

Transport diffusif d'un gaz d'électrons confiné dans une nanostructure

N. Vauchelet^a,

travail en collaboration avec N. Ben Abdallah^a,
F. Méhats^b et P. Pietra^c.

^a MIP, Université Paul Sabatier, Toulouse.

^b IRMAR, Université de Rennes 1.

^c IMATI del CNR, via Ferrata 1, I-27100 Pavia, Italie.

Intérêt grandissant pour les structures nanométriques

⇒ fonctionnalité

⇒ rapidité

Intérêt grandissant pour les structures nanométriques

⇒ fonctionnalité

⇒ rapidité

Avec la diminution de la taille :

⇒ effets quantiques deviennent non-négligeables →
modèles quantiques.

Importance de la modélisation et simulation des
nanotransistors pour l'électronique future.

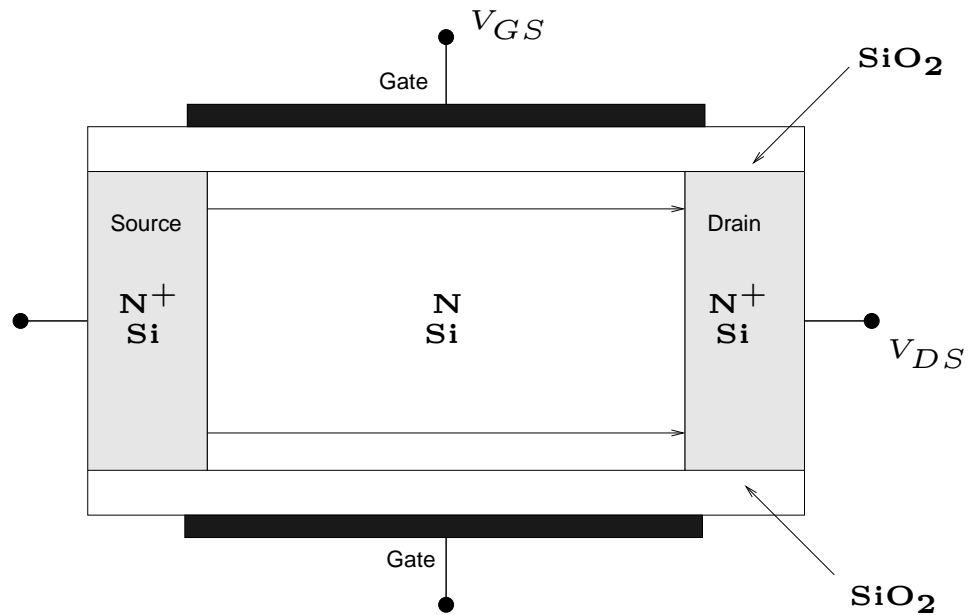
I) Introduction

- Description du modèle
- Système d'équations

II) Approche numérique pour la simulation d'un Double-Gate MOSFET

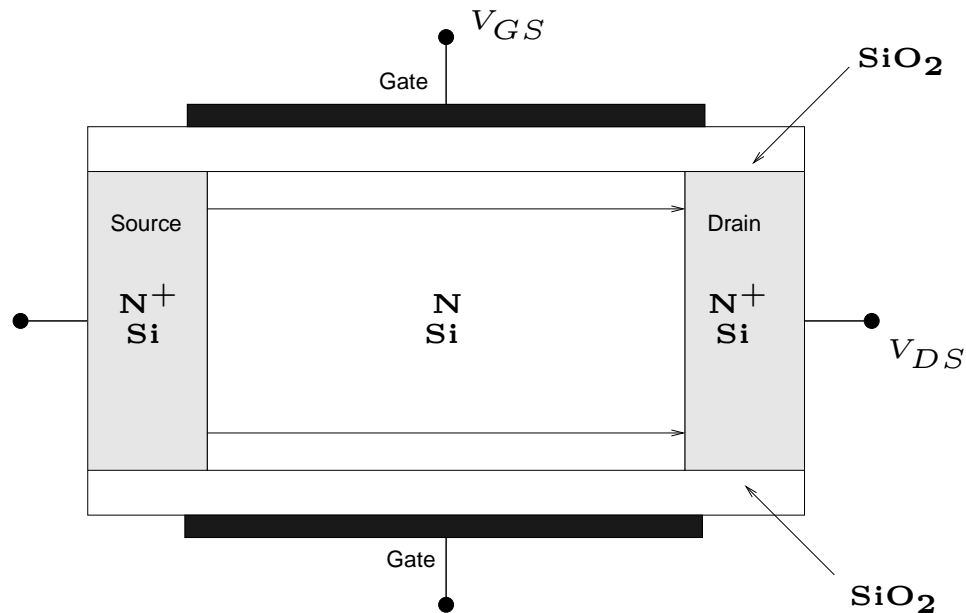
- Présentation du dispositif
- Itérations de Gummel

III) Résultats numériques



x : dir. transport

z : dir. confinement



x : dir. transport

z : dir. confinement

Transport classique dans la direction x

Description quantique dans la direction z

⇒ système couplé classique-quantique.

