

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche  
scientifique  
Université de Jijel

**M/ELE.E.OPT**  
**2013/06**



Faculté des sciences et de la technologie  
Département d'électronique



**MÉMOIRE**  
Présenté en vue de l'obtention du diplôme de MASTER  
En ELECTRONIQUE  
Option : Électronique et Optoélectronique

Thème :

*Contribution à l'étude du transport  
électronique dans un transistor MOS  
ultracourt en technologie SOI*

Réalisé par :

➤ KERBACHE Khaled

Encadreurs :

- Dr. REMMOUCHE Riad
- Dr. BOURIDAH Hachemi

Promotion : 2012/2013

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche  
scientifique  
Université de Jijel



Faculté des sciences et de la technologie  
Département d'électronique

**MÉMOIRE**  
Présenté en vue de l'obtention du diplôme de MASTER  
En ELECTRONIQUE  
Option : Électronique et Optoélectronique

Thème :

*Contribution à l'étude du transport  
électronique dans un transistor MOS  
ultracourt en technologie SOI*

Réalisé par :

➤ KERBACHE Khaled

Encadreurs :

➤ Dr. REMMOUCHE Riad

➤ Dr. BOURIDAH Hachemi

Promotion : 2012/2013

## Remerciements

*Je tiens à remercier tout d'abord ALLAH qui ma donnée la patience et le courage le long de tout le chemin de ma formation.*

*Je commence par remercier Monsieur :*

*REMMOUCHE Riad maitre de conférences et chef de département d'électronique de l'université de Jijel et je remercie aussi BOURIDAH Hachemi maitre de conférences de l'université de Jijel qui ont accepté et de nous encadrer le long de ce mémoire.*

*Je remercie tous les nombres de jury pour l'honneur qu'ils m'ont accordés en jugeant le présent travail.*

*Mes remerciements vont également à tous les enseignants de l'Université de JIJEL qui ont contribué à notre formation.*

*Je remercie tous ceux, qui de près ou de loin, m'ont Soutenu et aidé dans la réalisation de ce travail.*

# TABLE DES MATIERES

<i>Introduction Générale</i> .....	i-ii
------------------------------------	------

## Chapitre I

### Généralités et État de l'art sur les transistors MOSFET

I.1. Introduction .....	1
I.2. Structure du transistor Bulk .....	1
I.3. Principe de fonctionnement .....	2
I.3.1. Régime de fonctionnement des MOSFET .....	3
a) régime d'accumulation .....	4
b) régime de déplétion .....	4
c) régime de faible inversion .....	4
d) régime de forte inversion .....	5
I.4. Principales caractéristiques d'un MOSFET long .....	5
I.4.1. Tension du seuil .....	7
I.4.2. Caractéristiques courant- tension .....	7
I.4.3. Fin du CMOS conventionnel .....	8
I.4.3.1. Lois d'échelle .....	8
I.5. Les limites de fonctionnement lié à la miniaturisation .....	11
I.5.1. Les effets parasites du TMOS à canal réduit .....	12
I.5.2. Courant de fuite à travers l'oxyde .....	14
I.5.3. Déplétion de grille et pénétration de bore .....	15
I.6. Présentation des architectures multi-grilles .....	16
I.6.1. La technologie silicium sur isolant (SOI) .....	16
I.6.2. Transistor MOS sur SOI .....	17
I.6.3. Les transistors à grille multiples .....	18

I.6.3.1. La particularité du transistor PDSOI .....	20
I.6.3.2. La particularité du transistor FDSOI .....	21
I.7. Conclusion .....	22

## Chapitre II

### Transport électronique dans les MOSFET ultracourt

II.1. Introduction .....	23
II.2. Description du transport électronique.....	23
II.2.1. Transport balistique .....	24
I.2.2. Notion de la mobilité .....	24
II.2.3. Équation de transport de Boltzmann .....	25
II.2.4. Approximation usuelle de l'équation de Boltzmann.....	27
II.2.5. Les approches de type Monté Carlo semi-classique.....	28
II.3. Modélisation physique du silicium.....	30
II.3.1. Structure de bande .....	30
II.3.2. Concept de masse effective .....	31
II.3.3. Densité d'état.....	32
II.4. Effets quantiques .....	33
II.4.1. Effet de confinement quantique.....	33
II.5. Résolution de l'équation de Poisson à 2 dimensions.....	35
II.5.1. Condition de Dirichlet .....	38
II.5.2. Condition de Newman.....	38
II.6. Résolution de l'équation de Schrödinger.....	38
II.7. Modèles de dimensionnement des transistors MOS ultracourt.....	41
II.8. Nouvelles lois de réduction d'échelle .....	42
II.8.1. La technologie MOSFET double-grille.....	44
II.9. Conclusion .....	45

## Chapitre III :

### Résolution de l'équation de Schrödinger et Résultats de Simulation

III.1. Introduction .....	45
III.2. Présentation des méthodes Monte –Carlo quantique .....	45
III.2.1. Mouvement brownien et calcul stochastique .....	45
III.2.2. Principes et fondements du simulateur Monte Carlo .....	46
III.2.3. Les méthodes de Monte-Carlo appliquées à l'équation de Schrödinger .....	47
III.3. Les orbitales atomiques .....	47
III.3.1. Élément de mécanique quantique .....	47
III.3.2. Probabilité de présence .....	48
III.3.3. Équation de Schrödinger .....	48
III.4. Atome d'hydrogène .....	49
III.4.1. Hamiltonien du système .....	50
III.4.2. Résolution de l'équation de Schrödinger .....	50
a) Fonction d'onde.....	50
b) Énergie.....	53
III.5. Configuration électronique d'un atome .....	54
III.5.1. Principe d'exclusion de Pauli : .....	54
III.5.2.principe de Aufbau.....	54
III.5.3. Principe d'incertitude de Heisenberg .....	55
III.5.4. Relations de Planck-Einstein.....	56
III.6. Particule dans un puits de potentiel .....	56
III.6.1. Effet tunnel.....	59
III.7. Résolution de l'équation de Schrödinger spatiale à 2D.....	62
III.5.4. Relations de Planck-Einstein.....	55

III.8. Résultat de la simulation.....	64
III.8.1 Résolution numérique de l'équation de Poisson.....	64
III.8.2. Puits de potentiel infini.....	67
III.8.3. Barriere de potentiel .....	67
III.8.4. Résolution numérique de l'équation de Schrödinger .....	69
III.9. Conclusion.....	71
Références bibliographiques .....	74

# Liste des figures

<b>Figure I.1:</b> représentation schématique d'un transistor MOS bulk .....	1
<b>Figure I.2:</b> principe de fonctionnement d'un MOSFET .....	2
<b>Figure I.3:</b> Structure de bandes d'un NMOS .....	3
<b>Figure I.4:</b> Différents régimes de fonctionnement d'un MOSFET (canal N).....	4
<b>Figure I.5:</b> Réseau de la caractéristique du MOSFET .....	8 7
<b>Figure I.6:</b> illustration de la loi de Moore .....	10
<b>Figure I.7 :</b> Évolution de la technologie silicium.....	11 10
<b>Figure I.8 :</b> Évolution du potentiel surfacique en fonction de : (a) la longueur du canal (effet SCE), et (b) du potentiel du drain pour un transistor court (effet DIBL).....	13 12
<b>Figure I-9:</b> Caractéristiques d'un transistor idéal (en ligne pointillé), d'un transistor réel long (en ligne continue fine) et d'un transistor réel court (en ligne continue épaisse) .....	14 13
<b>Figure I.10:</b> schéma d'un substrat SOI....	16 16
<b>Figure I-11:</b> schéma d'un transistor MOS sur SOI .....	17 17
<b>Figure I.12:</b> MOSFET sur SOI pour différentes configurations de grille.....	18 17
<b>Figure I.13:</b> évolution de la technologie SOI au fil des années .....	18
<b>Figure I.14:</b> Image au MEB, d'une structure FinFET triple grille.....	19
<b>Figure I.15:</b> schéma d'un transistor SOI (a)entièrement déserté et (b) partiellement déserté.....	20 19
<b>Figure I.16:</b> l'augmentation du courant de drain résultant de l'effet Kink .....	21 20
<b>Figure II.1:</b> Bilan 1D de la fonction $f(x)$ entre $x$ et $x+dx$ durant $dt$ .....	26
<b>Figure II.2:</b> Principes de la méthode Monte Carlo dans un espace à deux dimensions.....	29
<b>Figure II.3:</b> Organigramme général de la méthode Monte-Carlo .....	30
<b>Figure II.4:</b> Les bandes d'énergie du Silicium.....	31
<b>Figure II.5:</b> Concentration d'électrons dans une capacité MOS en régime de forte inversion.....	34
<b>Figure II.6:</b> Quantification des niveaux d'énergie à l'interface du au confinement des porteurs .....	35
<b>Figure II.7:</b> maillage et conditions aux limites de la méthode de différences finis.....	37
<b>Figure II.8:</b> Schéma d'une structure DGMOS divisé en tranche de Schrödinger.....	39



<b>Figure II.11:</b> Les séquences de la résolution couplée des équations de Poisson et de Schrödinger .....	42
<b>Figure II.10:</b> Orientation du transport électronique et effet de champ sur le MOSFET double grille planaire.....	44
<b>Figure II.11:</b> orientation du transport électronique et effet de champ sur le MOSFET double grille quasi-planaire.....	44
<b>Figure II.12P:</b> orientation du transport électronique et effet de champ sur le MOSFET double grille quasi-planaire.....	45
<b>Figure III.1:</b> définition des cordonnés sphérique.....	49
<b>Figure III.2:</b> schéma illustrant les trois premiers niveaux d'énergie.....	53
<b>Figure III.3:</b> diagramme de Klechskowski .....	54
<b>Figure III.4:</b> Représentation des limites d'un puits de potentiel .....	57
<b>Figure III.5:</b> (a) barrière de potentiel et direction de propagation d'une onde incidente, réfléchie et transmise. (b) Densité de probabilité quand $E > V_0$ et $E < V_0$ .....	59
<b>Figure III.6:</b> Potentiel rectangulaire en deux dimensions.....	62
<b>Figure III.7:</b> solution numérique de l'équation de Poisson pour différents distribution .....	66
<b>Figure III.8:</b> variation de l'énergie potentielle en fonction de la largeur de potentiel ( $L = 2A^\circ$ ) .....	67
<b>Figure III.9:</b> variation de l'énergie potentielle en fonction de la largeur de potentiel ( $L=10A^\circ$ ) .....	68
<b>Figure III.10:</b> variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions $L_1 = L_2 = 1A^\circ$ , $n_1 = n_2$ .....	69
<b>Figure III.11:</b> variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions $L_1 = L_2 = 1A^\circ$ , $n_1 = 2n_2$ .....	70
<b>Figure III.12:</b> variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement e deux dimensions $L_1 = L_2 = 1A^\circ$ , $n_1 = 2n_2$ .....	70
<b>Figure III.13:</b> variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions $L_1 = L_2 = 1A^\circ$ , $n_2 = 2n_1$ .....	71

# *Introduction Générale*

Depuis l'invention du premier transistor en 1947, puis celle du circuit intégré en 1958, l'industrie des semi-conducteurs cherche toujours comment faire évoluer les technologies des semi-conducteurs vers des géométries de plus en plus fines. Les circuits plus petits réduisent la surface globale de la puce électronique et permettent donc l'augmentation de la densité d'intégration (produire plus de transistors sur un même substrat), et l'amélioration des performances électriques. Ceci est rendu possible par la diminution de la taille des transistors; la longueur caractéristique d'un transistor qui distingue une génération de transistor de la suivante est la longueur de grille  $L_G$  [1].

La diminution des dimensions des composants de la microélectronique a pour effet la diminution du coût et l'amélioration des performances des composants, mais ceci conduit cependant à l'apparition d'effets néfastes tel que l'effet DIBL (Drain Induced Barrier Lowering), les effets canaux courts, les phénomènes de nature quantique, le courant tunnel de grille, etc.

Pour minimiser ces effets, l'une des solutions consistant à modifier l'architecture des composants actuels, notamment l'augmentation du grilles afin d'avoir un meilleur contrôle du flux de courant, paraît une solution de choix pour l'avenir de la microélectronique, il est intéressant de se tourner vers de nouvelles architectures de transistors pour atteindre les prochains objectifs fixés par la feuille de route internationale des semi-conducteurs (ITRS : International Technology Roadmap of Semiconductor), l'utilisation d'architectures MOSFET multi grille sur SOI (Silicon On Insulator : Silicium sur Isolant) est très sérieusement envisagée. Ces architectures sont, en effet, particulièrement prometteuses en termes de contrôle électrostatique de canal [2].

Dans ce contexte, ce mémoire a été consacré à l'étude des transistors MOS ultracourts à grilles multiples par simulation particulière Monte Carlo sur SOI (Silicium sur Isolant).

Le premier chapitre de ce mémoire décrit la structure des transistors à effet de champ de type MOS Bulk, et leur principe de fonctionnement, ainsi que les problèmes engendrés par sa miniaturisation. Nous exposerons ensuite la technologie SOI à une grille, à savoir les technologies SOI multiple grille. La description du transport électronique et la présentation des équations régissant le fonctionnement de composants ultracourts est présentée dans le chapitre deux. Il s'agit des équations de Poisson et de Schrödinger.

Dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats de simulation de la solution numérique des équations de Poisson et Schrödinger.

Nous terminerons, enfin, notre étude par une conclusion générale et quelques perspectives.

---

**CHAPITRE I :**

***Généralités et État de l'art sur les  
Transistors MOSFET***

---

## I.1 Introduction :

Ce chapitre a pour but de poser la problématique des défis de l'industrie de la microélectronique. Nous rappelons, dans un premier lieu la structure MOS, le principe et les différents régimes de fonctionnement d'un transistor à effet de champ.

Nous présenterons ensuite les effets de la miniaturisation sur les transistors MOS, et nous exposerons l'une des solutions prévues pour minimiser ces effets.

## I.2 Structure du transistor MOS bulk :

Le nom du transistor MOS découle de sa structure verticale : Métal/Oxyde/Semi-conducteur. Cette structure, présentée sur le schéma de la Figure (I-1), est celle d'une capacité Conducteur/Isolant/Semi-conducteur.

Le transistor MOS bulk (ou standard) est constitué d'un substrat semi-conducteur sur lequel repose une fine couche d'oxyde isolant ( $\text{SiO}_2$ ) d'épaisseur  $t_{\text{ox}}$ . Une couche conductrice (métal ou poly silicium fortement dopé), appelée électrode de grille, est aussi dopée sur l'oxyde. Enfin, deux régions fortement dopées de profondeur  $X_j$ , appelées source et drain. En raison de procédé de fabrication, la grille -de longueur  $L_g$ - recouvre légèrement les régions de source et de drain. La région entre les jonctions de source et de drain est appelée canal et est définie par sa longueur  $L$  et sa largeur  $W$ . Nous nous limiterons pour l'instant à cette description succincte du dispositif MOSFET bulk [2]

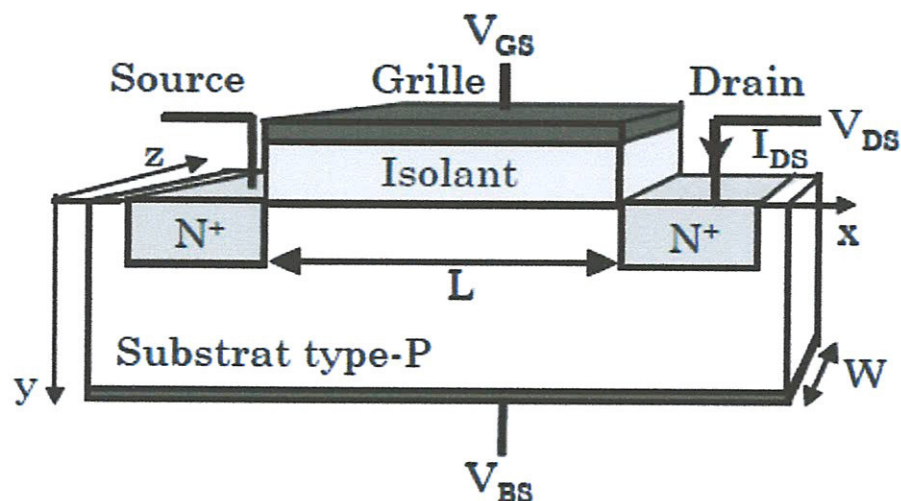


Figure I.1 : représentation schématique d'un transistor MOS bulk

### I.3 Principe de fonctionnement :

Le principe de fonctionnement d'un tel dispositif est schématisé en Figure (I.2). La tension de grille crée un champ vertical qui, par l'intermédiaire de la capacité MOS, module localement la densité de porteurs libres à l'interface Substrat/Oxyde permettant ainsi de commander sa conductivité. Ce phénomène est appelé « effet de champ ».

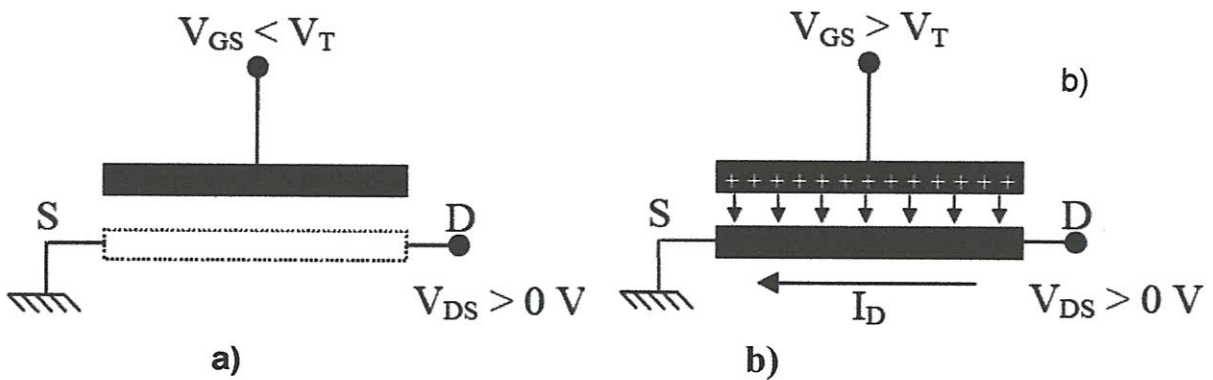


Figure I.2 : principe de fonctionnement d'un MOSFET. a) État bloqué. b) État passant

Lorsque la tension de grille ne permet pas de charger «convenablement» les électrodes de la capacité MOS, aucun courant ne peut circuler entre la source et le drain quelle que soit la tension appliquée sur l'électrode de drain; c'est l'état bloqué. Comme illustré en Figure (I-2.a), pour le type de transistor étudié, la tension de grille  $V_{GS}$  appliquée doit rester inférieure à une tension de seuil notée  $V_T$ . Ces transistors bloqués à tension de grille nulle sont dits «normally off» (par opposition à «normally on») [3].

Lorsque  $V_{GS}$  devient supérieure à  $V_T$ , le nombre de porteurs libres à l'interface Substrat/Oxyde est suffisant pour qu'ils forment un « canal » conducteur (si et seulement s'ils sont du même type que ceux des réservoirs de source et drain). Si, comme illustré sur la Figure (I-2.b), les porteurs du canal sont des électrons, le transistor est dit à canal N et est appelé NMOS. Lorsque la tension de drain devient positive, un courant de drain  $I_D$  peut circuler dans le canal, c'est l'état passant.

### I.3.1 Régimes de fonctionnement du MOSFET :

Il existe principalement trois régimes de fonctionnement électrique du MOSFET selon la polarisation de grille. Le régime sous le seuil, le régime d'inversion faible et le régime de forte inversion [4]. Pour comprendre leurs origines, commençons par décrire le diagramme de bandes d'une structure MOS à substrat de type P (de concentration en dopants accepteurs  $N_A$ ) en condition de bandes plates Figure (I-3).

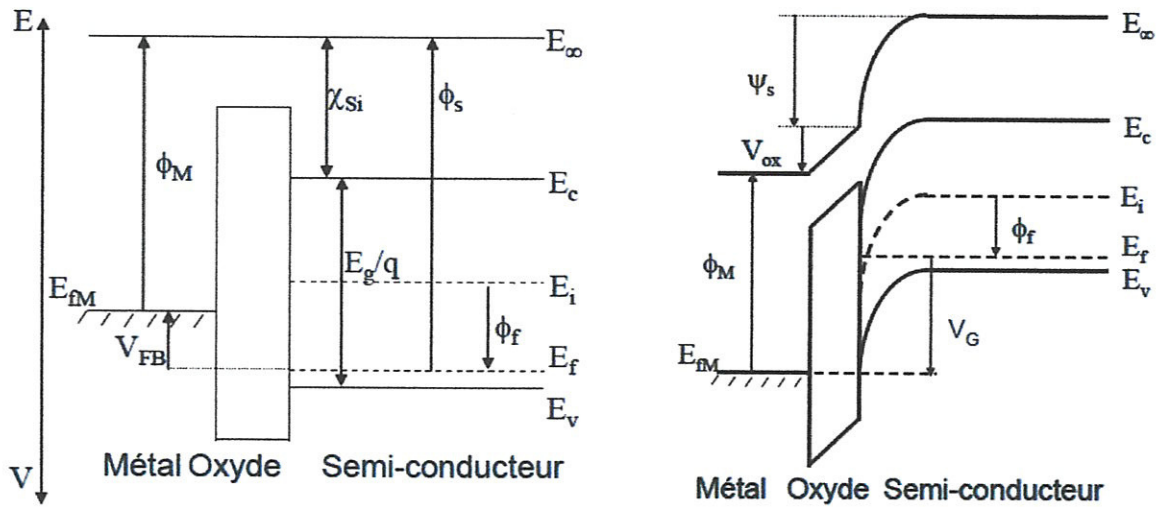


Figure I.3 : Structure de bandes d'un NMOS (substrat de type P), à gauche en régime de bande plate, à droite dans un régime d'inversion faible.

Le niveau de Fermi est donné par  $E_f = E_i - q\Phi_f$ , avec  $\Phi_f$  donné par l'équation :

$$\Phi_f = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right) \quad (I-1)$$

$k_B$  étant la constante de Boltzmann,  $T$  la température,  $q$  la charge élémentaire et  $n_i$  la concentration intrinsèque des porteurs du matériau.

La tension de bande plate  $V_{FB} = \phi_m - \phi_s$  est la tension qu'il faut appliquer sur la grille pour que le potentiel à l'interface oxyde/semi-conducteur  $\psi_s$  soit nul. La différence de potentiel  $\psi_s$ , appelée potentiel de surface, représente la courbure de bande entre la surface et le volume du semi-conducteur.

Selon la valeur de  $\Psi_s$ , quatre régimes peuvent être définis [4] (appliqué ici au cas du transistor NMOS) :

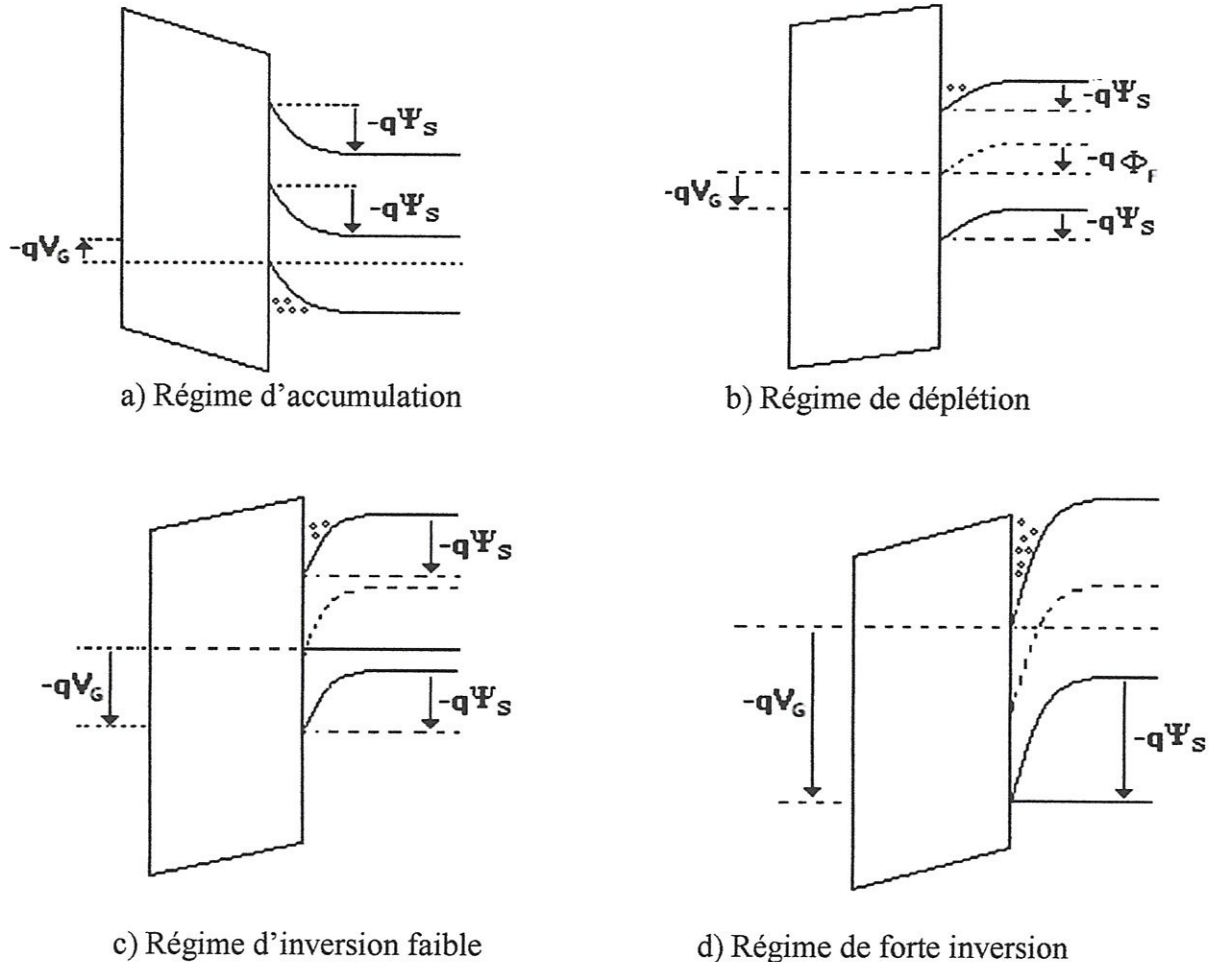


Figure I.4 : Différents régimes de fonctionnement d'un MOSFET (canal N).

