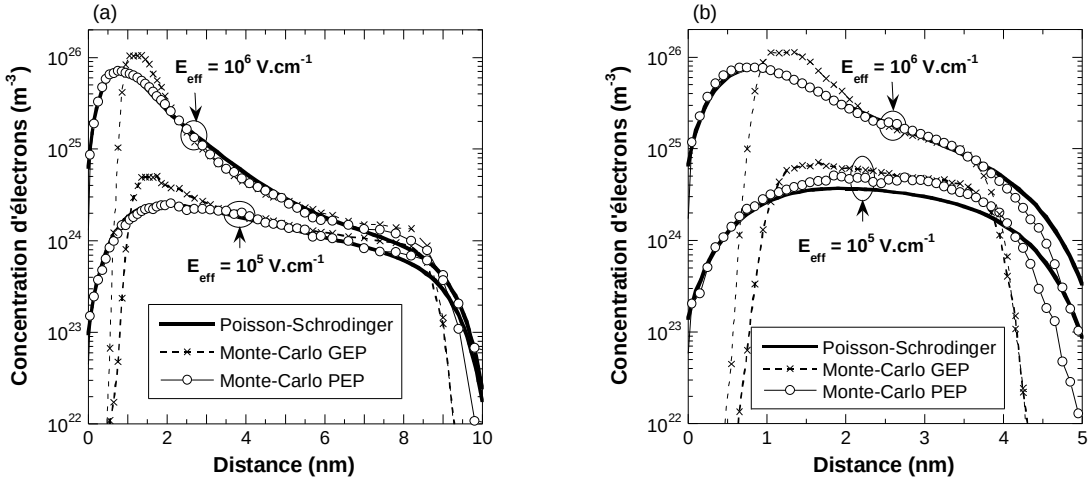


Figure 3.40 : Profils de concentration de porteurs dans la direction du confinement obtenus par simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour des épaisseurs de film de $T_{Si} = 10$ nm (a) et $T_{Si} = 5$ nm (b) et des champs effectifs de 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}.

Sur une architecture de type SOI, pour des épaisseurs de film de 5 et 10 nm et des champs effectifs compris entre 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}, les profils de concentrations de porteurs issus de simulations Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson reproduisent très correctement ceux obtenus par simulation Poisson-Schrödinger. Notons cependant que, pour une épaisseur de film de

5 nm, la zone de canal dont les effets de confinement quantique sont le fait de l'oxyde contacté est mal différenciée de la zone de canal dont les effets de confinement sont le fait de l'oxyde non contacté. Ceci explique que, pour de telles épaisseurs, les résultats soient un peu moins précis et qu'en particulier on observe une trop forte répulsion des porteurs aux interfaces avec l'oxyde enterré. Cependant, le profil de la concentration de porteurs obtenu par la correction par le PEP reste tout de même bien plus réaliste que celui obtenu par la correction par le GEP. En ce qui concerne les erreurs sur la charge d'inversion elles sont reportées dans la **Table 3.2**.

	Monte-Carlo GEP		Monte-Carlo PEP	
T_{Si} = 10 nm	$E_{eff} = 10^5$ V.cm^{-1} $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}	24 % 3 %	$E_{eff} = 10^5$ V.cm^{-1} $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}	1,6 % 0,7 %
T_{Si} = 5 nm	$E_{eff} = 10^5$ V.cm^{-1} $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}	35 % 2,3 %	$E_{eff} = 10^5$ V.cm^{-1} $E_{eff} = 10^6$ V.cm^{-1}	23 % 2,3 %

Table 3.2 : Erreur sur la charge d'inversion en fonction de l'épaisseur du film de silicium d'un dispositif SOI pour des simulations Monte-Carlo corrigé par le GEP et le PEP. L'erreur est calculée pour des champs effectifs de 10^5V.cm^{-1} et 10^6V.cm^{-1}.

Comme précédemment la précision à fort champ effectif est excellente et similaire avec les corrections par le GEP et par le PEP. A faible champ effectif et dans la limite des faibles épaisseurs de film, la correction par le PEP permet de conserver une excellente précision sur la charge d'inversion, ce que ne permet pas de faire la correction par le GEP. Même si à faible épaisseur de film et faible champ effectif l'erreur commise par la correction par le PEP est de 23 %, notons tout de même que cette valeur est significativement inférieure à l'erreur commise par une correction avec le GEP. Enfin, remarquons que ces résultats sur la charge d'inversion sont similaires à ceux obtenus sur le dispositif double-grille (cf. **Figure 3.33**).

3.6 Conclusion

Afin de rendre compte des effets de confinement quantique dans une simulation Monte-Carlo, une formulation originale de potentiel effectif, le potentiel effectif de type Pearson, est présentée dans ce chapitre. L'originalité de cette correction quantique repose sur l'amélioration de la description du paquet d'ondes de la particule afin que celle-ci présente une allure réaliste en particulier à proximité des interfaces oxyde-silicium. Ainsi, dans la correction par le potentiel effectif de type Pearson, le paquet d'ondes de la particule est représenté par une distribution de type Pearson IV dont les paramètres ont été calibrés en s'inspirant des moments du module au carré des fonctions d'onde de la première sous-bande d'énergie d'une résolution Poisson-Schrödinger. Rappelons que, dans les dispositifs étudiés dans ce manuscrit, les effets de confinement quantiques sont majoritairement

dépendants du profil de potentiel, reflet de la structure du dispositif et de son état. En conséquence de quoi, outre une dépendance en épaisseur de film de silicium, les distributions Pearson IV représentant le paquet d'ondes d'une particule présentent une dépendance en champ électrique local dans la direction du confinement à la position de la particule en question.

D'un point de vue numérique, la correction par le potentiel effectif de type Pearson n'est pas très avantageuse comparée à la correction par le potentiel effectif de type Gaussien. Ceci est la conséquence de l'évolution de l'allure de la Pearson IV en fonction du champ électrique local qui ne permet plus le calcul du produit de convolution par des algorithmes de transformée de Fourier rapide comme il est fait dans le cas de la correction par le GEP. Par conséquent, le potentiel effectif de type Pearson est calculé par la méthode d'intégration de Gauss, qui est certes efficace mais qui reste tout de même coûteuse en temps CPU. De par l'utilisation de cette méthode, le temps de calcul est fortement dépendant du nombre de mailles du dispositif simulé. Prenons le cas d'un dispositif double-grille de 45 nm par 9 nm, comprenant 90 par 55 mailles avec 0,1 fs de pas sur le temps et 50000 particules. Dans ce cas, une itération quantique avec correction par le potentiel effectif de type Pearson est environ 10 fois plus consommatrice en temps CPU qu'une itération classique et environ 4 fois plus consommatrice en temps CPU qu'une itération quantique corrigée par le GEP. Notons par ailleurs, que pour une simulation par la méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger (cf. paragraphe 1.3.2) d'un dispositif de même dimension mais pour lequel un maillage fin est nécessaire, c'est-à-dire que le dispositif est maillé en 100 par 100 mailles, une itération quantique est environ 30 fois plus lente qu'une itération classique [Saint Martin 05].

D'un point de vue électrostatique, la correction par le potentiel effectif de type Pearson montre, pour la première fois à notre connaissance, la capacité d'une approche de type potentiel effectif à reproduire correctement les effets de confinement quantique d'une simulation Poisson-Schrödinger. En effet, nous avons montré que cette correction permet de reproduire correctement les profils de densité de porteurs et donc les potentiels de Poisson de simulations Poisson-Schrödinger dans le cas de dispositifs MOSFET à double-grille pour des épaisseurs de film comprises entre 5 et 20 nm, des champs effectifs compris entre 10^5 et 10^6 V.cm^{-1} pour des polarisations symétriques ou asymétriques des grilles mais également dans le cas de dispositifs *bulk* ou SOI. Précisons que les modifications de champs effectifs ont été obtenues par modification des polarisations de grille et/ou des épaisseurs d'oxyde de grille. De plus, dans le cas des faibles champs électriques, l'erreur sur la charge d'inversion induite par la correction par le PEP est considérablement améliorée, par rapport à celle obtenue par la correction par le GEP. Il en résulte que, sauf dans le cas de très faibles épaisseurs de film à faible champ électrique, toutes les situations testées dans ce chapitre ont donné des erreurs sur la charge d'inversion inférieures à 10 %. Notons également que cette universalité de la correction par le potentiel effectif de type Pearson, dans le sens ou cette correction s'adapte à différentes architectures sous différents régimes de polarisation …, est essentiellement due au choix judicieux de calibrage des distributions Pearson IV en fonction du champ électrique local dans la direction du confinement.

En conclusion, grâce à la formulation originale du potentiel effectif de type Pearson présentée dans ce chapitre, d'un point de vue électrostatique, les effets de confinement quantique sont désormais correctement reproduits tout au long du film de silicium, et ceci pour un coût en temps de calcul raisonnable. Cette correction quantique peut donc être utilisée pour la simulation Monte-Carlo avec effets de confinement quantique de dispositifs de taille nanométrique. Ceci fait l'objet du quatrième et dernier chapitre de ce manuscrit.

Chapitre 4

Analyse du transport électronique par simulation Monte-Carlo avec effets de confinement quantique

La correction d'un code Monte-Carlo par le potentiel effectif de type Pearson a été montrée comme valide pour reproduire correctement les effets de confinement quantique sur une large gamme de dispositifs à double-grille mais aussi sur des architectures comme les transistors sur silicium massif ou SOI.

Le quatrième et dernier chapitre s'intéresse à la simulation Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson d'un dispositif double-grille de taille nanométrique. Dans une première partie, étant donné que jusqu'à présent nous nous sommes essentiellement concentrés sur les effets de confinement quantique dans le canal, nous présentons la manière dont les zones de source et drain sont traitées pour prendre en compte le confinement. Dans une deuxième partie nous explicitons l'étendue en deux dimensions de la correction par le potentiel effectif, utile à la simulation de dispositifs de taille nanométrique. Enfin, la troisième partie présente l'étude détaillée du transport électronique avec effets de confinement quantique dans un dispositif double-grille de 20 nm de longueur de canal et 8 nm d'épaisseur de film. Des comparaisons entre des résultats issus de simulations Monte-Carlo semi-classique, de simulations Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson mais également d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger sont présentées et analysées.

CHAPITRE 4 ANALYSE DU TRANSPORT ELECTRONIQUE PAR SIMULATION MONTE-CARLO AVEC EFFETS DE CONFINEMENT QUANTIQUE

4.1 Traitement du régime de bande plate par le Potentiel Effectif de type Pearson 147
4.1.1 Difficulté de la prise en compte du confinement dans les régimes de bande plate par l'approche du Potentiel Effectif de type Pearson 147
4.1.2 Différenciation des régimes 148
4.1.3 Traitement des régimes de bande plate 148
4.2 Correction par le potentiel effectif en 2D 151
4.2.1 Représentation du paquet d'ondes dans la direction du transport 151
4.2.2 Calcul du potentiel effectif en 2D 152
4.2.3 Conditions aux limites aux électrodes de source et de drain 152
4.3 Application 153
4.3.1 Dispositif simulé 153
4.3.2 Résultats 153
4.3.2.1 Caractéristiques électriques 153
4.3.2.2 Analyse à faible polarisation de drain 157
4.3.2.3 Analyse à forte polarisation de drain 160
4.3.3 Comparaisons avec une méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger 161
4.4 Conclusion 169

Chapitre 4

Analyse du transport électronique par simulation Monte-Carlo avec effets de confinement quantique

Dans le chapitre précédent, la capacité du potentiel effectif de type Pearson à reproduire correctement les effets de confinement quantique dans le canal en régime d'inversion (champs effectifs compris entre 10^5 V.cm^{-1} et 10^6 V.cm^{-1}) d'un transistor MOSFET a été démontrée. Cependant, la simulation de dispositifs requiert non seulement le traitement quantique du transport dans le canal en régime d'inversion mais également dans les zones de source et drain en contact avec de l'oxyde. En effet, la présence de cette interface influence notamment la distribution de charge dans le semi-conducteur. Le calcul du potentiel effectif dans ces zones de source et drain fait l'objet du prochain paragraphe.

4.1 Traitement du régime de bande plate par le Potentiel Effectif de type Pearson

4.1.1 Difficulté de la prise en compte du confinement dans les régimes de bande plate par l'approche du Potentiel Effectif de type Pearson

Dans le cas d'un traitement classique, les potentiels dans la direction du confinement des zones de source ou drain ne présentent aucune courbure, ils sont plats. En chaque point de ces profils de potentiel, le champ électrique dans la direction du confinement est donc nul. La correction par le potentiel effectif de type Pearson a été mise au point de telle sorte que le paquet d'ondes d'une particule située en champ électrique nul dans la direction du confinement soit une distribution gaussienne (asymétrie nulle et aplatissement égal à 3) centrée au milieu du film de silicium. Ainsi, dans le cas d'une bande plate, quelle que soit la position de la particule, son paquet d'ondes sera une distribution gaussienne centrée au milieu du film. Il en résulte que le potentiel effectif de type Pearson aura la même valeur en tout point du film de silicium. Il sera donc équivalent à une bande plate et

n'autorisera aucune répulsion. Par conséquent, la correction par le potentiel effectif de type Pearson présentée dans le chapitre 3 pour reproduire les effets de confinement quantique dans la direction transverse au transport n'est pas adaptée aux régimes de bande plate et plus particulièrement aux zones de source et drain d'un transistor MOSFET. Ces régimes de bande plate doivent donc être traités d'une manière spécifique. Mais commençons d'abord par les différencier des autres régimes.

4.1.2 Différenciation des régimes

Nous venons de le dire, le régime de bande plate (en particulier les zones de source et drain) pour les effets de confinement quantique doit être traité différemment du régime d'inversion (typiquement la zone de canal). Pour distinguer ces régimes, bien que les effets de confinement dont ils font l'objet soient dus à la présence du même oxyde de grille, les conditions aux limites à l'interface oxyde / silicium ou *padding* (cf. chapitre 2 paragraphe 2.1.3) sont différenciées selon que la zone d'oxyde est en contact avec l'électrode de grille ou non. On définit ainsi un "*padding* oxyde contacté" lorsque l'oxyde est en contact avec l'électrode de grille, ce qui en général correspond à la zone de canal, et un "*padding* oxyde non contacté" lorsque l'oxyde n'est pas en contact avec l'électrode de grille, ce qui correspond généralement aux zones de source et drain. Notons que pour ces deux *padding* d'oxyde les conditions aux limites appliquées sur le potentiel de Poisson sont identiques c'est-à-dire que $V_{ox} = V_P - E_B$ avec $E_B = 3{,}1$ eV dans le cas d'un oxyde en SiO_2. Seuls les paramètres de la distribution Pearson IV diffèrent. Ainsi pour toutes les zones en contact avec un oxyde contacté, vérifiant dans le sens oxyde-silicium un potentiel décroissant et non bruité (pour cela le nombre de changement de signe du champ électrique est relevé), les paramètres des distributions Pearson IV sont calculés tel qu'explicité dans le chapitre précédent. Par contre, pour toutes les autres zones, c'est-à-dire les zones en contact avec de l'oxyde non contacté ou en contact avec de l'oxyde contacté mais présentant une polarisation de grille telle que le champ électrique soit nul ou en régime inversé par rapport à un régime d'inversion, ce sont les paramètres de la Pearson IV explicités dans le paragraphe suivant qui sont appliqués. La différenciation des zones de *padding* établie selon la présence d'un contact entre l'oxyde et l'électrode de grille ou non est donc un facteur permettant de dissocier le régime de bande plate du régime d'inversion et donc de les traiter chacun de manière adaptée.

4.1.3 Traitement des régimes de bande plate

Pour traiter les zones de source ou de drain une solution possible est celle présentée ci-dessous. L'idée de la correction de bande plate est de conserver une distribution gaussienne caractérisant le régime de bande plate mais de faire évoluer sa position moyenne sur une petite distance entre $x_{interface1} + R_{Pdeb}$ et $x_{interface2} - R_{Pfin}$ en passant par R_{Pmin} avec $R_{Pdeb} = R_{Pfin}$ et $R_{Pmin} = T_{Si}/2$. Ainsi, la Pearson IV en régime de bande plate est définie par :

- ✓ une position moyenne évoluant en fonction de x suivant les équations (3.16) et (3.17) préalablement définies mais avec une valeur à calibrer de $R_{Pdeb} = R_{Pfin}$;

- ✓ un écart-type à calibrer ;
- ✓ une asymétrie nulle ;
- ✓ un aplatissement calculé à partir de l'asymétrie de manière à être minimal (cf. équation (3.13)).

