

Propriétés Électroniques et Propriétés de Transport de Nanofils Semiconducteurs et de Plans de Graphène.

Présenté par

Aurélien Lherbier

sous la direction de

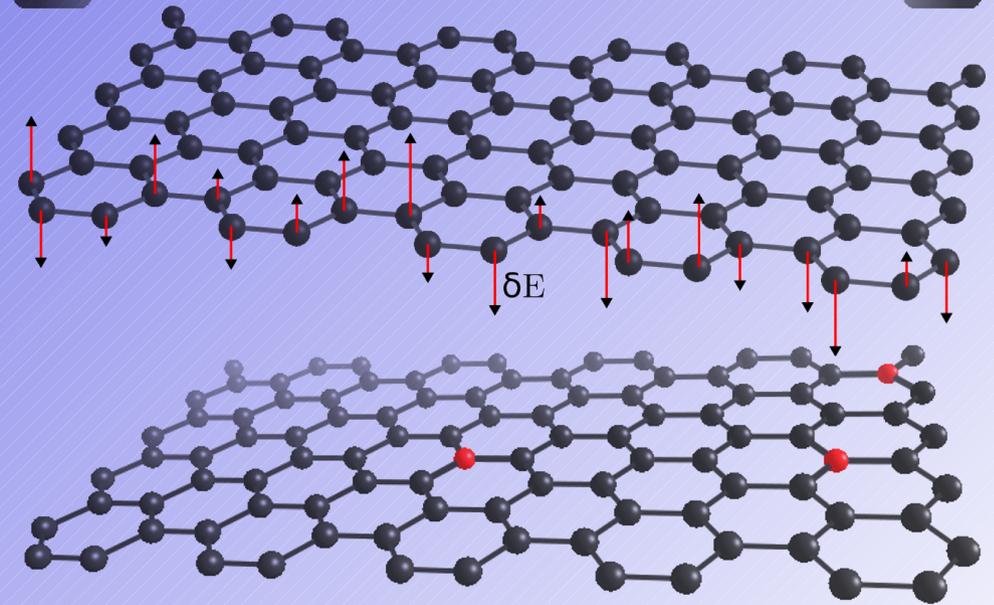
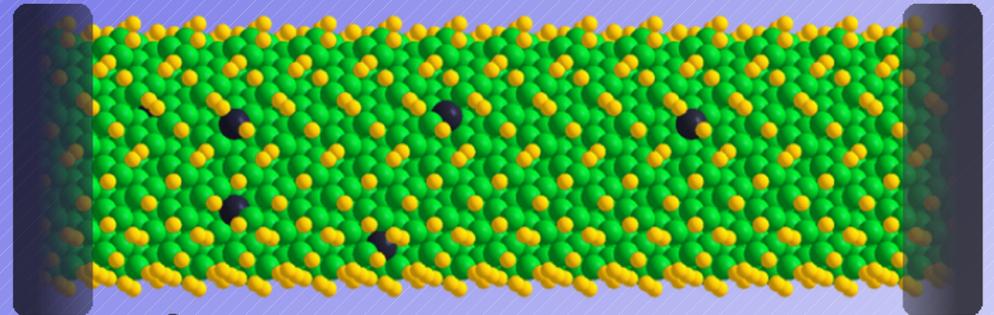
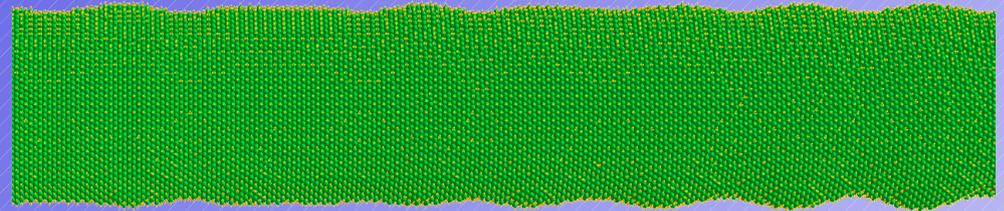
Thierry Baron

et sous l'encadrement de

Yann-Michel Niquet

et

Stephan Roche



1) Nano-objets:

Nanofils semiconducteurs.
Plans de Graphène.

2) Théorie et Simulation:

Méthode des liaisons fortes.
Approche du transport de Kubo-Greenwood.
Méthode de récursion.