Le transport est classique dans la direction

$$x \in \omega \subset \mathbb{R}^2$$

Régime de diffusion : collisions sont importantes

⇒ modèle fluide.

Le transport est classique dans la direction

$$x \in \omega \subset \mathbb{R}^2$$

Régime de diffusion : collisions sont importantes

➡ modèle fluide.

$N_s(t, x)$: densité des porteurs de charge en (t, x)

$$\text{(DD)} \quad \partial_t N_s + \operatorname{div}_x J = 0,$$

où le courant $J = -\mathbb{D}(\nabla_x N_s + N_s \frac{\nabla_x U_s}{k_B T})$.

\mathbb{D} est la matrice de diffusion,

U_s est l'énergie effective générée par les électrons.

Confinement dans la direction transverse $z \in [0, \ell]$.

⇒ Quantification de l'énergie ϵ_k .

Confinement dans la direction transverse $z \in [0, \ell]$.

► Quantification de l'énergie ϵ_k .

$(\epsilon_k[V], \chi_k[V])_{k \geq 1}$ est l'ensemble des valeurs propres et vecteurs propres de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m_*(z)} \frac{d}{dz} \chi_k \right) + (qV + U_c) \chi_k = \epsilon_k \chi_k, \\ \chi_k[V](0) = \chi_k[V](\ell) = 0, \quad \int_0^\ell \chi_k \chi_{k'} dz = \delta_{k,k'}. \end{cases}$$

U_c : barrière de potentiel.

V : potentiel électrostatique.

$V(x, z)$ satisfait l'équation de Poisson

$$-\operatorname{div}_{x,z}(\varepsilon_R \nabla_{x,z} V(x, z)) = \frac{q}{\varepsilon_0} (N(x, z) - N_D),$$

avec une densité de dopage N_D .

N est la densité des porteurs de charge.

$V(x, z)$ satisfait l'équation de Poisson

$$-\operatorname{div}_{x,z}(\varepsilon_R \nabla_{x,z} V(x, z)) = \frac{q}{\varepsilon_0} (N(x, z) - N_D),$$

avec une densité de dopage N_D .

N est la densité des porteurs de charge.

ρ_k : nombre d'occupation de chaque état.

$$N(x, z) = \sum_{k=1}^{+\infty} \rho_k(x, z) |\chi_k[V](z)|^2.$$

ρ_k est donné par une fonction statistique de l'équilibre thermodynamique. Pour des statistiques de Boltzmann,

$$N(x, z) = \sum_{k=1}^{+\infty} e^{\beta(\epsilon_F(x) - \epsilon_k[V](z))} |\chi_k[V](z)|^2.$$

ϵ_F est le niveau de Fermi, $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

ρ_k est donné par une fonction statistique de l'équilibre thermodynamique. Pour des statistiques de Boltzmann,

$$N(x, z) = \sum_{k=1}^{+\infty} e^{\beta(\epsilon_F(x) - \epsilon_k[V](z))} |\chi_k[V](z)|^2.$$

ϵ_F est le niveau de Fermi, $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Donc, la densité surfacique

$$N_s(x) = \int_0^\ell N(x, z) dz = e^{\beta\epsilon_F(x)} \sum_{k=1}^{+\infty} e^{-\beta\epsilon_k[V](z)}.$$

$$\partial_t N_s - \operatorname{div}_x \left(\mathbb{D} \left(\nabla_x N_s + N_s \frac{\nabla_x U_s}{k_B T} \right) \right) = 0,$$

$$\partial_t N_s - \operatorname{div}_x \left(\mathbb{D}(\nabla_x N_s + N_s \frac{\nabla_x U_s}{k_B T}) \right) = 0,$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m_*(z)} \frac{d}{dz} \chi_k[\mathbf{V}] \right) + (q\mathbf{V} + U_c) \chi_k[\mathbf{V}] \\ = \epsilon_k[\mathbf{V}] \chi_k[\mathbf{V}] + \text{cond. bord} \end{aligned}$$