**a) Régime d'accumulation**  $\Psi_s < 0$  soit  $V_G < V_{FB}$  : Les porteurs majoritaires du substrat sont attirés à l'interface diélectrique grille/semiconducteur. Le transistor est à l'état bloqué (régime sous le seuil).

**b) Régime de déplétion**  $0 < \Psi_s < \Phi_f$  ( $V_G > V_{FB}$ ) : les porteurs majoritaires sont repoussés de l'interface. Il se crée alors une zone de charge d'espace dépourvue des porteurs libres, le transistor est toujours bloqué (régime sous le seuil).

**c) Régime de faible inversion**  $\Phi_f < \Psi_s < 2\Phi_f$  soit  $V_{FB} < V_G < V_T$  les concentrations de porteurs majoritaires et minoritaires sont égales en surface.



**d) Régime de forte inversion**  $\Psi_s > 2\Phi_f$  soit  $V_G > V_T$  : la concentration en surface de porteurs minoritaires devient supérieure à la concentration de porteurs majoritaires dans le volume de semi conducteur. Un grand nombre de porteurs libres sont présent dans le canal ; le transistor peut alors conduire.

#### I.4 Principales caractéristiques d'un MOSFET long :

Dans le régime de faible inversion (régime sous le seuil), le courant de drain, dominé par un courant de diffusion dans les jonctions, est donné par :

$$I_{DS} = I_{th} \exp \left( \frac{V_{GT}}{S} \ln 10 \right) \left[ 1 - \exp \left( \frac{-qV_{DS}}{k_B T} \right) \right] \quad (I.2)$$

Où  $V_{GT} = V_G - V_T$ . Le courant  $I_{th}$  donné par :

$$I_{th} = D C_{dep} \frac{w}{L} \frac{k_B T}{q} = \mu_0 C_{dep} \frac{w}{L} \left( \frac{k_B T}{q} \right)^2 \quad (I.3)$$

Où  $\mu_0$  représente la mobilité du porteurs, D le coefficient de diffusion,  $C_{dep}$  la capacité de déplétion, donnée par  $\frac{\epsilon_{si}}{T_{dep}}$  avec  $T_{dep}$  la profondeur maximale de la zone de déplétion, égale à :

$$T_{dep} = 2 \sqrt{\frac{\epsilon_{si} \Phi_f}{q N_A}} \quad (I.4)$$

W et L sont respectivement la largeur et la longueur du canal.

La pente sous le seuil S, s'exprime en V/déc, est donnée par :

$$S = \left( \frac{\partial \log I_D}{\partial V_G} \right)^{-1} = \ln(10) \frac{k_B T}{q} \frac{\partial V_G}{\partial \psi_s} = 2.3 \frac{k_B T}{q} \left( 1 + \frac{C_{dep} + C_{it}}{C_{ox, eff}} \right) \quad (I.5)$$

$C_{ox}$  représente la capacité de l'oxyde et  $C_{it}$  la capacité liée aux états d'interface

$$S = \left( \frac{\partial \log I_D}{\partial V_G} \right)^{-1} = \ln(10) \frac{k_B T}{q} \frac{\partial V_G}{\partial \psi S} = 2.3 \frac{k_B T}{q} \left( 1 + \frac{C_{dep} + C_{it}}{C_{ox,eff}} \right) \quad (I.5)$$

$C_{ox}$  représente la capacité de l'oxyde et  $C_{it}$  la capacité liée aux états d'interface

De plus, pour une tension  $V_G$  nulle, un courant très faible circule dans le composant appelé courant de fuite dont l'expression est donnée par [5] :

$$I_{off} = I_{th} \exp\left(\frac{-V_T \cdot \ln 10}{S}\right) \quad (I.6)$$

$I_{off}$  : courant correspondant à la tension de seuil  $V_T$

Dans le régime de forte inversion, on distingue deux régimes principaux de fonctionnement du MOSFET selon la polarisation de drain. Pour  $V_D < V_G - V_T$ , on se trouve dans le régime dit ohmique, c'est-à-dire que le canal se comporte comme une résistance dont la valeur est modulée par la polarisation de la grille. Pour des tensions de drain faibles, c'est-à-dire  $V_D \ll V_G - V_T$ , on se trouve dans le régime dit linéaire. Dans ce cas, le courant de drain est directement proportionnel à la tension de drain. Pour des tensions légèrement plus fortes, l'évolution du courant de drain est quadratique avec  $V_D$ . L'expression du courant de drain dans le régime ohmique (linéaire puis quadratique) est donné par :

$$I_{Dli} = \frac{W_{eff}}{L_{eff}} C_{ox,eff} \mu_{eff} \left( V_G - V_T - \frac{V_D}{2} \right) V_D \quad (I.7)$$

Pour  $V_D \geq V_G - V_T$ , on se trouve dans le régime dit de saturation. Il se crée un point de pincement côté drain où la charge d'inversion s'annule ; lorsque  $V_D$  augmente, le point de pincement se rapproche de la source. Toute tension additionnelle sera répercutée dans cette zone libre de porteurs mobiles. Ainsi le courant de drain devient indépendant de la polarisation de drain et son expression prend la forme :

$$I_{Dsat} = \frac{1}{2} \frac{W_{eff}}{L_{eff}} C_{ox,eff} \cdot \mu_{eff} (V_G - V_T)^2 \quad (I.8)$$

### I.4.1 Tension de seuil :

La tension de seuil est l'un des paramètres les plus importants dans l'étude de transistor MOS, est définie comme étant la tension à appliquer sur la grille pour obtenir la forte inversion, c'est-à-dire [2] :  $\psi_s = 2.\phi_f$

Où  $\psi_s$  : potentiel de surface

$\phi_f$  est le potentiel correspond au déplacement de niveau de Fermi

Dans le cas idéal, l'expression de la tension de seuil est donnée par :

$$V_T = 2.\phi_f + \frac{\sqrt{4.q.N_A.\epsilon_{si}.\phi_f}}{C_{ox}} \quad (I.9)$$

Où  $N_A$  représente le dopage de substrat.

Mais lorsqu'on incorpore les effets de charges fixes dans l'oxyde et la différence des travaux de sortie (du métal et du semi-conducteur), il apparaît un décalage de la tension de seuil d'une quantité égale à la tension de bande plate  $V_{FB}$  ; donc la tension de seuil devient :

$$V_T = V_{FB} + 2.\phi_f + \frac{\sqrt{4.q.N_A.\epsilon_{si}.\phi_f}}{C_{ox}} \quad (I.10)$$

### I.4.2 Caractéristique courant- tension :

A partir des expressions du courant de drain en fonction des tensions drain - source et grille- source, on représente alors les caractéristiques de sortie et de transfert du MOSFET qui est donnée sur la figure (I.5).

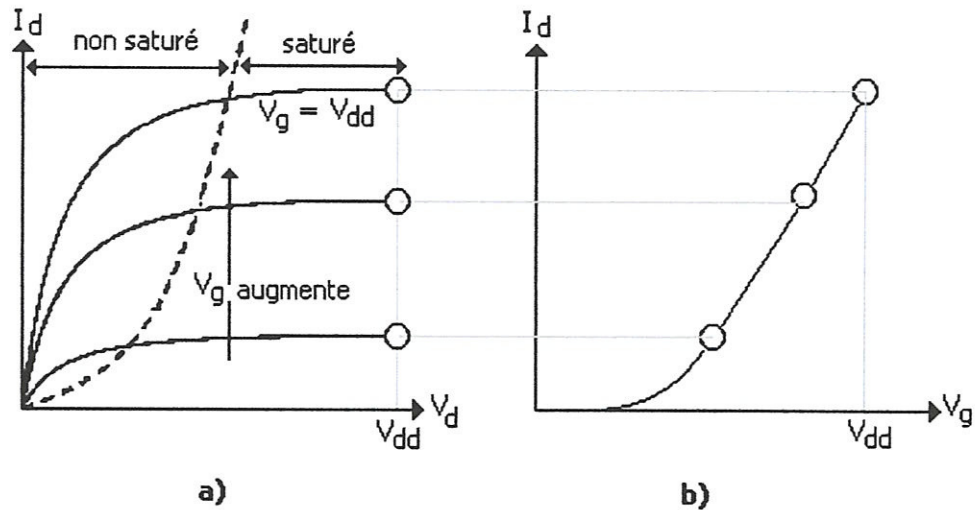


Figure I.5 : Réseau de la caractéristique du MOSFET a) caractéristique de sortie  
b) caractéristique de transfert.

### I.4.3 Fin du CMOS conventionnel :

#### I.4.3.1 Loi d'échelle :

Le monde de la microélectronique est en perpétuelle recherche d'améliorations de la rapidité et de la densité d'intégration de ses composants élémentaires. La réduction de la taille du composant, c'est-à-dire de sa longueur de grille  $L_G$ , le rend intrinsèquement plus rapide car le temps de transit des porteurs dans le canal diminue :  $t = L_G^2 / (\mu_{eff} \cdot V_{DS})$  à faible  $V_{DS}$ .

Cette miniaturisation doit être effectuée sans dégrader les caractéristiques du transistor. Pour cela, il faut adapter les paramètres géométriques (épaisseur d'oxyde  $T_{ox}$ , largeur de canal  $W$ ...), électriques ( $V_{DD}$ ...), et physiques (dopages) en fonction de la longueur de grille visée.

Ces paramètres de dimensionnement suivent ce que l'on appelle les lois d'échelle. Par exemple, afin de conserver le pouvoir de contrôle de la grille identique quelle que soit la longueur  $L_G$ , il faut travailler à capacité d'oxyde de grille par unité de largeur

$$C_{ox} \cdot L_G = \frac{\epsilon_{ox}}{T_{ox}} \cdot L_G \text{ constante (} C_{ox} \text{ capacité surfacique et } \epsilon_{ox} \text{ permittivité diélectrique du SiO}_2\text{)}.$$

Cela impose la réduction de  $T_{ox}$  proportionnellement à  $L_G$ . La diminution de l'épaisseur  $T_{ox}$  doit entraîner une diminution de la tension d'alimentation  $V_{DD}$  pour que le champ électrique

maximum dans l'oxyde, qui vaut  $V_{DD}/T_{ox}$ , ne dépasse pas le seuil de claquage. La réduction de  $V_{DD}$  doit en outre permettre de mieux gérer le bilan énergétique d'un circuit CMOS en fonctionnement.

Les lois d'échelle idéales permettent de conserver l'équation de Poisson invariante par rapport à la miniaturisation, c'est-à-dire que les champs électriques présents dans un transistor court sont toujours identiques à ceux apparaissant dans des transistors plus longs. Un dispositif ainsi dimensionné bénéficie des bienfaits de la miniaturisation sans subir de dégradation de ses caractéristiques. On vérifie facilement que l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial V^2}{\partial x^2} + \frac{\partial V^2}{\partial y^2} + \frac{\partial V^2}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_{si}} \quad (\text{V potentiel électrostatique, } \rho \text{ densité de charge) reste}$$

invariante si l'on substitue les variables par  $V' = 1/K \times V$ ,  $x' = 1/K \times x$ ,  $y' = 1/K \times y$ ,  $z' = 1/K \times z$  et  $\rho' = K \times \rho$ . On obtient ainsi les lois d'échelle détaillées au Tableau 1 : si toutes les dimensions et les tensions sont réduites d'un facteur  $1/K$  il faut augmenter les dopages des caissons et du substrat d'un facteur  $K$ .

	Transistor MOS et circuit	Facteur multiplicatif
		<b>K&gt;1</b>
<b>Dimensionnement du transistor</b>	Dimensions du transistor $T_{ox}$ , LG, W	<b>1/K</b>
	Tension	<b>1/K</b>
	Concentrations de dopants	<b>K</b>
<b>Effets sur les transistors</b>	Courant [A]	<b>1/K</b>
	Capacité [F]	<b>1/K</b>
<b>Effets sur les circuits</b>	Temps de retard (CV/I)	<b>1/K</b>
	Puissance dissipée par circuit (VI)	<b>1/K<sup>2</sup></b>
	Densité Puissance (P/Surface)	<b>1</b>

Tableau1 : lois d'échelles des transistors MOS [6]

Ces lois d'échelle renforcent le contrôle de la grille, quantifié par la capacité surfacique  $C_{ox} = \frac{\epsilon_{ox}}{T_{ox}}$ , qui est augmentée d'un facteur K. Elles induisent aussi une diminution proportionnelle au facteur 1/K du courant  $I_D$  et de la capacité totale de grille  $C_G = \frac{\epsilon_{ox}}{T_{ox}} \cdot L_G W$ . Ainsi, le rapport  $I_D/C_G$  reste inchangé par changement d'échelle ainsi que le courant normalisé par la largeur  $I_D/W$ . La charge surfacique d'inversion  $Q_{inv} = C_{ox} \cdot (V_G - V_T)$  restant invariante, il est à noter que malheureusement le courant sous le seuil, de nature diffusive augmente aussi d'un facteur K [6]. Cependant, ce courant reste suffisamment faible pour être négligé dans les dispositifs légèrement submicroniques.

L'utilisation de transistors dimensionnés selon ces lois d'échelle a permis d'améliorer les performances des circuits CMOS sans faire aucun compromis. La densité d'intégration est augmentée d'un facteur  $K^2$  ( $\propto W \times LG$ ), la puissance surfacique est diminuée du même facteur :  $P=U \times I$  et la vitesse ( $\propto I / (C_G \times V)$ ) progressent d'un facteur K. Cela a, entre autres, permis une augmentation exponentielle du nombre de transistors par puce au cours du temps, nommée communément loi de Moore (Figure I.6).

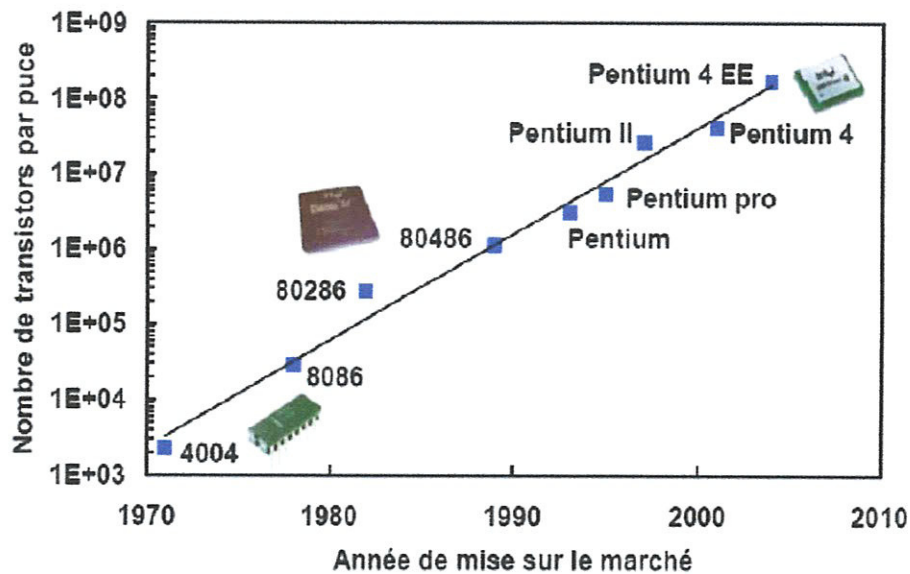


Figure I.6 : illustration de la loi de Moore

D'après la loi de Moore (figure I.6 qui traduit une constatation faite depuis une trentaine d'année), la densité des transistors sur une surface donnée peut être doublée ou la

taille du transistor MOSFET-Bulk peut être réduite par un facteur de 0.7 tous les deux ans (Figure I.7), c'est ce qu'on appelle le « scaling » CMOS.

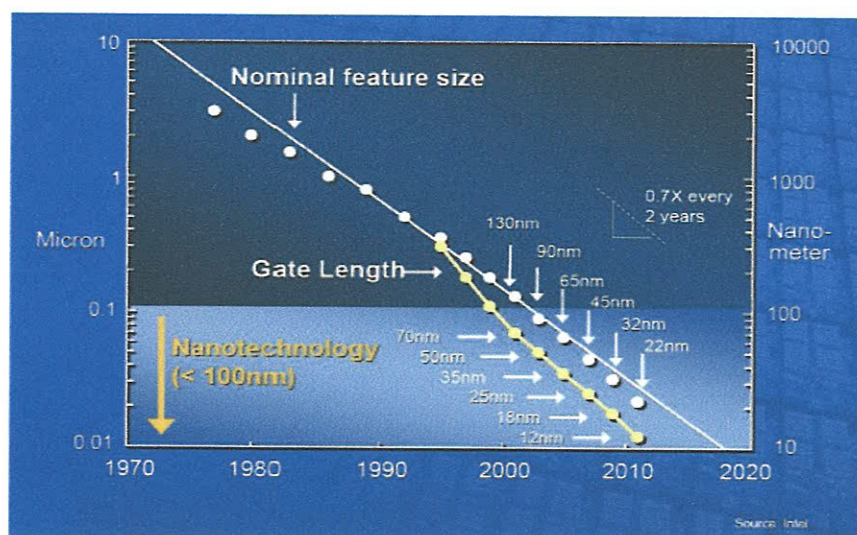


Figure I.7 : Evolution de la technologie silicium

Mais depuis que cette technologie est entrée dans l'ère du nanométrique, de nombreux effets néfastes apparaissent et deviennent non négligeables ; certains d'entre eux deviennent difficilement contournables et nous orientent vers des solutions technologiques complexes et coûteuses. L'ITRS prévoit qu'il ne reste pas plus de cinq années de réduction des dimensions (d'évolution) de la technologie MOSFET bulk ; ensuite ce transistor ne pourra plus être réduit et la technologie des processus permettant de supprimer ces effets néfastes coûtera trop chère, ce qui aura pour effet d'augmenter le prix des puces [7].

### I.5 Les limites de fonctionnements liés à la miniaturisation :

Avec la course à l'intégration et la réduction d'échelle, des effets parasites apparaissent détériorant le fonctionnement du transistor et mettent en défaut le modèle du transistor MOS idéal. Ainsi la loi de Moore ne peut plus être appliquée à la lettre et il faut introduire une nouvelle thématique dans le travail d'optimisation du transistor : l'intégration de nouveaux matériaux.

### I.5.1 Les effets parasites du transistor MOS à canal réduit :

Les principaux effets parasites liés à la réduction de la longueur du canal sont l'effet de canal court souvent désigné par le sigle SCE qui provient de l'anglais *short canal effect* et l'effet drain désigné par le sigle DIBL qui provient de *drain induced barrier lowering*. Ces deux effets ont pour conséquence de réduire la tension de seuil  $V_{th}$  du transistor MOS. On rencontre également le terme roll-off qui décrit la chute totale de  $V_{th}$  entre le transistor long et le transistor court.

Dans un transistor long (de 5  $\mu\text{m}$  par exemple), le potentiel de surface (le long du canal) est plat pratiquement sous l'ensemble de la longueur de la grille (sauf au voisinage des jonctions où il remonte sur une distance d'une dizaine de nm, dans les zones de charges d'espace). Or les expansions des zones de charges d'espaces autour des jonctions ne dépendent pas de la longueur du canal. C'est pourquoi dans un transistor court (de longueur inférieure à 0,18  $\mu\text{m}$ ) le potentiel de surface peut être complètement dominé par les zones de charges d'espaces. La partie plate peut être réduite jusqu'à une disparition totale. La Figure I-8.a illustre l'évolution du potentiel surfacique en fonction de la longueur du canal. Lorsqu'en plus le drain est polarisé, la barrière de potentiel se réduit davantage comme le montre la Figure I-8.b [8].

Du fait de la taille non négligeable des zones de déplétion associées aux jonctions des sources et drain par rapport à la longueur du canal, la tension  $V_G$  nécessaire à dépléter le substrat et créer la couche d'inversion est plus faible pour un transistor à canal court.



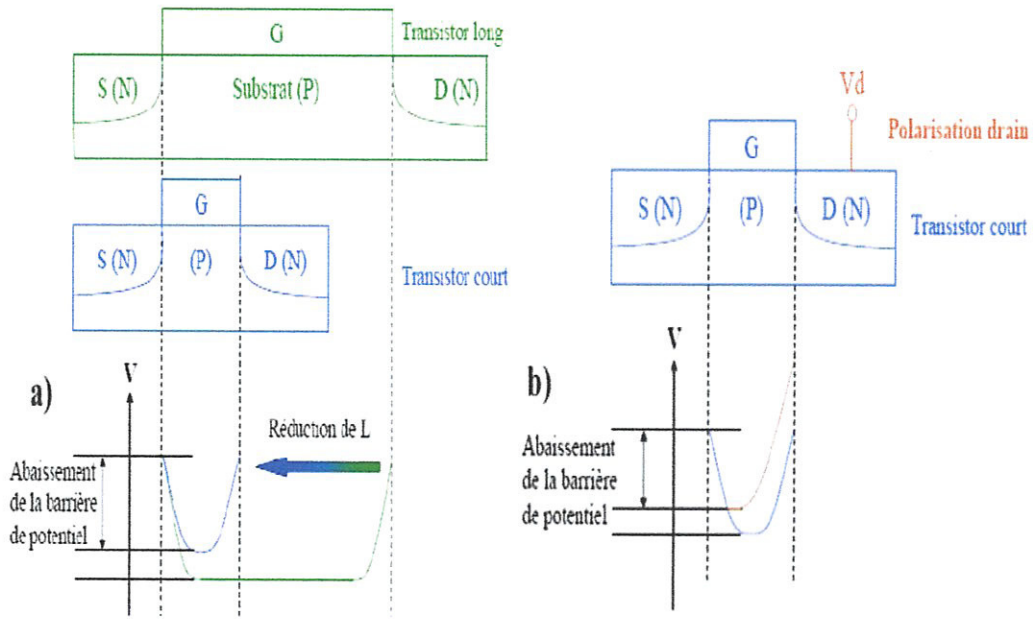


Figure I.8 : Évolution du potentiel surfacique en fonction de : (a) la longueur du canal (effet SCE), et (b) du potentiel du drain pour un transistor court (effet DIBL)

Différents modèles ont été proposés pour expliquer la chute de la tension seuil du transistor, dont celui basé sur une transformation tension-dopage [9]. Le principe consiste à remplacer le dopage réel par un dopage apparent plus faible, qui prend en compte l'influence des jonctions source et drain. Intuitivement, une réduction du dopage du substrat induit une diminution de la tension seuil du transistor. La tension seuil ainsi calculée s'écrit :

$$V_{th} = V_{thL \rightarrow \infty} - SCE \left( \frac{T_{ox}}{\epsilon_{ox} L^2} \right) - DIBL \left( \frac{T_{ox}}{\epsilon_{ox} L^2} \right) \quad (I.11)$$

Où  $SCE \left( \frac{T_{ox}}{\epsilon_{ox} L^2} \right)$  : correspond à la chute de tension seuil due à l'effet canal court.

$DIBL \left( \frac{T_{ox}}{\epsilon_{ox} L^2} \right)$  : correspond à la chute de tension seuil due à l'effet drain,

Et  $V_{thL \rightarrow \infty}$  est la tension de seuil pour un dispositif à canal infiniment long

La Figure I-9 illustre la chute de  $V_{th}$  dans le cas d'un transistor court due aux effets SCE et DIBL. Cette chute de la tension du seuil s'accompagne d'une augmentation de  $I_{on}$

(courant de drain correspondant à l'état « passant » du transistor), mais également d'une augmentation de  $I_{off}$  (courant de drain correspondant à l'état « bloqué » du transistor) [10].