Là encore, les profils de densité de porteurs en régime de bande plate ont été calibrés en 1D à partir de résultats Poisson-Schrödinger 1D sur des épaisseurs de film de 5 et 10 nm. Les équations ainsi définies, régissant l'évolution de R_{Pdeb} et de l'écart-type en fonction de l'épaisseur du film, sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
&\text{Si} \quad T_{Si} \geq 10\,\text{nm} \\
&\quad \text{alors} \quad R_{Pdeb} = R_{Pfin} = 1{,}35\times10^{-9} \\
&\qquad\qquad \sigma_P = 0{,}7\times10^{-9} \\
&\quad \text{sinon} \quad R_{Pdeb} = R_{Pfin} = 3\times10^{-11}\times T_{Si\,(nm)} + 1{,}05\times10^{-9} \\
&\qquad\qquad \sigma_P = 10^{-11}\times T_{Si\,(nm)} + 6\times10^{-10} \\
&\text{Fin Si}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

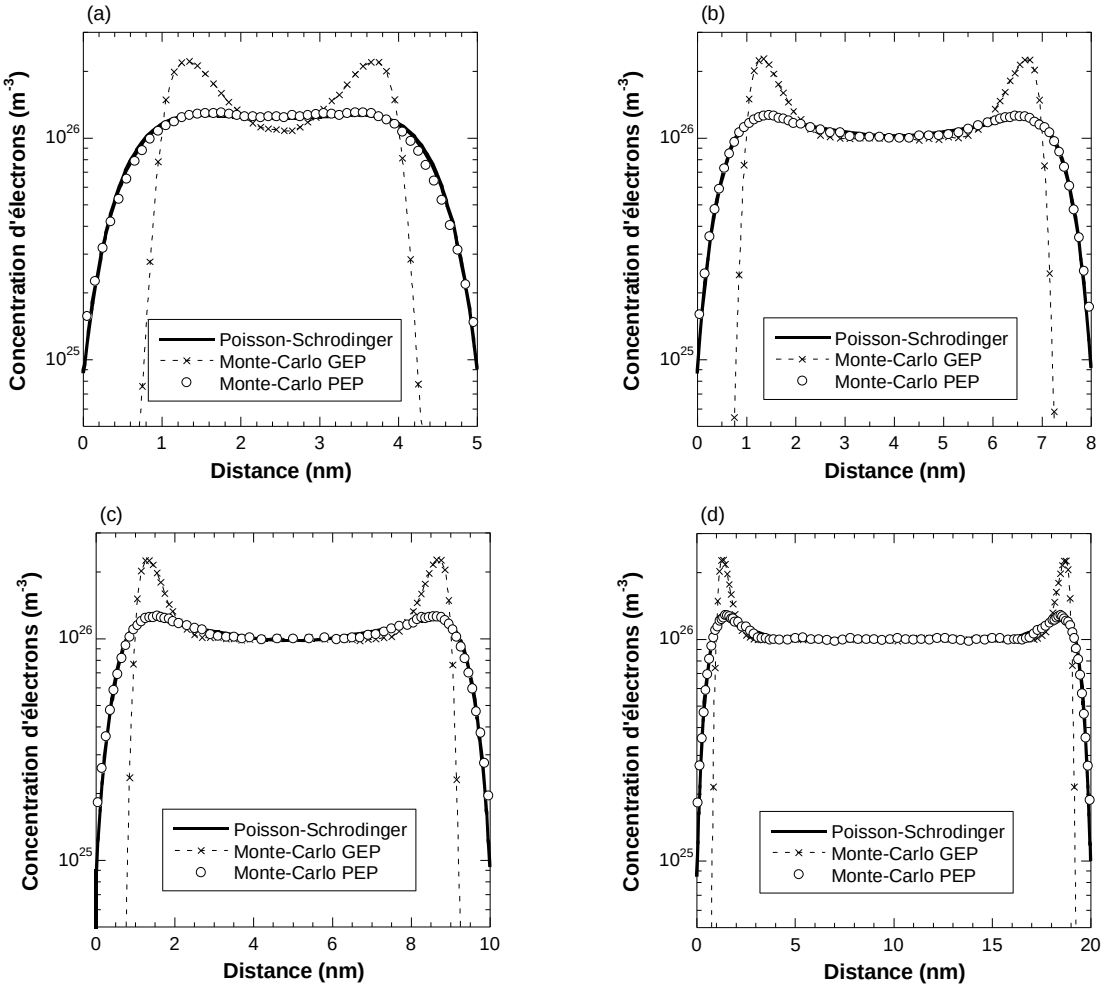


Figure 4.1 : Profils de concentration de porteurs au milieu de la source dans la direction du confinement obtenus par simulations Poisson-Schrödinger, Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP pour T_{Si} = 5 nm (a), T_{Si} = 8 nm (b), T_{Si} = 10 nm (c) et T_{Si} = 20 nm (d). $N_A = 10^{20}$ cm^{-3} et T_{ox} = 1 nm.

La **Figure 4.1** représente les profils de densités de porteurs dans la direction du confinement au milieu de la source de transistors nMOSFETs à double-grille d'épaisseur de film 5, 8, 10 et 20 nm pour des simulations Poisson-Schrödinger 1D et Monte-Carlo corrigé par le GEP et par le PEP. Pour chacune des épaisseurs de film, le profil de la densité de porteurs issu d'une simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP reproduit correctement les résultats obtenus par simulation Poisson-Schrödinger. Précisons ici que cette correction de bande plate est celle qui a été utilisée dans le cas des dispositifs SOI pour traiter la zone de canal en contact avec l'oxyde enterré (cf. paragraphes 3.3.6.2 et 3.5.3). En effet, l'oxyde enterré étant un oxyde non contacté, il est tout à fait adapté d'utiliser cette correction quantique qui, comme nous l'avons montré, donne de bons résultats.

Intéressons-nous désormais à l'étude d'une jonction source / canal afin d'observer la transition entre la correction par le potentiel effectif de type Pearson pour le régime de bande plate et le régime d'inversion. Pour cela, la **Figure 4.2**(a) représente la cartographie du potentiel effectif de type Pearson 1D dans un dispositif double-grille (cf. **Figure 3.28**) en régime d'inversion à proximité d'une telle jonction. De plus, des profils de concentration de porteurs obtenus par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP 1D et par simulation Poisson-Schrödinger 1D pour des coupes effectuées dans la direction du transport et représentées sur la cartographie sont tracés sur la **Figure 4.2**(b).

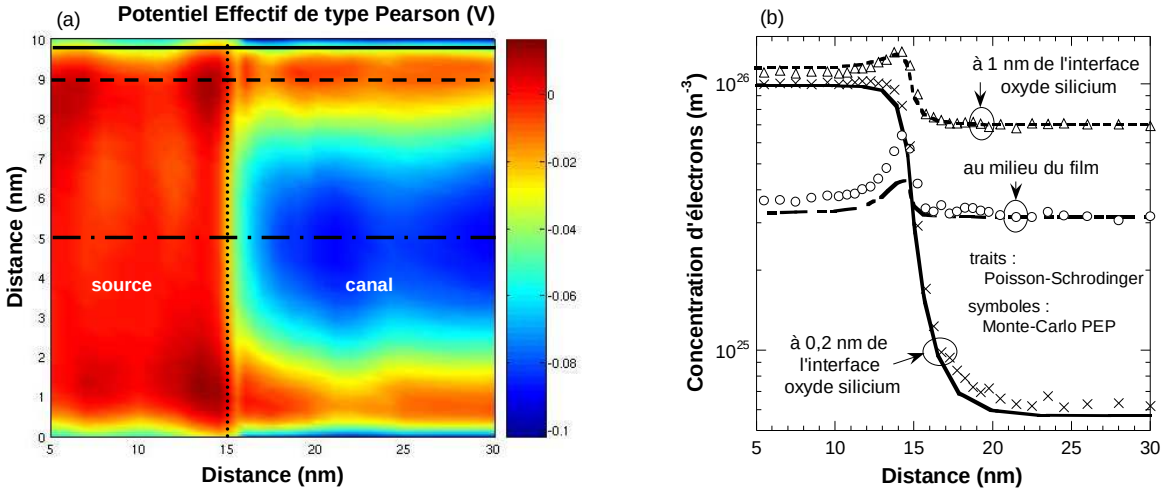


Figure 4.2 : Cartographie du potentiel effectif de type Pearson instantané (a) à proximité de la jonction source / canal et profils de concentration de porteurs (b) obtenus par simulation Poisson-Schrödinger 1D (traits) et Monte-Carlo corrigé par le PEP 1D (symboles) dans la direction du transport pour les coupes indiquées sur la cartographie. T_{Si} = 10 nm, L_G = 200 nm, T_{ox} = 1 nm, E_{eff} = 10^6 V.cm^{-1}, V_{DS} = 0 V.

Les résultats présentés ci-dessus permettent de vérifier qu'en une dimension, la jonction entre les corrections par le potentiel effectif de type Pearson dans la source (régime de bande plate) et dans le canal (régime d'inversion) ne présente pas de discontinuité majeure. Notons tout de même un léger artefact du potentiel effectif instantané de type Pearson à la jonction source / canal à hauteur du canal de conduction qui, a priori, ne devrait pas être critique. De plus, un très bon accord entre les profils de concentration de porteurs donnés par une simulation Poisson-Schrödinger 1D et Monte-Carlo corrigé par le PEP 1D sont observés et ceci en particulier au niveau du canal de conduction (à

environ 1 nm de l'interface) et au milieu du film. Nous validons ainsi la correction de bande plate présentée ci-dessus pour la simulation de dispositifs.

Enfin, rappelons que cette correction est également utilisée dans les zones en contact avec de l'oxyde contacté, c'est-à-dire typiquement le canal, lorsque celui-ci présente un potentiel plat ou de courbure opposée à celle du régime d'inversion. Toutefois, cette correction n'est effectuée que sur quelques itérations puisque le confinement induit par la correction par le PEP en régime de bande plate a pour conséquence de donner au potentiel de Poisson une courbure similaire à celle d'un régime d'inversion. Ainsi, après quelques itérations, la correction par le PEP en régime d'inversion est de nouveau appliquée.

Une solution pour prendre en compte le confinement dans le régime de bande plate vient d'être présentée. Ainsi, par la correction en potentiel effectif de type Pearson étendue au régime de bande plate, le confinement quantique est reproduit précisément en 1D dans toutes les zones d'un dispositif MOSFET. Cependant, pour la simulation de dispositifs de taille nanométrique avec du transport électronique en 2D, il est utile d'étendre cette correction quantique en 2D. Ceci fait l'objet du prochain paragraphe.

4.2 Correction par le Potentiel Effectif en 2D

4.2.1 Représentation du paquet d'ondes dans la direction du transport

Afin d'étendre les corrections de type potentiel effectif en 2 dimensions, il est nécessaire de définir une représentation du paquet d'ondes d'une particule dans la direction du transport "y" ou direction source-drain. Dans cette direction, il n'y a pas la présence d'une barrière d'énergie abrupte comme c'est le cas à l'interface oxyde / silicium. On choisit donc de représenter le paquet d'ondes de la particule par une distribution gaussienne [Ferry 00b, Palestri 03]. Pour déterminer l'étalement σ_y de cette distribution, on se reporte aux expressions données par Feynman dans le chapitre 2 :

$$\sigma = \sqrt{\beta\hbar^2/12m} \tag{4.2}$$

On définit σ_y comme étant l'écart-type σ lorsque $m = m_t = 0{,}19m_0$ avec m_0 la masse d'un électron. On obtient alors $\sigma_y = 1{,}13$ nm. Ainsi, dans toute la suite de cette étude, pour les corrections par le GEP et par le PEP, le paquet d'ondes de la particule dans la direction du transport est représenté par une distribution gaussienne d'écart-type $\sigma_y = 1$ nm [Ferry 00b]. Les expressions des potentiels effectifs de type Gaussien et Pearson en 2D sont donc les suivantes :

$$GEP(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\iint V_P(x',y')\times\exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{2\sigma_x^2}-\frac{|y-y'|^2}{2\sigma_y^2}\right)dx'dy' \tag{4.3}$$

$$PEP(x,y)=\frac{1}{\sigma_y\sqrt{2\pi}}\int\int V_P(x',y')\times PearsonIV\left(R_p(E_x,T_{Si})-x'\right)\times\exp\left(-\frac{|y-y'|^2}{2\sigma_y^2}\right)dx'dy' \quad (4.4)$$

4.2.2 Calcul du potentiel effectif en 2D

D'un point de vue numérique, le calcul du potentiel effectif en 2D ne pose aucun souci. En effet, un des critères pour le choix des méthodes de calcul du potentiel effectif en 1D était que cette méthode devait facilement être généralisable en 2D voire 3D. Le potentiel effectif de type gaussien est ainsi calculé en 2D par transformée de Fourier et le potentiel effectif de type Pearson par méthode d'intégration de Gauss.

Rappelons que l'un des intérêts des potentiels de correction quantique est de ne pas être limité à une correction quantique unidimensionnelle mais de pourvoir étendre cette correction en plusieurs dimensions sans difficulté majeure. Ceci sera particulièrement important dans le cas d'architectures présentant des effets de confinement quantique en plusieurs dimensions comme les architectures multi-grilles.

4.2.3 Conditions aux limites aux électrodes de source et de drain

Dans une approche classique, les conditions aux limites aux électrodes de source et drain pour la résolution de l'équation de Poisson imposent un potentiel uniforme, dont la valeur est celle de la polarisation appliquée sur l'électrode en question, et une répartition uniforme de la densité de porteurs sur toute l'épaisseur du film de manière à assurer la neutralité électronique. Cependant, dans le cas de la présence d'oxyde non seulement sur la zone de canal mais aussi sur les zones de source et drain et dans le cas d'un traitement quantique, ces conditions aux limites ne sont plus adaptées. A notre connaissance, dans la littérature, il n'est fait aucune mention de cette difficulté ni de la manière dont elle est résolue. Dans ce manuscrit, la procédure suivante a été adoptée. Le dispositif est mis à l'équilibre quantique avec les conditions aux limites du cas classique. Ensuite, les valeurs du potentiel dans la direction du confinement au milieu du drain, c'est-à-dire à une position où les conditions aux limites classiques n'influent pas sur le résultat quantique, sont imposées comme conditions aux limites sur le drain pour la résolution de l'équation de Poisson. Les conditions aux limites sur la source sont alors identiques à celles du drain mais diminuées de la tension de polarisation entre la source et le drain V_{DS}. Quelques itérations sont alors effectuées jusqu'à l'obtention d'un nouvel état d'équilibre.

Appliquons désormais cette correction par le potentiel effectif de type Pearson en 2D à la simulation de dispositifs dans le régime nanométrique.

4.3 Application

4.3.1 Dispositif simulé

Le dispositif double-grille simulé est représenté sur la **Figure 4.3**. Il est caractérisé par une longueur de canal L_G = 20 nm, une épaisseur de film de silicium T_{Si} = 8 nm et une épaisseur d'oxyde T_{ox} = 1,1 nm.

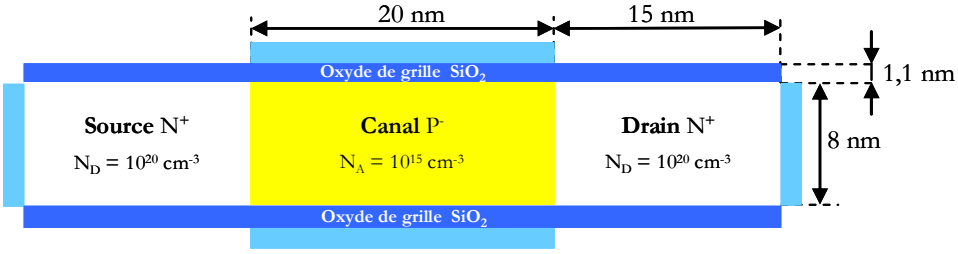


Figure 4.3 : Schéma du dispositif double-grille simulé.

Par la suite, seul ce dispositif est étudié. Il est à préciser que, pour tous les résultats présentés dans ce chapitre, la rugosité de surface n'est pas intégrée. Uniquement les interactions avec les phonons et les impuretés sont prises en compte.

Dans un premier temps nous nous intéressons à comparer les résultats obtenus par simulation Monte-Carlo semi-classique et Monte-Carlo corrigé par le PEP dans le but d'évaluer l'impact des effets de confinement quantique sur le transport électronique. Pour cela, nous présentons les caractéristiques électriques obtenues par chacun des modèles. Egalement, nous analysons précisément un résultat à faible polarisation de drain et un résultat à forte polarisation de drain en effectuant des comparaisons de profils de potentiel et de densité de porteurs. Dans un deuxième temps, nos résultats de simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP sont comparés à des résultats issus d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger afin de conforter la validation de la correction par le PEP.

4.3.2 Résultats

4.3.2.1 Caractéristiques électriques

La caractéristique du courant de drain en fonction de la tension de grille $I_{DS}(V_{GS})$ pour une polarisation de drain de 0,05 V est présentée sur la **Figure 4.4** en échelle linéaire (a) et semi-logarithmique (b) pour des simulations Monte-Carlo semi-classique (MC classique) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (MC PEP2D). Tout d'abord, on observe un courant quantique inférieur au courant classique sauf dans le cas des très faibles polarisations de grille. Dans toute cette partie, le courant qualifié de « quantique » par abus de langage fait référence au courant obtenu par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP2D. Il en est de même pour la charge d'inversion, la vitesse moyenne, la tension de seuil, les densités de porteurs ou encore les potentiels.

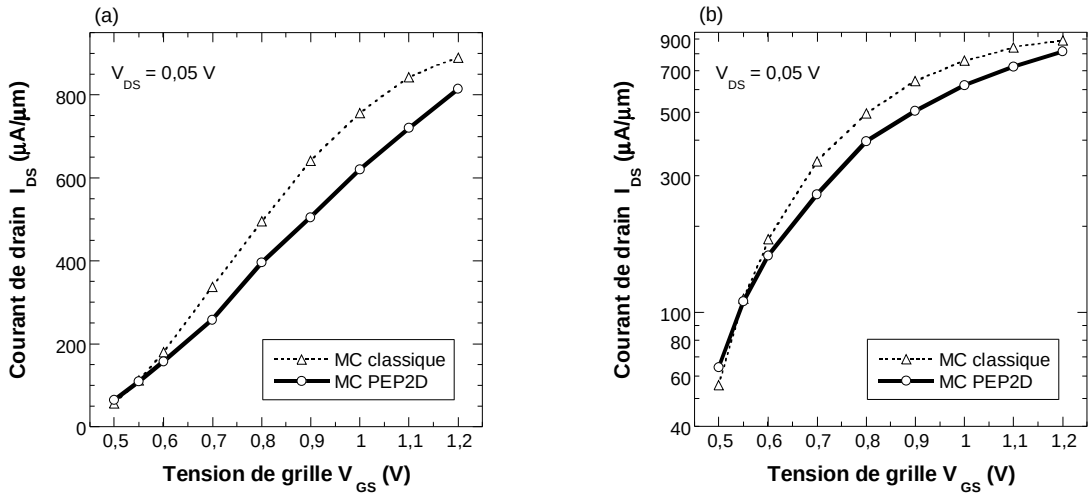


Figure 4.4 : Caractéristiques $I_{DS}(V_{GS})$ pour V_{DS} = 0,05 V en échelle linéaire (a) et en échelle semi-logarithmique (b) pour des simulations Monte-Carlo semi-classique (MC classique) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (MC PEP2D).

A V_{GS} = 1,2 V le courant quantique est environ de 8 % inférieur au courant classique. Afin de donner des éléments de compréhension quant à cette diminution du courant de drain, nous avons extrait la charge d'inversion ainsi que la vitesse moyenne dans la direction du transport tout le long du dispositif. La charge d'inversion et la différence relative des charges d'inversion sont tracées sur la **Figure 4.5** à V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V. Sur la **Figure 4.6** sont représentées la vitesse moyenne des porteurs dans la direction du transport ainsi que la différence relative de ces vitesses pour les mêmes polarisations. Les calculs des différences relatives considèrent le cas classique comme cas de référence.