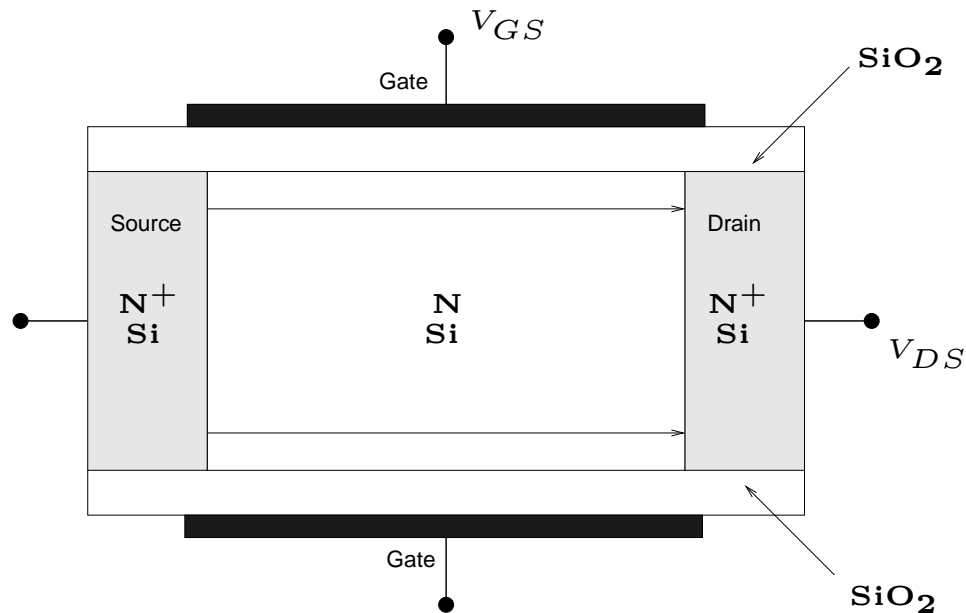
$$-\operatorname{div}_{x,z} (\epsilon_R \nabla_{x,z} \mathbf{V}) = \frac{q}{\epsilon_0} (N - N_D),$$

$$\partial_t N_s - \operatorname{div}_x \left(\mathbb{D} \left(\nabla_x N_s + N_s \frac{\nabla_x U_s}{k_B T} \right) \right) = 0,$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m_*(z)} \frac{d}{dz} \chi_k[\mathbf{V}] \right) + (q\mathbf{V} + U_c) \chi_k[\mathbf{V}] \\ = \epsilon_k[\mathbf{V}] \chi_k[\mathbf{V}] + \text{cond. bord} \end{aligned}$$

$$-\operatorname{div}_{x,z} (\epsilon_R \nabla_{x,z} \mathbf{V}) = \frac{q}{\epsilon_0} (N - N_D),$$

$$N = N_s \sum_{k \geq 1} \frac{e^{-\beta \epsilon_k} |\chi_k|^2}{\sum_k e^{-\beta \epsilon_k}} ; \quad U_s = -k_B T \log \left(\sum_{k \geq 1} e^{-\beta \epsilon_k} \right).$$



$x = (x_1, x_2)$:
dir. transport

z : dir. confinement

➡ structure de Si

Structure invariante par rapport à x_2 : $x = x_1$.

En $z = 0$ et $z = \ell$:

Conditions mixtes aux bords pour le **potentiel**.

- ▣ Porte : contacts ohmiques \Rightarrow Dirichlet,
- ▣ frontière isolante \Rightarrow Neumann.

En $z = 0$ et $z = \ell$:

Conditions mixtes aux bords pour le **potentiel**.

- ▣ Porte : contacts ohmiques \Rightarrow Dirichlet,
- ▣ frontière isolante \Rightarrow Neumann.

A la source et au drain :

Fort dopage N^+ \Rightarrow drain et source sont équivalents à de petits réservoirs d'électrons.

- ▣ **densité** et **potentiel** sont indépendants de la direction de transport.

Résolution numérique : itérations de Gummel₂

A la source :

➡ Schrödinger-Poisson 1D.

Résolution numérique : itérations de Gummel₂

A la source :

➡ Schrödinger-Poisson 1D.

Pas de voltage Drain-Source : le niveau de Fermi ϵ_F est constant et vaut ses valeurs aux bords,

➡ Schrödinger 1D – Poisson 2D.