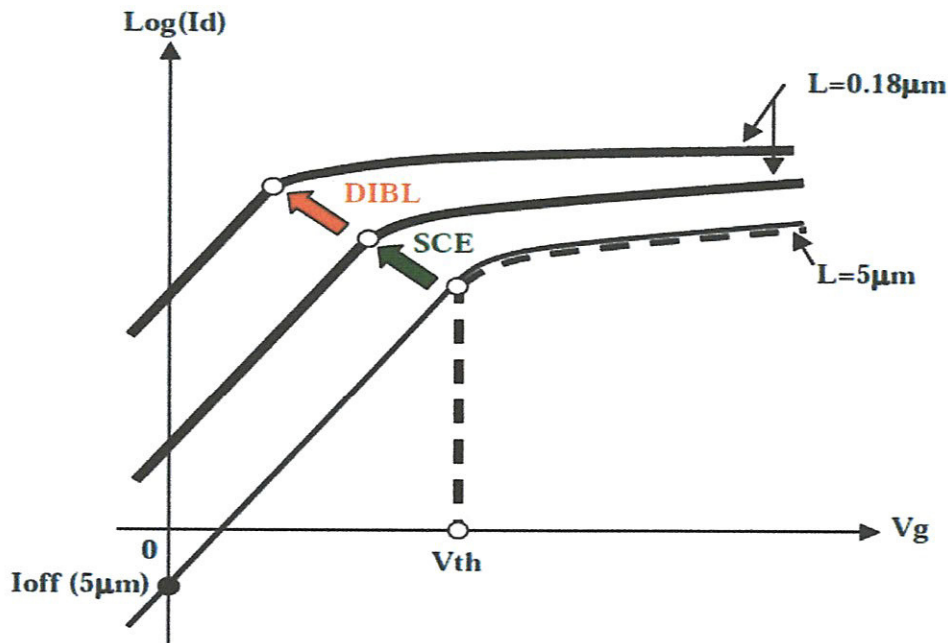


Figure I-9 : Caractéristiques d'un transistor idéal (en ligne pointillée), d'un transistor réel long (en ligne continue fine) et d'un transistor réel court (en ligne continue épaisse).

D'après l'expression (I.11) de  $V_{th}$ , il est clair que limiter la chute de la tension seuil revient soit à diminuer l'épaisseur  $T_{ox}$ , soit à augmenter la permittivité diélectrique  $\epsilon_{ox}$  de l'isolant de la grille.

### I.5.2 Courant de fuite à travers l'oxyde :

Il ressort clairement du paragraphe précédent que réduire l'épaisseur de l'oxyde  $T_{ox}$  permet de limiter les effets canal court et ainsi réduire  $I_{off}$  tout en augmentant  $I_{on}$  (voir Figure I-9 et Équation I-11).

Cependant réduire  $T_{ox}$  s'accompagne aussi d'effets parasites nuisibles au bon fonctionnement du transistor. En effet, un oxyde ultra mince de quelques monocouches atomiques n'est plus parfaitement isolant et le courant de type tunnel qui passe à travers l'oxyde est de moins en moins négligeable. Il peut même compromettre certaines applications telles que la basse consommation. Or le problème du courant tunnel est intrinsèque au

matériau et ne pourra être résolu que par l'intégration de matériaux à forte permittivité diélectrique. Ces matériaux permettent d'augmenter la valeur de  $C_{ox}$  sans diminuer l'épaisseur du diélectrique, évitant ainsi les pertes par effet tunnel.

### 1.5.3 Déplétion de grille et pénétration du bore :

La déplétion de grille correspond à la zone de charge d'espace présente dans le poly-silicium de la grille à l'interface avec l'oxyde venant du fait que la grille n'est pas dopée à dégénérescence. Cette zone de charge d'espace est équivalente à une capacité qui vient s'ajouter en série avec la capacité de l'oxyde de grille, réduisant la capacité totale  $C_{ox}$  :

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_{ox}}{T_{ox} + \frac{\epsilon_{ox}}{\epsilon_{si}} T_{dep}} \quad \text{Avec } T_{dep} \text{ l'épaisseur de la zone de déplétion dans le poly-silicium.}$$

Pour des oxydes de grille supérieurs à 50 Å d'épaisseur, la zone de déplétion dans la grille est suffisamment mince pour être négligée. Mais pour les oxydes minces, l'épaisseur de la couche de déplétion devient du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la couche d'oxyde et le gain en courant obtenu grâce à la réduction de l'épaisseur de l'oxyde de grille est perdu.

Dans le cas de grilles en matériaux semi conducteurs, minimiser la déplétion de grille se résume à augmenter la densité de dopants à l'interface avec l'oxyde. Cependant l'augmentation des doses d'implantation est limitée par les problèmes de pénétration de ces dopants à travers l'oxyde de grille, particulièrement pour les PMOS dopés au bore. Cette diffusion à travers l'oxyde peut engendrer une dégradation de la qualité de l'oxyde et augmenter le nombre d'impuretés dans le canal, diminuant ainsi la mobilité des porteurs dans le canal. L'utilisation d'oxydes nitrurés est un moyen de réduire cette diffusion. Cependant il a été montré [11] que même pour un dopage élevé, la déplétion ne pourra pas descendre en dessous de  $4 \text{ \AA}$  pour les NMOS et  $6 \text{ \AA}$  pour les PMOS avec une grille en poly-silicium du fait de la saturation de la concentration active des dopants. Le moyen radical de s'affranchir de la déplétion de grille est l'utilisation d'une grille métallique.

Ces limitations entraînent de nouveaux challenges pour maintenir l'augmentation des performances demandée par la feuille de route de l'ITRS (International Technology Roadmap

for Semiconductors). Une solution prometteuse est l'utilisation de films minces de silicium pour contrôler les effets canaux courts dans les dispositifs de faible longueur de grille. C'est pourquoi les technologies FDSOI qui seront décrites dans la partie suivante sont considérées comme un des meilleurs candidats pour les futures générations de technologie CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor).



## I.6 Présentation des architectures multigrilles :

Parmi les alternatives possibles aux transistors MOS massifs 'traditionnels', les architectures multigrilles sur SOI (Silicon On Insulator : Silicium sur Isolant) sont particulièrement prometteuses en terme de contrôle électrostatique de canal [12]. Après avoir présenté la technologie SOI, différentes techniques permettant de réaliser les architectures multigrilles seront décrites et leur performances électriques actuelles comparées. Enfin, leur formidable potentiel d'innovation sera évoqué.

### I.6.1 La technologie Silicium sur Isolant (SOI) :

Les substrats Silicium sur Isolant (SOI) sont des substrats dans lesquels un oxyde enterré (BOX pour « buried oxide ») sépare la couche de silicium active (où sont fabriqués les transistors) du substrat de silicium massif (figure I.10). Dans un transistor MOSFET, seule la couche supérieure de silicium située entre la source et le drain est vraiment utile pour le transport des porteurs. Le reste du substrat de silicium ne sert en réalité que de support mécanique. D'où l'intérêt du SOI, qui offre une isolation diélectrique parfaite entre la couche active des dispositifs et le substrat de silicium massif [13].

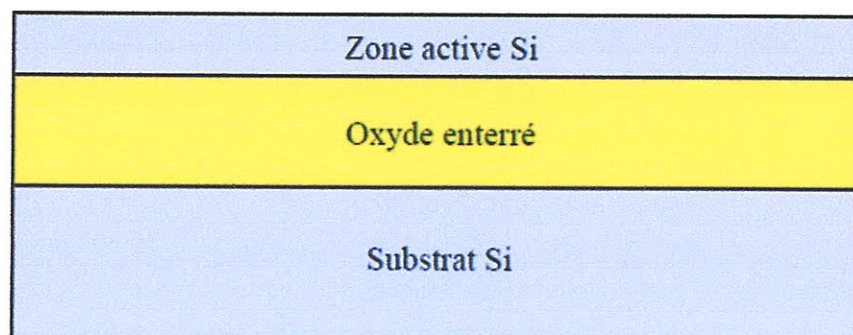


Figure I.10 : schéma d'un substrat SOI

La très nette amélioration de cette technologie en qualité et en coût la rend très compétitive et ce d'autant plus qu'elle permet une bonne compatibilité avec les technologies CMOS actuelles [14]. Par exemple, la méthode révolutionnaire nommée «Smart cut», permet à l'heure actuelle de fabriquer des substrats SOI dits «Unibond» avec des couches actives de silicium ultrafines et de très bonne qualité cristalline [15]. On peut aussi citer la technologie SON (Silicon On Nothing) qui permet d'associer des zones « SOI » et « non SOI » sur une même puce [16].

### I.6.2 Transistor MOS sur SOI :

Le schéma d'un transistor MOS sur SOI est présenté en Figure I-11. On constate que les caissons source et drain et la zone active de silicium, tous d'épaisseur  $T_{Si}$ , reposent directement sur l'oxyde enterré ('buried oxide' en anglais) d'épaisseur  $T_{box}$ .

L'utilisation de substrats SOI permet la réalisation de transistor MOS à plus fort pouvoir bloquant et plus rapides. Dans un transistor MOS massif, le substrat de silicium est le siège d'un courant de fuite dû au percement volumique. Dans un MOS sur SOI, en lieu et place de cette zone de percement, on trouve un isolant : l'oxyde enterré. Le SOI a donc naturellement une action bénéfique sur les effets de canal court (à condition de bien dimensionner le transistor :  $T_{box}$  faible [17]).

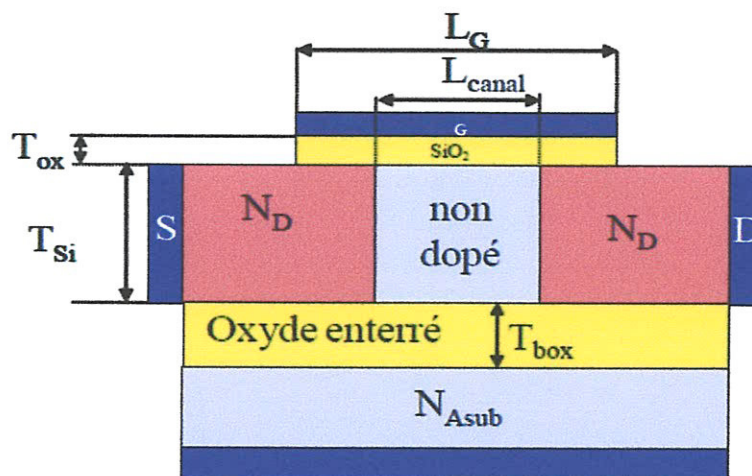


Figure I-11 : schéma d'un transistor MOS sur SOI

### I.6.3 Les transistors à grille multiples :

La technologie SOI à une grille ne permet pas de réduire les effets canaux courts en raison notamment de l'influence électrostatique. Cependant, l'ajout de grille autour de la couche silicium, non seulement favorise l'isolement du canal de conduction, d'où sa protection, mais offre également un meilleur contrôle sur ce canal. En conséquence nous voyons apparaître des structures SOI avec deux, trois, voire quatre grilles [18].

L'évolution des dispositifs SOI avec l'augmentation de nombre de grilles est illustrée en figure I.12 et figure I.13.

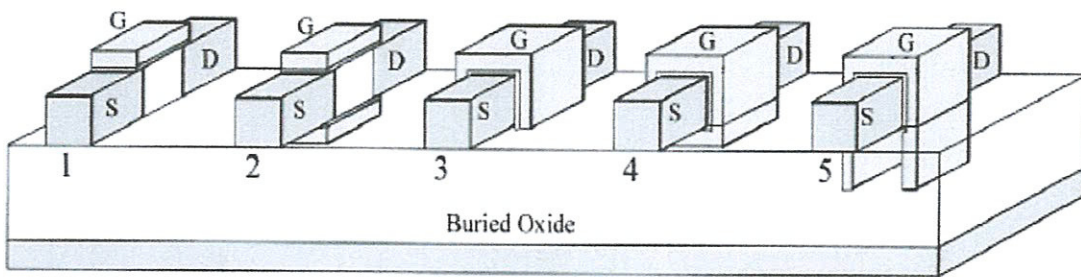


Figure I.12 : MOSFET sur SOI pour différentes configurations de grille, 1) Simple Grille, 2) Double grille, 3) Triple Grille, 4) Quadruple Grille et 5) une nouvelle structure : «Grille en Pi»

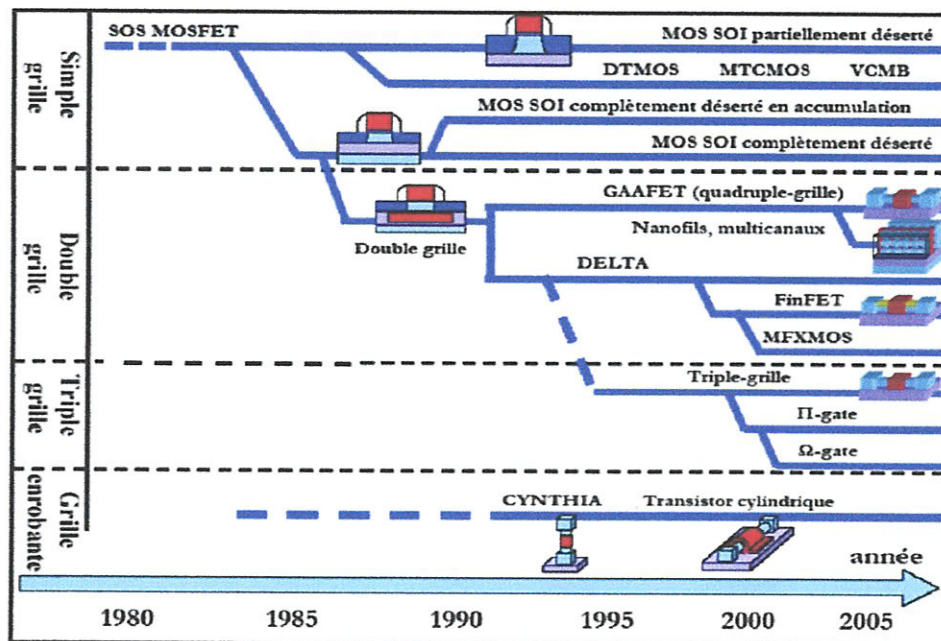


Figure I.13 : évolution de la technologie SOI au fil des années [18]

L'utilisation de plusieurs grilles permet, à épaisseur d'oxyde constante, d'améliorer le contrôle électrostatique du canal et donc de lutter efficacement contre les effets de canal court. On espère ainsi s'affranchir de la nécessité des oxydes de grille ultrafins pour réaliser les dispositifs ultimes de la feuille de route de l'ITRS.

Conventionnellement, le nombre de grilles indique le nombre de côtés de la zone active contrôlés efficacement par une grille. Ainsi, dans les structures à grilles enrobantes FinFET, transistor verticaux... où l'épaisseur de la zone active tend à être du même ordre de grandeur que sa largeur ( $W \approx T_{Si}$ ), on parle de transistor triple grille si un côté de la zone active n'est pas recouverte par une grille, ou sinon on parle de quadruple grille (grille complètement enrobante). Ces architectures nécessitent des efforts de réalisation supplémentaires par rapport aux dispositifs double grille car l'utilisation d'une lithographie très agressive est indispensable quelle que soit l'orientation du transistor.

Les FinFET permettent de réaliser des dispositifs triple grille comme illustré sur la Figure I.14 [19]. On remarquera qu'il y a alors plusieurs canaux de conduction ou «doigts» en parallèle pour augmenter le courant délivré.

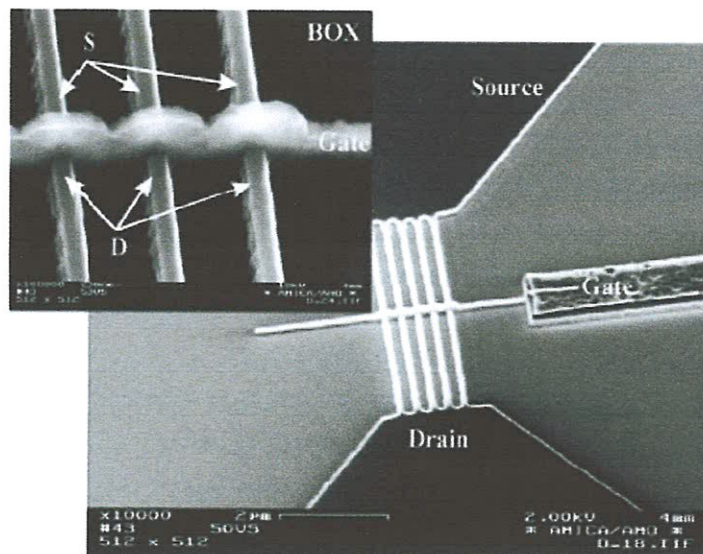


Figure I.14. Image au MEB, d'une structure FinFET triple grille ( $W \approx T_{Si}$ ) [19]

On distingue deux grands types de dispositifs sur substrat SOI (figure I.14). Les transistors SOI partiellement désertés (PDSOI pour « Partially Depleted SOI ») et les

transistors SOI totalement désertés (FDSOI pour « Fully Depleted SOI »). La différence entre ces deux types de dispositifs dépend de l'épaisseur de la couche de Si active et de son dopage.

Dans le cas des transistors FDSOI l'épaisseur de la couche active est inférieure à l'épaisseur de la zone de désertion :

$$T_{dep} = Q_{dep} / qN_{ch} \quad (\text{Où } Q_{dep} \text{ est la charge de désertion et } N_{ch} \text{ le dopage du canal}).$$

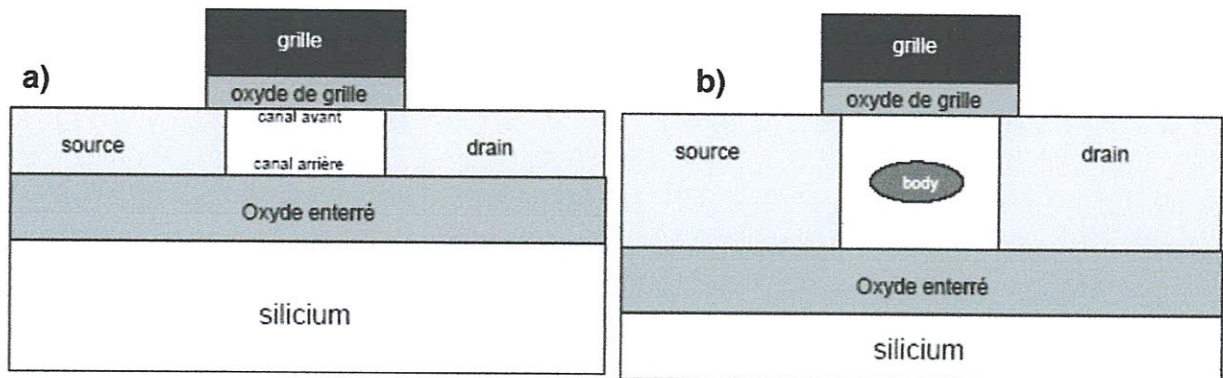


Figure I.15 : schéma d'un transistor SOI (a) entièrement déserté et (b) partiellement déserté.

### I.6.3.1 La particularité du transistor SOI partiellement déplété:

Le transistor SOI partiellement déplété est très proche du transistor MOS bulk. La similitude entre les procédés de fabrication permet la co-intégration des dispositifs sur une même puce. De plus, l'oxyde enterré isole le canal de conduction du substrat permettant d'immuniser le transistor contre les radiations [20] et d'améliorer la densité d'intégration en rapprochant les dispositifs. L'oxyde enterré limite également les capacités parasites drain-substrat et source-substrat qui sont quatre à sept fois plus faible que sur silicium massif [18]. Le transistor SOI partiellement déplété ne permet pas le contrôle du potentiel dans tout le film. En plus des effets canaux courts, le transistor SOI partiellement déplété est soumis aux effets de substrat flottant qui dégradent le fonctionnement du transistor. Nous pouvons citer l'effet Kink qui est l'un des principaux effets du substrat flottant est déclenché par l'accumulation de charges produites par ionisation par impact dans le film de silicium.



Cet effet se traduit dans les transistors SOI partiellement déplétés par une augmentation du courant des drains (Figure I.16) et du bruit électrique en saturation.

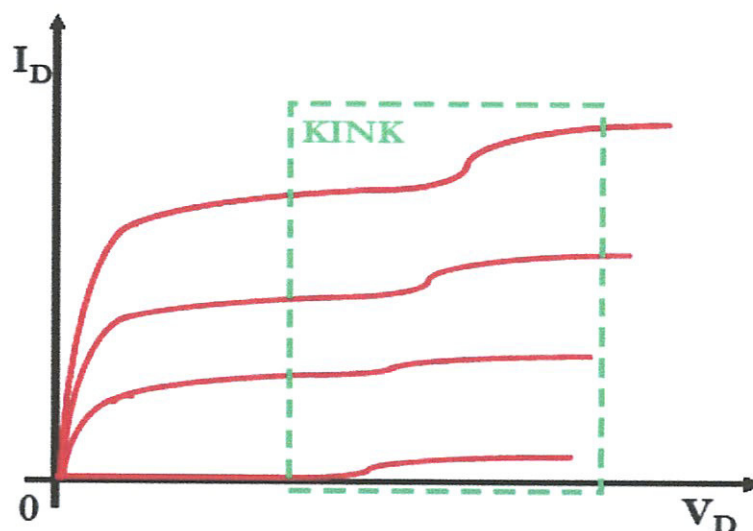


Figure I.16 : l'augmentation du courant de drain résultant de l'effet Kink.

### I.6.3.2 La particularité du transistor SOI entièrement déplété:

Pour les dispositifs de la taille déca-nanométrique appelés à prendre la relève du transistor MOS bulk, le contrôle des effets canaux courts nécessite une réduction importante des épaisseurs d'oxyde et du film de silicium. En plus le transistor SOI entièrement déplété possède d'autres avantages par rapport au transistor MOS bulk. Tout d'abord, les jonctions ultra-minces limitées par l'épaisseur du film  $t_{si}$  permettent un bon contrôle des effets de canal court. Ce dernier permet également de réduire le dopage du film. L'utilisation d'un film faiblement dopé et la réduction des champs électriques dans le transistor SOI permettent d'améliorer la mobilité des porteurs.

Cependant, la fabrication de transistor SOI à film de silicium mince présente quelques inconvénients. La réduction de l'épaisseur  $t_{si}$  augmente les résistances parasites des contacts source drain. Pour réduire ces résistances, les jonctions de source et de drain doivent être fortement dopées, ce qui augmente la diffusion des dopants dans le film et réduit par conséquent la longueur effective du canal. Parallèlement, plus les films sont minces, plus les fluctuations sur une même plaquette induisent des différences de comportement entre les composants, notamment en terme de tension de seuil. La tension de seuil est également

modifiée par l'apparition des effets de confinement quantique des porteurs dans les films très minces. Pour finir, l'oxyde enterré s'avère être un obstacle pour l'intégration des transistors les plus avancés. Tout d'abord, il empêche l'évacuation de la chaleur par le substrat et le phénomène d'auto-échauffement en résultant dégrade le courant  $I_{off}$ , la pente sous le seuil ainsi que la mobilité des porteurs. Il a aussi été observé que l'oxyde enterré ne limite pas indéfiniment le couplage électrostatique entre la source et le drain et par conséquent les effets de canal court.

### **I.7 Conclusion:**

La technologie MOS bulk arrivera bientôt la fin de son évolution, et cela à cause notamment de nombreux effets de plus en plus néfastes (liés au scaling<sup>3</sup>) au bon fonctionnement des dispositifs. Le SCE et le DIBL sont deux des principaux inconvénients.

Succédant au MOSFET bulk, la technologie multi-grilles devrait permettre de continuer à suivre la loi de Moore. D'après la théorie du scaling, la technologie multiple grilles à une longueur naturelle plus courte que le MOS bulk grâce au contrôle renforcé du canal.

---

<sup>3</sup> Scaling : la miniaturisation des composants

---

***Chapitre II :***  
***Transport électronique dans les***  
***MOSFET ultracourts***

---

## II.1 Introduction :

La miniaturisation des MOSFET fait apparaître des phénomènes complexes tels que les effets quantiques, ces derniers deviennent inévitables lorsque les dimensions de l'oxyde sont de l'ordre nanométrique. Dans ce cas, le calcul des grandeurs caractéristiques du composant tel que la concentration en porteurs et les grandeurs transportés (vitesse, énergie...) par les modèles classiques (modèles drift-diffusion) ne sont plus valables, il est donc nécessaire de faire des calculs quantiques (modèles Poisson-Schrödinger).

Dans ce chapitre, nous commençons par un rappel théorique sur le transport électronique, ensuite nous présenterons les effets quantiques, ainsi les équations régissant ces phénomènes et nous exposerons l'une des différentes méthodes utilisées pour les résoudre. Nous finirons par une partie consacrée à l'influence de l'architecture des MOSFET sur le transport.

## II.2 Description du transport électronique :

Le transistor à effet de champ peut se représenter par une résistance modulable (le canal) connectée à des réservoirs d'électrons (source et drain). La grille ajuste la résistance du canal, alors que les réservoirs permettent d'y faire circuler un courant.

L'étude classique du transport s'effectue à travers la connaissance de l'évolution temporelle de l'état des porteurs dans le dispositif. Selon la géométrie du canal du transistor MOS, on distingue deux types de transport :

- Lorsque le canal est long, il existe un grand nombre d'interactions dans le canal et le transport est dit diffusif.
- Lorsque le canal court, aucune interaction n'a lieu dans le canal et le transport est dit balistique. Entre les deux quelques porteurs sont balistiques et quelques interactions, le transport est quasi balistique.

### II.2.1. Transport balistique :

Les premières études sur le transport des électrons ont souvent adopté des structures métalliques, mais il était difficile d'observer le transport balistique sur un parcours moyen de l'électron dans un métal de taille nanométrique, sans diffusion. D'autre part, les progrès rapides des nanotechnologies des semi conducteurs ont atteint le transport balistique dans les nanostructures semi-conductrices à des basses températures [21].