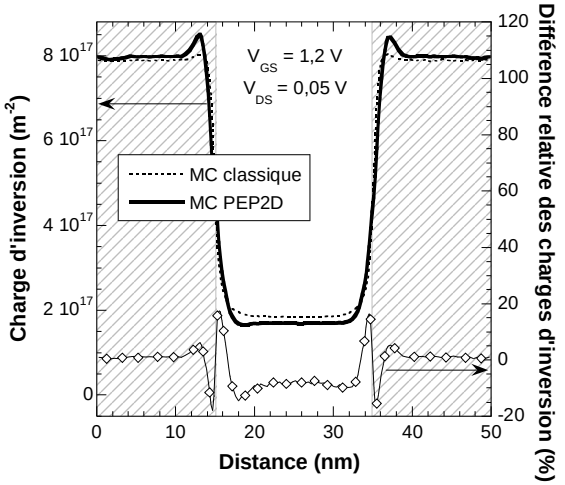


Figure 4.5 : Charge d'inversion le long du dispositif et différence relative des charges d'inversion pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

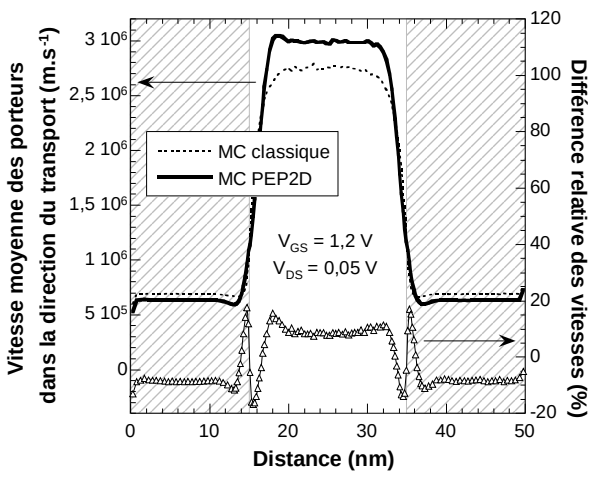


Figure 4.6 : Vitesse moyenne des porteurs dans la direction du transport et différence relative des vitesses pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

Sur la **Figure 4.6**, on observe une vitesse quantique dans le canal en moyenne supérieure à la vitesse classique accréditant un courant quantique supérieur au courant classique ; ce qui n'est pas le cas. Il semble donc que la réduction de charge d'inversion observée au milieu du canal, soit majoritairement responsable de la diminution de courant. Notons néanmoins que près du haut de la

barrière d'énergie, située à environ 1 nm de la jonction source / canal, nous pouvons observer à la fois une réduction de la vitesse et une augmentation de la charge d'inversion, phénomène qui influence aussi certainement le courant de drain.

Venons-en désormais au cas des très faibles polarisations de grille. Nous expliquons l'obtention d'un courant quantique de valeur supérieure au courant classique de la manière suivante. A de telles polarisations la correction par le PEP induit une surestimation de la charge d'inversion. En effet, pour un tel dispositif non polarisé sur le drain, une polarisation de grille de V_{GS} = 0,50 V induit un champ effectif (cf. équation (3.21)) de 2.10^4 V.cm^{-1}. Or, pour une épaisseur de film de 8 nm et un champ effectif de 1.10^5 V.cm^{-1}, la **Figure 3.33** indique une surestimation de la charge d'inversion de l'ordre de 7 %. Il est donc fort probable qu'à plus faible champ effectif cette surestimation soit encore plus importante et soit en partie responsable du courant de drain quantique supérieur au classique. Comme pressenti dans le chapitre 3, on touche ici du doigt l'une des limites de la correction par le PEP à très faible champ effectif pour les faibles épaisseurs de film. En effet, en son état, cette correction peut être considérée comme réaliste uniquement pour des polarisations de grille au minimum supérieures à la tension de seuil. Néanmoins, cette correction n'a pas pour objet d'étudier le fonctionnement du transistor en régime sous le seuil mais plutôt en régime de forte inversion. Elle est dans ce cas tout à fait adaptée.

Enfin, la méthode du maximum de la transconductance donne une valeur de tension de seuil d'environ 0,48 V dans les cas classique et quantique. La prise en compte des effets quantiques, en première approche, ne modifie donc pas ou peu la tension de seuil. Ceci s'explique notamment par le fait que le film de silicium est suffisamment épais et quasiment non dopé.

En ce qui concerne la caractéristique électrique du courant de drain en fonction de la tension de drain $I_{DS}(V_{DS})$, on choisit de travailler à $V_{GS} - V_T = V_{DS} = V_{DD}$ = 0,7 V en prenant pour valeur de la tension de seuil V_T = 0,5 V. Ainsi, pour les mêmes simulations que précédemment, la caractéristique $I_{DS}(V_{DS})$ pour une polarisation de grille de 1,2 V est présentée sur la **Figure 4.7** en échelle linéaire.

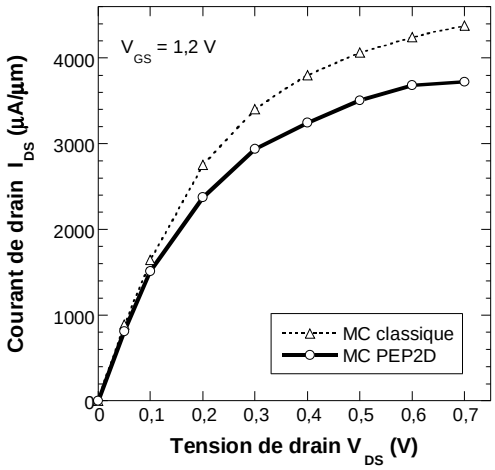


Figure 4.7 : Caractéristiques $I_{DS}(V_{DS})$ pour V_{GS} = 1,2 V pour des simulations Monte-Carlo semi-classique (MC classique) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (MC PEP2D).

On observe un courant de drain quantique inférieur en moyenne de 8 %, respectivement 14 %, au courant classique pour une polarisation de drain inférieure ou égale à 0,1 V, respectivement supérieure ou égale à 0,2 V. De même que précédemment, traçons dans les cas classique et quantique à V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V la charge d'inversion sur la **Figure 4.8** et la vitesse moyenne des porteurs dans la direction du transport sur la **Figure 4.9** avec leurs différences relatives.

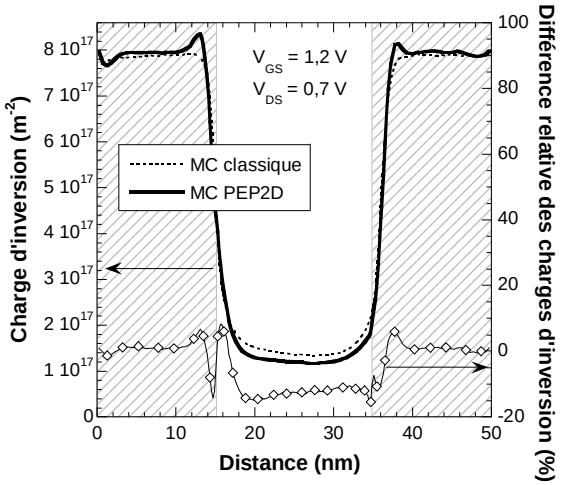


Figure 4.8 : Charge d'inversion le long du dispositif et différence relative des charges d'inversion (la charge de référence est celle issue de la simulation Monte-Carlo semi-classique) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

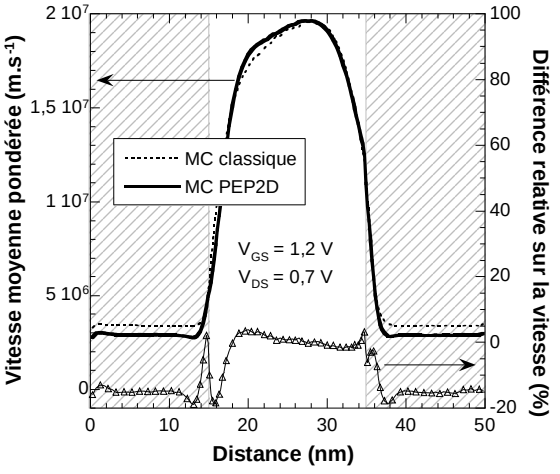


Figure 4.9 : Vitesse moyenne des porteurs dans la direction du transport et différence relative des vitesses moyennes (la vitesse de référence est celle issue de la simulation Monte-Carlo semi-classique) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

Contrairement au cas des faibles polarisations de drain, tout au long du canal sauf à proximité de la jonction source / canal, les vitesses classique et quantique sont sensiblement équivalentes alors qu'une charge d'inversion quantique bien inférieure à la charge d'inversion classique est observée. De plus, comme dans le cas des faibles polarisations de drain, en haut de la barrière d'énergie (à 1 nm de la jonction source / canal), on observe une vitesse quantique bien inférieure à la vitesse classique et une augmentation dans une moindre mesure de la charge d'inversion. Ces deux contributions expliquent en partie la diminution de courant de drain à V_{DS} = 0,7 V.

Venons-en désormais à l'analyse détaillée d'un résultat à faible polarisation de drain puis d'un résultat à forte polarisation de drain. Pour cela différentes coupes de la densité de porteurs et du potentiel dans les directions du transport et du confinement sont présentées.

4.3.2.2 Analyse à faible polarisation de drain

A forte polarisation de grille V_{GS} = 1,2 V et faible polarisation de drain V_{DS} = 0,05 V, la cartographie du PEP2D instantané extraite à l'équilibre quantique est représentée sur la **Figure 4.10**. Dans toute cette partie, on entend par « équilibre quantique » l'équilibre obtenu par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP2D. Des coupes du potentiel effectif dans la direction du confinement au milieu de la source et au milieu du canal sont tracées sur la **Figure 4.11**.

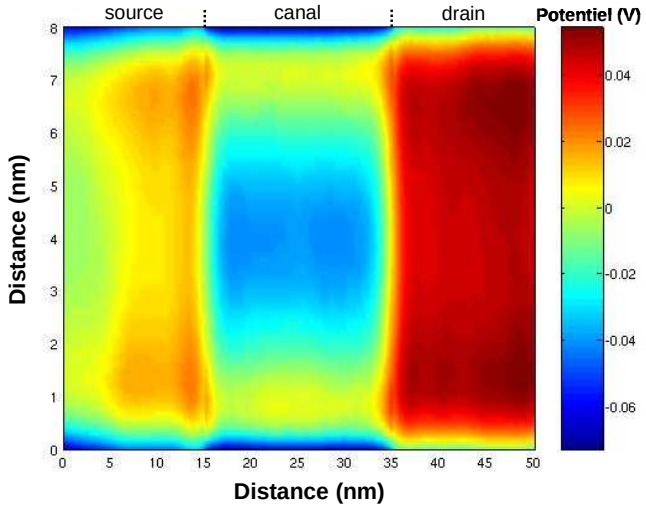


Figure 4.10 : Cartographie du potentiel effectif de type Pearson 2D pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

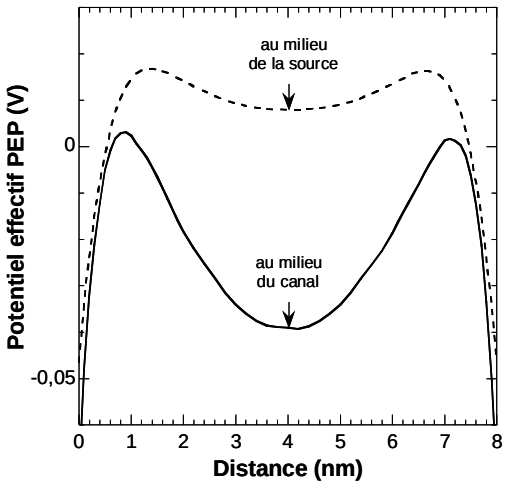


Figure 4.11 : Potentiel effectif de type Pearson extrait dans la direction du confinement au milieu de la source et au milieu du canal pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

Tout le long du dispositif, le potentiel effectif est très nettement répulsif aux interfaces avec les oxydes de grille. Ceci est clairement mis en évidence par les coupes effectuées dans la direction du confinement au milieu de la source et au milieu du canal. Dans le canal, le potentiel effectif est maximal à environ 0,8 nm de chacune des interfaces, ce qui laisse présager des canaux de conduction à ces positions. Enfin, comme évoqué dans le paragraphe 4.1.3, on observe un léger artefact du potentiel effectif dans la direction du transport au niveau des jonctions source / canal et canal / drain induit par une différence de modélisation des zones de source et drain par rapport au canal. Cependant, cet artefact ne devrait pas être critique et les modélisations spécifiques de chacune des zones du dispositif présentent tout de même une excellente continuité.

Pour les mêmes polarisations, les cartographies de la densité de porteurs aux équilibres classique (a) et quantique (b) sont tracées sur la **Figure 4.12**. De plus, la **Figure 4.13** représente des coupes de la densité de porteurs effectuées à partir de ces cartographies : une coupe dans la direction du confinement au milieu du canal (a) et des coupes dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique (à environ 0,8 nm de l'interface oxyde / silicium) et au milieu du film de silicium (b).

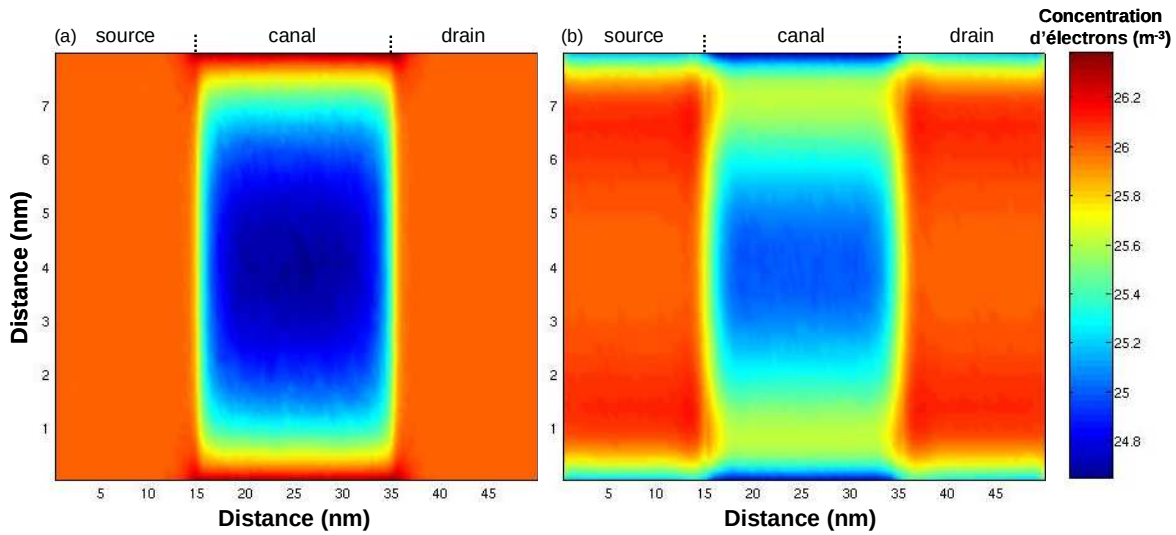


Figure 4.12 : Cartographies de la densité électronique obtenues par simulations Monte-Carlo semi-classique (a) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (b) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

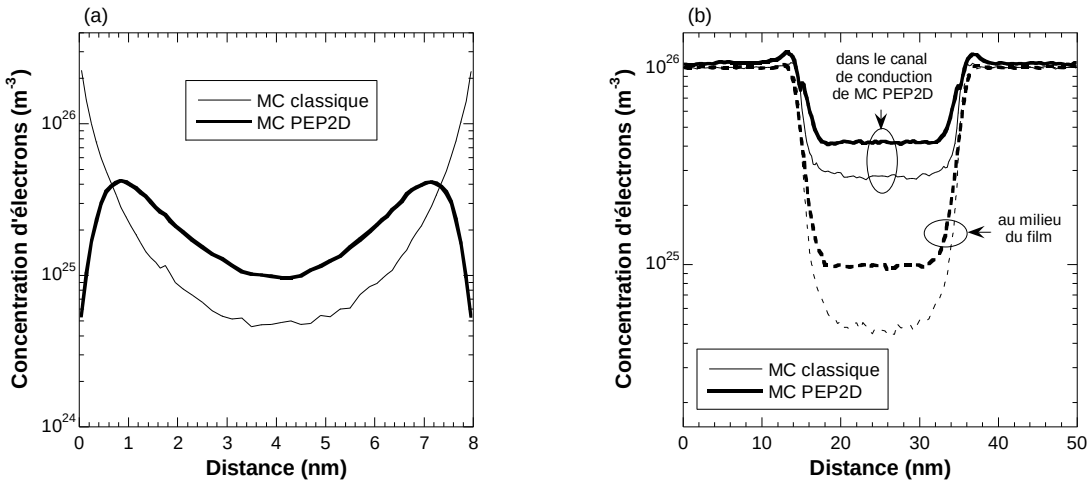


Figure 4.13 : Profil de la concentration de porteurs extrait dans la direction du confinement au milieu du canal (a) et dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film (b) obtenus par simulations Monte-Carlo semi-classique (MC classique) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (MC PEP2D) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

Le traitement quantique du transport conduit à la formation de deux canaux de conduction localisés à environ 0,8 nm de chacune des interfaces oxyde / silicium. On retrouve, dans la direction du transport et à hauteur des canaux de conduction, des artefacts induits par le potentiel effectif. Cependant, la coupe dans le canal de conduction quantique montre que leur impact semble négligeable sur le transport électronique.

Les cartographies du potentiel de Poisson associées aux précédentes densités de porteurs sont tracées sur la **Figure 4.14**. La **Figure 4.15** représente des coupes de potentiel effectuées à partir de ces cartographies : une coupe dans la direction du confinement au milieu du canal (a) et des coupes dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film de silicium (b).