Résolution numérique : itérations de Gummel₂

A la source :

➡ Schrödinger-Poisson 1D.

Pas de voltage Drain-Source : le niveau de Fermi ϵ_F est constant et vaut ses valeurs aux bords,

➡ Schrödinger 1D – Poisson 2D.

Petites perturbations :

➡ Diagonalisation de l'opérateur Schrödinger 1D.

➡ Calcul de la densité : Dérive-Diffusion 1D.

➡ Calcul du potentiel : Poisson 2D.

➡ Boucle sur le potentiel.

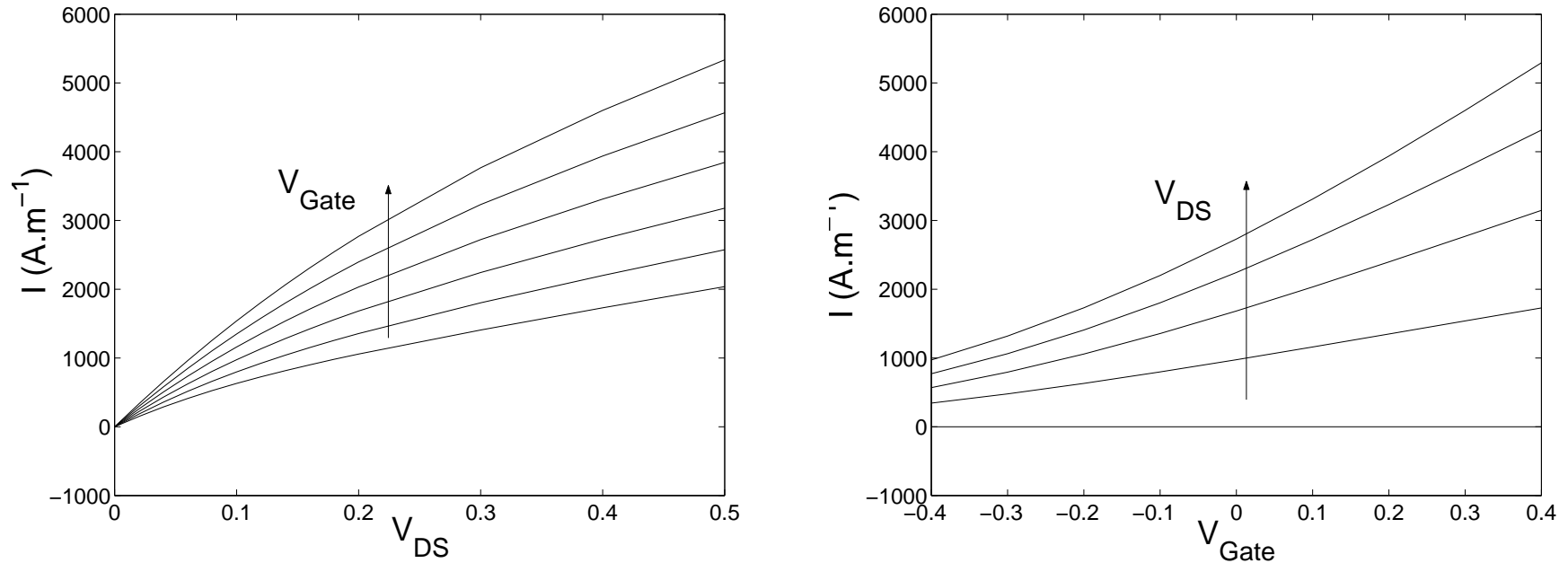


Figure 1: Gauche : caractéristiques courant–tension pour différents potentiels V_{Gate} ; Droite : courant en fonction de V_{Gate}