Dans les transistors ultimes où la longueur de grille est fortement submicronique, et la longueur du canal est de l'ordre de la distance moyenne entre deux interactions, appelée libre parcours moyen "lpm" (environ dix nanomètres dans le Si à 300 °K). Le nombre d'interactions subies par les porteurs lors de leur traversée d'un canal ultracourt est donc très faible. Ce nombre peut même être nul, le porteur est alors qualifié de « balistique » [21,22].

### II.2.2 Notion de la mobilité :

En physique, la mobilité d'un électron relie sa vitesse au champ électrique, dans un solide ou dans un gaz, elle est donnée par [24] :  $v_d = \mu_0 E_y$

avec 
$$\mu_0 = \frac{q \tau_m}{m^*}$$

Où  $\tau_m$  est le temps de relaxation et  $m^*$  la masse effective.

Mais dans le transistor MOS, le champ électrique transversal accélère les électrons à la surface de la couche d'inversion et tend à les rapprocher de l'interface canal/oxyde de grille. Dans cette zone, les porteurs minoritaires subissent différents mécanismes d'interactions en fonction de l'amplitude du champ appliqué [24]. Donc la mobilité de surface dépend de l'interaction des électrons avec l'interface et de champ électrique vertical.

La mobilité de surface due au champ électrique  $\xi_x$  dans le canal est donnée par :

$$\mu_n(y) = \frac{\mu_{n0}}{1 + \theta \xi_x(y)}$$

Où  $\theta$  est appelé le facteur de la mobilité.

Le champ moyen dans le canal est donné par :  $\xi_x(\mathbf{y}) = \frac{\xi_{so}(\mathbf{y}) + \xi_{si}(\mathbf{y})}{2}$

Où  $\xi_{so}$  est le champ électrique à l'interface silicium-oxyde et  $\xi_{si}$  est le champ vertical à la limite entre la couche d'inversion et la région de déplétion.

### II.2.3 Équation de transport de Boltzmann :

L'équation de transport de Boltzmann est le point de départ de la majorité des modèles classiques. Dans cette approche, une fonction de distribution  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  décrit la densité de particules  $n(\vec{k}, \vec{r}, t)$  en termes de leur moment  $k$  et de leur position  $r$  dans l'espace à un temps  $t$  [3]:

$$n(\vec{r}, t) = \int \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{K}, \vec{r}, t) dk^3 \quad (\text{II.1})$$

Le long de la trajectoire d'une particule, la dérivée par rapport au temps de la fonction de distribution doit être nulle :

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{K}, \vec{r}, t) = 0 \quad (\text{II.2})$$

Pour une structure au repos, la connaissance de  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  est importante car elle permet de déduire toutes les grandeurs caractéristiques du système telles que la concentration en porteurs  $n(\vec{r}, t)$  ou la valeur totale de toute autre grandeur transportée  $A(\vec{r}, t)$  (vitesses, énergie...).

L'étude du transport consiste à déterminer l'évolution des fonctions de distribution hors d'équilibre, c'est-à-dire à résoudre l'équation de Boltzmann.

Un bilan de variation d'une fonction  $f(x, t)$  entre  $x$  et  $x+dx$  (Figure II.1) donne :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial x}{\partial t} f(x, t) - \frac{\partial x}{\partial t} f(x+dx, t) + G(x, t)$$

avec  $G(x, t)$  taux net de génération par unité de temps.

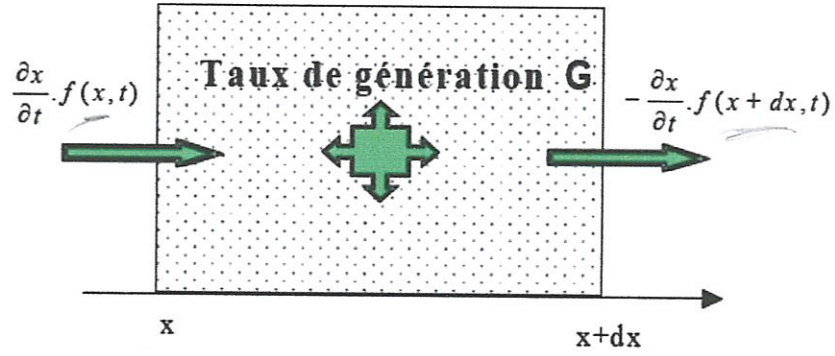


Figure II.1 Bilan 1D de la fonction  $f(x)$  entre  $x$  et  $x+dx$  durant  $dt$ [3]

Soit 
$$\frac{\partial}{\partial t} = -v_x \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} + G(x,t)$$

En faisant de même un bilan de variation entre  $t$  et  $t+dt$  de la fonction de distribution  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  selon ses 6 dimensions ( $x, y, z, k_x, k_y, k_z$ ), nous obtenons la fameuse équation de Boltzmann [21] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} + G(\vec{k}, \vec{r}, t) \tag{II.3}$$

Où  $\vec{F} = \hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t}$  est la force extérieure appliquée.

$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k})$  avec  $E(k)$  la relation de dispersion de l'énergie.

$G(k,r, t)$  correspond au taux net de génération/recombinaison par unité de temps

$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$  décrit la variation de  $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$  due aux collisions que subissent les porteurs avec le milieu de propagation.

A l'équilibre thermique ( $\frac{\partial}{\partial t} = 0$  dont  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = 0$ ) et en négligeant les phénomènes de génération/recombinaison, l'EB se réduit à : 
$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = 0$$

Les distributions maxwelliennes : 
$$f_{equilibre}(\vec{r}, \vec{k}, t) = e^{\frac{E(\vec{r}, \vec{k}) - \Phi_F}{k_B T}}$$

$$\text{où } E(\vec{r}, \vec{k}) = E_{BC}(\vec{r}) + \frac{\hbar k^2}{2m^*}$$

Avec  $E_{BC}(\vec{r})$  représente l'énergie de la bande de conduction,  $m^*$  la masse effective et  $\Phi_F$  niveau de Fermi, sont solutions de cette équation. On remarque alors que les distributions en vecteur d'onde  $f_{\text{équilibre}} f(\vec{k})$  ou en vitesse  $m^* \vec{v} = \hbar \vec{k}$  sont gaussiennes (si la bande est parabolique).

### II.2.4 Approximations usuelles de l'équation de Boltzmann :

L'équation de Boltzmann est une équation intégral-différentielle difficile à résoudre ou, du moins, dont la résolution est mal adaptée à l'étude des dispositifs à plus d'une direction dans l'espace réel, c'est pourquoi des approches plus simples, basées sur des dérivations de l'EB, ont été mises en œuvre en vue de pouvoir analyser, concevoir et optimiser de manière plus souple les structures des composants [21].

On simplifie généralement l'intégrale de collision en écrivant (approximation de Boltzmann) :  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = -\frac{f - f_{\text{équilibre}}}{\tau}$  avec  $\tau$  le temps de relaxation moyen. Ainsi, en régime permanent  $\left(\frac{\partial}{\partial t} = 0\right)$ , dans un matériau de dopage et de température uniformes (d'où  $\vec{\nabla}_{\vec{r}} f = 0$ ), l'EB simplifiée devient :

$$\frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f + \frac{f - f_{\text{équilibre}}}{\tau} = 0 \quad (\text{II.4})$$

Si on considère un fonctionnement sous faible champ électrique, les porteurs restent constamment dans un état proche de l'équilibre, c'est-à-dire à la température du réseau cristallin. Grâce à ces simplifications de l'EB, on obtient [15] un courant de conduction (fonction du champ électrique) qui suit la relation  $\vec{v} = -\mu_{\text{eff}} \times \vec{E}$

En couplant cette relation avec les équations de diffusion, les équations de continuité et l'équation de Poisson [3], on obtient pour les électrons et les trous le système d'équations linéaires suivant :



$$\vec{J}_n(\vec{r}, t) = q \cdot D_n \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r}, t) + q \cdot n(\vec{r}, t) \cdot \mu_n \cdot \vec{E} \quad (\text{II.5})$$

$$\vec{J}_p(\vec{r}, t) = q \cdot D_p \cdot \vec{\nabla} p(\vec{r}, t) + q \cdot p(\vec{r}, t) \cdot \mu_p \cdot \vec{E} \quad (\text{II.6})$$

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = G_n(\vec{r}, t) + \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(\vec{r}, t) \quad (\text{II.7})$$

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} = G_p(\vec{r}, t) + \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p(\vec{r}, t) \quad (\text{II.8})$$

$$\vec{\nabla}(\epsilon_{sc} \cdot \vec{E}) = q(p(\vec{r}, t) - n(\vec{r}, t) + N_D - N_A) \quad (\text{II.9})$$

Avec :  $Dn = \frac{k_B T}{q} \mu_n$  et  $Dp = \frac{k_B T}{q} \mu_p$

$G_n(\vec{r}, t)$  et  $G_p(\vec{r}, t)$  dépendent des modèles de génération/recombinaison choisis.

Avec  $N_D$  et  $N_A$  qui correspondent respectivement aux dopages en ions donneurs et accepteurs d'électrons. Alors que les quatre inconnues sont respectivement la densité de courant et la concentration pour les électrons  $\vec{J}_n(\vec{r}, t)$  et  $n(\vec{r}, t)$ , et pour les trous  $\vec{J}_p(\vec{r}, t)$  et  $p(\vec{r}, t)$ .

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 particulière de type Monte-Carlo. Le principe de cette méthode est exposé dans le paragraphe suivant.

### II.2.5 Les approche de type Monte-Carlo semi-classique :

La méthode Monte-Carlo particulière 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. Les

principes de la méthode Monte-Carlo ayant été abondamment décrits dans la littérature (citons en particulier [25, 26, 27]), nous n'en rappelons que les grandes lignes. Le mouvement de chacun des porteurs est décrit en fonction du temps, dans les espaces réel et réciproque, 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 II.2). Ces interactions peuvent être dues aux imperfections du réseau cristallin (vibrations des atomes, présence d'impuretés) ou à la présence d'interface rugueuse (interface oxyde-silicium).

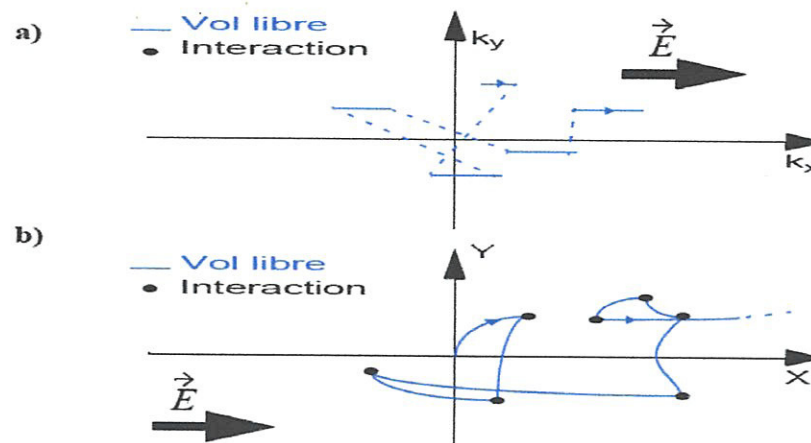


Figure II.2 : Principes de la méthode Monte Carlo dans un espace à deux dimensions.

a) Trajectoire représentative d'une particule dans l'espace des vecteurs d'onde.

b) Trajectoire d'une particule dans un espace à 2 dimensions x-y

Dans cet exemple, la particule est soumise à une force orientée le long de l'axe x;. Les fragments paraboliques constituent les vols libres des électrons. Les points noirs représentent les interactions subies par la particule [25].

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 II.3).

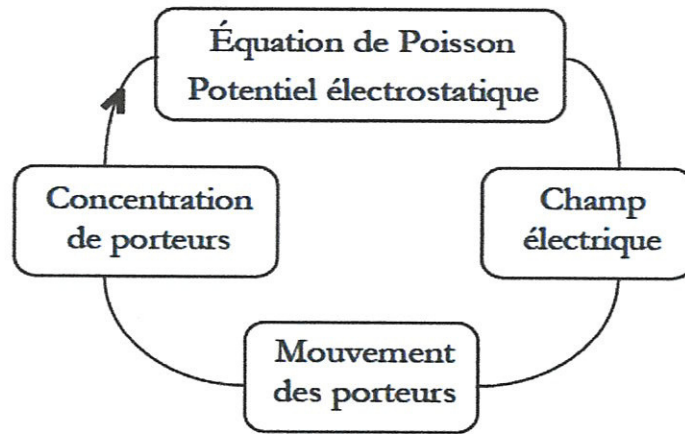


Figure II.3 : Organigramme général de la méthode Monte-Carlo [23]

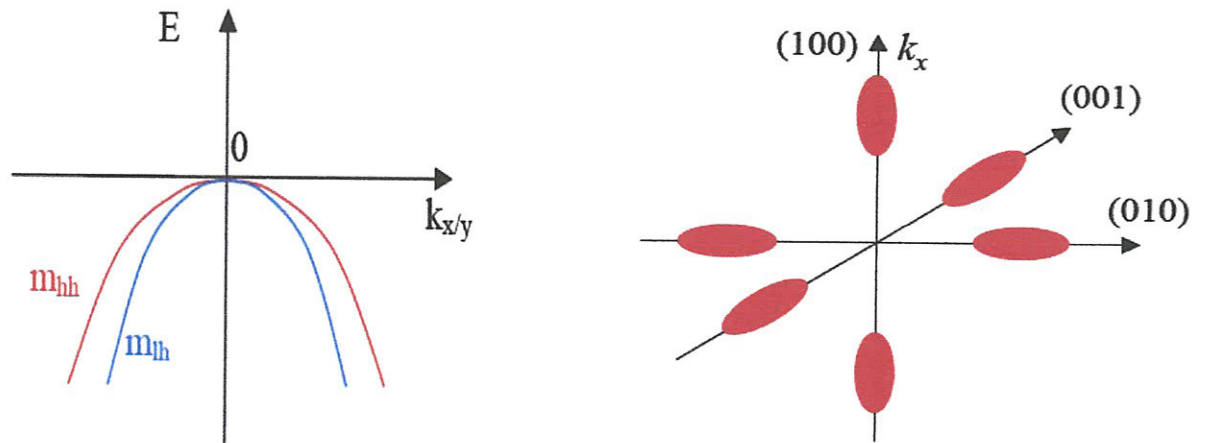
## II.3 Modélisation physique du silicium :

### II.3.1 structure de bande :

On utilise des relations analytiques de dispersion en énergie  $E(k)$  pour décrire les extrema (vallées) de la structure de bandes du semiconducteur susceptibles d'être occupés par des porteurs. La bande de valence du silicium, présentée en Figure II.4, est modélisée de façon simple par deux vallées sphériques. Chacune est caractérisée par une masse effective  $m^*$  (trous lourds  $m^* = m_{hh} = 1,08 \times m_0$  et trous légers  $m^* = m_{lh} = 0,24 \times m_0$ , avec  $m_0$  masse des électrons libres) et éventuellement un coefficient de non-parabolicité  $\alpha$ . Les relations de dispersion associées sont de la forme :  $E (1 + \alpha . E ) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 . m^*}$

La relation de dispersion pour un électron du niveau (appelé aussi sous-bande) numéro 'n' s'écrit :

$$E (1 + \alpha . E ) = E_n \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} \right)$$



a)- Les bandes de valence analytiques du silicium.

b)- Les six vallées équivalentes de la bande de conduction du silicium.

Figure II.4 : Les bandes d'énergie du Silicium.

Où  $k_x$  et  $k_y$  sont les composantes du vecteur d'onde à partir du minimum du niveau,  $m_x$  et  $m_y$  celles des masses effectives et  $E_n$  l'énergie quantifiée du niveau 'n'.

### II.3.2 Concept de masse effective :

Dans un semi-conducteur, les électrons, de masse  $m_0$ , ne sont pas libres et subissent l'influence du potentiel du réseau (par opposition au vide), on dit qu'ils sont quasi-libres. Cependant, on peut inclure l'effet global du potentiel périodique cristallin dans la masse de l'électron, alors assimilé à une quasi-particule libre de masse  $m_e^*$  appelée masse effective de l'électron [4]. De la même manière on définit la masse effective d'un trou  $m_h^*$ . Cette masse effective est directement proportionnelle à l'inverse de la courbure des bandes d'énergie dans l'espace des  $\vec{k}$ .

On peut donc définir une masse effective pour chaque bande d'énergie et vallée  $v$  d'un matériau semi-conducteur selon chaque direction  $x$  [34]:

$$m_{v,x}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E_v(k_x) / \partial k_x^2}$$

### II.3.3 densité d'état :

La densité d'états (DOS) correspond au nombre d'états disponibles pour une énergie donnée dans l'espace réciproque. Son calcul est donc une donnée clé pour obtenir une modélisation précise de la densité de porteurs dans le Silicium.

On a considéré des relations de dispersion paraboliques ( $\alpha = 0$ ) pour le calcul de la densité d'états. La "densité d'états" est une fonction de l'énergie, notée  $D(E)$  telle que pour toute fonction  $f$  ne dépendant que de l'énergie, on a  $\langle f \rangle = \int f(E) D(E) dE$ . Ainsi, la concentration des porteurs libres (par unité de volume) possédant une énergie  $E$  est donnée par le produit de la densité d'états par la fonction de distribution [1].

- Pour les électrons :  $dn = D_n(E) f_n(E) dE$

- Pour les trous :  $dp = D_p(E) f_p(E) dE$

La concentration totale des électrons dans la bande de conduction et celle de trous dans la bande de valence est obtenue en intégrant l'énergie  $E$  sur toute la bande.

$$n = \int_{E_c}^{\infty} D_n(E) f_n(E, T) dE \quad (\text{pour les électrons})$$

$$p = \int_{\infty}^{E_v} D_p(E) f_p(E, T) dE \quad (\text{pour les trous})$$

-  $D(E)$  : représente le nombre maximum de particules de masses  $m_n^*$  ou  $m_p^*$  pouvant être comprises entre les niveaux d'énergies  $E$  et  $E+dE$ .

-  $f(E, T)$  : fonction de distribution (probabilité d'occupation de l'état d'énergie  $E$ ).

Cette dernière obéit à la statistique de FERMI-DIRAC, et est donnée par l'expression suivante:

- Pour les électrons :  $f_n(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{kBT}\right)}$

## II.4 Effets quantiques :

Les effets quantiques sont dus au puits de potentiel dans lequel sont confinés les porteurs entre l'oxyde de grille et le volume du semiconducteur dans les transistors déca nanométriques. La combinaison de ces effets quantiques avec les effets induits par la contrainte peuvent donner lieu à une modification profonde des propriétés de transport électronique et donc des conclusions que l'on peut tirer en ne considérant que les aspects contrainte dans ces dispositifs.

La réduction des dimensions des dispositifs jusqu'à des tailles nanométriques met en évidence des phénomènes de nature quantique, ceci produit une quantification de l'énergie des porteurs correspondant au mouvement le long des trois directions spatiales.

Quand un électron est confiné dans un espace de dimensions  $L_x$ ,  $L_y$  et  $L_z$ , si la longueur caractéristique est  $\lambda$ , on peut avoir les situations suivantes [22]:

$\lambda \ll L_x, L_y, L_z$  : dans ce cas l'électron se comporte dans un semi-conducteur massif (3D).

$\lambda > L_x$ , et  $L_x \ll L_y, L_z$  : dans cette situation, on a un semi-conducteur 2D perpendiculaire à l'axe x. ce système est appelé puits quantique.

$\lambda > L_x, L_y$  et  $L_x, L_y \ll L_z$  : ceci correspond à un semi conducteur 1D ou un fil quantique.

$\lambda \gg L_x, L_y, L_z$  : dans ce cas on a un semi conducteur 0D ou un point quantique.

### II.4.1 Effet de 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. 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. 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) comme le montre les figure II.5 et II.6).

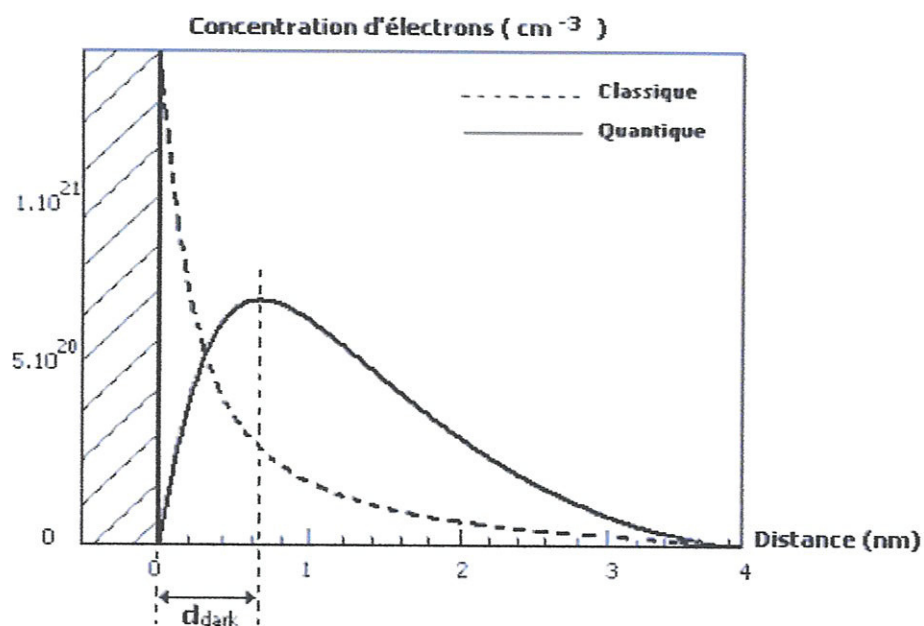


Figure II.5 : Concentration d'électrons dans une capacité MOS en régime de forte inversion

Dans les composants MOS de dimensions courtes, le déplacement du maximum du profil d'électrons de l'interface vers le substrat d'une distance de l'ordre du nanomètre, c'est le phénomène de confinement des porteurs.

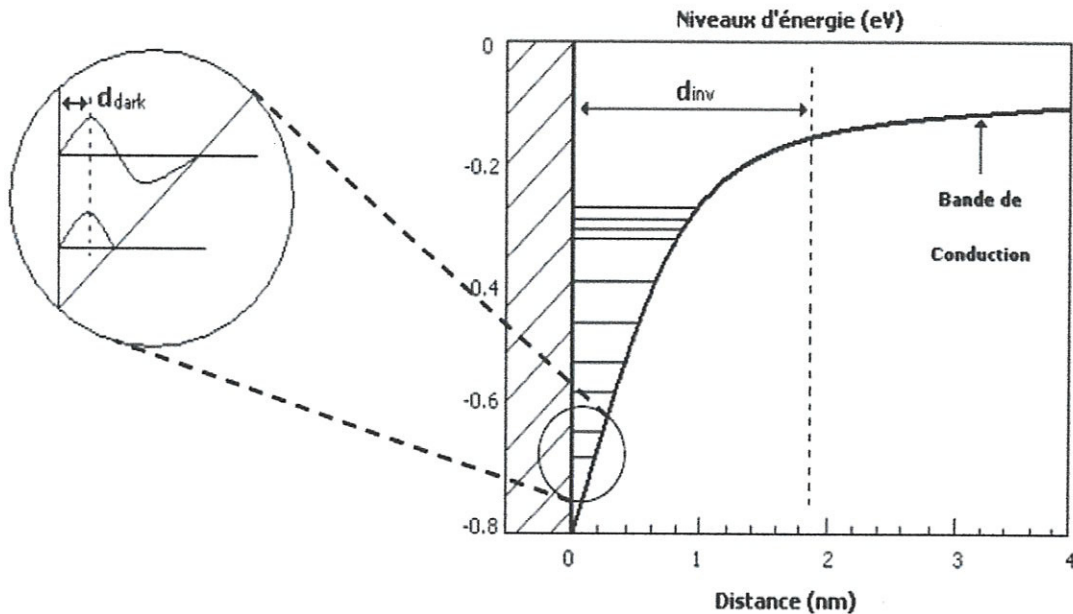


Figure II.6 : Quantification des niveaux d'énergie à l'interface du au confinement des porteurs

Les porteurs qui sont confinés dans un puits de potentiel peuvent être considérés comme un gaz bidimensionnel. La statistique classique de Fermi-Dirac pour un gaz tridimensionnel d'électrons n'est plus valable pour modéliser ce phénomène. Il est nécessaire de faire appel à des équations issues de la mécanique quantique [23]. Dans ce contexte, nous nous sommes intéressés à une approche qui consiste à résoudre l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger.

## II.5. Résolution de l'équation de Poisson à 2 dimensions :

Pour modéliser les effets 'canaux courts', nous allons résoudre l'équation de Poisson suivant la dimension transversale au canal et la dimension longitudinale à celui-ci [2]. Dans cette partie on s'intéresse à la résolution approchée, par la méthode des différences finies, d'un problème aux limites pour l'équation de Poisson en dimensions d'espace.

L'équation de Poisson à deux dimensions s'écrit :



$$\frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon_{si}} \quad (\text{II.11})$$

Où :  $V(x, y)$  : potentiel électrostatique

$\rho(x, y)$  : Densité de charge

$\epsilon_{si}$  : Permittivité diélectrique du silicium.

La densité de charge totale d'un semi conducteur de type P s'obtient en sommant les différentes contributions des charges fixes et des porteurs libres.

$$\rho(x, y) = -q [p(x, y) - n(x, y) + N_{D^+}(x, y) - N_{A^+}(x, y)] \quad (\text{II.12})$$

Où  $N_{A^+}(x, y)$  et  $N_{D^+}(x, y)$  sont respectivement la concentration des dopants de type accepteurs et dopants de type donneurs.  $n(x, y)$  et  $p(x, y)$  sont les densités d'électrons et de trous.