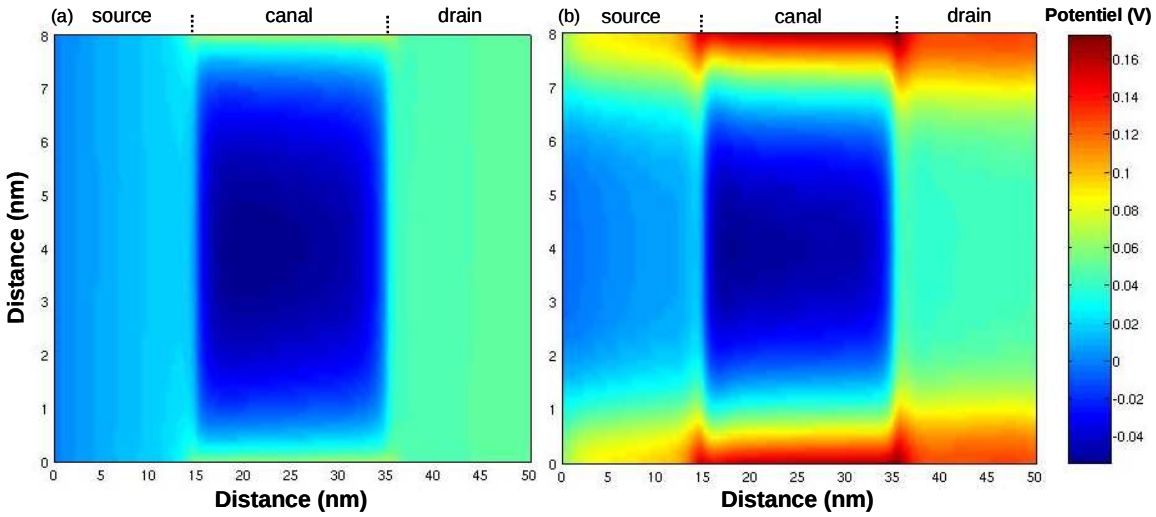


Figure 4.14 : Cartographies du potentiel de Poisson obtenues par simulations Monte-Carlo semi-classique (a) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (b) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

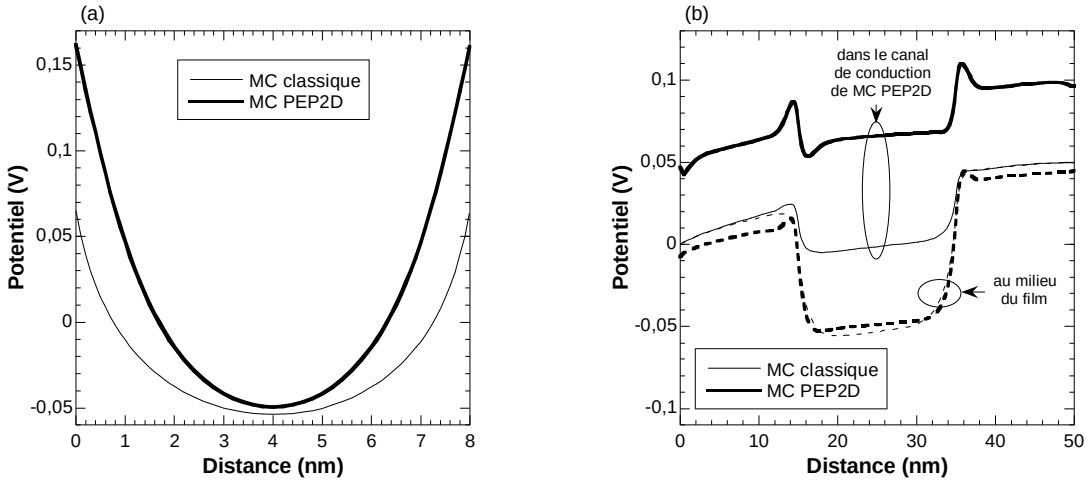


Figure 4.15 : Potentiel de Poisson extrait dans la direction du confinement au milieu du canal (a) et dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film (b) obtenus par simulations Monte-Carlo semi-classique (MC classique) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (MC PEP2D) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

Dans le canal, le potentiel quantique est représentatif du confinement quantique aux interfaces oxyde / silicium : le potentiel quantique présente une courbure supérieure à celle du potentiel classique. Notons également que les potentiels quantiques dans les zones de source et de drain présentent une courbure non nulle, ce qui n'est pas le cas des potentiels classiques. Ceci est la conséquence naturelle de la prise en compte des effets de confinement quantique dus à la présence d'une barrière d'énergie induite par l'oxyde de grille recouvrant ces zones.

Pour finir, toutes les cartographies présentées dans ce paragraphe nous permettent également de valider le choix et la mise en œuvre des conditions aux limites imposées aux électrodes de source et de drain dans la correction par le PEP2D (cf. paragraphe 4.2.3). On peut tout de même noter

quelques petites variations de la densité de porteurs ou du potentiel de Poisson à proximité des électrodes de source et de drain induites par ces conditions aux limites non parfaites. Cependant, ces petites variations ont essentiellement lieu à proximité des interfaces avec les oxydes de grille et sont loin d'être critiques pour le transport électronique. Précisons par ailleurs qu'à notre connaissance la littérature ne fait aucune mention de l'application de telles conditions aux limites sur des corrections de type potentiel effectif. Effectuons désormais une étude similaire à celle présentée ci-dessus mais cette fois-ci dans le cas d'une forte polarisation de drain.

4.3.2.3 Analyse à forte polarisation de drain

A forte polarisation de grille $V_{GS} = 1{,}2$ V et forte polarisation de drain $V_{DS} = 0{,}7$ V, une représentation en trois dimensions du potentiel effectif de type Pearson 2D instantané à l'équilibre quantique est tracée sur la **Figure 4.16**. De plus, des coupes du potentiel effectif dans la direction du confinement dans le canal à 2 nm des jonctions source / canal et canal / drain sont extraites sur la **Figure 4.17**.

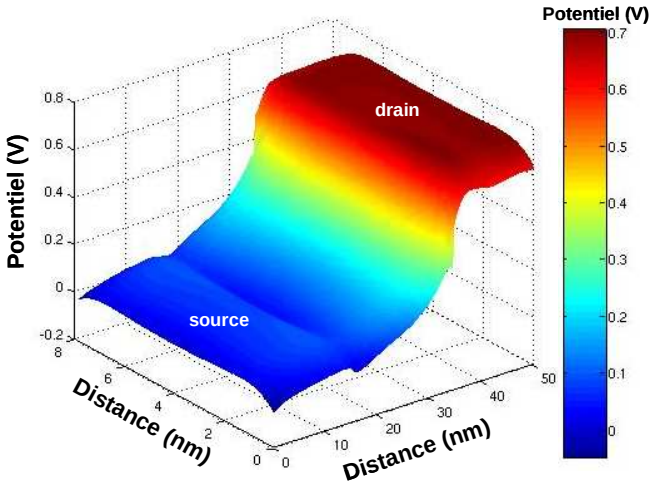


Figure 4.16 : Représentation en trois dimensions du potentiel effectif de type Pearson 2D à l'équilibre quantique pour $V_{GS} = 1{,}2$ V et $V_{DS} = 0{,}7$ V.

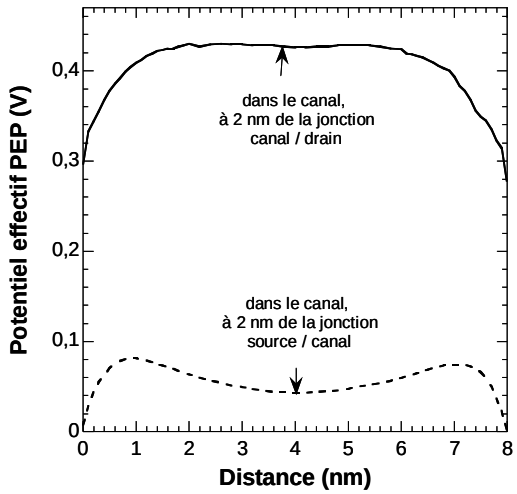


Figure 4.17 : Potentiel effectif de type Pearson extrait dans la direction du confinement dans le canal à 2 nm des jonctions source / canal et canal / drain pour $V_{GS} = 1{,}2$ V et $V_{DS} = 0{,}7$ V.

Bien que ce ne soit pas évident à discerner sur la représentation en trois dimensions du potentiel effectif du fait de la forte disparité des valeurs de potentiel entre la source et le drain, le potentiel effectif est répulsif à proximité des interfaces avec l'oxyde de grille tout le long du dispositif. Ceci est notamment mis en évidence sur les coupes effectuées dans la direction du confinement. Notons par ailleurs que ces coupes présentent une légère dissymétrie en particulier à proximité du drain, ce qui n'est pas très inquiétant puisqu'il faut rappeler que le potentiel effectif présenté ici est instantané. On observe à proximité de la source deux pics marqués du potentiel effectif alors qu'à proximité du drain

seulement un lobe est observé. Etudions les conséquences d'un tel potentiel effectif sur la densité de porteurs.

Pour les mêmes polarisations que précédemment, les cartographies de la densité de porteurs aux équilibres classique (a) et quantique (b) sont tracées sur la **Figure 4.18**. De plus, la **Figure 4.19** représente des coupes de la densité de porteurs effectuées à partir de ces cartographies : des coupes dans la direction du confinement dans le canal à 2 nm de la jonction source / canal et à 2 nm de la jonction canal / drain (a) et des coupes dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film de silicium (b).

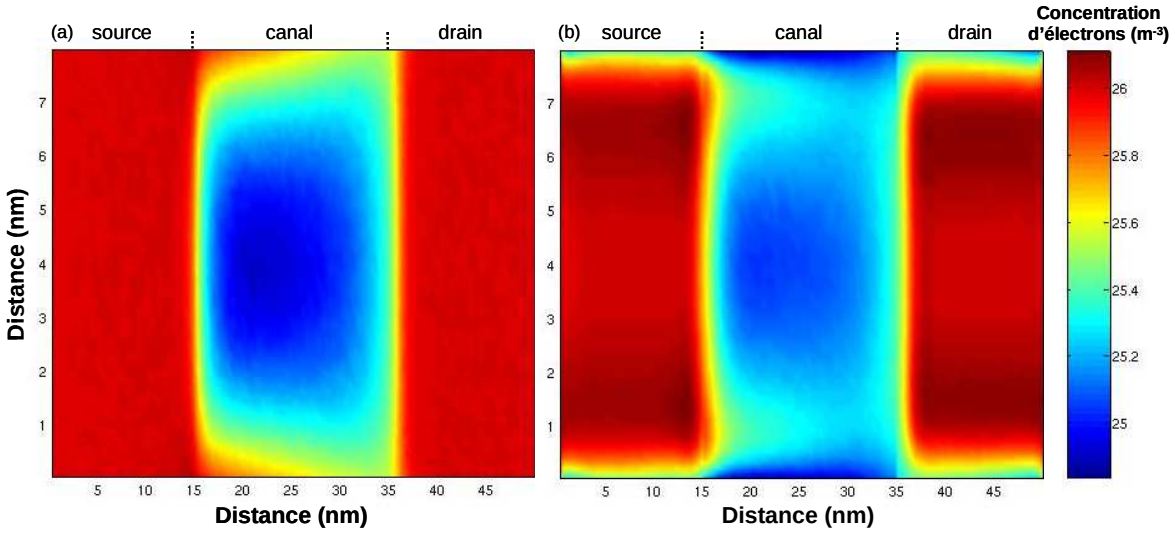


Figure 4.18 : Cartographies de la densité électronique obtenues par simulations Monte-Carlo semi-classique (a) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (b) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

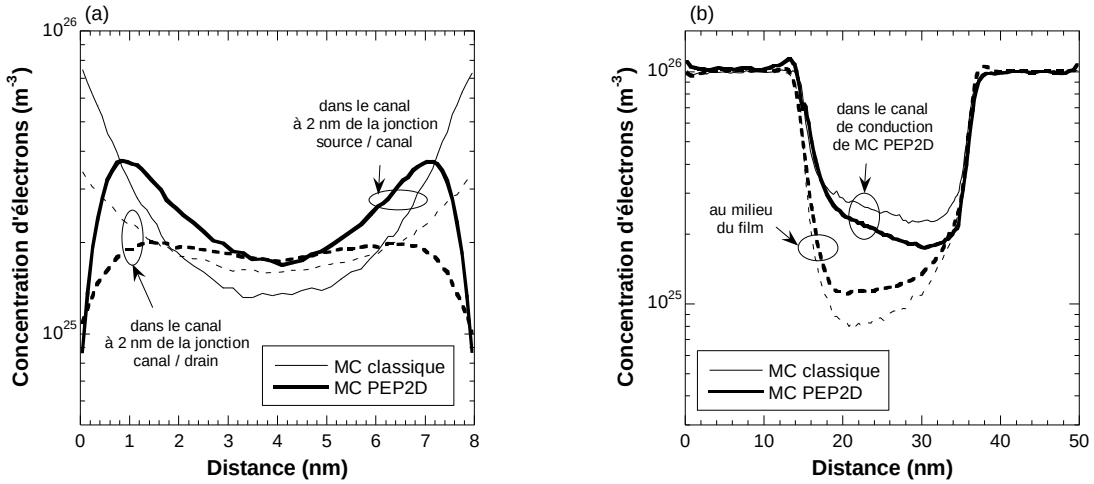


Figure 4.19 : Profils de concentration de porteurs dans la direction du confinement dans le canal à 2 nm des jonctions source / canal et canal / drain (a) et dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film (b) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

Sur les cartographies, on observe nettement un pincement des canaux de conduction, à la différence près que dans le cas classique ce pincement a lieu aux interfaces et dans le cas quantique il a lieu à

environ 1 nm de chacune des interfaces. Comme pressenti sur les profils de potentiel effectif, à proximité de la source les effets de confinement sont très marqués et conduisent à la formation de deux canaux de conduction distincts. Au contraire à proximité du drain, la forte polarisation de drain induit des effets de confinement moins prononcés et conduit à une conduction de type volumique.

Sur la **Figure 4.20** les cartographies du potentiel de Poisson associées à ces densités de porteurs sont tracées. La **Figure 4.21** représente alors des coupes de potentiel de Poisson effectuées à partir de ces cartographies : des coupes dans la direction du confinement dans le canal à 2 nm de la jonction source / canal et à 2 nm de la jonction canal / drain (a) et des coupes dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film de silicium (b).

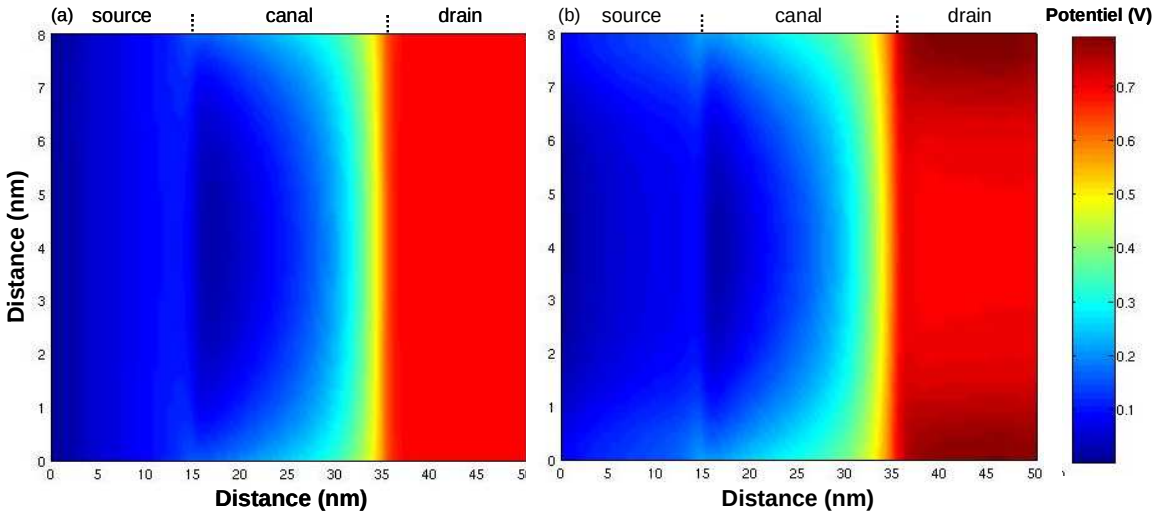


Figure 4.20 : Cartographies du potentiel de Poisson obtenues par simulations Monte-Carlo semi-classique (a) et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D (b) pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

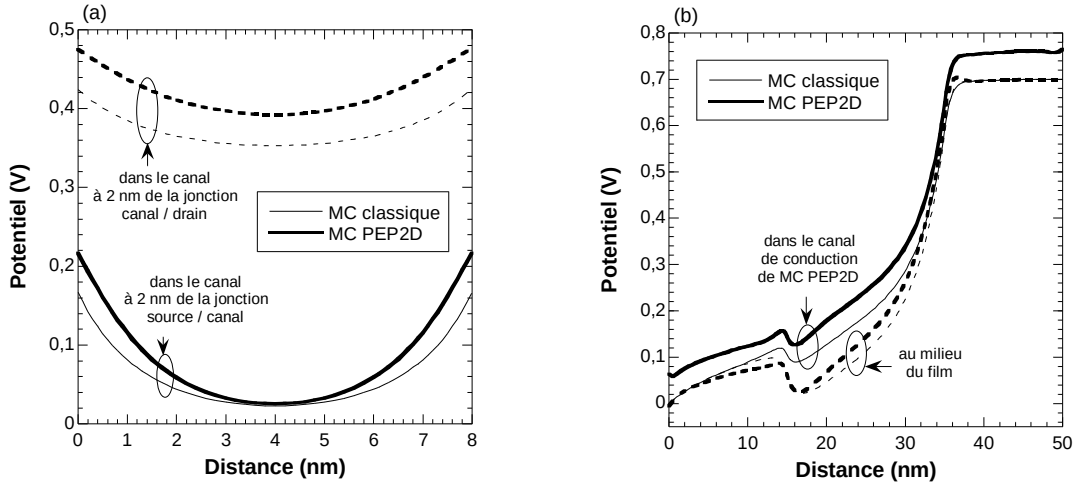


Figure 4.21 : Potentiel de Poisson dans la direction du confinement au milieu du canal (a) et dans la direction du transport dans le canal de conduction quantique et au milieu du film (b) obtenus par simulations Monte-Carlo semi-classique et Monte-Carlo corrigé par le PEP2D pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

Dans le cas classique, dans le canal à proximité de la source, le potentiel présente une forte courbure dans la direction du confinement. Par contre, dans le canal à proximité du drain, de par la forte

polarisation de drain, cette courbure est bien moindre. Par conséquent, les effets de confinement quantique sont d'autant moins prononcés. On remarque alors que la différence de courbure entre les potentiels quantique et classique est nettement plus marquée à proximité de la source que du drain. Bien que le potentiel effectif de type Pearson ait été calibré à l'équilibre thermodynamique, cette correction se comporte comme attendu vis-à-vis du confinement quantique tout au long du film de silicium d'un dispositif fortement polarisé sur le drain. Ceci peut être notamment attribué à sa dépendance en champ électrique local dans la direction du confinement. Pour finir cette analyse à forte polarisation de drain, traçons sur la **Figure 4.22** l'énergie cinétique moyenne des porteurs dans la direction du transport. Quelle que soit l'approche utilisée, les électrons ne présentent pas d'énergie élevée dans la source. Une énergie cinétique des porteurs quantiques inférieure à l'énergie cinétique des porteurs classiques dans la source s'explique par une chute plus faible du potentiel quantique par rapport au classique (cf. **Figure 4.21**(b)).