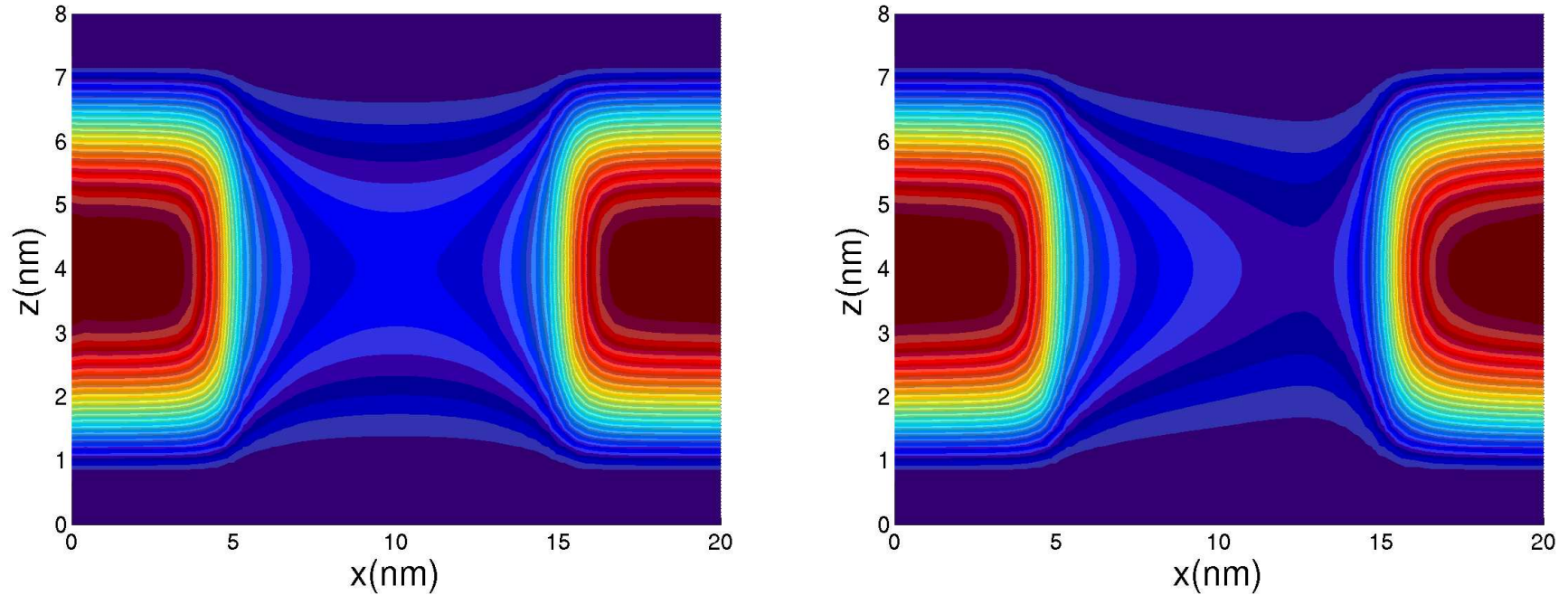


Figure 2: Evolution de la densité pour $V_{DS} = 0V$ (gauche) et pour $V_{DS} = 0.2V$ (droite)