Soit  $\Omega$  est le domaine  $[0, X] \times [0, Y]$ , pour cela, et pour construire une solution approchée de l'équation (II.5) on se donne un pas de discrétisation en  $X$  noté  $a$  et un pas en  $Y$  noté  $b$ , définis

$$\text{par : } a = \frac{X}{m+1} \text{ et } b = \frac{Y}{n+1}$$

Où  $m$  et  $n$  sont respectivement le nombre de points intérieurs de domaine  $\Omega$  dans les directions  $x$  et  $y$  respectivement.

Deux conditions aux limites peuvent être appliquées sur le système de la figure (II.7)

i) Condition de Dirichlet correspondent à un contact métallique (valeur fixe du potentiel), qui est perpendiculaire à l'interface silicium / oxyde.

ii) La condition de Newman correspond à toutes les fonctions libres régies par la neutralité de la dérivée normale de la variable considérée.

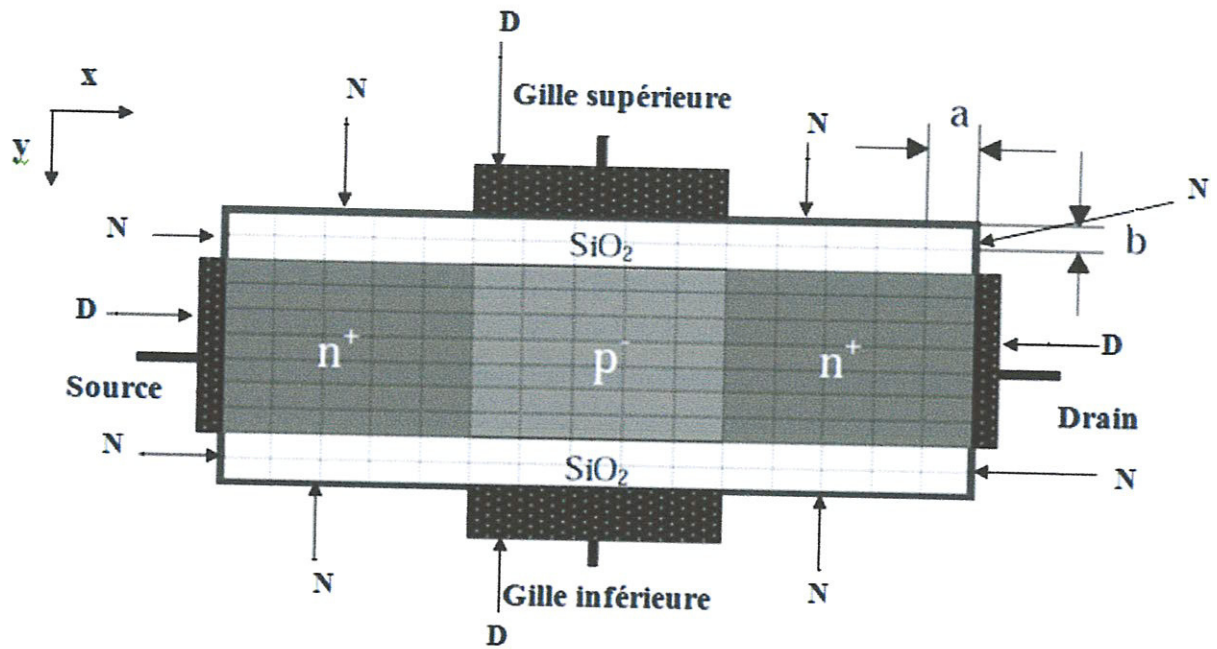


Figure II.7 maillage et conditions aux limites de la méthode de différences finies

L'équation de poisson discrétisée selon la méthode de différences finies est [29] :

$$\frac{V_{m+1,n} - 2V_{m-1,n}}{a^2} + \frac{V_{m,n+1} - 2V_{m,n} + V_{m,n-1}}{b^2} = -\frac{\rho(x,y)}{\epsilon} \quad (\text{II.13})$$

$$\frac{a}{b}V_{m-1,n} + \frac{b}{a}V_{m,n-1} - 2\left(\frac{a}{b} + \frac{b}{a}\right)V_{m,n} + \frac{b}{a}V_{m,n+1} + \frac{a}{b}V_{m+1,n} = -\frac{ab}{\epsilon}q(N_D - N_A - n)_{m,n}$$

Dans le cas de l'approximation discrète à l'interface où les nœuds sont placés à l'interface silicium/ oxyde, l'équation (II.6) devient :

$$\begin{aligned} \frac{a}{b}V_{m-1,n} + \frac{b}{2a}\left(1 + \frac{\epsilon_{Bot}}{\epsilon_{Top}}\right)V_{m,n-1} - \left(\frac{a}{b} + \frac{b}{a}\right)\left(1 + \frac{\epsilon_{Bot}}{\epsilon_{Top}}\right)V_{m,n} + \frac{b}{2a}\left(1 + \frac{\epsilon_{Bot}}{\epsilon_{Top}}\right)V_{m,n+1} \\ + \frac{a}{b}\frac{\epsilon_{Bot}}{\epsilon_{Top}}V_{m+1,n} = -\frac{ab}{\epsilon_{Top}}q(N_D - N_A - n)_{m,n} \end{aligned}$$

Où  $\epsilon_{Bot}$  et  $\epsilon_{Top}$  sont les constants diélectriques pour les matériaux au-dessus de l'interface et au-dessous de l'interface.

L'approximation discrète aux frontières représente les conditions aux limites. Parmi celle-ci, on distingue deux types des conditions aux limites : les conditions de Dirichlet, et les conditions de Newman.

### II.5.1 Condition de Dirichlet :

Les conditions de Dirichlet sont appliquées sur les contacts métalliques (source, drain et les deux grilles) [1].

$$V_{m,n} = V_D + U_T L n \frac{N_D}{n_i} \quad (\text{sur le drain) contact métal / semi-conducteur}).$$

$$V_{m,n} = V_s + U_T L n \frac{N_D}{n_i} \quad (\text{sur la source) contact métal / semi-conducteur}).$$

$$V_{m,n} = V_G \quad (\text{sur les deux grilles) contact métal / oxyde}).$$

### II.5.2 Condition de Newman :

Sur les autres frontières, nous appliquons les conditions de Newman. La considération des lignes de champ perpendiculaires à la structure permet d'écrire que la dérivée selon la normale est nulle, alors nous avons :

$$\frac{\partial V}{\partial y} = 0 \Rightarrow V_{m,n+1} = V_{m,n-1} \quad \frac{\partial n}{\partial y} = 0 \Rightarrow n_{m,n+1} = n_{m,n-1}$$

### II.6 Résolution de l'équation de Schrödinger :

La résolution de l'équation de Schrödinger nous permet d'obtenir les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes dans la direction du confinement quantique. On considère une particule de masse effective  $m^*$  dans un puits de potentiel  $V(x)$  à une dimension. L'équation de Schrödinger à résoudre est donnée par :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(y) + qV(y)\psi(y) = E\psi(y) \quad (\text{II.14})$$

$\psi(y)$  est la fonction d'onde.

$E$  est l'énergie quantifiée.

$V(y)$  est le potentiel électrostatique.

Les fonctions d'ondes sont nulles ( $\psi(y) = 0$ ) à l'interface oxyde / silicium dans le cas où, la pénétration des électrons dans l'oxyde est négligeable.

La discrétisation de l'équation de Schrödinger consiste à diviser la structure (DG MOS) en tranches dans la direction de transport. Celles-ci appelées tranches de Schrödinger. La résolution est alors réalisée en 'pseudo' 2D.

La figure (II-8), illustre la structure double grille divisée en tranche de Schrödinger. Dans chaque tranche (ou même colonne). On connaît, le profil du potentiel, donc la résolution de l'équation de Schrödinger dans la direction de confinement (axes-y) permet d'obtenir les niveaux d'énergies et les fonctions d'ondes [23].

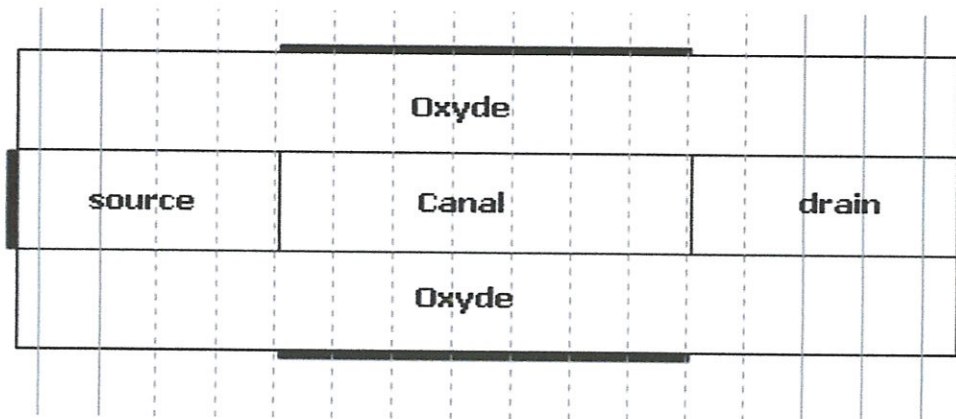


Figure II.8 : Schéma d'une structure DGMOS divisé en tranche de Schrödinger [1]

On peut écrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{m^*(y)} \frac{\partial}{\partial y} + V(y) \right] \psi_n(y) = E_n \psi_n(y) \quad (\text{II.15})$$

En discrétisation sur la base des impulsions de Dirac  $\{\delta(y - y^i)\}$

Avec :

$$\{\delta(y - y^i)\} \delta y^{i+1} - y^i \quad (i \in [1 \dots N]),$$

$y^1$  et  $y^N$  limite de la fenêtre de Schrödinger où  $\delta y^{N+1} = \delta y^N$ . En approximant les opérateurs par les méthodes classiques de différence finie pour la dérivée première et seconde suivantes [3] :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{1}{m^*(y)} \right) \approx \frac{1}{(\delta y^{i+1} + \delta y^i)} \left( \frac{1}{m_y^{i+1}} - \frac{1}{m_y^{i-1}} \right) \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\Psi_n(y)) \approx \frac{\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\delta y^{i+1}} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{\delta y^i}}{\frac{\delta y^{i+1} + \delta y^i}{2}}$$

$$\text{on obtient :} \quad H.\Psi = A_i \left( \frac{2}{\delta y^{i+1} m_y^i} + B_i \right) \Psi_n^{i+1} + D_i \Psi_n^i + A_i \left( \frac{2}{\delta y^i m_y^i} - B_i \right) \Psi_n^{i-1}$$

$$\text{Avec :} \quad A_i = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{(\delta y^{i+1} + \delta y^i)} \quad , \quad B_i = \frac{1}{(\delta y^{i+1} + \delta y^i)} \left( \frac{1}{m_y^{i+1}} - \frac{1}{m_y^{i-1}} \right)$$

$$\text{et} \quad D_i = \frac{\hbar^2}{m_y^i} \frac{1}{(\delta y^{i+1} + \delta y^i)} \left( \frac{1}{\delta y^{i+1}} - \frac{1}{\delta y^i} \right) + V(y_i)$$

En considérant des conditions aux limites nulles :  $\Psi_n^{N+1} = \Psi_n^0 = 0$  , on obtient sous forme matricielle :

$$H.\Psi = \begin{bmatrix} D_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & A_i \left( \frac{2}{\delta y^{i+1} m_y^i} + B_i \right) & D_i & A_i \left( \frac{2}{\delta y^i m_y^i} - B_i \right) & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & A_N & D_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dots \\ \Psi_n^{i-1} \\ \Psi_n^i \\ \Psi_n^{i+1} \\ \dots \end{bmatrix} = E_n \begin{bmatrix} \dots \\ \Psi_n^{i-1} \\ \Psi_n^i \\ \Psi_n^{i+1} \\ \dots \end{bmatrix}$$

Où : H est l'Hamiltonien du système défini par [30] :

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*(y)} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} + q \begin{bmatrix} V(y_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V(y_2) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(y_i) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V(y_N) \end{bmatrix}$$

Les niveaux d'énergies  $E_n$  (valeurs propres) et les fonctions d'ondes associées  $\Psi_n$  (vecteurs propres) de la matrice réelle  $H$  sont obtenus par EIG (Eigen value) : étant un sous programme MATLAB [31].

## II.7 Résolution auto-cohérente des équations de Poisson et Schrödinger :

Dans ce paragraphe, nous présentons un modèle auto-cohérent qui permet la résolution des équations couplées de Poisson - Schrödinger. Cette approche est justifiée par plusieurs résultats présentés dans la littérature [35-36-37].

Le couplage des équations Poisson-Schrödinger est nécessaire lorsque l'épaisseur de l'oxyde est de plus en plus mince et l'épaisseur du canal du dispositif (MOSFET) proche de la longueur d'onde des électrons.

Dans la direction de transport ( $x$ ), les porteurs dans la couche d'inversion sont libres, mais dans la direction perpendiculaire à la surface du canal ( $y$ ) (direction de confinement), les porteurs sont confinés dans un puits de potentiel étroit.

La modélisation du transport des porteurs se fait comme pour un gaz 2D (cas de l'équation de Poisson), et comme un gaz 1D (cas de l'équation de Schrödinger).

Pour la résolution de l'équation de Schrödinger, il faut connaître le potentiel électrostatique  $[V(x)]$ ; et pour résoudre l'équation de Poisson, il faut connaître les concentrations des porteurs ou la densité de charge  $[\rho(x)]$ . Il y a donc auto cohérence entre les résolutions de l'équation de Poisson 2D, et l'équation de Schrödinger 1D. On peut illustrer le système auto cohérent par le système suivant (chaque tranche  $x$ ) [30].

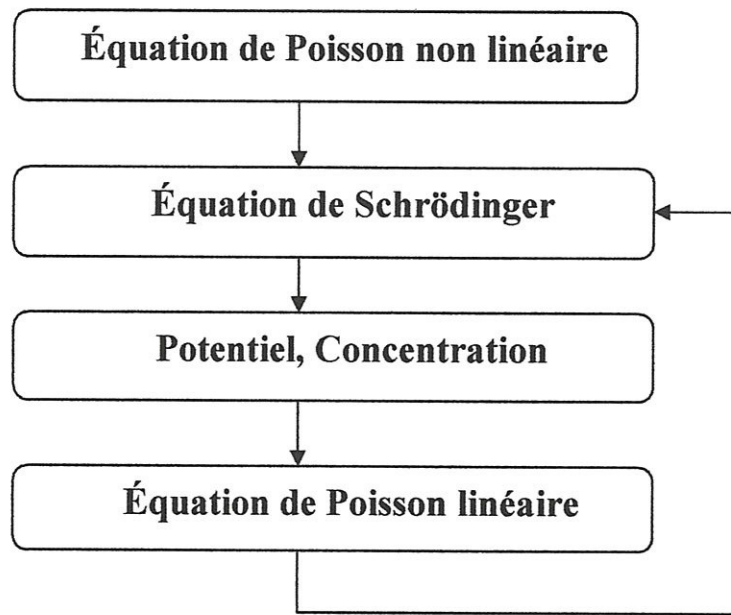


Figure II-11: Les séquences de la résolution couplée des équations de Poisson et de Schrödinger

## II.8 Nouvelles lois de réduction d'échelle :

Les modèles analytiques permettant de dimensionner les dispositifs massifs ont dû être adaptés pour décrire les nouvelles architectures multi grilles sur SOI. Il faut ainsi ajuster de nouveaux facteurs de formes ou longueurs caractéristiques pour optimiser les caractéristiques électriques et assurer l'immunité vis-à-vis des effets de canal court.

Ces règles de dimensionnement sont généralement obtenues par résolution de l'équation de Poisson pour une structure 2D (SGMOS ou DGMOS) en faisant l'hypothèse d'un canal complètement déserté :

$$\frac{\partial^2 \varphi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi(x, y)}{\partial y^2} = \frac{qN_A}{\epsilon_{si}} \quad (\text{II.16})$$

où  $N_A$  est le dopage (en ions accepteurs d'électrons dans les transistors à canal N) de la zone active,  $\varphi$  est le potentiel électrostatique et  $\epsilon_{si}$  permittivité diélectrique du silicium.

Si l'on suppose en outre un potentiel de forme parabolique dans la direction de l'effet de champ (axe  $y$ ), il vient [32]:

$$\varphi(x, y) = c_0(x) + c_1(x) \times y + c_2(x) \times y^2$$

En considérant des conditions aux limites plus ou moins raffinées, et en posant  $\varphi(x) = c_0(x) - \frac{qN_A}{\epsilon_{si}}$ , on peut réécrire l'équation de Poisson sous l'oxyde ( $y = 0$ ) sous la forme :  $\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} - \frac{\varphi(x)}{\lambda^2} = 0$

Ceci conduit à la définition d'un paramètre essentiel à l'analyse des effets canaux courts, à savoir  $\lambda$ . Le paramètre  $\lambda$  est appelé la distance caractéristique ou longueur naturelle (Natural length) du dispositif ; il est fortement dépendant de l'épaisseur de l'oxyde  $t_{ox}$  et de l'épaisseur du film de silicium  $t_{si}$ . Ce paramètre contrôle la répartition du potentiel dans la direction perpendiculaire au canal. Pour chaque architecture multi grilles, la solution de  $\lambda$  est obtenue en adaptant les conditions aux limites définies lors de la résolution de l'équation de Poisson suivant la géométrie de la structure schématisée dans la figure (II.7). L'analyse des résultats de simulation a montré que pour réduire les effets canaux courts et maintenir des valeurs de la pente sous le seuil raisonnable avec la miniaturisation [3], cette longueur caractéristique doit être plus petite que la longueur effective de la grille (c.-à-d. la longueur du canal). Ce qui conduit à un dimensionnement précis de facteur  $L/\lambda$ .

Le tableau II.1 regroupe les différentes longueurs caractéristiques de différentes structures multi grilles. Il convient de noter  $\lambda$  diminue lorsque le nombre de grilles croît. Ceci explique l'intérêt des technologues pour ces architectures de plus en plus complexes

	SOI à une grille(SG)	SOI double grille(DG)	SOI quadripule grille(QG)
Longueur caractéristique ( $\lambda$ )	$\sqrt{\frac{\epsilon_{si}}{1 \cdot \epsilon_{ox}}} t_{ox} t_{si}$	$\sqrt{\frac{\epsilon_{si}}{2 \cdot \epsilon_{ox}}} t_{ox} t_{si}$	$\sqrt{\frac{\epsilon_{si}}{4 \cdot \epsilon_{ox}}} t_{ox} t_{si}$

Tableau II.1 : Expression de la longueur caractéristique  $\lambda$  en fonction de l'architecture : Simple, Double ou Quadruple Grille.



### II.8.1 La technologie MOSFET double grille :

Les transistors MOS double grille (DG) sont regroupés en trois catégories suivant la direction du transport électronique et la direction du champ de grille par rapport au plan du champ du substrat qui est le plan horizontal. Ainsi, nous pourrions distinguer :

✓ **Le double-grille planaire :** où le transport électronique s'effectue parallèlement au plan de substrat et le champ de grille est perpendiculaire au substrat.

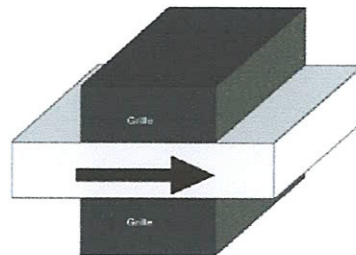


Figure II.10 : Orientation du transport électronique et effet de champ sur le MOSFET double grille planaire [2]

La flèche indique l'orientation du transport, alors que la position des grilles indique la direction de l'effet de champ par rapport au plan supérieur du substrat qui correspond au plan horizontal.

✓ **Le double-grille quasi-planaire :** où le transport électronique et le champ de grille sont parallèles au plan de substrat.

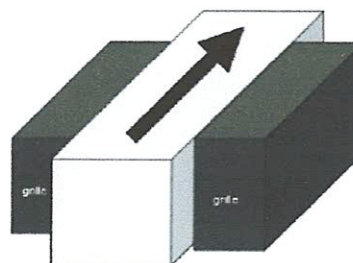


Figure II.11 : orientation du transport électronique et effet de champ sur le MOSFET double grille quasi-planaire [2]

La flèche indique l'orientation du transport, alors que la position des grilles indique la direction de l'effet de champ par rapport au plan supérieur du substrat qui correspond au plan horizontal.

- ✓ **Le double-grille verticale** : où le transport électronique est perpendiculaire au plan de substrat et le champ de grille est parallèle au substrat.

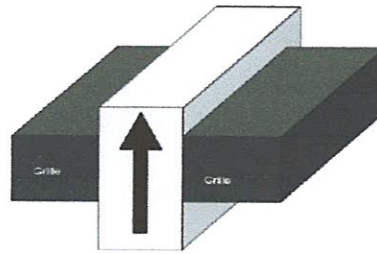


Figure II.12 : orientation du transport électronique et effet de champ sur le MOSFET double grille quasi-planaire [2]

### II.11 Conclusion :

Ce chapitre précédent a permis de donner un aperçu sur le transport électronique dans les transistors MOS dont des dimensions ultracourts, ces derniers font apparaître des effets quantiques. La résolution des problèmes liés à ces effets quantiques conduit à la résolution des équations de Poisson et de Schrödinger. Nous avons utilisés la méthode de différences finies pour résoudre ces équations avant de les discrétiser.

---

***Chapitre III :***  
***Résolution de l'équation de***  
***Schrödinger et Résultats de***  
***Simulation***

---

### III.1 Introduction :

Dans ce chapitre nous commençons par un petit rappel historique sur les méthodes Monte-Carlo quantiques, Nous raconterons les principes et les fondements de ces méthodes. Ensuite, nous présenterons comment les méthodes de Monte-Carlo classiques ont été appliquées à l'équation de Schrödinger. Enfin, nous exposerons les résultats de simulation de la solution numérique des deux équations, Poisson et Schrödinger.

### III.2 Présentation des méthodes Monte-Carlo quantiques :

#### III.2.1 Mouvement brownien et calcul stochastique :

La notion de mouvement brownien a été annoncée par le botaniste Robert Brown. Cette notion de mouvement brownien pour décrire le mouvement aléatoire de grains de pollen en suspension dans l'eau. Cependant, il utilise le mouvement brownien pour le domaine de la finance et ne le connecte pas avec les phénomènes physiques de propagation des particules. Ce problème sera redécouvert quelques années plus tard par Albert Einstein. Il résoudra le problème en 1905 en décrivant le mouvement brownien comme un processus qui sera appelé plus tard "processus de Wiener". En 1908, Paul Langevin proposera un autre moyen d'appréhender le mouvement brownien en le considérant du point de vue des trajectoires des particules. Il applique les équations de mouvement de Newton en considérant que la particule de masse  $m$  est soumise à deux forces : une force visqueuse  $f = -k \cdot v$  et un terme de bruit blanc gaussien  $n(t)$  : Il établit ainsi l'équation dite de Langevin, point de départ de la théorie de la diffusion [38]:

$$m \frac{\partial v(t)}{\partial t} = -k v(t) + n(t) \quad (\text{III.1})$$

Les points de vue d'Einstein et de Langevin seront réunis par Adrian Fokker qui dans sa thèse décrira l'évolution d'une densité de probabilité  $p$ . Il établira l'équation de Fokker-Planck qui généralise les deux processus précédents.

Par exemple, pour une densité  $p(x, t)$  unidimensionnelle, cette équation est de la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [D_1(x) f(x, t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D_2(x) f(x, t)] \quad (\text{III.2})$$

$D_1$  est le vecteur de dérive (drift Vector) et  $D_2$  le tenseur de diffusion. La théorie des probabilités sera étendue par Kiyoshi Ito qui publie sa théorie de l'intégrale stochastique, elle permet d'étudier les phénomènes aléatoires à travers le temps. Cette théorie permet d'intégrer le mouvement brownien et de calculer directement des trajectoires stochastiques. En 1949, Mark-Kac établira une formule qui permet de faire le lien entre la résolution d'une équation de Fokker-Planck et la résolution d'une intégrale stochastique [39].

### III.2.2 Principes et fondements du simulateur Monte Carlo:

La méthode de simulation Monte Carlo est devenue un outil de simulation des dispositifs semi-conducteurs indispensable. Cette méthode considère un modèle physique particulière pour les porteurs mis en jeu. Le transport électronique y est traité de manière exacte mais les formules donnant les probabilités d'interactions proviennent du calcul de la mécanique quantique. Ainsi les simulations Monte Carlo sont des simulations microscopiques dites semi classiques. La méthode de Monte Carlo fut pour la première fois appliquée à l'étude du transport électronique par Kurosawa en 1966 [41].

Le principe de la méthode consiste à suivre au cours du temps un ou plusieurs électrons dans l'espace réel et dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde  $\vec{k}$ . Chaque électron, caractérisé par son énergie  $E$  et son vecteur d'onde  $\vec{k}$ , subit l'effet du champ électrique existant dans le matériau. Il s'agit d'un processus itératif constitué de série de vols libres entrecoupés d'interactions [42]. Lors d'un vol libre, l'électron n'est soumis qu'au champ électrique  $\vec{E}$  dont l'effet est de modifier le vecteur d'onde  $\vec{k}$  par la relation suivante [43] :

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \quad (\text{III.3})$$

Où  $q$  représente la charge élémentaire de l'électron et  $\hbar$  la constante de Planck réduite.