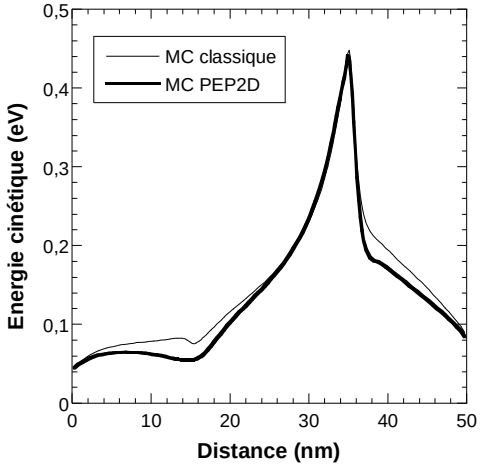


Figure 4.22 : Energie cinétique moyenne des électrons dans la direction du transport pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

Tous les résultats présentés dans cette partie accréditent la correction par le potentiel effectif de type Pearson en 2D. Les courants, les charges d'inversion, les profils de densité de porteurs et de potentiel sont cohérents vis-à-vis des résultats semi-classiques. Afin de poursuivre l'étude des résultats induits par la correction par le PEP, effectuons désormais des comparaisons avec une approche développée à l'Institut d'Electronique Fondamentale d'Orsay et qui consiste en un couplage Monte-Carlo / Schrödinger [Saint Martin 06] (cf. paragraphe 1.3.2).

4.3.3 Comparaisons avec une méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger

Le couplage Monte-Carlo Schrödinger est considéré comme traduisant les effets quantiques uniquement dans la direction du confinement. Ainsi, afin que les comparaisons des résultats d'une telle méthode avec une méthode de correction quantique par le PEP soient au plus justes, seule la correction par le PEP1D dans la direction du confinement est utilisée. Avant de passer aux comparaisons à proprement parler, récapitulons les différences majeures des méthodes comparées :

- ✓ le couplage Monte-Carlo Schrödinger considère que tous les porteurs sont dans un gaz 2D et utilise les fréquences d'interaction reformulées pour un tel gaz. Dans la correction par le PEP, les fréquences d'interaction restent inchangées par rapport au cas semi-classique (les porteurs sont considérés comme étant dans un continuum d'énergie ou gaz 3D).

- ✓ le couplage Monte-Carlo Schrödinger calcule les premiers niveaux d'énergie et leur fonction d'onde associée, ce qui permet d'avoir directement accès à la concentration de porteurs. Notons que, dans la version du code utilisée ici, les conditions aux limites considérées imposent aux fonctions d'onde de s'annuler à l'interface oxyde / silicium. Quant à la correction par le PEP, elle ne contient aucune notion ni de niveau d'énergie ni de fonction d'onde. Cette correction a été calibrée de manière à reproduire les profils de densité de porteurs issus de simulations Poisson-Schrödinger 1D pour lesquelles les fonctions d'onde sont autorisées à pénétrer dans l'oxyde.
- ✓ dans le cas d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger, le mouvement des porteurs est effectué dans un gaz 2D : la connaissance de l'évolution des niveaux d'énergie dans la direction du transport donne le champ électrique subi par un porteur de la sous-bande n dans cette direction comme la dérivée première du niveau d'énergie n dans la direction du transport. La correction par le PEP donne le mouvement des porteurs dans un gaz 3D, c'est-à-dire que le mouvement des porteurs dans la direction du transport est donné par la dérivée première du potentiel de Poisson dans cette direction.

Les **Figure 4.23** et **Figure 4.24** représentent respectivement les caractéristiques $I_{DS}(V_{GS})$ à V_{DS} = 0,05 V et $I_{DS}(V_{DS})$ à V_{GS} =1,2 V pour des simulations Monte-Carlo semi-classique (MC classique), Monte-Carlo corrigé par le PEP1D (MC PEP1D) et un couplage Monte-Carlo Schrödinger (MC Schrödinger). Dans toute cette partie tout ce qui est qualifié de « Schrödinger » fait référence aux résultats obtenus par un couplage Monte-Carlo Schrödinger (courant, potentiel …) et tout ce qui est qualifié de « PEP » fait référence aux résultats obtenus par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D.

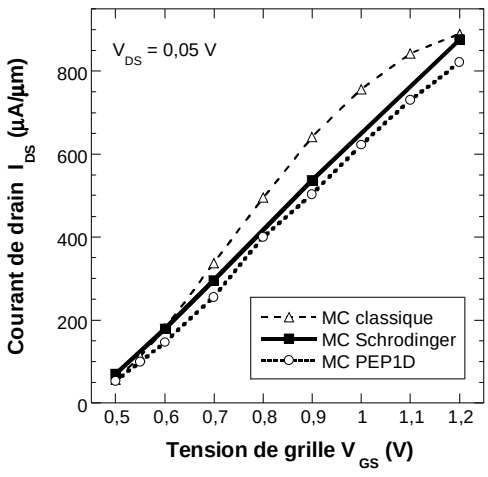


Figure 4.23 : Caractéristiques $I_{DS}(V_{GS})$ à V_{DS} = 0,05 V pour des simulations Monte-Carlo semi-classique, Monte-Carlo corrigé par le PEP1D et un couplage Monte-Carlo Schrödinger.

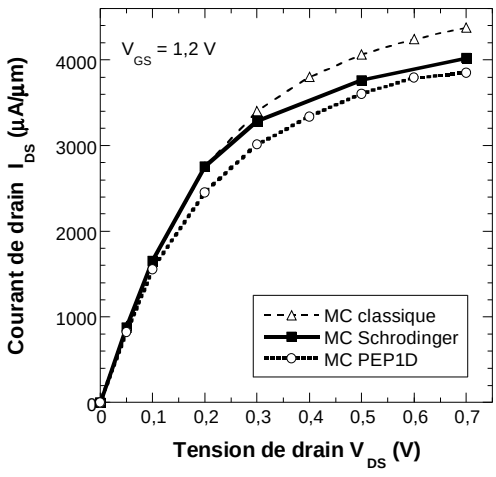


Figure 4.24 : Caractéristiques $I_{DS}(V_{DS})$ à V_{GS} = 1,2 V pour des simulations Monte-Carlo semi-classique, Monte-Carlo corrigé par le PEP1D et un couplage Monte-Carlo Schrödinger.

Les courants Schrödinger et PEP, même s'ils sont de valeurs différentes, sont proches et présentent des évolutions similaires en fonction des tensions de polarisation. Notons également que le courant

PEP est systématiquement inférieur au courant Schrödinger. La **Figure 4.25** représente la charge totale pour V_{DS} = 0,05 V et différentes polarisations de grille (a) et pour V_{GS} = 1,2 V et différentes polarisations de drain (b) dans le cas d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger et de Monte-Carlo corrigé par le PEP1D.

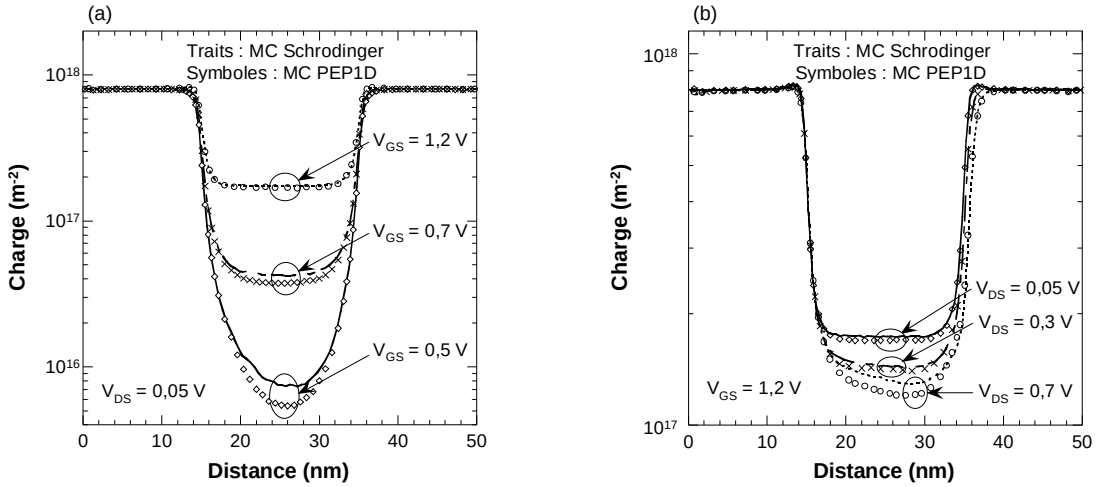


Figure 4.25 : Charge totale pour V_{DS} = 0,05 V et différents V_{GS} (a) et pour V_{GS} = 1,2 V et différents V_{DS} (b) dans le cas d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger (MC Schrödinger) et de Monte-Carlo corrigé par le PEP1D (MC PEP1D).

Les charges PEP en fonction des polarisations présentent une évolution analogue aux charges Schrödinger tout en étant systématiquement légèrement inférieures, ce qui est en accord avec des courants PEP inférieurs aux courants Schrödinger. Effectuons désormais une analyse précise des résultats obtenus par les deux modèles à faible polarisation de drain. La **Figure 4.26** présente des profils de densité de porteurs (a) et de potentiel (b) extraits dans la direction du transport dans le canal de conduction (à environ 0,8 nm de l'interface oxyde / silicium) et au milieu du film pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

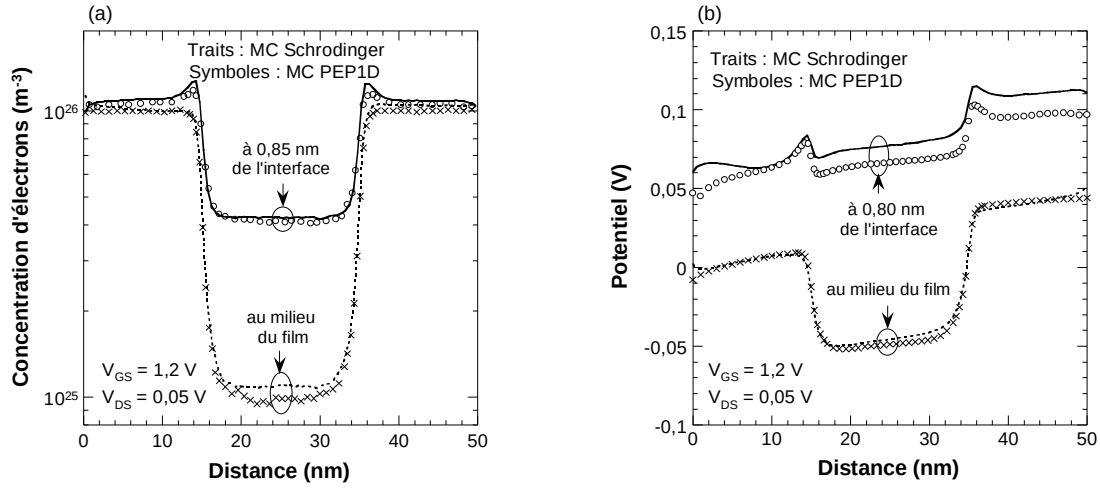


Figure 4.26 : Profils de concentration d'électrons (a) et de potentiel (b) dans la direction du transport dans le canal de conduction (à environ 0,8 nm de l'interface oxyde / silicium) et au milieu du film pour un couplage Monte-Carlo Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP1D à V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

Les profils de concentration de porteurs et de potentiels extraits au milieu du film sont globalement similaires. Cependant, bien que ces mêmes profils, et en particulier le profil de potentiel, extraits à environ 0,8 nm de l'interface oxyde / silicium présentent des évolutions analogues, leurs valeurs sont sensiblement différentes. Afin de mieux comprendre cette différence, effectuons quelques coupes dans la direction du confinement. Tout d'abord, la concentration de porteurs (a) et le potentiel (b) extraits dans la direction du confinement au milieu de la source sont tracés sur la **Figure 4.27** pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

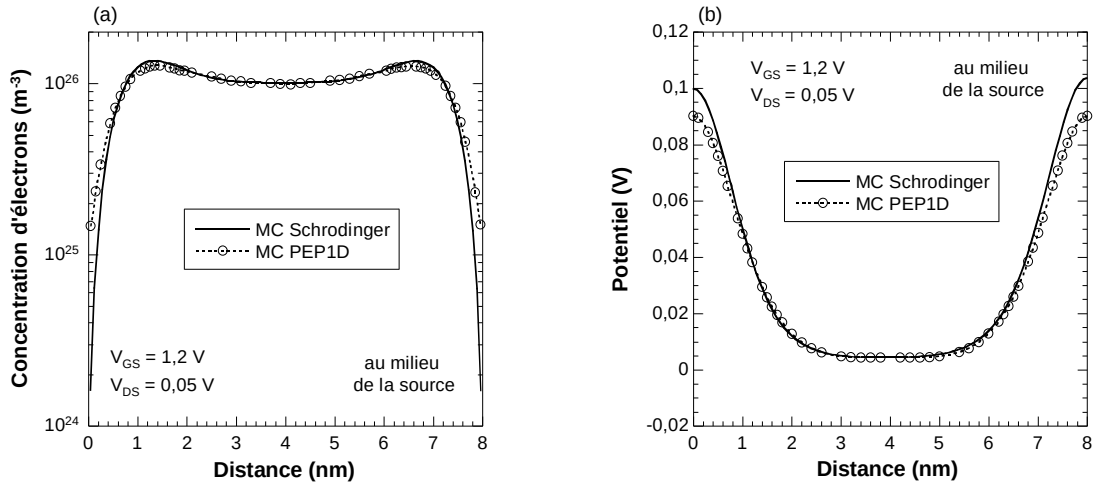


Figure 4.27 : Concentration d'électrons (a) et potentiel (b) extraits dans la direction du confinement au milieu de la source pour un couplage Monte-Carlo Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP1D à V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

La **Figure 4.27**(a) met en évidence une répulsion moins importante de la concentration PEP par rapport à la concentration Schrödinger. Celle-ci s'explique simplement par la différence des conditions aux limites appliquées sur les fonctions d'onde : dans le cas présent, le couplage Monte-Carlo Schrödinger n'autorise pas la pénétration des fonctions d'onde dans l'oxyde alors que la correction par le PEP a été calibrée sur des simulations Poisson-Schrödinger autorisant cette pénétration. Ceci explique la différence de potentiel observée près des interfaces sur la **Figure 4.27**(b) et à 0,8 nm de l'interface sur la **Figure 4.26**(b). La **Figure 4.28** met ceci en évidence en comparant le profil de la concentration de porteurs extrait au milieu de la source obtenu par couplage Monte-carlo Schrödinger, par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D, par simulation Poisson-Schrödinger

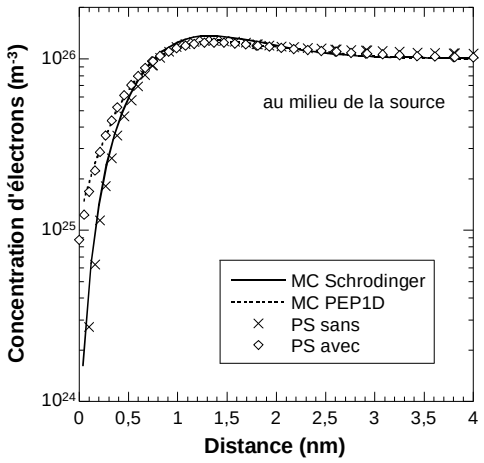


Figure 4.28 : Concentration d'électrons extraite dans la direction du confinement au milieu de la source obtenue pour un couplage Monte-Carlo Schrödinger (MC Schrödinger), par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D (MC PEP1D), par simulation Poisson-Schrödinger 1D n'autorisant pas la pénétration des fonctions d'onde dans l'oxyde (PS sans) et l'autorisant (PS avec).

1D n'autorisant pas la pénétration des fonctions d'onde dans l'oxyde et l'autorisant. Cette répulsion plus importante des porteurs à l'interface est principalement à l'origine d'une charge d'inversion plus élevée observée avec le couplage Monte-Carlo Schrödinger sur la **Figure 4.25**.

Sur la **Figure 4.29** sont tracées les concentrations de porteurs extraites dans la direction du confinement au milieu du canal pour différentes polarisations de grille à V_{DS} = 0,05 V obtenues par couplage Monte-Carlo Schrödinger (a) et par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP (b).

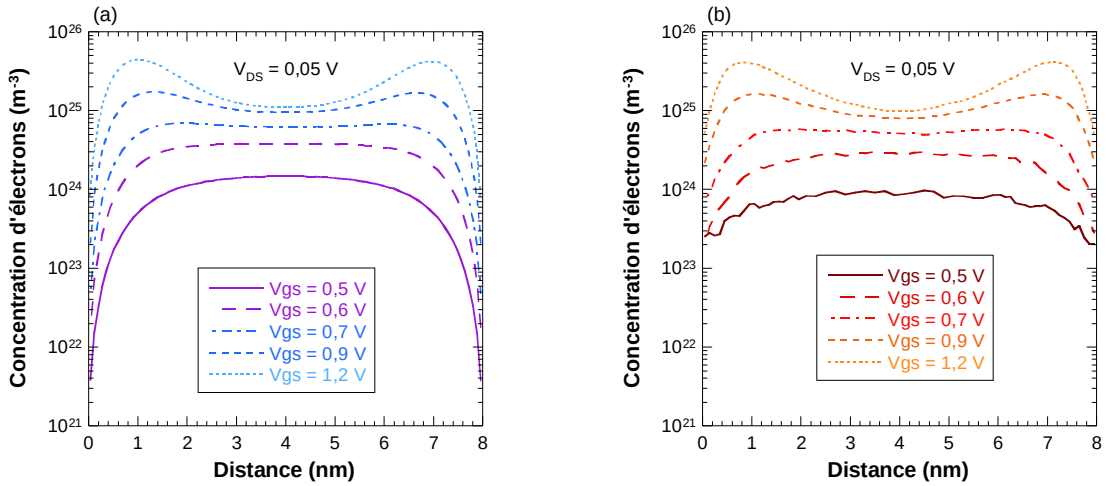


Figure 4.29 : Concentrations de porteurs extraites dans la direction du confinement au milieu du canal pour différentes polarisations de grille à V_{DS} = 0,05 V obtenues par couplage Monte-Carlo Schrödinger (a) et par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP (b).