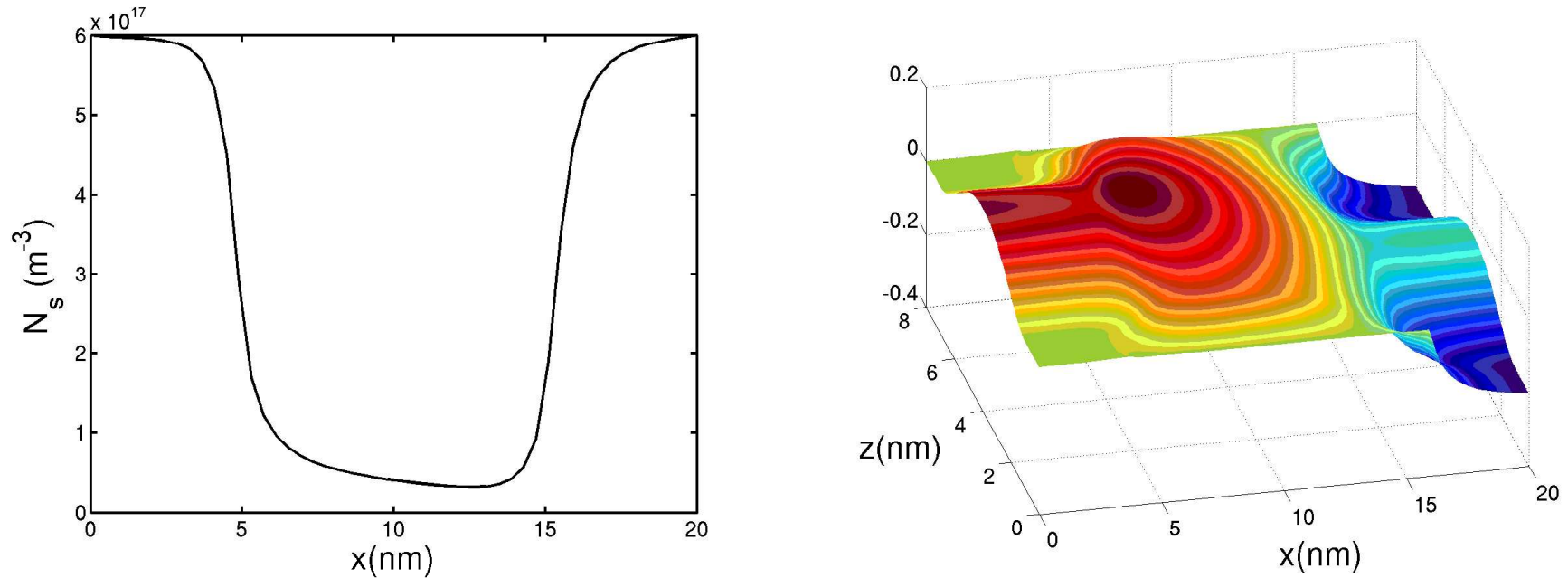
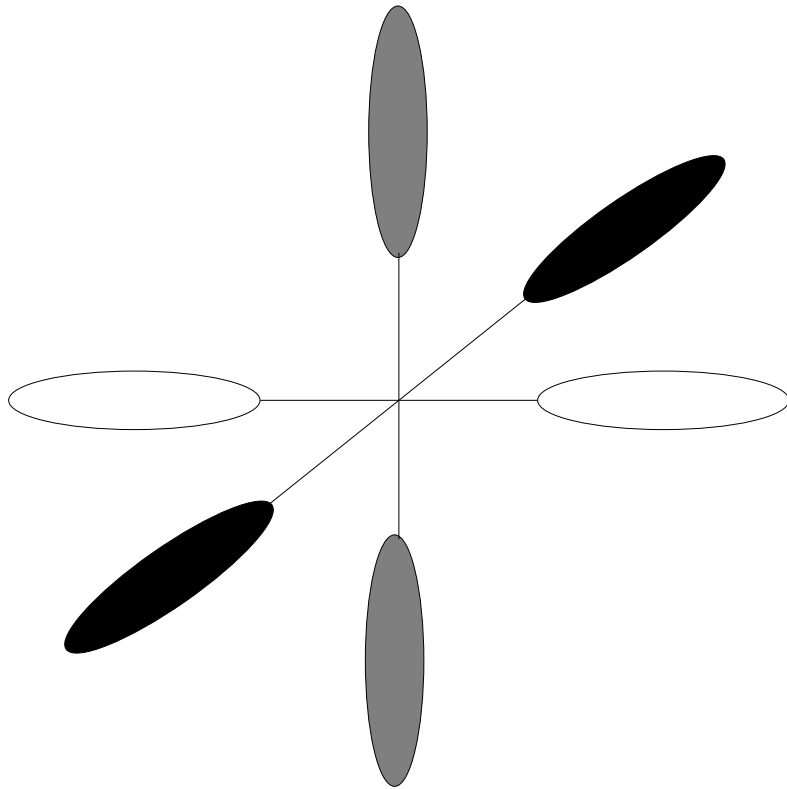


Figure 3: Gauche : densité surfacique pour $V_{DS} = 0.2V$; Droite: Energie potentiel pour $V_{DS} = 0.2V$

Effets anisotropiques dans le silicium $\Rightarrow m_t^*$ masse effective transverse et m_l^* longitudinale.

► 3 configurations différentes pour les électrons.