L'intégration de cette équation fournit l'évolution temporelle du vecteur d'onde  $\vec{k}$ , et la connaissance de la structure de bande  $\varepsilon(\vec{k})$  permet de déduire l'énergie du porteur tel que :

$$\varepsilon_i = (1 + \alpha_i \varepsilon_i) = \gamma(k) = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i^*} \quad (\text{III.4})$$

Où  $\alpha_i$  est le coefficient de non parabolicité et  $m^*$  la masse de l'électron au fond. Il est alors possible de déterminer la vitesse et la position des particules grâce aux expressions :

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (\text{III.5})$$

$$\vec{r} = \int_0^t \vec{v}(t') dt' + \vec{r}_0 \quad (\text{III.6})$$

### III.2.3 Les méthodes de Monte-Carlo appliquées à l'équation de Schrödinger :

C'est dans un deuxième temps que s'est développée l'utilisation des méthodes Monte Carlo pour résoudre l'équation de Schrödinger, on parle alors de méthodes Monte Carlo quantique. Des 1931, Schrödinger soulignait la possibilité d'associer son équation en temps imaginaire à un processus de diffusion. Ces méthodes sont basées sur l'idée originale de Schrödinger, et par la suite d'autres chercheurs, soulignant le lien formel entre mécanique quantique en temps imaginaire et processus de diffusion. En 1982, Ceperley, Reynolds, Alder et Lester [45] présentent la méthode Diffusion Monte-Carlo dans l'approximation des nœuds fixes (Fixed-Node DMC). A partir de ce moment, les méthodes Monte-Carlo quantiques pour le calcul des structures électroniques prendront leur essor, permettant des applications variées.

## III.3 Les orbitales atomiques :

### III.3.1 Élément de mécanique quantique :

A une particule en mouvement est associée une onde dont l'amplitude  $\Psi$  dépend des coordonnées d'espace et de temps de la particule.  $\Psi(x, y, z, t)$  est appelée fonction d'onde de la particule.  $\Psi$  n'a pas de sens physique mais elle contient toute l'information concernant la particule.

### III.3.2 Probabilité de présence :

Contrairement à la mécanique classique déterministe, la mécanique quantique est dite *probabiliste*. En effet, la position exacte d'une particule n'est pas directement calculable. Par contre, on peut facilement exprimer la probabilité de la trouver dans un volume  $dv$  centré sur un point de coordonnées  $(x, y, z)$  à un instant  $t$ .

$$dP = \Psi^*(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t) dv \quad (\text{III.7})$$

Le produit  $\Psi^* \Psi$  est appelé *densité de probabilité de présence*. La particule devant se trouver dans l'espace, l'intégration des probabilités de présence sur tout l'espace doit être égale à 1. La fonction  $\Psi$  doit donc vérifier la relation (III.4) :

$$\int_{\text{espace}} \Psi^* \Psi dv = 1 \quad (\text{III.8})$$

Dans la suite, nous n'utiliserons que des fonctions réelles, c'est pourquoi nous noterons cette condition :  $\int_{\text{espace}} \Psi^2 dv = 1$

Cette relation est appelée condition de normalisation.

### III.3.3 Equation de Schrödinger :

L'évolution des fonctions d'onde est régie par l'équation de Schrödinger, qui joue un rôle équivalent à la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique :

$$H \Psi = -i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{III.9})$$

Dans cette équation,  $H$  est l'hamiltonien du système. Cet opérateur représente l'énergie du système, qui se décompose en deux termes :  $T$  représentant l'énergie cinétique, et  $V$  son énergie potentielle :

$$H = T + V \quad (\text{III.10})$$

Nous admettrons que l'opérateur hamiltonien est linéaire. On a donc les relations suivantes :

$$H(\lambda \Psi) = \lambda H(\Psi) \quad \text{et} \quad H(\Psi_i + \Psi_j) = H(\Psi_i) + H(\Psi_j) \quad (\text{III.11})$$

Nous ne nous intéresserons, dans la suite, qu'aux solutions stationnaires qui ne dépendent pas du temps.

Dans cette hypothèse, on considère que l'hamiltonien ne dépend pas du temps, la séparation des variables spatiales et temporelles conduit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{III.12})$$

La résolution de cette équation revient à trouver les valeurs propres  $E$  de l'hamiltonien  $H$ , qui correspondent aux énergies possibles du système, et les fonctions d'onde  $\Psi$  qui leur sont associées.

L'ensemble des solutions de l'équation de Schrödinger constitue une base de l'espace des fonctions d'onde du système.

### III.4 Atome d'hydrogène :

L'atome d'hydrogène est constitué d'un électron et d'un noyau comportant un seul proton, compte tenu du fait que l'électron est beaucoup plus léger que le proton, le centre de masse sera confondu avec le noyau qui est alors immobile. Nous considérerons que le noyau fixe constitue l'origine du repère (l'énergie cinétique du noyau est ainsi nulle). Dans ces conditions, l'électron est soumis à un champ électrostatique central créé par le noyau. Dans ce référentiel, l'utilisation des coordonnées sphériques  $(r, \theta, \Phi)$  définies sur le schéma suivant est plus adaptée à l'étude d'un tel système.

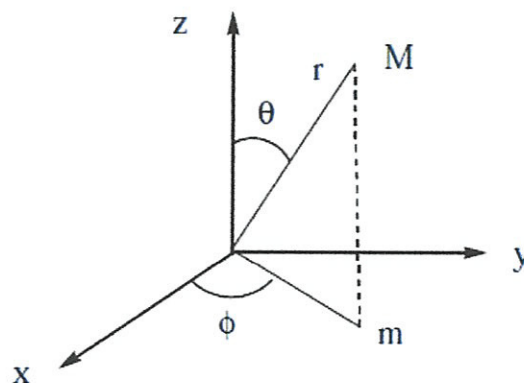


Figure III.1 : définition des coordonnées sphériques



### III.4.1 Hamiltonien du système :

L'opérateur hamiltonien du système est composé de l' $E_c$ (noyau), de l' $E_c$ (électron) et de l' $E_p$ (électron). Le premier terme est nul car le noyau est immobile dans le référentiel barycentrique. Il ne reste plus que les termes relatifs à l'électron : l'énergie cinétique de l'électron (de masse  $m$ ) et l'attraction coulombienne entre l'électron (de charge  $-e$ ) et le noyau (de charge  $+e$ ) :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta e - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (\text{III.13})$$

Où

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad (h=6.64 \cdot 10^{-34} \text{ J.S}).$$

$m$  : masse de l'électron ( $9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ).

$r$  : distance séparant l'électron du noyau.

### III.4.2 Résolution de l'équation de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger  $H\Psi = E\Psi$  admet un nombre infini de solutions. Chaque fonction propre  $\Psi$  caractérise un état de l'électron appelée orbitale atomique. A chacun de ces états (orbitales atomiques) est associée une valeur propre  $E$  représentant l'énergie de l'électron décrite par la fonction d'onde  $\Psi$  correspondante.

La résolution de l'équation de Schrödinger de ce système simple est possible mais n'apporterait rien de nouveau. Nous ne nous intéresserons donc pas à cette résolution mais aux principaux résultats qui en découlent.

#### a) Fonctions d'onde :

L'énergie des états stationnaires ne peut prendre que certaines valeurs discrètes. Les fonctions d'onde associées à la situation d'un électron dans un atome d'hydrogène sont ainsi quantifiées. Elles sont définies par trois nombres quantiques  $n$ ,  $l$  et  $m$  définis de la façon suivante :

$n$  : nombre quantique principal,  $n$  est un entier strictement positif. Ce nombre définit

l'énergie de l'électron et correspond à la couche électronique.

**l** : nombre quantique secondaire ou azimuthal, c'est un entier positif qui ne peut prendre que des valeurs strictement inférieures à  $n$ . il est défini les sous couche électronique.

**m** : nombre quantique magnétique,  $m$  peut prendre toutes les valeurs entières comprises entre  $-l$  et  $+l$ . Pour une valeur de  $l$  donnée, il y a donc  $(2l+1)$  valeurs de  $m$  possibles. Ce nombre définit l'orientation de l'orbitale atomique.

$$-l \leq m \leq l$$

**S** : Le nombre quantique de spin, C'est un demi-entier, la valeur pouvant être  $+1/2$  ou  $-1/2$  pour les électrons. Ce nombre définit la rotation de l'électron sur lui-même (moment cinétique intrinsèque).

Ces trois nombres quantiques permettent de définir une orbitale  $\Psi_{n, m, l}(r, \theta, \Phi)$ .

Plutôt que de désigner les orbitales atomiques par le triplet  $(n, \ell, m)$ , l'usage veut que l'on utilise les notations  $s, p, d...$  (d'origine spectroscopique) précédées du nombre quantique principal  $n$ . Ces lettres correspondent aux différentes valeurs de  $\ell$ . Le tableau ci-dessous présente les premières fonctions d'onde :

Couche	Sous couche	M	Fonction d'onde	Orbitale (case quantique)	
N	l	M	$\Psi$		
n=1	l=0	m=0	$\Psi_{1,0,0}$	1s	
n=2	l=0	m=0	$\Psi_{2,0,0}$	2s	
		l=1	m=-1	$\Psi_{2,1,-1}$	2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub> , 2p <sub>z</sub>
			m=0	$\Psi_{2,1,0}$	
m=1	$\Psi_{2,1,1}$				
n=3	l=0	m=0	$\Psi_{3,0,0}$	3s	
		l=1	m=-1	$\Psi_{3,1,-1}$	3p <sub>x</sub> , 3p <sub>y</sub> , 3p <sub>z</sub>
			m=0	$\Psi_{3,1,0}$	
	m=1		$\Psi_{3,1,1}$		
	l=2	m=-2	$\Psi_{3,2,-2}$	3d <sub>xy</sub> , 3d <sub>yz</sub> , 3d <sub>xz</sub> 3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> , 3d <sub>z<sup>2</sup></sub>	
		m=-1	$\Psi_{3,2,-1}$		
		m=0	$\Psi_{3,2,0}$		
		m=1	$\Psi_{3,2,1}$		
		m=2	$\Psi_{3,2,2}$		

L'expression de l'hamiltonien d'un système hydrogénoïde montre qu'il est possible de séparer les variables :

$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\Phi) = R_{n,l}(r) \gamma_{n,l}(\theta,\Phi)$$

Le premier terme est  $R_{n,l}(r)$  appelé partie radiale de la fonction propre car elle ne dépend que de la seule variable  $r$ . Le second terme  $\gamma_{n,l}(\theta,\Phi)$  est la partie angulaire de la fonction d'onde. Chaque terme est normalisable ce qui assure la normalisation de la fonction totale.

**b) Energie :** Les valeurs propres de l'équation de Schrödinger forment un ensemble de niveaux d'énergie discrets  $E_n$  qui ne dépendent que du nombre quantique principal  $n$  (nombre entier qui varie de 1 à l'infini) :

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2} \quad (\text{III.114})$$

avec  $Ry$ , constante de Rydberg, qui a la dimension d'une énergie et vaut 13,6 eV.

Par convention,  $E = 0$  correspond à l'énergie associée à un électron libre de vitesse nulle dans le référentiel choisi. Ainsi, lorsque l'électron est lié au noyau, son énergie est négative. Lorsque  $n$  tend vers l'infini,  $E$  tend vers 0 comme le montre le schéma de la figure (III.2).

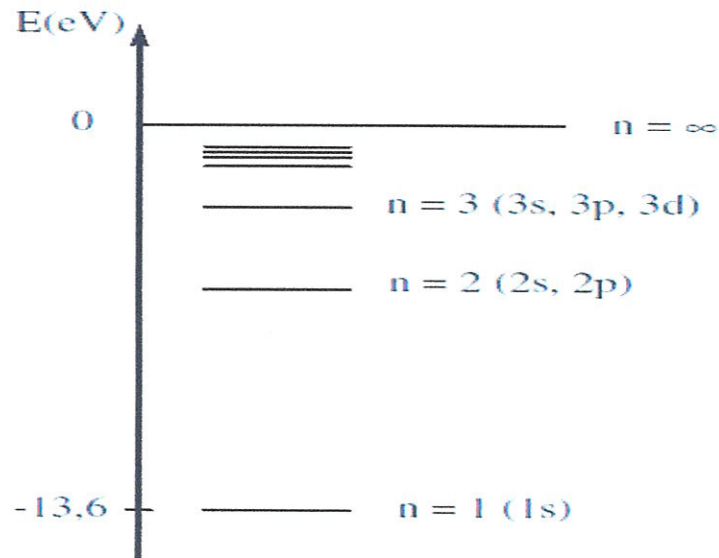


Figure III.2 : schéma illustrant les trois premiers niveaux d'énergie

Dans l'état fondamental, l'atome d'hydrogène possède un électron dont l'énergie est -13,6 eV. L'énergie minimale qu'il faut fournir pour arracher cet électron est donc de 13,6 eV qui correspondent à la valeur expérimentale du potentiel d'ionisation de l'hydrogène.

### III.5 Configuration électronique d'un atome :

#### III.5.1 Principe d'exclusion de Pauli :

En 1925, Wolfgang Pauli stipule qu'il est impossible que deux électrons aient le même état quantique à l'état fondamental, c'est-à-dire qu'ils ne peuvent posséder les quatre mêmes nombres quantiques ( $n$ ,  $l$  et  $m_l$  pour décrire l'orbitale et  $m_s$  pour le spin de l'électron). Ainsi, si deux électrons se trouvent dans la même orbitale et que l'un des électrons possède un moment magnétique (un spin), le second aura systématiquement un moment magnétique opposé. Pour bien mettre en évidence cette différence dans le système codé des cases quantiques, l'une des flèches pointe vers le haut et l'autre vers le bas (le sens de la flèche représente les moments magnétiques distincts de l'électron ou plus simplement le sens de rotation de l'électron sur lui-même).

Par exemple, les électrons d'un même atome ont des énergies (liées à leurs orbites) différentes. Chaque particule possède ainsi un certain nombre de propriétés propres qui forment "l'état de la particule". Parmi ces propriétés citons:

- la **masse au repos** (identique pour chaque type de particules)
- la **charge électrique**  $Q$  qui vaut  $+1$  pour le proton,  $-1$  pour l'électron,  $0$  pour le neutron.
- le **spin** (de l'anglais "to spin" = faire tourner) qui correspond au moment cinétique interne, c'est-à-dire en gros à la rotation de la particule sur elle-même.

#### III.5.2 principe de *Aufbau* :

Mot allemand signifiant construction par empilement précise que les orbitales de plus faible énergie doivent être remplies en premier. Cela est fort logique d'un point de vue énergétique puisque si l'on place des électrons sur le premier niveau énergétique, ils seront plus près du noyau et subiront une plus forte attraction. Les électrons dans une orbitale  $1s$  sont donc plus stables que ceux disposés dans une orbitale  $2s$ . Le principe de *Aufbau* indique qu'il faut absolument remplir l'orbitale  $1s$  avant de placer des électrons dans l'orbitale  $2s$  et ainsi de suite.

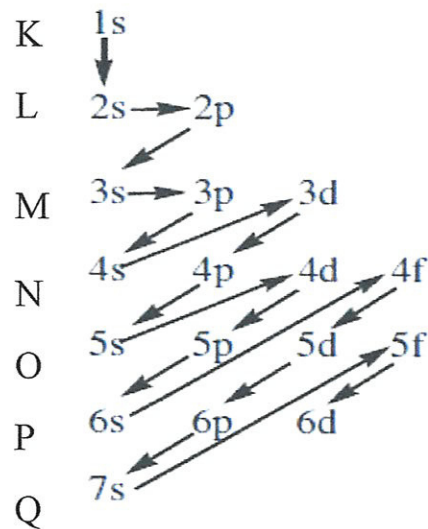


Figure III.3 : diagramme de Klechskowski

### III.5.3 Principe d'incertitude de Heisenberg :

Le principe d'incertitude (ou principe d'indétermination) énonce que, pour une particule massive donnée, on ne peut pas connaître simultanément sa position et sa vitesse. Ce principe fut énoncé en 1927 par Heisenberg lors des balbutiements de la mécanique quantique. Le terme "incertitude" est le terme historique pour ce principe. Le nom de théorème d'indétermination est parfois préféré car le principe ne porte pas sur l'ignorance "subjective" de grandeurs par l'expérimentateur, mais bien sur une impossibilité fondamentale de les déterminer, et même sur le fait que le concept de grandeur précise n'a pas de sens physique. De plus, ce principe étant démontré par les équations, il devient un théorème.

La formulation mathématique donne :  $\Delta p \cdot \Delta q \geq h / (2 \pi)$

Où : p = mesure du mouvement et q = mesure de la position.

Dans son deuxième énoncé Heisenberg vas plus loin, son équation nous apprend que l'incertitude sur la mesure de l'énergie d'un corps est inversement proportionnelle à la durée de la mesure.

Ce qui nous donne :  $\Delta E \cdot \Delta T \geq h / (2 \pi)$

### III.5.4 Relations de Planck-Einstein :

Les deux relations de Planck-Einstein, montrent l'existence d'un passage entre des notions corpusculaires, l'énergie  $E$  et la quantité de mouvement  $p$ , et ondulatoires, la pulsation  $\omega$  et le vecteur d'onde  $k$  :

$$\begin{cases} E & = & \hbar \omega \\ P & = & \hbar k \end{cases} \quad (\text{III.15})$$

$\hbar = h / (2\pi)$  est la constante de Planck normalisée ( $h$  divisée par  $2\pi$ ) avec :

$$h \approx 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

C'est la présence de cette constante qui fait que ces relations appartiennent au domaine de la mécanique quantique. Nous verrons que l'énergie  $E$  est à la fois l'énergie d'une onde et l'énergie mécanique d'un corpuscule.

Donc on peut constater une relation entre l'énergie potentielle et la longueur d'onde, elle est exprimée :

$$\left. \begin{array}{l} E = \hbar \omega \\ \omega = 2\pi f = \frac{2\pi c}{\lambda} \end{array} \right\} \Rightarrow E = \hbar \cdot \frac{2\pi c}{\lambda} \quad (\text{III.16})$$

### III.6 Particule dans un puits de potentiel :

Soit une particule de la masse  $m$  confinée pour se déplacer à l'intérieur d'un puits de potentiel  $V(x)$  décrit sur la figure III.4.

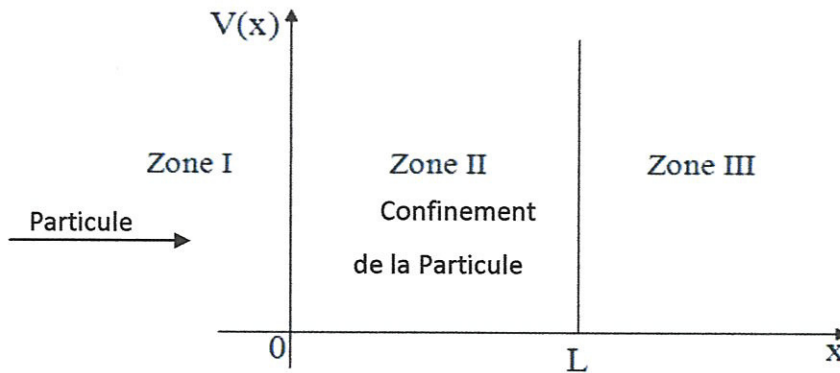


Figure III.4 : Représentation des limites d'un puits de potentiel

L'énergie potentielle de la structure représentée sur la figure III.3.a est donnée par :

$$v(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ +\infty, & x < 0 \text{ et } x > L \end{cases} \quad (\text{III.17})$$

L'équation de Schrödinger stationnaire est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V\Psi = E\Psi \quad (\text{III.18})$$

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger dans les trois zones. Dans la zone II,  $V(x) = 0$  et l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi \quad (\text{III.19})$$

La solution, exprimée avec les fonctions cosinus et sinus, est :

$$\Psi = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (\text{III.20})$$

L'énergie qui lui correspond est :  $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  (III.21)

Dans les zones I et III, l'énergie potentiel  $V$  est infini. On peut déduire, selon la forme de l'équation de Schrödinger, si  $V$  est infini,  $\Psi$  doit être nul.



A ce stade, nous avons donc :

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ A \sin(kx) + B \cdot \cos(kx) & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{si } x > L \end{cases} \quad (\text{III.22})$$

On sait que la fonction  $\Psi(x)$  est une fonction continue en  $x = 0$ , ceci implique que B égal zéro. La condition de continuité en  $x=L$  implique que :

$$kL = n\pi \Leftrightarrow k = \frac{n\pi}{L} \quad (\text{III.23})$$

Le vecteur  $k$  ne peut prendre que des valeurs discrètes  $n\pi/L$ . L'impulsion correspondante  $p$  vaut :

$$p = \hbar k = \frac{\hbar n\pi}{L} \quad (\text{III.24})$$

On dit alors que  $k$  et  $p$  sont quantifiés. La quantification de  $k$  implique donc aussi la quantification de l'énergie  $E$  de la particule :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2L^2 m} \quad (\text{III.25})$$

L'énergie d'une particule dans un puits de potentiel de longueur  $L$  et de profondeur infinie consiste en des niveaux discrets ( $\hbar^2 n^2 \pi^2 / 2L^2 m$ ). Notons que  $E$  varie comme  $n^2$ , on dit que l'énergie est aussi quantifiée.

Dans la zone II la fonction d'onde devienne :  $\Psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

En utilisant la condition de normalisation, on peut calculer  $A$  :

$$\int_0^L |A|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \quad (\text{III.26})$$

La fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (\text{III.27})$$

### III.6.1 Effet tunnel :

Soit un faisceau de particules de masse  $m$  envoyées de la gauche vers la droite sur une barrière de potentiel comme illustré sur la figure (III.5).

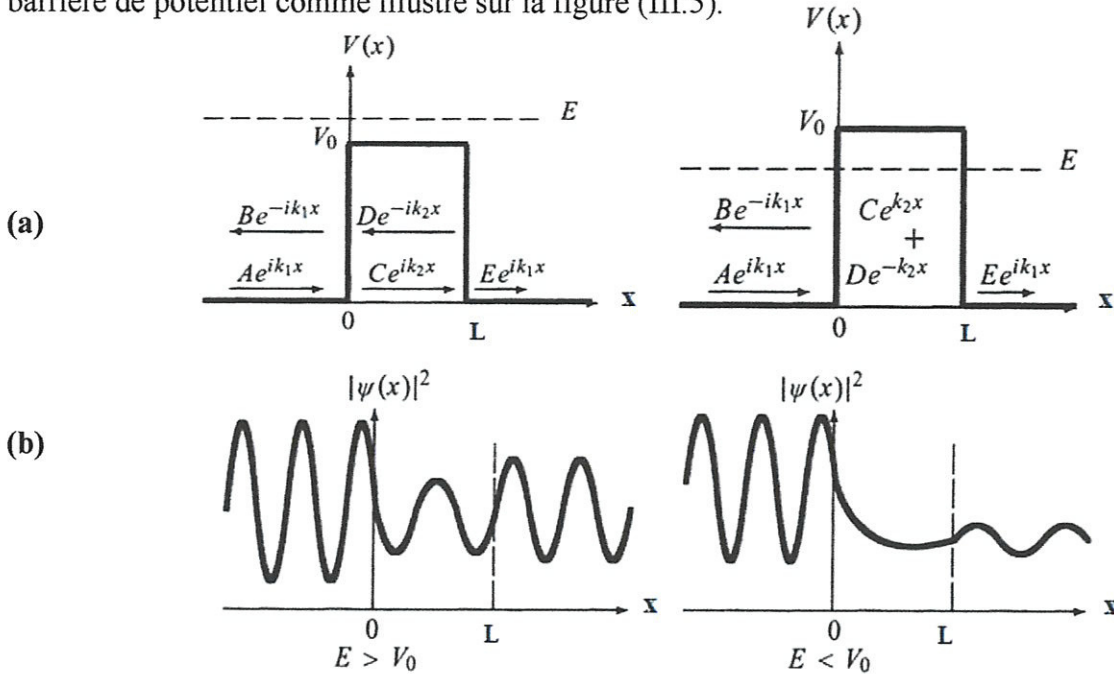


Figure III.5 : (a) barrière de potentiel et direction de propagation d'une onde incidente, réfléchiée et transmise. (b) Densité de probabilité quand  $E > V_0$  et  $E < V_0$  [46]

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{si } x > L \end{cases} \quad (\text{III.28})$$

On peut résoudre ce problème dans le cadre de la mécanique quantique. On peut distinguer deux cas :

- Cas  $E > V_0$  : l'équation de Schrödinger admet une solution :

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A \cdot \exp(ik_1x) + B \cdot \exp(-ik_1x) & x \leq 0 \\ \Psi_2(x) = C \cdot \exp(ik_2x) + D \cdot \exp(-ik_2x) & 0 < x < L \\ \Psi_3(x) = E \cdot \exp(ik_1x) & x \geq L \end{cases} \quad (\text{III.29})$$

Les constants  $B$ ,  $C$ ,  $D$  et  $A'$  sont obtenus en fonction de  $A$  à partir de conditions de continuité de  $\Psi$  et sa dérivée première en  $x=0$  et  $x=L$ .