Quelle que soit l'approche utilisée, les évolutions des profils de densité de porteurs en fonction de la tension de grille sont similaires. Sur la **Figure 4.30** sont superposés les concentrations de porteurs (a) et leurs potentiels associés (b) extraits dans la direction du confinement au milieu du canal obtenus par couplage Monte-Carlo Schrödinger et simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D à V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

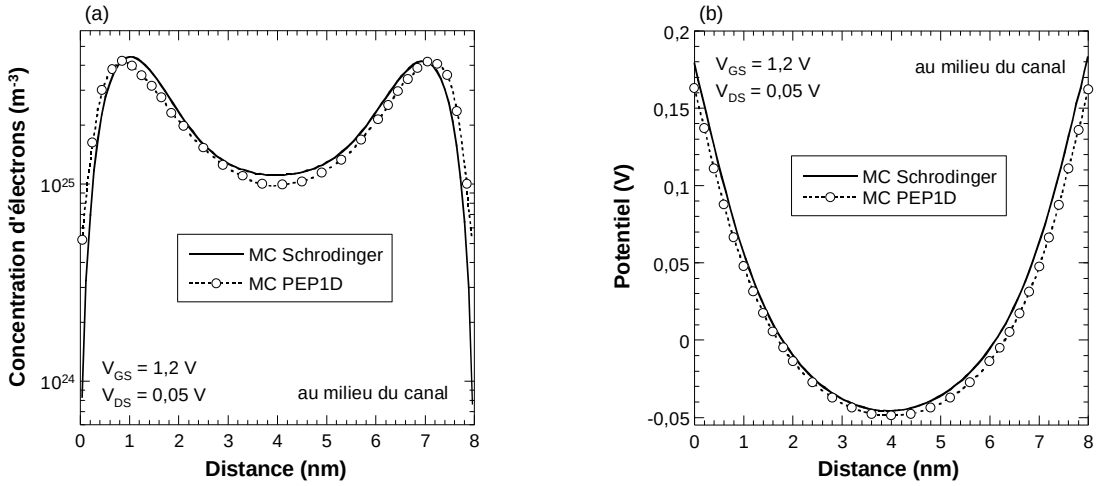


Figure 4.30 : Concentrations de porteurs (a) et potentiels (b) extraits dans la direction du confinement au milieu du canal obtenus par couplage Monte-Carlo Schrödinger et simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,05 V.

Là encore les différences observées sont majoritairement les conséquences de conditions aux limites différentes appliquées sur les fonctions d'onde aux interfaces oxyde / silicium.

Effectuons désormais une analyse similaire en jouant cette fois-ci sur la polarisation de drain à forte polarisation de grille V_{GS} = 1,2 V. Sur la **Figure 4.31** sont tracés des profils de densité de porteurs (a) et de potentiel (b) extraits dans la direction du transport dans le canal de conduction (à environ 0,8 nm de l'interface oxyde / silicium) et au milieu du film pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

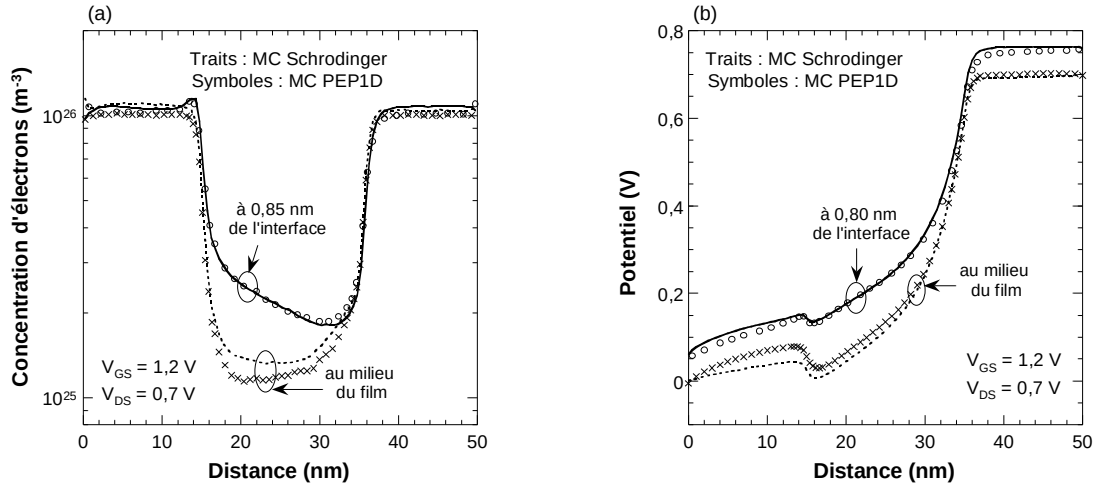


Figure 4.31 : Profils de concentration d'électrons (a) et de potentiel (b) extraits dans la direction du transport dans le canal de conduction (à environ 0,8 nm de l'interface oxyde / silicium) et au milieu du film pour un couplage Monte-Carlo Schrödinger et Monte-Carlo corrigé par le PEP1D à V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

Les coupes de concentrations de porteurs ou de potentiel présentent des évolutions tout à fait similaires que ce soit dans le canal de conduction ou au milieu du film de silicium.

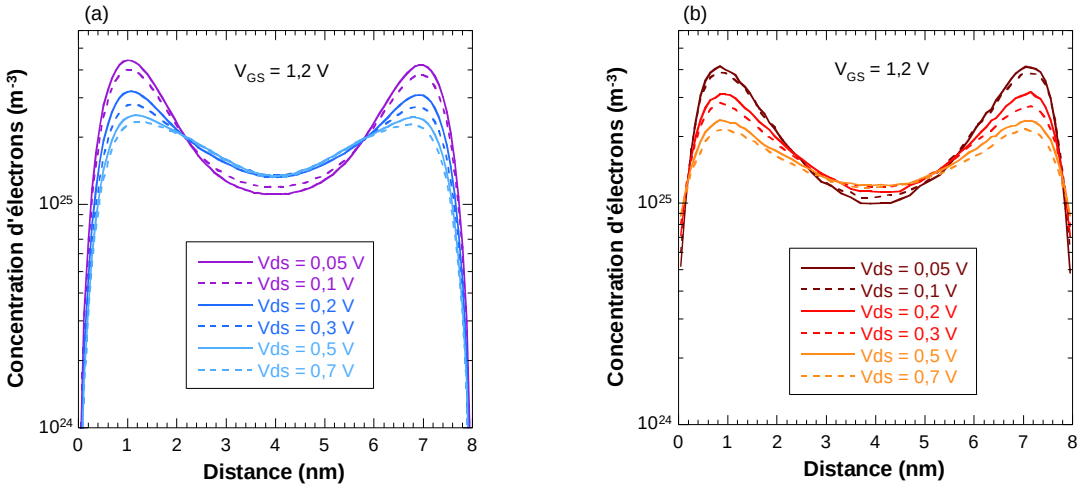


Figure 4.32 : Concentrations de porteurs extraites dans la direction du confinement au milieu du canal pour différentes polarisations de drain à V_{GS} = 1,2 V obtenues par couplage Monte-Carlo Schrödinger (a) et par simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP (b).

La **Figure 4.32** compare l'évolution du profil de la concentration de porteurs extrait dans la direction du confinement au milieu du film pour différentes polarisations de drain à V_{GS} = 1,2 V dans le cas

d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger (a) et de simulations Monte-Carlo corrigé par le PEP1D (b). Quelle que soit l'approche utilisée, les évolutions des concentrations de porteurs en fonction de la polarisation de drain sont analogues et conformes. Enfin, sur la **Figure 4.33** sont superposés les concentrations de porteurs (a) et leurs potentiels associés (b) extraits dans la direction du confinement au milieu du film obtenus par couplage Monte-Carlo Schrödinger et simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

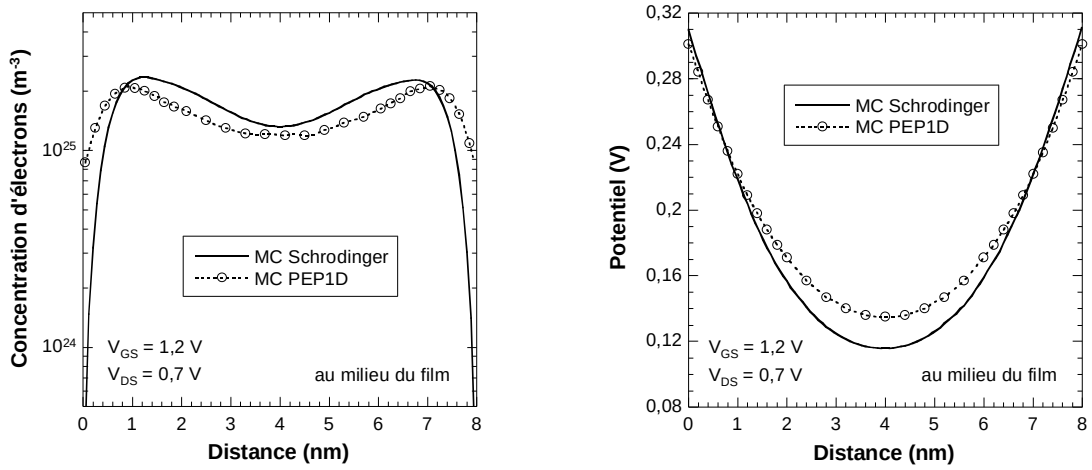


Figure 4.33 : Concentrations de porteurs (a) et potentiels (b) extraits dans la direction du confinement au milieu du canal obtenus par couplage Monte-Carlo Schrödinger et simulation Monte-Carlo corrigé par le PEP1D pour V_{GS} = 1,2 V et V_{DS} = 0,7 V.

La différence des conditions aux limites concernant la pénétration des fonctions d'onde dans l'oxyde est une fois encore en grande partie à l'origine des écarts observés entre les résultats des deux approches. Il est clair que des simulations par méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger prenant en compte la pénétration des fonctions d'onde dans l'oxyde sont à mener pour que la comparaison entre les deux approches soit encore plus judicieuse et valide complètement la correction par le PEP.

4.4 Conclusion

Afin d'analyser le transport électronique par simulation Monte-Carlo avec effets de confinement quantique, la correction par le Potentiel Effectif de type Pearson est appliquée à un dispositif à double grille caractérisé par une longueur de grille de 20 nm et une épaisseur de film de 8 nm. Les comparaisons effectuées avec des simulations Monte-Carlo semi-classique mettent en évidence l'impact des effets de confinement quantique sur le transport électronique : la conduction ne se fait plus majoritairement le long des interfaces oxyde / silicium mais à l'intérieur du film de silicium, à quelques Angström de ces interfaces ; le potentiel de Poisson quantique présente une courbure supérieure à son homologue classique, ce qui est représentatif des effets de confinement quantique aux interfaces ; à forte polarisation de drain, les profils de densité de porteurs et de

potentiel de Poisson mettent en évidence des effets de confinement quantique d'autant moins prononcés qu'on se rapproche du drain. La correction par le potentiel effectif de type Pearson permet donc l'obtention de résultats cohérents quant à la prise en compte des effets de confinement quantique. Il en résulte un courant quantique inférieur de 15 % au courant classique pour des polarisations égales à V_{GS}-V_T = V_{DS} = V_{DD} = 0,7 V.

De plus, des comparaisons avec des résultats issus d'une méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger ont été effectuées. Celles-ci mettent en évidence que, quel que soit le régime de fonctionnement du dispositif, les niveaux de courant mais également les évolutions des profils de potentiel et de densité de porteurs dans toutes les zones du dispositif (source, canal et drain) sont analogues. Si les conditions aux limites relatives à la pénétration ou non des fonctions d'onde dans l'oxyde étaient identiques, il est même probable que les résultats obtenus par les deux approches soient vraiment similaires. Ces comparaisons permettent donc de valider dans une large mesure la capacité de la correction par le PEP à prendre en compte correctement les effets de confinement quantique.

En conclusion, la correction par le Potentiel Effectif de type Pearson présentée dans ce manuscrit permet d'introduire les effets de confinement quantique de manière réaliste dans un code Monte-Carlo pour la simulation de dispositifs MOSFETs de taille nanométrique. A notre connaissance, la prise en compte correcte de ces effets tout au long d'un dispositif MOSFET de taille nanométrique par une méthode de type potentiel de correction quantique n'ayant pas recourt à la résolution de l'équation de Schrödinger n'a jamais été montrée en littérature. De plus, nous démontrons qu'avec une approche de type potentiel effectif, le PEP, il est possible d'obtenir des résultats similaires à une approche plus rigoureuse de couplage Monte-Carlo Schrödinger.

Conclusions et perspectives

A ce jour, l'introduction des effets de confinement quantique dans les méthodes de simulation de type Monte-Carlo constitue un réel enjeu dans la course à la miniaturisation des transistors MOSFETs. En effet, ceux-ci sont désormais susceptibles d'influencer notablement les performances électriques des transistors. C'est dans ce contexte que se situe l'étude présentée dans ce manuscrit. Introduire de manière réaliste les effets de confinement quantique dans un code Monte-Carlo par méthode de potentiel de correction quantique afin d'étudier leur impact sur le transport électronique en est l'objectif majeur.

Le chapitre 1, outre une introduction du contexte de l'étude, dresse un état de l'art des différentes méthodes existantes pour l'introduction des effets quantiques dans une approche Monte-Carlo. Le choix d'une approche de potentiel de correction quantique se justifie par les raisons suivantes : elle s'applique à différentes architectures de dispositifs (sur silicium massif, SOI ou encore double-grille) sans limitation supérieure de dimension et sans pour autant augmenter considérablement les temps de calcul. Ces approches offrent ainsi de nombreux avantages et répondent parfaitement aux besoins exprimés par les centres de recherche et développement. De plus, parmi les différentes formulations de potentiel de correction quantique existantes, le potentiel effectif de type gaussien est tout à fait adapté aux simulateurs particulaires de type Monte-Carlo et est relativement aisé à coupler au transport électronique. C'est ce potentiel de correction quantique que nous avons choisi d'étudier pour démarrer cette étude.

Le chapitre 2 traite exclusivement de la correction par le potentiel effectif de type gaussien (GEP). Cette correction est mise en œuvre dans un simulateur de type Monte-Carlo. Tout d'abord, nous montrons que la correction par le GEP est qualitativement valide pour représenter la répulsion des porteurs aux interfaces oxyde / silicium. En outre, avec le jeu de paramètres habituellement utilisé en littérature nous obtenons des résultats similaires à ceux publiés : la correction par le GEP utilisée en littérature permet de reproduire, dans une certaine mesure, la charge d'inversion mais conduit systématiquement à une trop forte répulsion de la densité de porteurs aux interfaces. Afin d'améliorer ces profils, nous avons mis en place une méthodologie basée sur des plans d'expériences. Celle-ci permet d'obtenir des profils de densité de porteurs bien plus réalistes mais qui restent néanmoins

insuffisamment bien décrits par rapport à une résolution Poisson-Schrödinger. Nous démontrons ainsi de manière quantitative que, malgré un calibrage précis de ses paramètres, la correction par le GEP est limitée quant à la reproduction correcte des profils de densité de porteurs. Enfin, nous identifions clairement que les limitations de cette correction sont majoritairement inhérentes à la représentation systématique du paquet d'ondes d'une particule par une distribution gaussienne. Une telle représentation n'est en effet pas adaptée à proximité de barrières d'énergie comme c'est le cas aux interfaces oxyde/silicium d'un dispositif MOSFET. C'est ce qui nous a conduit à proposer une amélioration de cette correction quantique dans le chapitre 3.

Le chapitre 3 présente une formulation originale de potentiel de correction quantique : le Potentiel Effectif de type Pearson (PEP). Celui-ci a pour objectif de permettre une description réaliste des effets de confinement quantique et en particulier du profil de la densité de porteurs. L'idée de cette formulation innovante est issue des conclusions de l'étude effectuée dans le chapitre 2 : conserver une correction de type potentiel effectif tout en améliorant la description du paquet d'ondes de la particule. Afin que ce dernier présente une allure réaliste à proximité des barrières d'énergie, nous avons choisi de le décrire par une distribution Pearson IV calibrée de manière à reproduire l'allure des densités de probabilité de la première sous-bande d'énergie d'une résolution Poisson-Schrödinger. En effet, en particulier parce qu'il est possible de maîtriser leur asymétrie, nous avons montré que les distributions Pearson IV sont un bon compromis simplicité / précision pour reproduire les densités de probabilité. De plus, nous avons opté pour une dépendance des distributions Pearson IV en épaisseur de film de silicium mais également en champ électrique local dans la direction du confinement. Cette dernière dépendance peut être considérée comme faisant la « force » de cette correction quantique. En effet, en présentant une dépendance en champ électrique local dans la direction du confinement, la correction par le PEP présente une certaine universalité puisqu'elle devient ainsi indépendante de paramètres tels que l'épaisseur d'oxyde, le niveau de dopage, les tensions de polarisation dont l'influence est contenue dans le champ électrique local. Nous avons ainsi développé et validé la correction par le PEP pour la reproduction correcte des effets de confinement quantique en terme de profils de concentration de porteurs et par conséquent de profils de potentiel et de charge d'inversion dans la gamme suivante : pour des champs effectifs compris entre 10^5 et 10^6 V.cm^{-1} dans le cas d'architectures SOI faiblement dopées à double et simple grille (5 nm < T_{Si} < 20 nm) et dans le cas d'une architecture sur silicium massif fortement dopé. Précisons cependant que le bruit particulaire rend difficile le calcul de la correction quantique à très faible champ effectif et peut conduire à des surestimations de la charge d'inversion. En conclusion, pour la première fois à notre connaissance, nous démontrons qu'une approche de type potentiel effectif, la correction par le PEP, permet de reproduire correctement les profils de densité de porteurs d'une simulation Poisson-Schrödinger.

Le chapitre 4 a pour objet l'analyse du transport électronique dans un dispositif MOSFET par simulation Monte-Carlo corrigé par le potentiel effectif de type Pearson. De manière à reproduire correctement les effets de confinement quantique tout au long du dispositif (source, canal et drain), il

y est tout d'abord traité de la manière dont les effets de confinement quantique sont pris en compte dans les zones de source et drain. Ensuite, l'étendue de la correction par le PEP en deux dimensions ainsi que les conditions aux limites spécifiques appliquées aux électrodes de source et drain dans le cas d'un traitement quantique par le PEP sont présentées. Enfin, le transport électronique dans un dispositif MOSFET à double-grille présentant une longueur de canal de 20 nm et une épaisseur de film de 8 nm est analysé. Dans un premier temps, des résultats de simulation Monte-Carlo semi-classique et Monte-Carlo corrigé par le PEP sont comparés. L'introduction des effets de confinement quantique conduit à l'obtention de canaux de conduction non plus à l'interface oxyde / silicium mais à quelques nanomètres de l'interface. Il en résulte une courbure plus importante des potentiels de Poisson dans la direction du confinement. De plus une diminution de la charge d'inversion explique en partie la réduction de 15 % du courant de drain à $V_{GS} - V_T = V_{DS} = V_{DD} = 0{,}7$ V. Dans un deuxième temps, des comparaisons avec une méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger développée à l'Institut d'Electronique Fondamentale à Orsay sont effectuées. En terme de caractéristiques électriques mais également de profils de densité de porteurs et de potentiel, nous montrons qu'une approche de type potentiel effectif permet d'obtenir des résultats similaires à une approche plus rigoureuse de couplage Monte-Carlo Schrödinger, et ceci quelle que soit la polarisation de drain appliquée. Nous confortons ainsi la validité de la correction par le PEP pour la prise en compte des effets de confinement quantique tout le long d'un dispositif de taille nanométrique. Cette étude met ainsi en évidence qu'une méthode de type potentiel effectif, et en l'occurrence le potentiel effectif de type Pearson, donne une bonne prédictibilité des effets de confinement quantique.