Surfaces d'énergie constante : 6 ellipsoïdes et 3 configurations

$$(m_t^*, m_t^*, m_l^*)$$

$$(m_t^*, m_l^*, m_t^*)$$

$$(m_l^*, m_t^*, m_t^*)$$

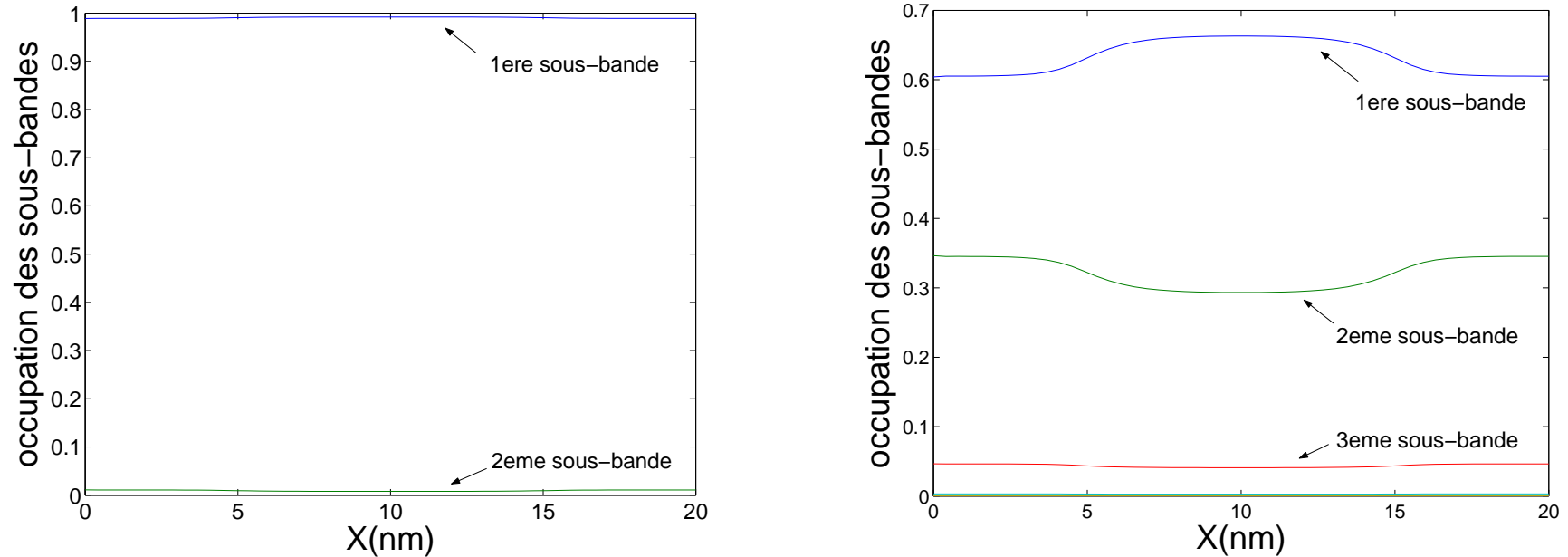


Figure 4: Effet de la masse effective sur le confinement : transversale (gauche), longitudinale (droite)

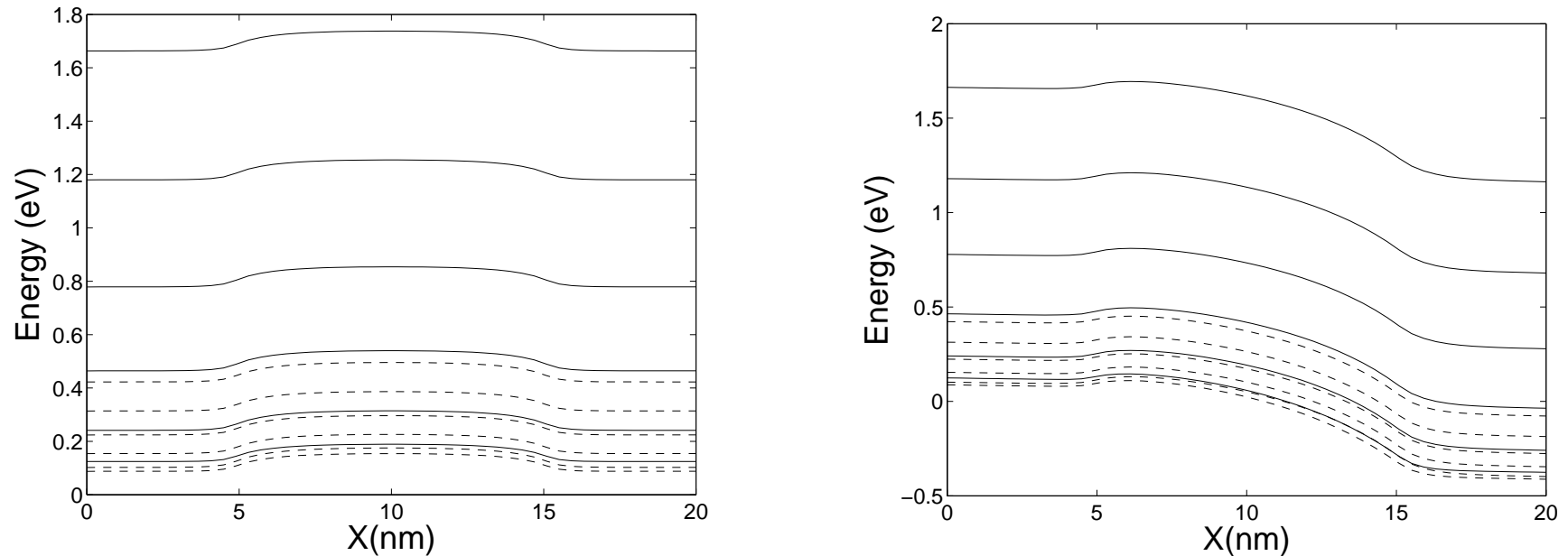


Figure 5: Niveaux d'énergie $\epsilon_k(x)$ pour les deux configurations de masse effective (m_t^* en trait plein, m_l^* en pointillé) pour $V_{DS} = 0V$ (gauche) et $V_{DS} = 0.5V$ (droite)