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad \frac{d\Psi_1(0)}{dx} = \frac{d\Psi_2(0)}{dx} \quad (\text{III.30})$$

$$\Psi_2(L) = \Psi_3(L), \quad \frac{d\Psi_2(L)}{dx} = \frac{d\Psi_3(L)}{dx} \quad (\text{III.31})$$

Donc :

$$A + B = C + D, \quad ik_1(A - B) = ik_2(C - D) \quad (\text{III.32})$$

$$C \exp(ik_2L) + D \exp(-ik_2L) = E \exp(ik_1L) \quad \text{et} \quad ik_2(C e^{ik_2L} - D e^{-ik_2L}) = ik_1 E e^{ik_1L}$$

$$\begin{aligned} E &= 4k_1k_2A e^{-ik_1L} \left[ (k_1+k_2)^2 e^{-ik_2L} - (k_1-k_2)^2 e^{ik_2L} \right]^{-1} \\ &= 4k_1k_2A e^{-ik_1L} \left[ 4k_1k_2 \cos(k_2L) - 2i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2L) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{III.33})$$

Le coefficient de transmission est donné par :

$$\begin{aligned} T &= \frac{k_1|A'|^2}{k_2|A|^2} = \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1k_2} \right)^2 \sin^2(k_2L) \right]^{-1} \\ &= \left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \left( L \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar}} \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} \right) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{III.34})$$

$$\text{Puisque :} \quad \left( \frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1k_2} \right)^2 = \frac{V_0^2}{E(E - V_0)} \quad (\text{III.35})$$

En utilisant les notations :  $\lambda = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}L$  et  $w = \frac{E}{V_0}$ , on peut écrire T sous la forme :

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4w(w-1)} \sin^2(\lambda\sqrt{w-1}) \right]^{-1} \quad (\text{III.36})$$

- Cas  $E < V_0$  :

Soit une particule arrivant sur la barrière de potentiel (figure III.4) depuis  $x < 0$ . En mécanique classique, la particule est réfléchiée par la barrière de potentiel.

L'équation de Schrödinger dans les trois régions auxquelles être semblable à (III.29).

Sauf que :  $\Psi_2(x) = C \cdot \exp(ik_2x) + D \cdot \exp(ik_2x)$ , devrait être remplacée par :

$$\Psi_2(x) = C \cdot \exp(k_2x) + D \cdot \exp(k_2x) :$$

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A \cdot \exp(ik_1x) + B \cdot \exp(-ik_1x) & x \leq 0 \\ \Psi_2(x) = C \cdot \exp(k_2x) + D \cdot \exp(-k_2x) & 0 < x < L \\ \Psi_3(x) = E \cdot \exp(ik_1x) & x \geq L \end{cases} \quad (\text{III.37})$$

Quand  $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  et  $k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$ , le comportement de la densité de probabilité correspondant à la fonction d'onde est prévu, comme illustré dans la figure(III.4) pour être oscillant dans les régions  $x < 0$  et le  $x > L$ , et décroît fortement dans la région  $0 < x < L$ .

Pour trouver les coefficients de réflexion et de transmission, nous devons calculer seulement B et E en termes de A. Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de son dérivé à  $x=0$  et  $x=L$  :

$$A + B = C + D \quad (\text{III.38})$$

$$ik_1(A-B) = k_2(C-D) \quad (\text{III.39})$$

$$C \cdot e^{k_2L} + D \cdot e^{-k_2L} = E \cdot e^{ik_1L} \quad (\text{III.40})$$

$$k_2(C \cdot e^{k_2L} - D \cdot e^{-k_2L}) = ik_1E \cdot e^{ik_1L} \quad (\text{III.41})$$

Les deux dernières équations mènent aux expressions suivantes pour C et D :

$$C = \frac{E}{2} \left( 1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{(ik_1 - k_2)L}, \quad D = \frac{E}{2} \left( 1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{(ik_1 + k_2)L}$$

En remplaçant ces deux expressions dans les deux équations(III.27) et (III.28) et en divisant par A, on obtient deux équations réduites suivantes :

$$1 + \frac{B}{A} = \frac{E}{A} e^{ik_1L} \left[ \cosh(k_2L) - i \frac{k_1}{k_2} \sin(k_2L) \right] \quad (\text{III.42})$$

$$1 - \frac{B}{A} = \frac{E}{A} e^{ik_1L} \left[ \cosh(k_2L) - i \frac{k_2}{k_1} \sin(k_2L) \right] \quad (\text{III.43})$$

Dans ce cas le coefficient de transmission est donné par :

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = 4 \left[ 4 \cosh^2(k_2L) + \left( \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \right]^{-1} \quad (\text{III.44})$$

On a :  $\cosh^2(k_2 L) = 1 + \sinh^2(k_2 L)$ , donc, nous pouvons réduire (III.33) :

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 L) \right]^{-1} \quad (\text{III.45})$$

Le fait que T soit non nul montre qu'il y a une probabilité non nulle que la particule traverse la barrière de potentiel et ressorte dans la zone III. C'est ce qu'on appelle l'effet tunnel.

Pour  $KL \gg 1$  et après un réarrangement mathématique, on peut faire une approximation pour T

$$T = 16 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp(-2 K L) \quad (\text{III.46})$$

$$\text{Avec } K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}}$$

L'effet tunnel décroît exponentiellement avec L et  $m^{1/2}$ . Les particules légères comme les électrons ont une probabilité plus grande de causer un effet tunnel que les particules plus lourdes.

### III.7 Résolution de l'équation de Schrödinger spatiale à 2D :

On considère le potentiel à deux dimensions illustré dans la figure (III.6).

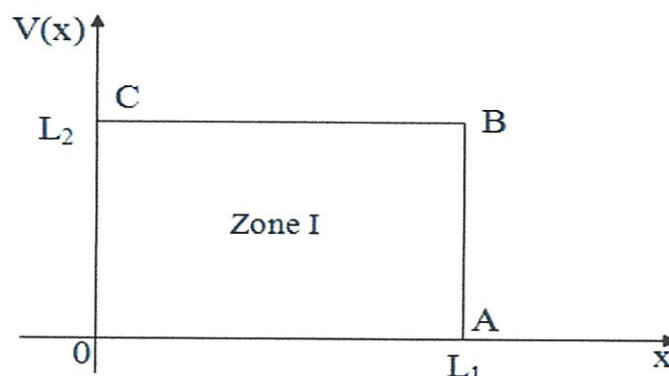


Figure III.6 : Potentiel rectangulaire en deux dimensions

Le potentiel  $V$  est donné par :

$$V = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq L_1 \text{ et } 0 \leq y \leq L_2 \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Nous définissons donc la zone I comme le rectangle délimité par 0,  $A = (L_1; 0)$ ,  $B = (L_1; L_2)$  et  $C = (0; L_2)$  et la zone II par le reste du plan (figure III.4). Donc :

$$V = \begin{cases} 0 & \text{dans la zone I} \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

D'une manière classique, la particule est confinée dans la zone I.

Dans le cas quantique, l'équation de Schrödinger est :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} \right] = E\Psi(x, y) \quad (\text{III.47})$$

Cette équation est résolue par la technique de la séparation des variables.

Posons  $\Psi(x, y) = X(x) Y(y)$

L'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ Y(y) \frac{d^2\Psi}{dx^2} + X(x) \frac{d^2\Psi}{dy^2} \right] = E X(x) Y(y) \quad (\text{III.48})$$

Divisons par  $X(x)$  et  $Y(y)$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{X} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2\Psi}{dy^2} \right] = E \quad (\text{III.49})$$

Notons que  $\frac{1}{X} \frac{d^2\Psi}{dx^2}$  (respectivement  $\frac{1}{Y} \frac{d^2\Psi}{dy^2}$ ) ne dépend que de  $x$  (respectivement de

$y$ ), alors que le membre de droite  $E$  est indépendant de  $x$  et  $y$ . Il faut donc :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y \\ E_x + E_y = E \end{cases} \quad \text{(III.50)}$$

Nous nous retrouvons dans le cas bien connu d'un puits de potentiel à une dimension. C'est un problème que nous avons déjà résolu :

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{L_1}} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{L_1} x\right) \quad \text{(III.51)}$$

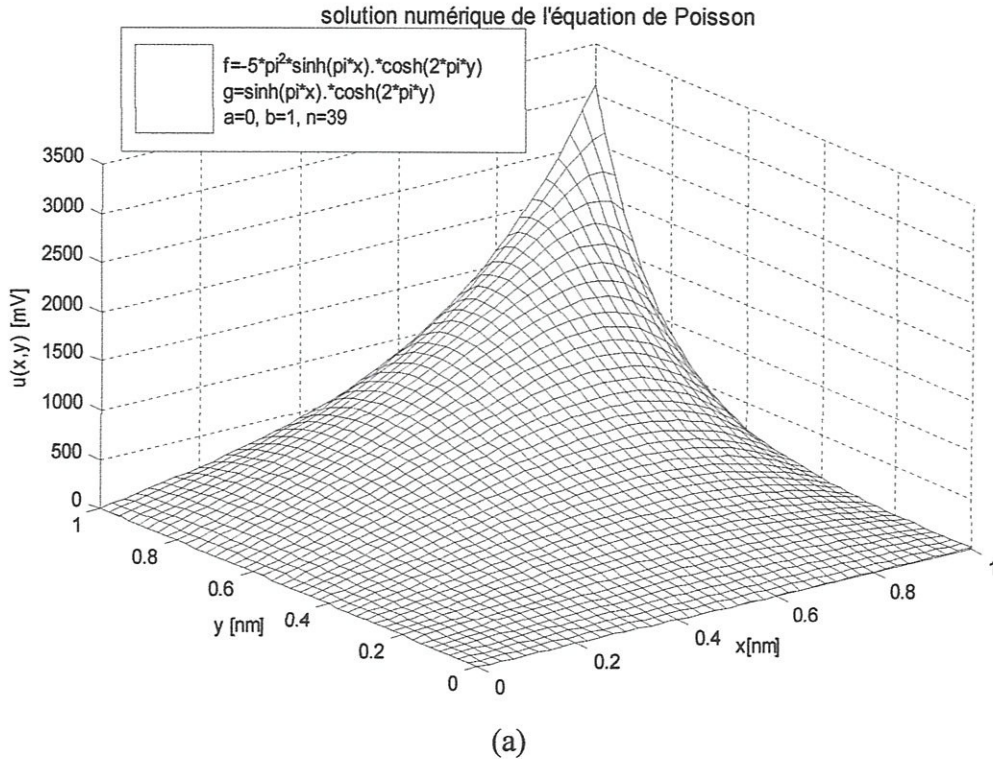
$$Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_2}} \sin\left(\frac{n_2 \pi}{L_2} y\right) \quad \text{(III.52)}$$

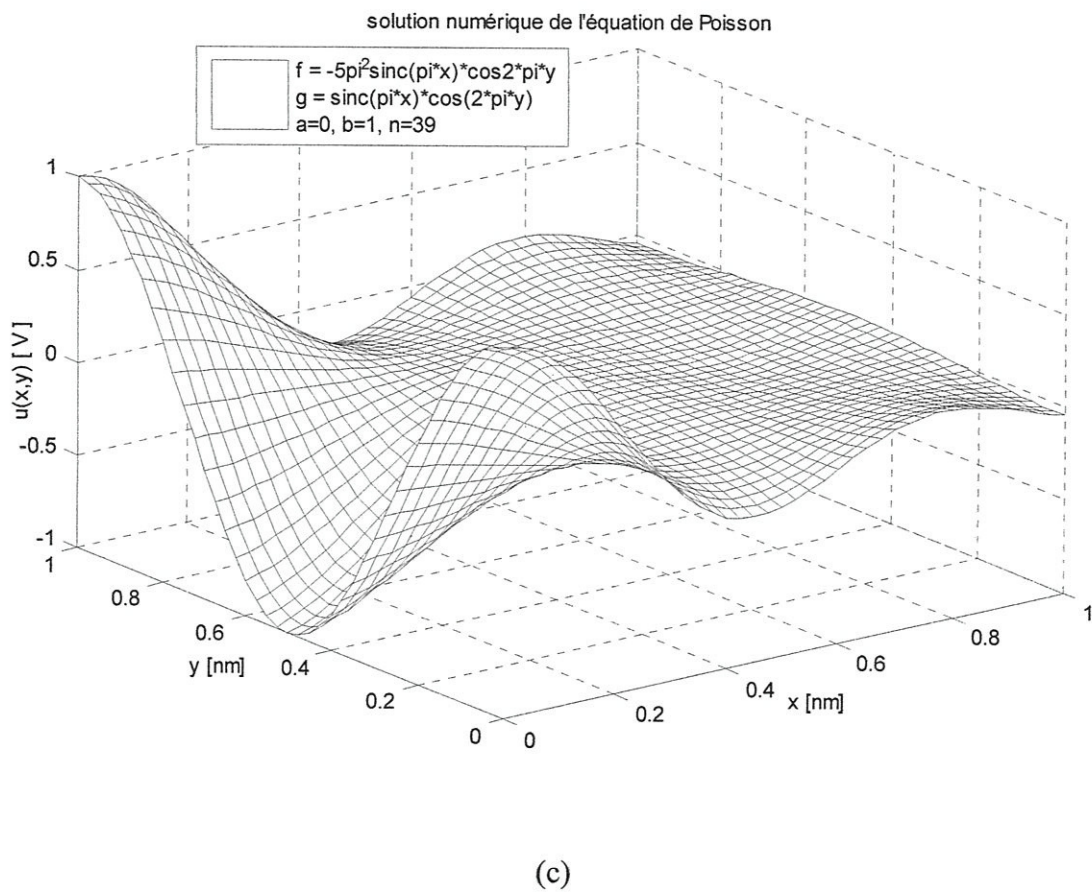
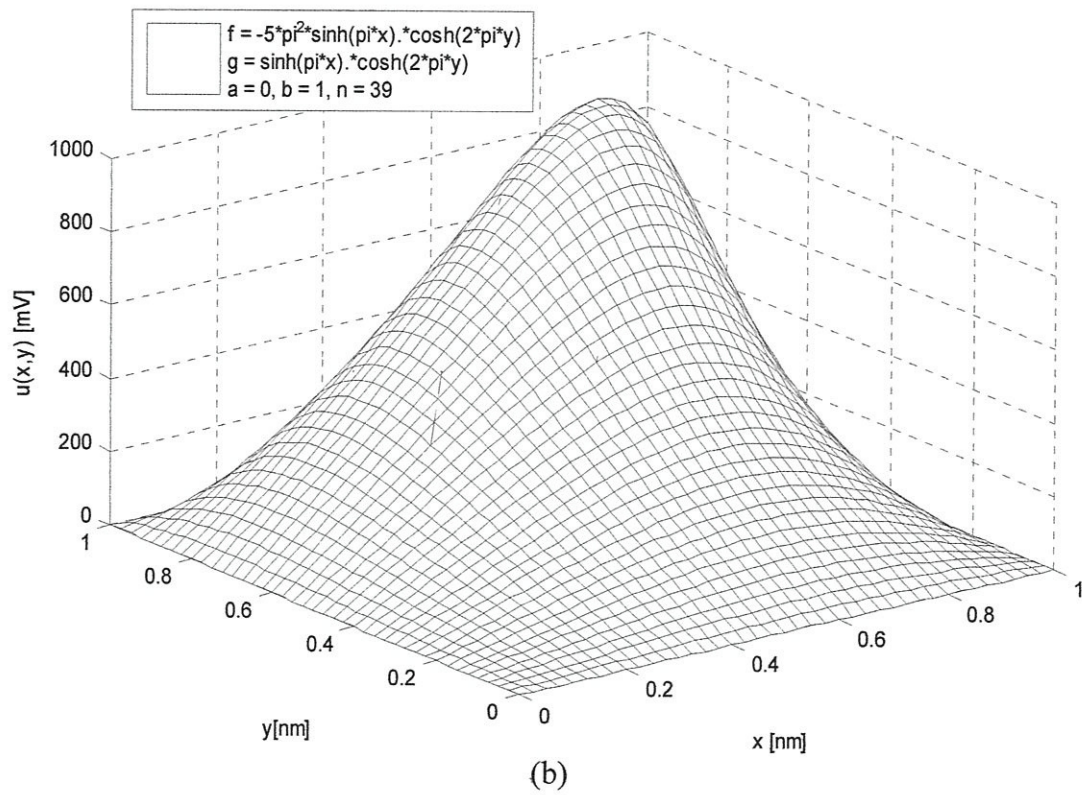
$$\Psi_1(x, y) = \sqrt{\frac{4}{L_1 L_2}} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{L_1} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{L_2} y\right) \quad \text{(III.53)}$$

### III.8 Résultats de simulation :

#### III.8.1 Résolution numérique de l'équation de Poisson :

Les figures (III.7 a-e) représentent les résolutions numériques de l'équation de Poisson à deux dimensions pour différentes distributions et pour différents intervalles.







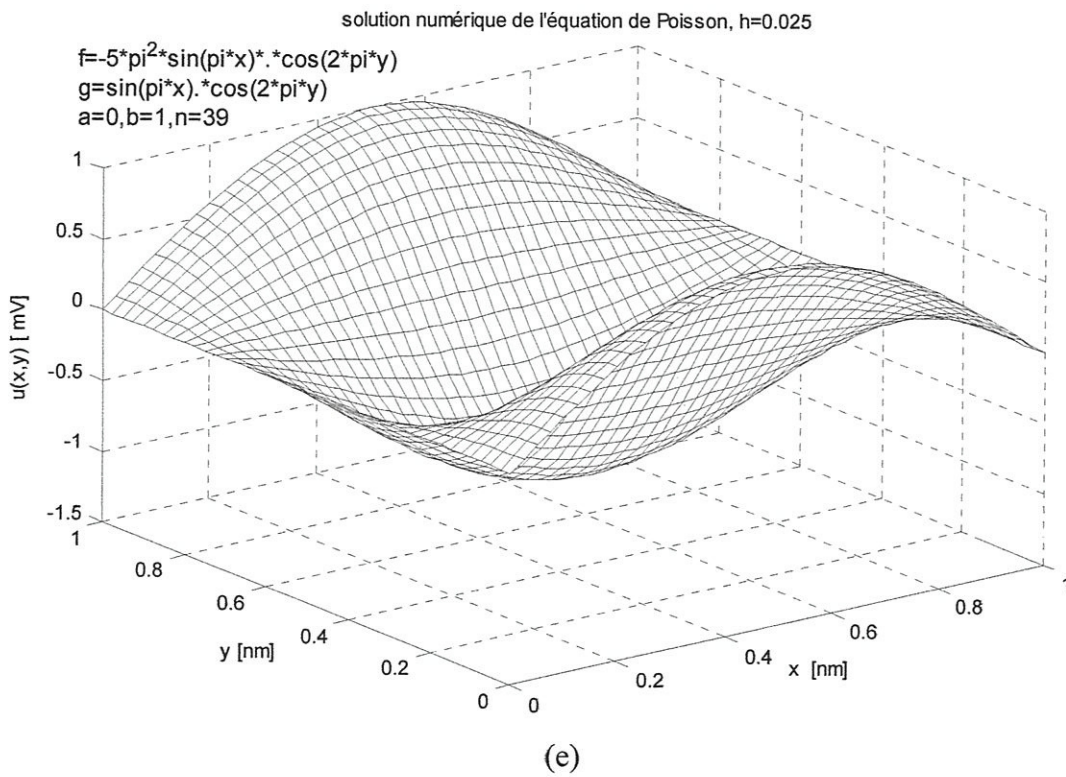
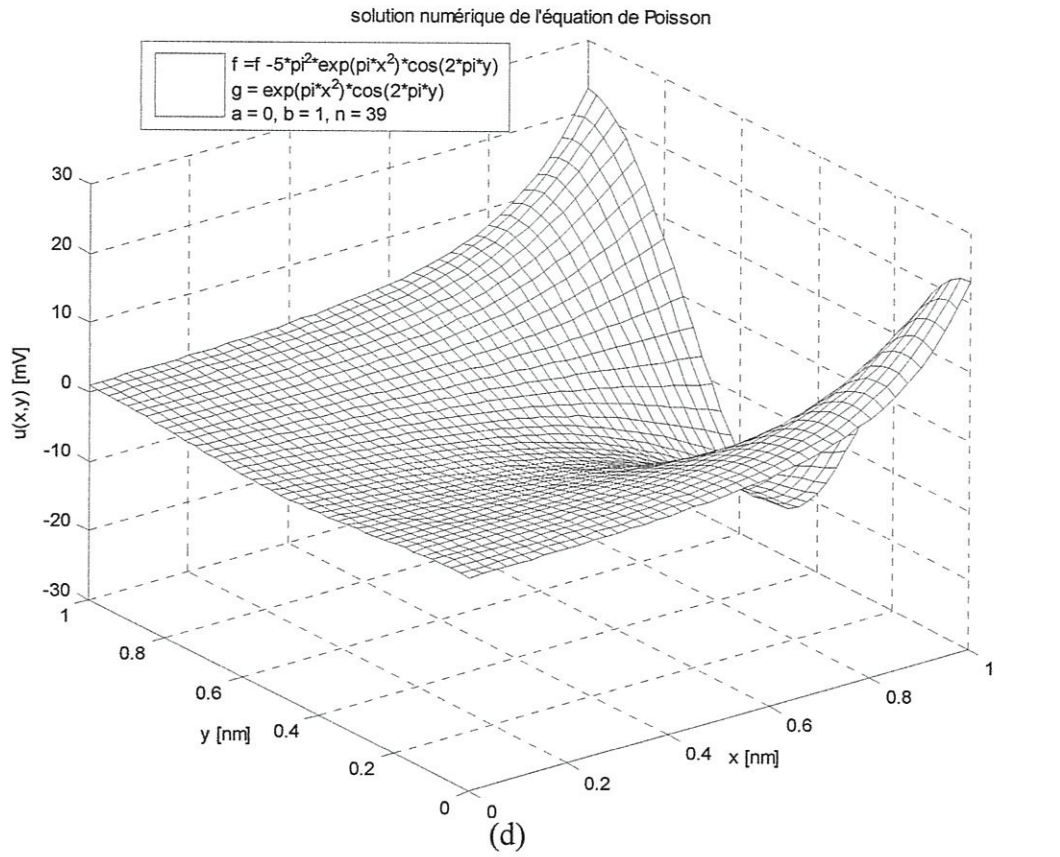


Figure III.7: solution numérique de l'équation de Poisson pour différents distribution

### III.8.2 Puits de potentiel infini :

D'après l'équation (III.23), on peut représenter les fonctions d'onde pour un puits de potentiel infini comme le montre la figure (III.8).

Dans un intervalle  $L$  allant de  $0$  à  $2 \text{ \AA}$ , on remarque que la longueur d'onde et l'énergie potentielle du puits sont inversement proportionnelles, quand l'énergie potentielle augmente la longueur d'onde diminue. Dans le cas limite, quand l'énergie tend vers l'infini la longueur d'onde tend vers zéro, ce résultat peut être confirmé par l'expression de l'énergie potentielle  $E$  en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$ .

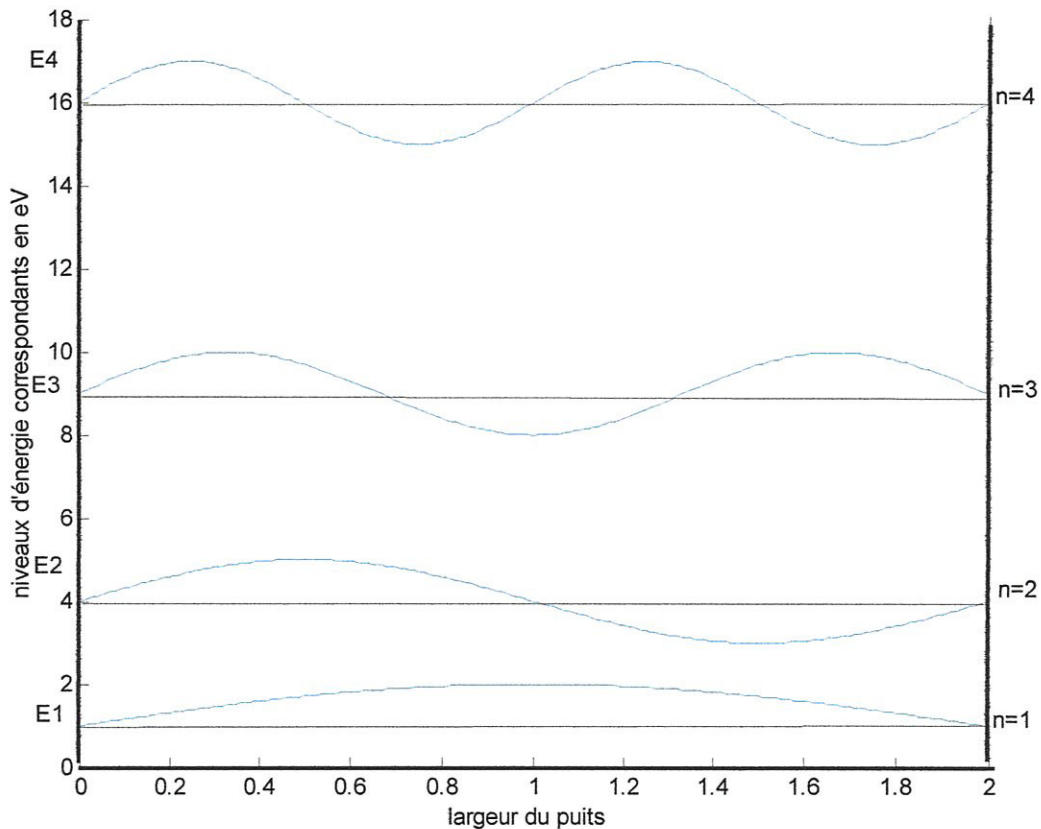


Figure III.8 : niveaux d'énergie en fonction de la largeur d'un puits de potentiel infini

### III.8.3 Barrière de potentiel :

Nous avons simulé la résonance de diffusion et l'effet tunnel comme le montre la figure (III.9). On remarque une décroissance forte de l'énergie entre  $0$  et  $1.2 \text{ \AA}$ . L'énergie est

stable à partir de 1.2 Å. Ce résultat est expliqué par le fait que la largeur de la barrière représentée sur la figure (III.5) est très importante pour qu'une particule puisse la traverser.<sup>4</sup>

Si on considère une largeur allant de 0 jusqu'à 2 Å, on peut constater que l'énergie de la particule ne s'annule pas mais par conséquent la particule peut franchir une telle barrière.