En terme de perspectives, il serait tout d'abord judicieux d'étendre la gamme de validité du potentiel effectif de type Pearson vers des champs effectifs plus faibles. En effet, le chapitre 3 met clairement en évidence les limitations de la correction par le PEP dans le cas de très faibles champs effectifs pour des épaisseurs de films inférieures à 10 nm. Un objectif raisonnable serait donc d'assurer la validité de la correction par le PEP jusqu'à des champs effectifs de l'ordre de grandeur de ceux associés aux tensions de seuil des dispositifs étudiés.

Ensuite, afin de quantifier de manière plus réaliste l'impact des effets de confinement quantique sur les caractéristiques électriques des dispositifs, il convient désormais d'introduire l'interaction de rugosité de surface. Cependant, de par la répulsion des porteurs aux interfaces oxyde / silicium, l'utilisation d'une réflexion spéculaire et diffusive des particules heurtant l'interface avec l'oxyde de grille n'est plus satisfaisante. Par conséquent de nouvelles approches doivent être développées afin de prendre en compte l'effet de l'interface rugueuse sous la forme d'un mécanisme de collision additionnel. A ce jour, principalement deux méthodes ont été proposées. L'une est adaptée aux approches par potentiel de correction quantique mais est limitée aux épaisseurs de film supérieures à 10 nm [Ramey 03, Palestri 05] ; l'autre nécessite le calcul de valeurs propres et est par conséquent spécifiquement adaptée aux approches de couplage Monte-Carlo Schrödinger [Esseni 04]. Notons qu'une fois l'interaction de rugosité de surface introduite dans l'approche Monte-Carlo corrigé par le

PEP et dans la méthode de couplage Monte-Carlo Schrödinger, il sera alors intéressant d'effectuer de nouvelles comparaisons entre ces deux approches.

Enfin, bien que l'application majeure de cette étude concerne les dispositifs à double-grille l'approche Monte-Carlo corrigé par le PEP a été montrée comme s'appliquant aussi aux dispositifs SOI simple grille ou sur silicium massif. Ainsi, cette correction étant tout à fait adaptée aux applications d'ingénierie, elle pourra par exemple être utilisée pour des études systématiques de l'influence de paramètres comme la longueur de grille ou l'épaisseur de film sur les effets de confinement quantique dans les architectures précédemment citées. De plus, la correction mise en œuvre dans ce manuscrit peut aisément s'étendre en plusieurs dimensions. Nous l'avons d'ailleurs montré dans le chapitre 4 en appliquant dans la direction du transport un potentiel effectif de type gaussien justifié par l'absence de barrière d'énergie dans cette direction. Avec ce type de correction quantique, il semble donc tout à fait possible d'envisager d'étudier le transport électronique d'architectures présentant du confinement dans plusieurs directions comme c'est le cas dans les architectures multi-grilles.

Annexes

Annexe A : Méthode Monte-Carlo

1. Structure de bande et mouvement des porteurs

L'évaluation du mouvement des porteurs durant leur phase de vol libre passe par l'introduction de grandeurs telles que l'énergie ε et le vecteur d'onde $\vec{k}$ du porteur reliés l'un à l'autre par la description de la structure de bande. Une particule dans le silicium de masse m, même si elle n'est soumise à aucun potentiel extérieur, n'est pas totalement libre puisqu'elle est soumise au potentiel cristallin du silicium, c'est-à-dire au potentiel électrostatique dû aux atomes. L'approximation de la masse effective consiste à s'affranchir de ce potentiel cristallin en considérant la particule totalement libre mais en lui donnant une masse m* appelée masse effective. Ainsi, la masse effective intègre l'influence du réseau cristallin périodique du semi-conducteur sur la particule. Dans le cas des bandes isotropes, la masse effective des électrons, respectivement des trous, est définie scalairement comme inversement proportionnelle à la courbure de bande à chaque minimum de la bande de conduction, respectivement de la bande de valence :

$$m^* = \left| \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial \vec{k}^2} \right| \qquad \text{(A.1)}$$

avec ε l'énergie des porteurs, $\vec{k}$ leur vecteur d'onde et $\hbar$ la constante de Planck réduite.

Dans le silicium, la bande de conduction présente 6 minima et les surfaces iso-énergétiques au voisinage des ces minima sont de forme ellipsoïdale. Ces vallées ellipsoïdales sont caractérisées par une masse effective transverse m_t^* (selon le petit axe de l'ellipsoïde) et une masse effective longitudinale m_l^* (selon le grand axe de l'ellipsoïde). Dans le cas d'un coefficient de non-parabolicité α, la relation de dispersion permettant de décrire les extrema de la structure de bande du semi-conducteur est de la forme :

$$\varepsilon(1+\alpha\varepsilon)=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_t^2}{m_t^*}+\frac{k_l^2}{m_l^*}\right) \qquad (A.2)$$

Durant un vol libre, le mouvement d'un porteur de charge q dans un champ électrique E est défini en appliquant les lois de la dynamique, c'est-à-dire :

$$\frac{d\vec{r}}{dt}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon\left(\vec{k}\right)}{\partial\vec{k}} \quad \text{dans l'espace réel} \qquad (A.3)$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt}=\frac{q}{\hbar}\vec{E} \quad \text{dans l'espace réciproque} \qquad (A.4)$$

2. Fréquences d'interaction

Les imperfections du cristal semi-conducteur, telles que les vibrations des atomes ou la présence d'impuretés, perturbent le potentiel cristallin dans lequel se déplacent les porteurs, ce qui se répercute sur le mouvement de ceux-ci. Ces perturbations peuvent être considérées comme des évènements instantanés, appelés interactions, qui modifient l'état du porteur qui les subit. Pour chacune des interactions 'i' possibles, on définit la fréquence $\lambda_i(k)$ de l'interaction, c'est-à-dire la probabilité pour un porteur de passer de l'état initial $\vec{k}$ à un état final $\vec{k}'$, tel que :

$$\lambda_i(\vec{k})=\sum_{k'}S_i(\vec{k},\vec{k}') \qquad (A.5)$$

où $S_i(\vec{k},\vec{k}')$ est la probabilité par unité de temps d'une interaction. donnée par la règle d'or de Fermi [Cohen-Tannoudji 95 p.1291]:

$$S_i(\vec{k},\vec{k}')=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle\vec{k}\left|V_i\right|\vec{k}'\right\rangle\right|^2\rho_k\,\delta(\varepsilon-\varepsilon') \qquad (A.6)$$

où ρ_k est la densité d'états finale dans l'espace réciproque, V_i est le potentiel de couplage caractéristique de l'interaction, ε et ε' sont les énergies du porteur avant et après l'interaction.

La connaissance des fréquences d'interaction permet de tirer au sort la nature de l'interaction subie, son effet sur le porteur mais également le temps de vol libre. En effet, le mécanisme d'interaction est sélectionné en tenant compte de la probabilité plus ou moins élevée que cette interaction survienne. Quant au nouvel état de l'électron $\vec{k}'$ après son interaction, son module est connu directement par sa nouvelle énergie et son orientation est déterminée de manière aléatoire mais en accord avec le mécanisme de collision subi. Enfin, la durée de vol libre est directement liée aux fréquences d'interactions, puisqu'il est évident que le temps moyen de vol libre est d'autant plus faible que la probabilité totale d'interaction est élevée. Les principaux mécanismes d'interactions que peut subir un porteur lors de son transport dans le silicium à 300 K [Jacoboni 89]:

✓ Collisions avec les phonons

Les phonons correspondent aux vibrations du réseau cristallin. En effet, les ions du réseau cristallin ne sont pas rigoureusement fixés en un arrangement périodique, mais subissent des oscillations par rapport à leur position d'équilibre dont l'amplitude croît avec la température. Pour les porteurs de faible énergie, ce sont les interactions avec les phonons acoustiques intra-vallée qui dominent. Ces interactions n'échangent que très peu d'énergie avec le réseau. Pour les porteurs de forte énergie, ce sont les interactions avec les phonons optiques ou acoustiques inter-vallée qui sont prépondérantes. Il est à noter qu'à forte énergie, les collisions avec ces phonons optiques vont contribuer de manière primordiale à la relaxation de l'énergie du gaz électronique.

✓ Collisions avec des dopants et des défauts chargés (interaction de Coulomb)

Elles sont induites par toutes les charges fixes ou mobiles positionnées à l'intérieur du canal comme les dopants ou à proximité du canal comme les charges dans l'oxyde. De telles charges représentent une irrégularité dans le réseau cristallin, qui agit sur les porteurs comme un centre diffuseur localisé. La collision d'un porteur avec ce centre diffuseur est en général élastique du fait de la masse du centre diffuseur très supérieure à celle du porteur. Ces collisions sont d'autant plus prédominantes que la température et donc l'énergie des porteurs est faible (une particule rapide subit moins les effets du centre diffuseur qu'une particule lente). En régime de forte inversion, la forte densité de porteurs induit un effet d'écrantage qui réduit l'influence de ces collisions.

✓ Collisions avec l'interface canal / oxyde de grille

La rugosité, ou fluctuations géométriques, de l'interface oxyde/silicium, constitue une importante source de collisions. Les collisions sur les défauts de la surface sont indépendantes de la température. Par contre, elles sont d'autant plus importantes que le champ électrique dans la direction transverse au transport augmente.

Annexe B : Formulation de Bohm

Pour la prise en compte des effets quantiques dans la description des dispositifs, une méthode consiste en l'utilisation de potentiel de correction quantique. L'idée de ces potentiels quantiques vient de la formulation hydrodynamique de la mécanique quantique, tout d'abord introduite par de Broglie et Madelung [Madelung 26] et ensuite développée par Bohm [Bohm 52]. La formulation de Bohm repose sur la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}=-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2\psi\left(\vec{r},t\right)+V\left(\vec{r},t\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \tag{B-1}$$

Exprimons la fonction d'onde complexe ψ en fonction de ses coordonnées polaires :

$$\psi\left(\vec{r},t\right)=R\left(\vec{r},t\right)\exp\left(\frac{iS\left(\vec{r},t\right)}{\hbar}\right) \tag{B-2}$$

avec $R\left(\vec{r},t\right)$, l'amplitude, et $S\left(\vec{r},t\right)$, la phase, des réels.

On vérifie alors les équations suivantes pour R et S :

$$\frac{\partial R\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}=-\frac{1}{2m}\left[R\left(\vec{r},t\right)\nabla^2 S\left(\vec{r},t\right)+2\nabla R\left(\vec{r},t\right)\nabla S\left(\vec{r},t\right)\right] \tag{B-3}$$

$$\frac{\partial S\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}=-\left[\frac{\left(\nabla S\left(\vec{r},t\right)\right)^2}{2m}+V\left(\vec{r},t\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R\left(\vec{r},t\right)}{R\left(\vec{r},t\right)}\right] \tag{B-4}$$

En posant $\rho\left(\vec{r},t\right)=R\left(\vec{r},t\right)^2=\left|\psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2$ la densité de probabilité, on obtient

$$\frac{\partial\rho\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}=-\nabla\left(\rho\left(\vec{r},t\right)\frac{\nabla S\left(\vec{r},t\right)}{m}\right) \tag{B-5}$$

$$\frac{\partial S\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}+\frac{\left(\nabla S\left(\vec{r},t\right)\right)^2}{2m}+V\left(\vec{r},t\right)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} \tag{B-6}$$

Dans le cas où $\hbar \to 0$ les deux équations précédentes peuvent être interprétées comme un ensemble de particules classiques sous l'influence d'un potentiel classique V. Lorsque le terme $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R}{R} \to \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\sqrt{n}}{\sqrt{n}}$ est présent avec $n\left(\vec{r},t\right) = N\rho\left(\vec{r},t\right) = NR\left(\vec{r},t\right)^2$ où N est la nombre total de particules, l'équation précédente peut toujours être interprétée comme un ensemble de particules classiques évoluant cette fois-ci sous l'influence d'un potentiel composé de la somme du potentiel classique $V\left(\vec{r},t\right)$ et d'un potentiel supplémentaire $V_Q\left(\vec{r},t\right)$ souvent appelé potentiel quantique ou potentiel de Bohm, avec :

$$V_Q\left(\vec{r},t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 R\left(\vec{r},t\right)}{R\left(\vec{r},t\right)} \tag{B-7}$$

D'après Bohm, la fonction d'onde d'une particule (déterminée par Schrödinger) est équivalente à un champ qui exerce une force sur l'ensemble auquel la particule elle-même appartient [Bohm 52].

Références bibliographiques

[Ahmed 03] S. Ahmed, C. Ringhofer, D. Vasileska, "An effective potential approach to modelling 25nm MOSFET devices", *Journal of Computational Electronics*, vol. 2, p. 113-117, 2003.

[Ahmed 05] S. Ahmed, C. Ringhofer, D. Vasileska, "Parameter-free effective potential method for use in particle-based device simulations", *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 4, n° 4, p. 465-471, 2005.

[Akis 01] R. Akis, N. Milicic, D. K. Ferry, D. Vasileska, "An effective potential method for including quantum effects into the simulation of ultra-short and ultra-narrow channel MOSFETs", *International conference on Modeling and Simulation of Microsystem (MSM 2001)*, vol. 1, p. 550-553, 2001.

[Ancona 89] M.G. Ancona, "Quantum correction to the equation of state of an electron gas in a semiconductor", *Physical Review B*, vol. 39, p. 9536-9540, 1989.

[Andrieu 05] F. Andrieu, "Transistors CMOS décananométriques à canaux contraints sur silicium massif ou sur SOI – fabrication, caractérisation et étude du transport", *Thèse de doctorat*, INPG, 2005.

[Atlas] Logiciel ATLAS, société Silvaco.

[Bohm 52] D. Bohm, "A suggested interpretation of the quantum theory in terms of "Hidden" variables. II", *Physical Review*, vol. 85, n°2, p.180-193, 1952.

[CEA 06] "Le supercalculateur Tera-10", *Dossier de presse*, www.cea.fr, janvier 2006.

[Clavelier 05] L. Clavelier, C. Le Royer, C. Tabone, J.-M. Hartmann et al., "Fully depleted germanium p-MOSFETs with high-k and metal gate fabricated on 200 nm GeOI substrates", *Silicon Nano Workshop VLSI Tech. Dig.*, p. 18, 2005.

[Cohen-Tannoudji 95] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, "Mécanique quantique I et II", *Hermann*, 1995.

[Cooley 65] J. W. Cooley, J. W. Tukey, "An algorithm for the machine computation of complex Fourier series", *Mathematics of computation*, vol. 19, p. 297-301, 1965.

[Dhatt 05] G. Dhatt, G. Touzot, E. Lefrançois, "Méthode des élements finis", *Hermes Science Publications*, 2005.

[Dollfus 99] P. Dollfus, "Etudes théoriques de structures pour l'électronique rapide et contribution au développement d'un simulateur particulaire Monte Carlo", *Habilitation à Diriger les Recherches*, Université Paris-Sud, 1999.

[Doris 03] B. Doris, M. Ieong, H. Zhu et al., "Device design considerations for ultra-thin SOI MOSFETs", *IEDM Tech. Dig.*, p. 631, 2003.

[Eminente 05] S. Eminente, D. Esseni, P. Palestri, C. Fiegna, L. Selmi, E. Sangiorgi, "Understanding quasi-ballistic transport in nano-MOSFETs : Part II-Technology scaling along ITRS", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 52, n° 12, p. 2736-2743, 2005.

[Esseni 04] D. Esseni, "On the modeling of surface roughness limited mobility in SOI MOSFETs and its correlation to the transistor effective field", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 51, n° 3, p. 394-401, 2004.

[Ezaki 03] T. Ezaki, P. Werner, M. Hane, "Self-consistent quantum mechanical Monte Carlo MOSFET device simulation", *Journal of Computational Electronics*, vol. 2, p. 97-103, 2003.

[Fan 04] X.-F. Fan, X. Wang, B. Winstead, L. F. Register, U. Ravaioli, S. K. Banerjee, "MC simulation of strained-Si MOSFET with full-band structure and quantum correction", *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 51, n°6, p. 962-970, 2004.

[Ferry 95] D. K. Ferry, H. L. Grubin, "Modeling of quantum transport", *Solid State Physics*, vol. 49, p. 283-443, 1995.

[Ferry 00a] D. K. Ferry, "Semiconductor transport", *New-York : Taylor and Francis*, 2000.

[Ferry 00b] D.K. Ferry, R. Akis, D. Vasileska, "Quantum effects in MOSFETs, use of an effective potential in 3D Monte Carlo simulation of ultra-short channel devices", *IEDM Tech. Dig.*, p.287-290, 2000.

[Ferry 00c] D.K. Ferry, "Effective potentials and the onset of quantization in ultrasmall MOSFETs", *Superlattices and Microstructures*, vol. 28, n° 5/6, p. 419-423, 2000.

[Feynman 65] R.P. Feynman, A. R. Hibbs, "Quantum mechanics and path integrals", *McGraw-Hill Publishing Company*, 1965.

[Feynman 72] R.P. Feynman, "Statistical Mechanics : A set of Lectures", *Westview Press*, 1972

[Fischetti 88] M. V. Fischetti, S. E. Laux, "Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space charge effects", *Physical Review B*, vol. 38, n° 14, p. 9721-9745, 1988.

[Fischetti 93] M. V. Fischetti, S. E. Laux, "Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers", *Physical Review B*, vol. 48, n°4, p. 2244-2273, 1993.

[Fuchs 06] E. Fuchs, "Etude théorique et expérimentale du transport électronique dans les dispositifs nanométriques sur silicium", *Thèse de doctorat*, Université Paris XI Orsay, 2006.

[Geva 00] E. Geva, E. Rosenman, D. Tannor, "On the second-order correction to the quantum canonical equilibrium density matrix", *Journal of Chemical. Physics*, vol. 113, n° 4, p. 1380-1390, 2000.

[Grasser 03] T. Grasser, T. W. Tang, H. Kosina, S. Selberherr, "A review of hydrodynamic and energy-transport models for semiconductor device simulation", *Proceedings of IEEE*, vol. 91, p. 251-273, 2003.

[Guillaumot 02] B. Guillaumot, X. Garros, F. Lime et al., "75 nm damascene metal gate and high-k integration for advanced CMOS devices", *IEDM Tech. Deg.*, p. 355, 2002.

[Histoire] Histoire de l'informatique, http://histoire.info.online.fr

[Iske 02] A. Iske, "On the approximation order and numerical stability of local Lagrange interpolation by polyharmonic splines", *Proceedings of the 5th international conference on Multivariate Approximation*, 2002.