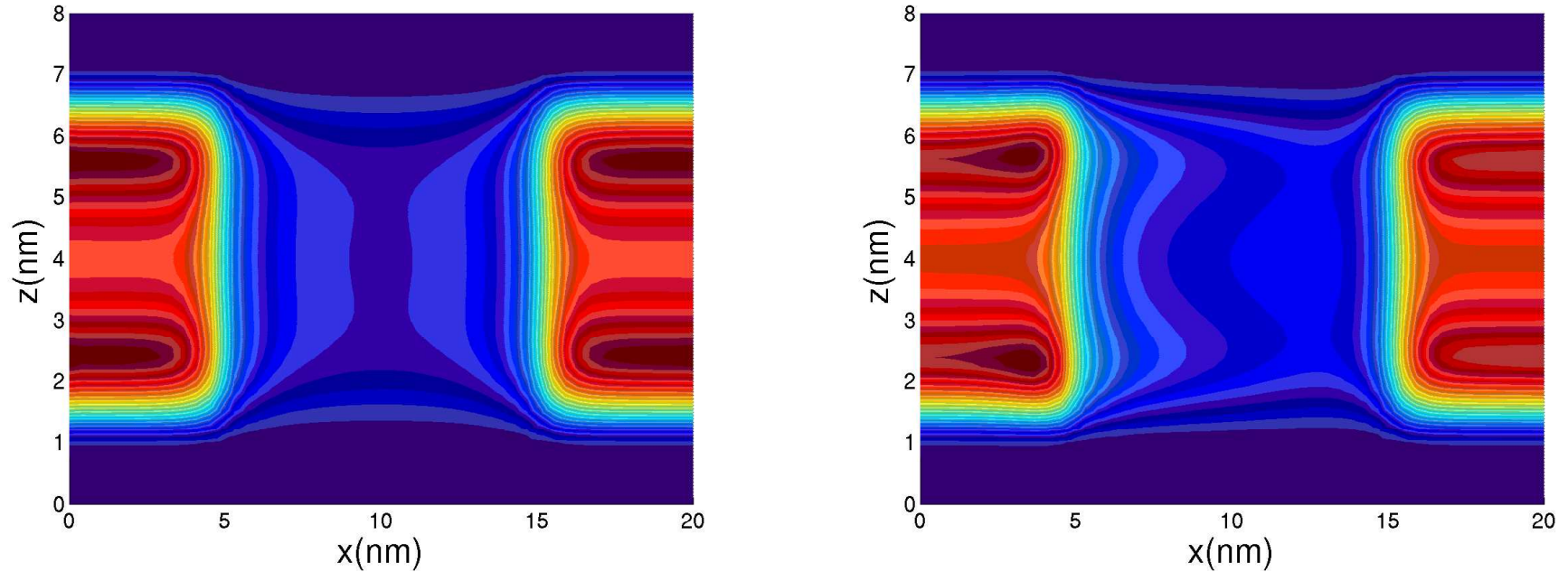


Figure 6: Gauche : densité avec $V_{DS} = V_{Gate} = 0V$;
Droite : densité avec $V_{DS} = V_{Gate} = 0.2V$

Résumé : Nous avons présenté une simulation d'un gaz d'électrons quasi bidimensionnel confiné dans une nanostructure.

Perspectives :

- Etendre aux statistiques de Fermi-Dirac.
- Couplage hybride avec un modèle purement ballistique de type Schrödinger.

-
- Gummel sur Dérive-Diffusion : F. Brezzi, L.D. Marini, P. Pietra.
 - Ph. Caussignac, B. Zimmermann, R. Ferro.
 - système Schrödinger-Poisson : F. Nier.
 - modèle purement ballistique de type Schrödinger : N. Ben Abdallah, E. Polizzi, C. Negulescu.
 - méthode de décomposition en sous-bande : E. Polizzi, N. Ben Abdallah.