On remarque que les valeurs de l'énergie dans le cas de la résonance de diffusion varient au rythme d'une sinusoïde, on remarque aussi que la période de l'énergie devient plus large comme le confirme la théorie, cette variation de la période peut être expliquée par la variation de l'énergie de la particule qui devient  $E - V_0$ , selon l'équation de Planck-Einstein.

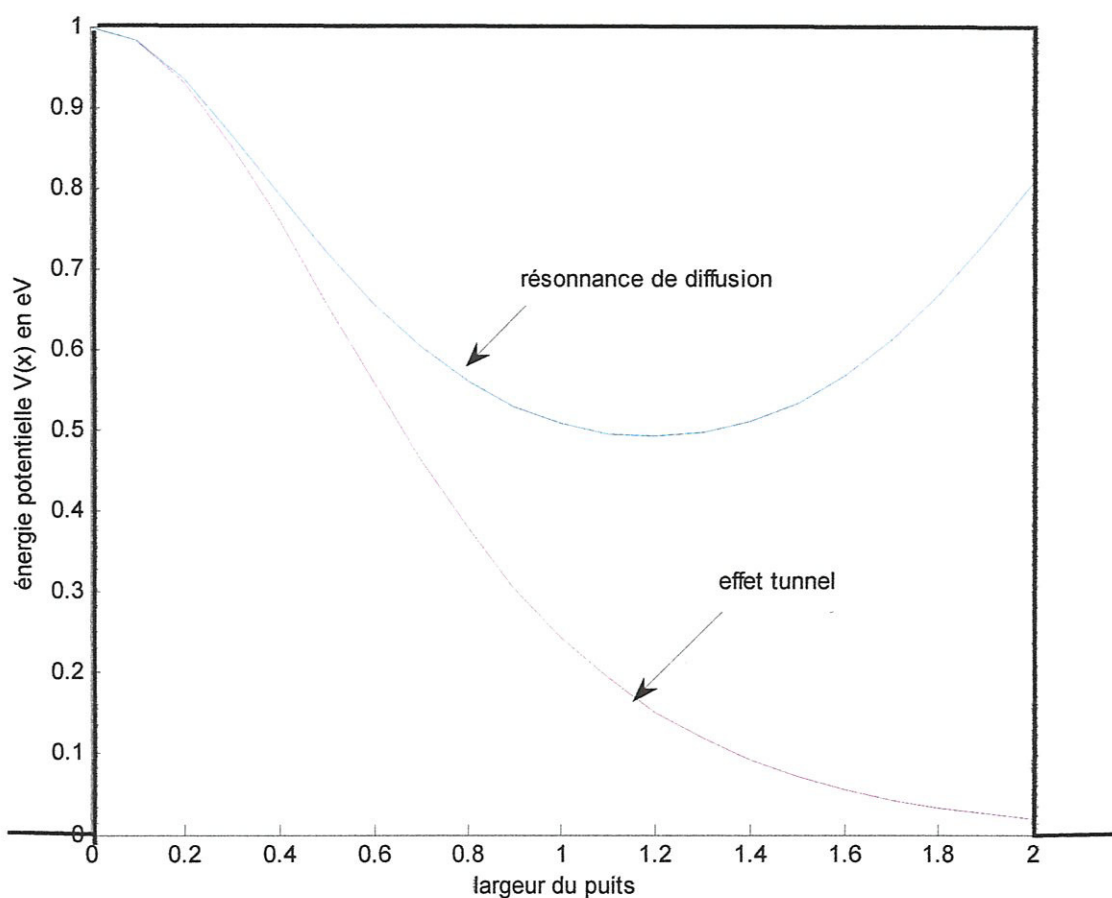


Figure III.9: variation de l'énergie potentielle en fonction de la largeur de potentiel ( $L = 2$  Å).

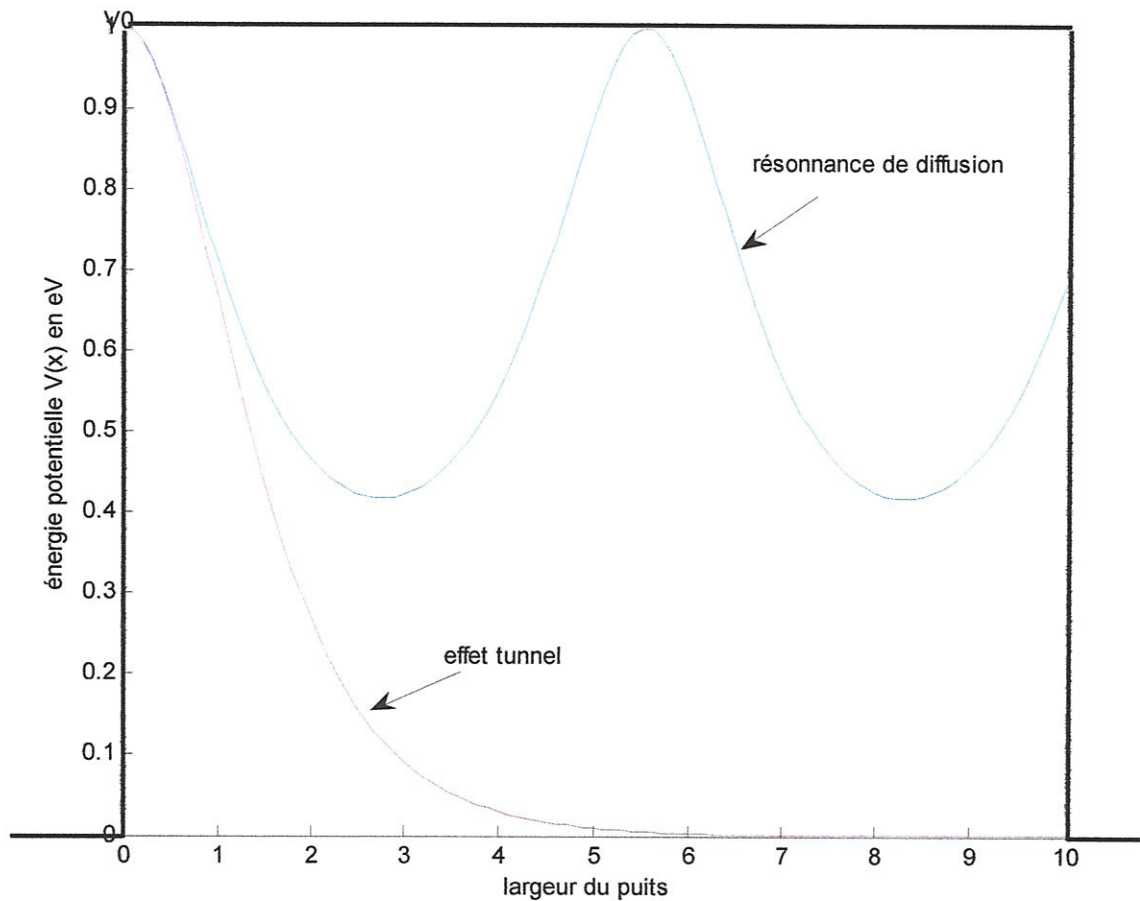


Figure III.10: variation de l'énergie potentielle en fonction de la largeur de potentiel ( $L=10 \text{ \AA}$ )

### III.8.4 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger à 2D :

D'après l'équation (III.53), nous avons simulé la variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions  $x$  et  $y$  pour une distribution donnée à une largeur de confinement  $L_1$  et  $L_2$  et pour des nombres quantiques  $n_1 = 1$  et  $n_2 = 1$  comme le montre la figure (III.11). La figure (III.12) et (III.13) représentent la même distribution de la fonction d'onde pour  $n_1 = 2n_2$  (fig. III.12) et pour  $n_2 = 2n_1$  (fig. III.13).

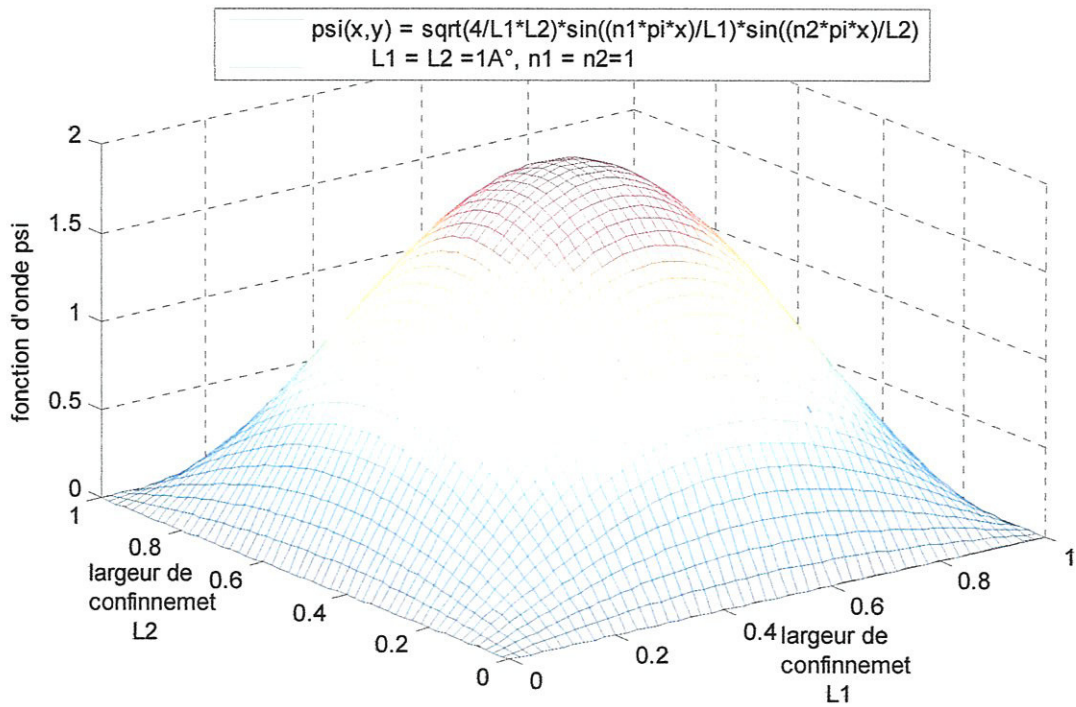


Figure (III.11) : variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions  $L_1 = L_2 = 1 \text{ \AA}$ ,  $n_1 = n_2$

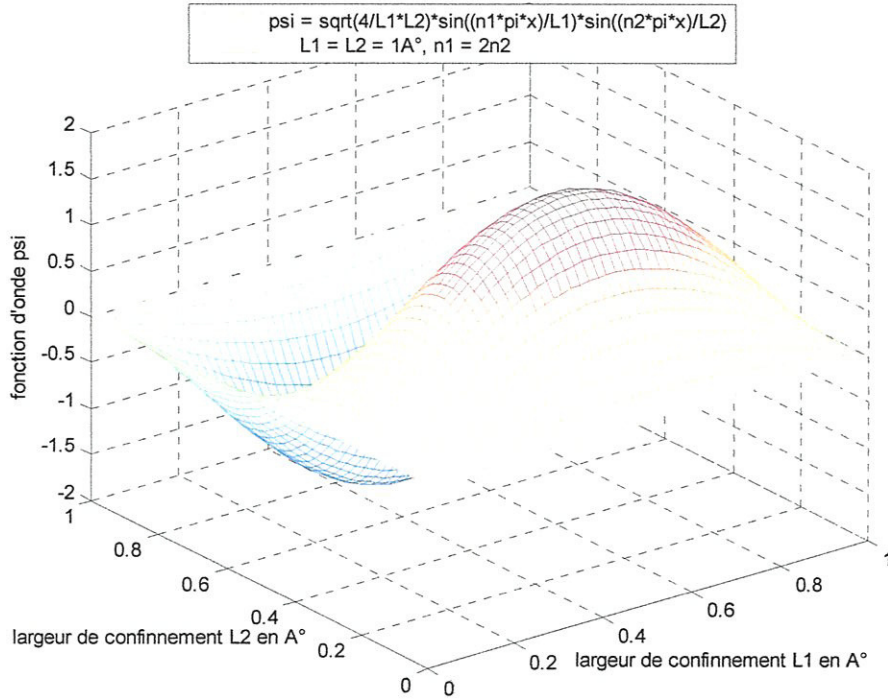


Figure (III.12) : variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions  $L_1 = L_2 = 1 \text{ \AA}$ ,  $n_1 = 2n_2$

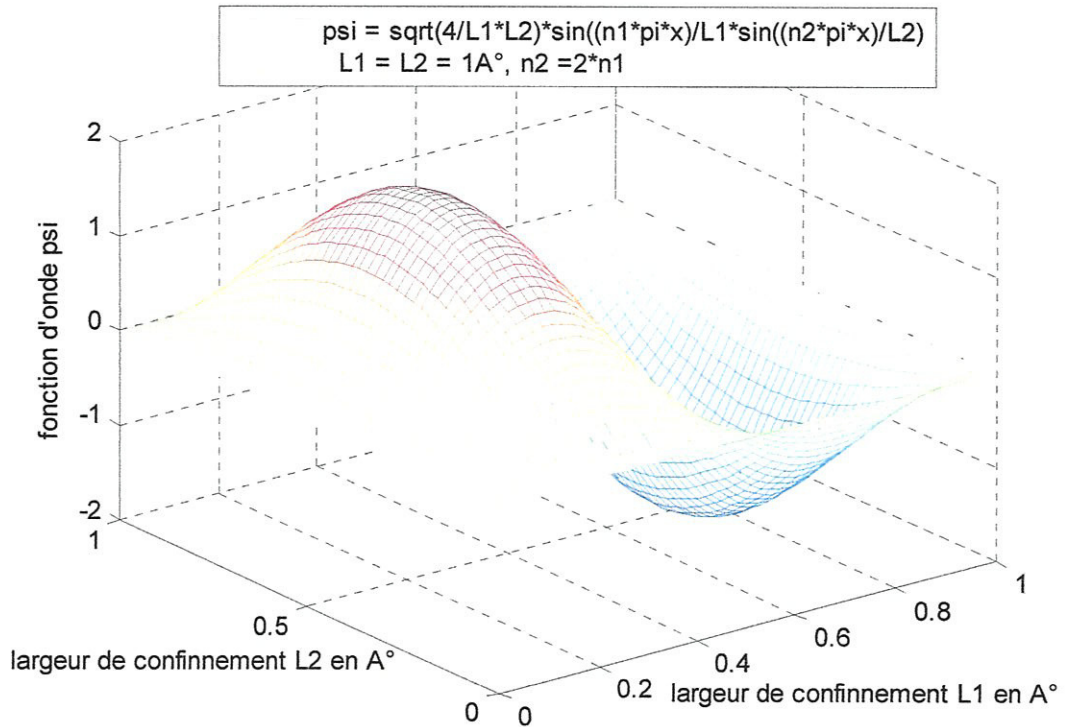


Figure (III.13) : variation de la fonction d'onde en fonction de la largeur de confinement en deux dimensions  $L_1 = L_2 = 1 \text{ \AA}$ ,  $n_2 = 2n_1$

### III.9 conclusion :

Dans ce présent chapitre, nous nous sommes intéressés à la résolution numérique de l'équation de Poisson à deux dimensions, nous avons explicité des exemples de solutions numériques de l'équation de Schrödinger à une dimension dans un certain nombre de cas : puits de potentiel infini et barrière de potentielle.

## *Conclusion Générale*

Afin de continuer la course effrénée à la miniaturisation des composants, la microélectronique ne cesse, depuis ses débuts, de surmonter des obstacles considérés initialement comme infranchissables. Néanmoins, le nombre de défis à relever actuellement pour lutter contre les effets de canal court, entre autres, dans les prochaines générations de transistors MOS est particulièrement impressionnant comme il a été détaillé dans le premier chapitre de ce mémoire.

Dans ce contexte, le travail présenté dans ce mémoire est consacré essentiellement à l'étude par simulation Monté Carlo d'un transistor MOS à effet de champ ultracourt en technologie SOI.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté les défis de l'industrie de la microélectronique. Nous avons rappelé par la suite la structure MOS, le principe et les différents régimes de fonctionnement d'un transistor à effet de champ. Le transport électronique dans les transistors MOS a été décrit dans le deuxième chapitre.

Dans le dernier chapitre, nous nous sommes intéressés à la simulation de l'équation de Poisson et celle de Schrödinger et de leur résolution pour différents cas de figure. En effet, l'équation unidimensionnelle de Schrödinger a été couplée à celle de Poisson pour prendre en considération les phénomènes quantiques, d'ailleurs, les niveaux d'énergie quantifiés dans un puits quantique ainsi que les fonctions d'onde équivalentes représentent respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur Hamiltonien de la résolution numérique de l'équation de Schrödinger.

Comme perspective à cette modeste contribution, nous proposons l'exploitation de résolution, en premier lieu, de l'équation de Poisson et en second lieu celle de l'équation de Schrödinger pour tirer les expressions (analytiques et numériques) des potentiels, champs

électriques et notamment les concentrations des porteurs libres tout en prenant en compte les différents effets quantiques qui régissent le transport électronique dans les transistors MOSFET ultracourts.



## Références bibliographiques :

- [1] M. BELLA, “ Influence des effets quantiques sur les caractéristiques de transistors DGMOS nanométrique ”, mémoire de magister, Université de Constantine, 2009.
- [2] B. DIAGNE, “ étude et modélisation compacte d’un transistor MOS sur SOI double grille dédié à la conception ”, thèse de doctorat, Université Luis Pasteur Strasbourg I, 2007.
- [3] J. SAINT-MARTIN, “ étude par simulation monté Carlo d’architecture de MOSFET ultracourts à grille multiple sur SOI ”, thèse de doctorat, Université de PARIS-SUD, 2005.
- [4] R. FLORENT, “ étude et caractérisation de l’influence des contraintes mécaniques sur les propriétés de transport électronique dans les architectures MOS avancés ”, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble. 2008.
- [5] F. LALLEMENT, “ Étude, développement et caractérisation de procédés de dopage par plasma appliqués aux technologies avancés”, thèse de doctorat, Université de Toulouse. 2005.
- [6] Y. TAUR et T. NING, “ fundamentals of modern VLSI devises”, Cambridge university Press, 1998.
- [7] T.C. CHEN, “ where CMOS is doing: Trendy Hype vs Real Technology”, IEEE International Solid-State Circuit Conference San Francisco, USA, 2006.
- [8] S.ELODIE, “ Étude et développement de procédés de gravure plasma de HfO<sub>2</sub> pour l’élaboration de transistors CMOS sub-45 nm ”, thèse de doctorat, Université Jpseph Fourier de Grenoble, 2009.
- [9] T. Skotniki, “ The voltage doping transformation: A new approach to the modeling of MOSFET short channel effects”, IEEE Electron Devices Lett, (V9) 109-112 (1988).
- [10] A. LE GOUIL, “ Étude et développement de procédés de gravure plasma pour l’élaboration des grilles métalliques pour les filières technologiques CMOS : Cas de l’empilement Si/TiN/HfO<sub>2</sub> ”, thèse de doctorat, Université Jpseph Fourier de Grenoble, France, 2006.
- [11] E. JOSSE. T .SKOTNIKI, “2D analysis of gate polydepletion in ultra short MOSFET ”, ESSDERC. Tech. Dig. 207-210 (2001).
- [12] J. P. COLLINGE, “ Multi gate SOI MOSFET” solid state- electronics, vol.4816, pp.897-905, 2004.
- [13] S. BAUDOT, “analyse des déformations par diffractions des rayons x et étude des propriétés électriques des MOSFET ” thèse de doctorat, Université de Grenoble, France, 2010.

- [14] F. ALLIBERT et al, "from SOI materials to innovative devices" solid state- electronic, vol 45, p 559, 2001.
- [15] J. GAUTIER et al, "physique des dispositifs pour circuits intégrés silicium", Edition Hermès, 2003.
- [16] T. SKOTNIKI et al "Heavily doped and extremely shallow junctions on insulator by SONTION process", IEDM tech. dig, p. 513-519, 1999.
- [17] C. FENOILLET-BERANGER et al, " requirements for ultra thin-film devices and new materials for the CMOS roadmap" solid state electronic, vol 48, pp 947-961. 2004.
- [18] J.P. COLINGE "Silicon on insulator technology materials to VLSI" ISBN 1-4020-77734, kluwer Academic publishers, 3<sup>rd</sup> edition, 1997.
- [19] M.C. LEMME, "Sub threshold behavior for triple gate MOSFET", Solid state electronic, vol48, p 529-534, 2004.
- [20] S. Cristolovenu and S.S.Li, "Electrical characterization of silicon-on- insulator materials and devices", Kluwer Academic Publisher, 1995.
- [21] H. Mizuta, K. Nishiguchi, S. Oda, "Silicon Nanoelectronics", Taylor and Francis Group LLC, p 105-129, 2006
- [22] J. M Martinez- Duart, R. J. Martin-Palma, F. Agullo-rueda, "Nanotechnology for Microelectronics and Optoelectronics" , Elsevier B,V,2006.
- [23] M.A. Jaud, "Approche du potentiel effectif pour la simulation MONTE CARLO du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs", thèse de doctorat, Université Paris Sud, 2006.
- [24] J.P. Colinge, C.A. Colinge, " physics of semiconductor devices". Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] 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.

- [28] C. Johnson, "Numerical solution of partial differential equations by the finite element method", universit  de Cambridge, 1987.
- [29] Z. Ren, "nanoscale MOSFETS : physics,simulation and ", th se de doctorat, universit  de Perdue, Italie, 2001.
- [30] O. Simonetti, "Influence de la quantification en  nergie des porteurs sur la mod lisation et la caract risation  lectronique des structures MOS   oxyde de grille ultramince (<3nm)", laboratoire d'automatique et de micro lectronique, France.
- [31] W. H. PRESS et al, "Numerical Recipes in Fortran 77: The art of Scientific Computing", Second edition, Cambridge University Press, 2003.
- [32] R. DAVIOT, "  tude en radiofr quences de transistors MOS partiellement dissert s en technologie avanc s sur SOI" , Th se de Doctorat, INSA de Lyon, France, 2006.
- [33] C. Choi, "Modeling of nanoscale MOSFET", th se de doctorat, universit  de Stanford, USA, 2002.
- [34] H. Mathieu, "Physique des Semi-conducteurs et des Composants Electroniques ", Dunod, 5   dition, Paris, 2001.
- [35] Z. Ren, R.Venugopal, S.Datta, M.Lundstrom, "The ballistic nanotransistor – A simulation study", IEDM Tech. Digest, pp .715-718; 2002.
- [36] M. Lundstrom and Z. Ren "Essentiel physics of courier transport in Nanoscale MOSFETs ", IEEE Transations on electron devices, vol. 49, No. 1, 2002.
- [37] M. Heydemmann, " R solution num rique des  quations bidimensionnelles de transport dans les semi-conducteurs", Th se de Doctorat, Universit  Paris Sud, France, 1972.
- [38] B. THOMAS, "Introduction d'orbitales corr l es dans les approches Monte-Carlo Quantiques", th se de doctorat, universit  de Toulouse, France, 2009.
- [39] B. L. Hammond, W. A. Lester Jr., and P. J. Reynolds in "Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry", World scientific Lecture and course notes in chemistry Vol.1, 1994.
- [40] K. Kurosawa, "Monte Carlo calculation of hot electron problems", Journal of the Physical Society of Japan, vol. 21, pp. 424-426, 1996.
- [41] C. SAYAH, L. AMER, B. BOUAZZA et C. GONTRANT, " effet du dopage de la temp rature sur le transport  lectronique des mat riaux III-V", Phys. Chem. News 36 117-121, 2007.

- [42] P. HESTO, "simulation Monte Carlo du transport non stationnaire dans les dispositifs submicroniques : importance du phénomène balistique dans GaAs à 77 K", Thèse de doctorat, Université de Paris Sud, France, 1984.
- [43] P.ARIFIN, E.M.GOLDYS, T.L.TANSLEY, "Électron mobility in low temperature grown gallium arsenide", Département de Physique, Université Macquarie, Australia, 1995.
- [44] P. J.REYNOLDS , D. M. Ceperley, B. J. Alder, and W. A. Lester, "Recent Advances in Quantum Monte Carlo Methods, Jr.", J.Chem. Phys. 77 11, 1982.
- [45] N. ZETTILI , "quantum mechanics concepts an applications", Université Jacksonville, USA, 2001.