[Jacoboni 83] C. Jacoboni, 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, n° 3, p. 645-705, 1983.

[Jacoboni 89] C. Jacoboni, P. Lugli, "The Monte-Carlo method for semiconductor device simulation", *Springer Verlag*, 1989.

[Jacoboni 01] C. Jacoboni, R. Brunetti, P. Bordone, A. Bertoni, "Quantum transport and its simulation with the Wigner function approach", *International Journal of High Speed Electronics and Systems*, vol.11, p. 387-423, 2001.

[Jahan 05] C. Jahan, O. Faynot, M. Cassé, R. Ritzenthaler et al., "Omega-FET transistors with TiN metal gate and HfO_2 down to 10 nm", *VLSI Tech. Dig.*, p. 112, 2005.

[Kahng 60] D. Kahng, M. M. Atalla. "Silicon-silicon dioxide field induced surface devices", *IRE Solid-State Device Research Conference*, 1960.

[Kathawala 03] G. A. Kathawala, B. Winstead, U. Ravaioli, "Monte Carlo simulations of double-gate MOSFETs", *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 50, n°12, p. 2467-2473, 2003.

[Kawaura 00] H. Kawaura, T. Sakamoto, T. Baba, "Observation of source-to-drain direct tunnelling in 8 nm gate electrically variable shallow junction metal-oxide-semiconductor field-effect transistors", *Applied Physics Letters*, vol. 76, n°25, p. 3810-3812, 2000.

[Kedzierski 03] J. Kedzierski, D. Boyd, Y. Zhang, M. Steen et al., "Issues in NiSi-gates FDSOI device integration", *IEDM Tech. Dig.*, p. 441, 2003.

[Kosina 00] H. Kosina, M. Nedjalkov, S. Selberherr, "Theory of the Monte Carlo method for semiconductor device simulation", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 47, n° 10, p. 1898-1908, 2000.

[Kosina 03] H. Kosina, G. Klimeck, M. Nedjalkov, S. Selberherr, "Comparison of numerical device models", *SISPAD proceedings*, 2003.

[Kurzweil 01] R. Kurzweil, "The law of accelerating returns", KurzweilAI.net, 2001.

[Landau 67] L. Landau, E. Lifchitz, "Physique statistique", *Mir*, 1967.

[Le Coz 03] Y. L. Le Coz, "Quantum-statistical equilibrium and the "law" of constant Fermi potential", *Journal of Applied Physics*, vol. 93, n° 4, p. 2069-2077, 2003.

[Li 02] Y. Li, T.-W. Tang, X. Wang, "Modeling of quantum effects for ultrathin oxide MOS structures with an effective potential", *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 1, n° 4, p. 238-242, 2002

[Lilienfeld 30] J. E. Lilienfeld, U.S. Patent 1,745,175, 1930.

[Lucci 05] L; Lucci, P. Palestri, D. Esseni, L. Selmi, "Multi-subband Monte Carlo modeling of nano-MOSFETs with strong vertical quantization and electron gas degeneration", *IEDM Tech. Dig.*, 2005.

[Madelung 26] E. Madelung, "Quantatheorie in hydrodynamischer form", *Z. Phys.*, vol. 40, p. 322-326, 1926.

[Max 01] J. Max, J.-L. Lacoume, "Méthodes et techniques de traitement du signal", *Dunod*, 2001.

[Mizuno 03] T. Mizuno, N. Sugiyama, T. Tezuka, T. Nuama, S. Takagi, "High performance strained-SOI CMOS devices using thin film SiGe-on-insulator technology", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 50, n° 4, p. 988, 2003.

[Momose 98] H. S. Momose, S. Nakamura, T. Ohguro, T. Yoshitomi et al., "Study of manufacturing feasibility of 1.5 nm direct-tunneling gate oxide MOSFET's : uniformity, reliability, and dopant penetration of the gate oxide", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 45, n° 3, p. 691-700, 1998.

[Monsef 02] F. Monsef, "Etude par simulation Monte-Carlo des effets de quantification sur le transport dans les structures à effet de champ", *Thèse de doctorat*, Université Paris-Sud, 2002.

[Nedjalkov 04] M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, D. K. Ferry, "Unified particle approach to Wigner-Boltzmann transport in small semiconductor devices", *Physical Review B*, vol. 70, p. 115319, 2004.

[Ogawa 03] M. Ogawa, H. Tsuchiya, T. Miyoshi, "Quantum electron transport modeling in nano-scale devices", *IEICE Trans. Electron.*, vol. E86-C, n°3, p. 363-371, 2003.

[Palestri 03] P. Palestri, D. Esseni, A. Abramo, R. Clerc, L. Selmi, "Carrier quantization in SOI MOSFETs using an effective potential based Monte-Carlo tool", *ESSDERC Tech. Digest.*, p. 407, 2003.

[Palestri 04] P. Palestri, S. Eminente, D. Esseni, C. Fiegna, E. Sangiorgi, L. Selmi, "An improved semi-classical Monte-Carlo approach for nano-scale MOSFET simulation", *Solid-State Electronics*, vol. 49, p. 727-732, 2005.

[Palestri 05] P. Palestri, D. Esseni, S. Eminente, C. Fiegna, E. Sangiorgi, L. Selmi, "Understanding quasi-ballistic transport in nano-MOSFETs : Part I-Scattering in the channel and in the drain", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 52, n° 12, p. 2727-2735, 2005.

[Press 96] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, "Numerical recipes in Fortran 77", *Cambridge university*, 1992.

[Querlioz 06a] D. Querlioz, P. Dollfus, V.-N. Do, V. Lien Nguyen, "An improved Wigner Monte-Carlo technique for the self-consistent simulation of RTDs", *in Proc. IWCE-11, to be published in Journal of Computational Electronics*, 2006.

[Querlioz 06b] D. Querlioz, J. Saint-Martin, V.-N. Do, A. Bournel, P. Dollfus, "A study of quantum transport in end-of-roadmap DG-MOSFETs using a fully self-consistent Wigner Monte-Carlo approach", *presented at IEEE SNW 2006, to be published in IEEE Transactions on Nanotechnology*, 2006.

[Ragnarsson 05] L. A. Ragnarsson, S. Severi, L. Trojman et al., "High performing 8 Angstrom EOT HfO_2/TaN low termal-budjet n-channel FETs with solid-pahe epitaxially regrown (SPER) junctions", *VLSI Tech. Dig.*, p. 234, 2005.

[Ramey 03] S. M. Ramey, D. K. Ferry, "Implementation of surface roughness scattering in Monte Carlo modelling of thin SOI MOSFETs using the effective potential", *IEEE Transaction on nanotechnology*, vol. 2, n°2, p. 110-114, 2003.

[Rim 03] K. Rim, L. Shi, K. Chan et al., "Strained Si for sub-100 nm MOSFETs", *in Proc. ICSI3 Int. SiGe(C) Epitaxy and Heterostructures Conf.*, p. 122, 2003.

[Ringhofer 03] C. Ringhofer, C. Gardner, D. Vasileska, "Effective potentials and quantum fluid models : a thermodynamic approach", *International Journal of High Speed Electronics and Systems*, vol. 13, n° 3, p. 771-801, 2003.

[Rudan 94] M. Rudan, "The hydrodynamic model in semiconductors; Coefficients calculation for the conduction band of silicon", *Pitman Res. Notes, Laugman Edition*, 1994.

[Sado 91] G. Sado, M.-C. Sado, "Les plans d'expériences : De l'expérimentation à l'assurance qualité", *Afnor technique*, 1991.

[Saint Martin 04] J. Saint Martin, A. Bournel, P. Dollfus, "On the ballistic transport in nanometer scaled DG MOSFETs", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 51, n° 7, p. 1148-1155, 2004.

[Saint Martin 05] J. Saint Martin, "Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts à grille multiple sur SOI", *Thèse de doctorat*, Université Paris XI Orsay, 2005.

[Saint Martin 06] J. Saint Martin, A. Bournel, F. Monsef, C. Chassat, P. Dollfus, "Multi sub-band Monte Carlo simulation of ultra-thin double gate MOSFET with 2D electron gas", *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 21, p. L29-L31, 2006.

[Selberherr 84] S. Selberherr, "Analysis and simulation of semiconductor devices", *Springer-Verlag*, 1984.

[Shang 03] H. Shang, H. Okorn-Schmidt, J. Ott, P. Kozlowski et al., "Electrical characterization of germanium p-channel MOSFETs", *IEEE Electron Device Letters*, vol. 24, n° 4, p. 242, 2003.

[Shifren 01] L.Shifren, D.K. Ferry, "Particle Monte Carlo simulation of Wigner function tunneling", *Physical Letter A*, vol. 285, p. 217-221, 2001.

[Shifren 03] L. Shifren, C. Ringhofer, D. K. Ferry, "A Wigner function-based quantum ensemble Monte Carlo study of resonant tunnelling diode", *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 50, n°3, p. 769-773, 2003.

[Sverdlov 05] V. Sverdlov, A. Gehring, H. Kosina, S. Selberherr, "Quantum transport in ultra-scaled double-gate MOSFETs : a Wigner function-ased Monte Carlo approach", *Solid-State Electronics*, vol. 49, p. 1510-1515, 2005.

[Sze 81] S. M. Sze, "Physics of semiconductor devices", second edition, *John Wiley* & *Sons*, 1981.

[Sze 88] S. M. Sze, "VLSI Technology", second edition, *McGraw-Hill Book Company*, 1988.

[Tang 03] T. Tang, B. Wu, "Quantum corrected Monte Carlo simulation of semiconductor devices using the effective conduction-band edge method", *Journal of Computational Electronics*, vol.2, p. 131-135, 2003.

[Tsuchiya 99] H. Tsuchiya, T. Miyoshi, "Quantum transport modeling of ultrasmall semiconductor devices", *IEICE Trans. Electron.*, vol. E82-C, n°6, p. 880-888, 1999.

[Tsuchiya 01] H. Tsuchiya, U. Ravaioli, "Particle Monte Carlo simulation of quantum phenomena in semiconductor nanostructures", *Journal of Applied Physics*, vol. 89, n°7, p. 4023-4029, 2001.

[Tsuchiya 03] H. Tsuchiya, M. Horino, T. Miyoshi, "Quantum Monte Carlo device simulation of nano-scaled SOI-MOSFETs", *Journal of Computational Electronics*, vol. 2, p. 91-95, 2003.

[Vinet 05] M. Vinet, T. Poiroux, J. Widiez, J. Loliver et al., "Bonded planar double-metal-gate nMOS transistors down to 10 nm", *IEEE Electron Device Letters*, vol. 26, n° 5, p. 317-319, 2005.

[Wang 02] X. Wang, T.-W. Tang, "Comparison of three quantum correction models for the charge density in MOS inversion layers", *Journal of Computational Electronics*, vol. 1, p. 283, 2002.

[Watling 01] J. R. Watling, A. R. Brown, A. Asenov, D. K. Ferry, "Quantum corrections in 3-D drift diffusion simulations of decanano MOSFETs using an effective potential", *SISPAD proceedings*, 2001.

[Weber 05] O. Weber, P. Scheiblin, R. Ritzenthaler, T. Ernst et al., "A novel locally engineered (111) V-channel pMOSFET architecture with improved drivability characteristics for mow-standby power (LSTP) CMOS applications", *VLSI Tech. Dig.*, p. 156, 2005.

[Widiez 05] J. Widiez, "Etude, fabrication et caractérisation de transistors CMOS double-grille planaires déca-nanmétriques", *Thèse de doctorat*, INPG, 2005.

[Wigner 32] E. Wigner, "On the quantum correction for thermodynamic equilibrium", *Physical Review*, vol. 40, p. 749-759, 1932.

[Williams 00] S. C. Williams, K. W. Rim, W. C. Holton, "Ensemble Monte Carlo study of channel quantization in a 25-nm n-MOSFET", *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 47, n° 10, p. 1864-1872, 2000.

[Winstead 01] B. Winstead, H. Tsuchiya, U. Ravaioli, "An approach to quantum correction in Monte Carlo device simulation", *Nanotech 2001*, vol. 1, p. 566-569, 2001.

[Winstead 03] B. Winstead, U. Ravaioli, "A quantum correction based on Schrödinger equation applied to Monte Carlo device simulation", *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 50, n° 2, p. 440-446, 2003.

[Wu 03a] B. Wu, T-W. Tang, J. Nam, J.-H. Tasai, "Monte Carlo simulation of symmetric end asymmetric double-gate MOSFETs using Bohm-based quantum correction", *IEEE Trans. on Nanotechnology*, vol. 2, n°4, p. 291-294, 2003.

[Wu 03b] B. Wu, T-W. Tang, "Quantum corrected Boltzmann transport model for tunneling effects", *SISPAD 2003*, p. 283-286, 2003.

[Yang 03] M. Yang, M. Ieong, L. Shi, K. Chan et al., "High performance CMOS fabricated on hybrid substrate with different crystal orientations", *IEDM Tech. Dig.*, p. 453, 2003.

Publications et communications de l'auteur

Conférences internationales avec actes

M.-A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus, H. Jaouen, G. Le Carval
Semi-classical Monte-Carlo simulation of ultimate DGMOS based on a Pearson Effective Potential formalism
(Poster) International conference on Simulation of Semiconductor Process and Devices (SISPAD), Monterey (CA), USA, 6-8 septembre 2006, Proceedings ISBN 1-4244-0404-5, p. 196-199, 2006.

M.-A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus, H. Jaouen, G. Le Carval
Pearson versus Gaussian Effective Potentials for quantum corrected Monte-Carlo simulation
(Poster) International Workshop on Computational Electronics (IWCE-11), Vienne, Autriche, 25-27 mai 2006, à paraître dans Journal of Computational Electronics.

M.-A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus, H. Jaouen, F. De Crecy, G. Le Carval
Validity of the Effective Potential approach for the simulation of quantum confinement effects : a Monte-Carlo study
(Oral) 15th Workshop on the Modelling and Simulation of Electron Devices (MSED 2005), Pise, Italie, 4-5 juillet 2005, paru dans Journal of Computational Electronics, vol.5, p.171-175, 2006.

M.-A. Jaud., S. Barraud, G. Le Carval
Impact of quantum mechanical tunnelling on off-leakage current in double-gate MOSFET using a quantum drift-diffusion model
(Poster) Nanotech 2004, Boston (MA), USA, 7–11 mars 2004, Proceedings ISBN 0-9728422-8-4, vol. 2 , p. 17-20, 2004.

Autres communications

M.-A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus, H. Jaouen, G. Le Carval
Potentiel effectif de type Pearson pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs DGMOS
(Poster) GDR Nanoélectronique, Journées simulation et caractérisation des nanocomposants, Minatec Grenoble, 19-20 octobre 2006.

M.-A. Jaud
Semi-classical Monte-Carlo simulation of ultimate double-gate nMOSFETs : A new quantum corrected potential approach
Séminaire présenté au CEA-LETI ainsi qu'à STMicroelectronics Crolles en juin 2006.

M.-A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus, H. Jaouen, G. Le Carval
Modélisation des effets de confinement quantique par simulation Monte-Carlo : Approche du potentiel effectif
(Poster) 8èmes Journées Nationales du Réseau des doctorants en Microélectronique (JNRDM 2005), Paris, 10-12 mai 2005.

M.-A. Jaud
A quantum corrected potential method for including quantum effects in Monte-Carlo simulation
Séminaire présenté au CEA-LETI ainsi qu'à STMicroelectronics Crolles en janvier 2005.

TITRE : Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs

RESUME

Le transistor MOSFET atteint aujourd'hui des dimensions nanométriques pour lesquelles les effets quantiques ne peuvent plus être négligés. Il convient donc de développer des modèles qui, tout en décrivant précisément les phénomènes physiques du transport électronique, rendent compte de l'impact de ces effets sur les performances des transistors nanométriques. Dans ce contexte, ce travail porte sur l'introduction des effets de quantification dans un code Monte-Carlo semi-classique pour la simulation du transport électronique dans les dispositifs MOSFETs. Pour cela, l'utilisation d'un potentiel de correction quantique s'avère judicieuse puisque cette correction s'applique à différentes architectures de transistor sans augmentation considérable du temps de calcul. Tout d'abord, nous évaluons et identifions les limites de la correction par le potentiel effectif usuel. Cette analyse nous conduit à proposer une formulation originale de potentiel effectif s'appuyant sur l'amélioration de la représentation du paquet d'ondes de l'électron. Nous montrons qu'en l'absence de champ électromoteur dans la direction du transport, cette formulation permet une description réaliste des effets de confinement quantique pour des architectures MOSFETs à double ou simple grille, sur substrat SOI et sur silicium massif. Des comparaisons avec des simulations Monte-Carlo semi-classiques mettent en évidence l'impact de ces effets sur le transport électronique dans un transistor MOSFET à double-grille de taille nanométrique. Enfin, notre formulation originale de potentiel de correction quantique est validée par l'obtention de résultats analogues à ceux d'un couplage Monte-Carlo Schrödinger.

MOTS-CLES : MOSFET, simulation Monte-Carlo, effets de quantification, potentiel de correction quantique, transport électronique, modélisation.

TITLE : Effective Potential approach for the Monte-Carlo simulation of electronic transport with quantization effects in MOSFETs devices

ABSTRACT

Today, the MOSFET transistor reaches nanometric dimensions for which quantum effects cannot be neglected anymore. It is thus necessary to develop models able to precisely describe the physical phenomena of electronic transport, and to account for the impact of these effects on the performances of the nanometric transistors. In this context, this work concerns the introduction of the quantization effects into a semi-classical Monte Carlo code for the simulation of electronic transport in MOSFETs devices. With this aim in view, the use of a quantum corrected potential is well suited since this correction can be applied to various transistor architectures without a large increase of CPU time. First of all, we evaluate and identify the limits of the usual effective potential correction. This analysis leads us to propose a novel effective potential formulation based on the improvement of the electron wave-packet representation. Without source-drain bias, this formulation is shown to allow a realistic description of the quantum confinement effects in double-gate, SOI and bulk MOSFETs architectures. Then, comparisons with semi-classical Monte Carlo simulations highlight the impact of the quantum confinement effects on electronic transport in a nanometric double-gate MOSFET. Finally, our novel formulation of quantum corrected potential is validated by obtaining results similar to those of a Monte Carlo/Schrödinger coupled method.

KEY WORDS : MOSFET, Monte-Carlo simulation, quantization effects, quantum corrected potential, electronic transport, modeling.

Thèse préparée au sein :

- du Laboratoire d'Electronique et des Technologies de l'Information (LETI), CEA-Grenoble, 38054 Grenoble, France
- de STMicroelectronics, 38926 Crolles, France
- de l'Institut d'Electronique Fondamentale (IEF), 91405 Orsay, France