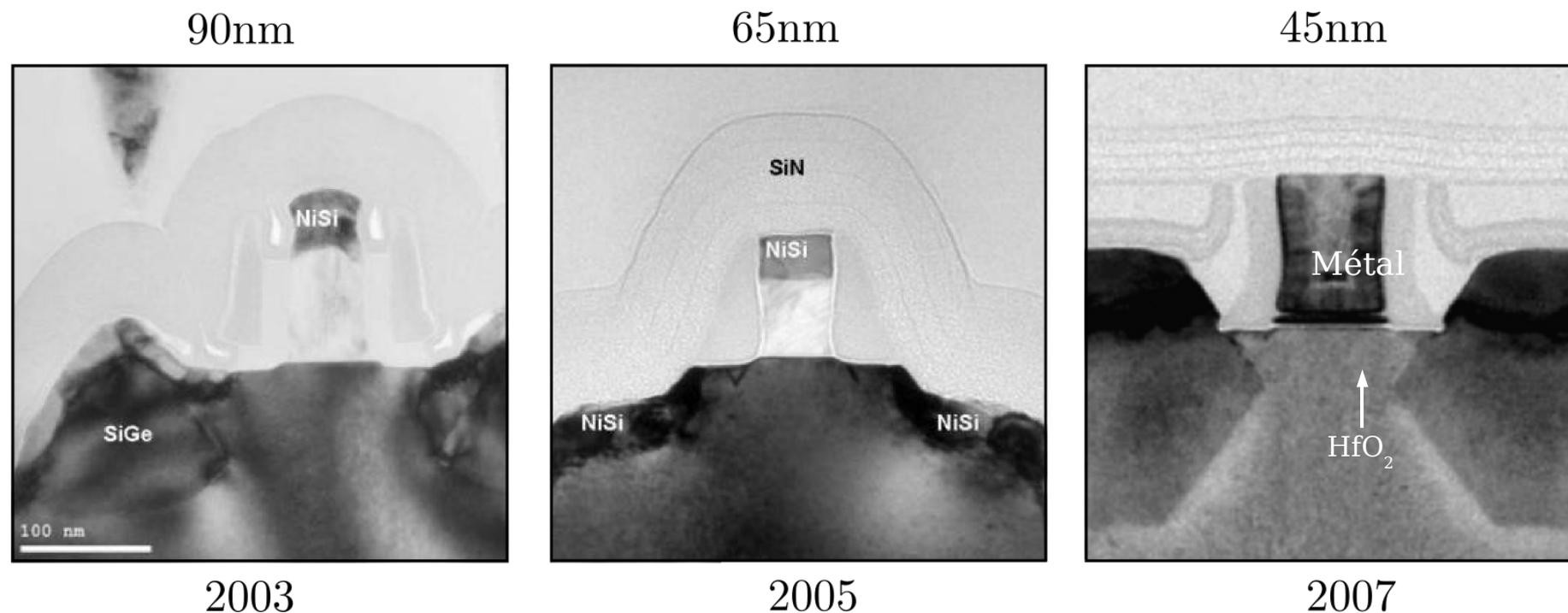
3) Nanofils de silicium rugueux:

Modèle de rugosité.
Structure électronique de nanofils de silicium.
Propriétés de transport de nanofils de silicium rugueux.

4) Plans de Graphène dopés bore:

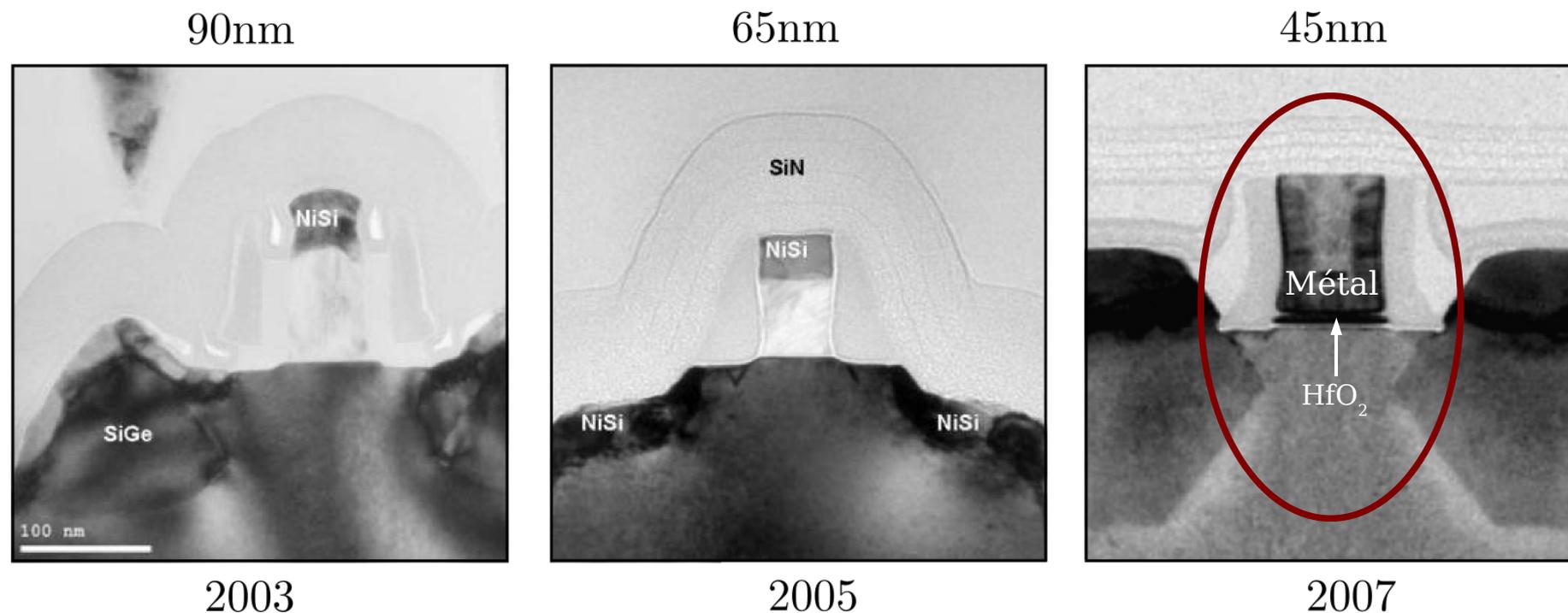
Structure Electronique de plans de graphène.
Effets des dopants sur le transport dans les plans de graphène.

- Diminution de la taille des composants
- Loi de Moore: doubler le nombre de transistors par unité de surface tous les 2 ans.
- En 2007, le transistor fêtait ses 60 ans d'existence.



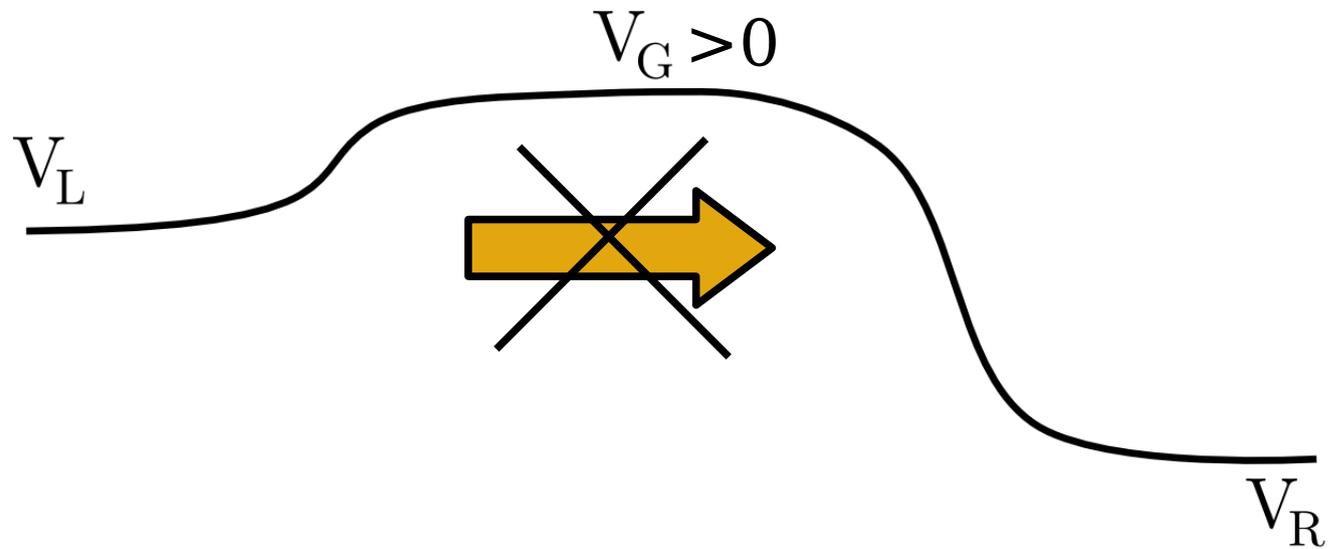
http://www.solid-state.com/display_article/316496/5/none/none/Dept/IEDM-shows-real-details-of-materials-technology-devices/

- Diminution de la taille des composants
- Loi de Moore: doubler le nombre de transistors par unité de surface tous les 2 ans.
- En 2007, le transistor fêtait ses 60 ans d'existence.



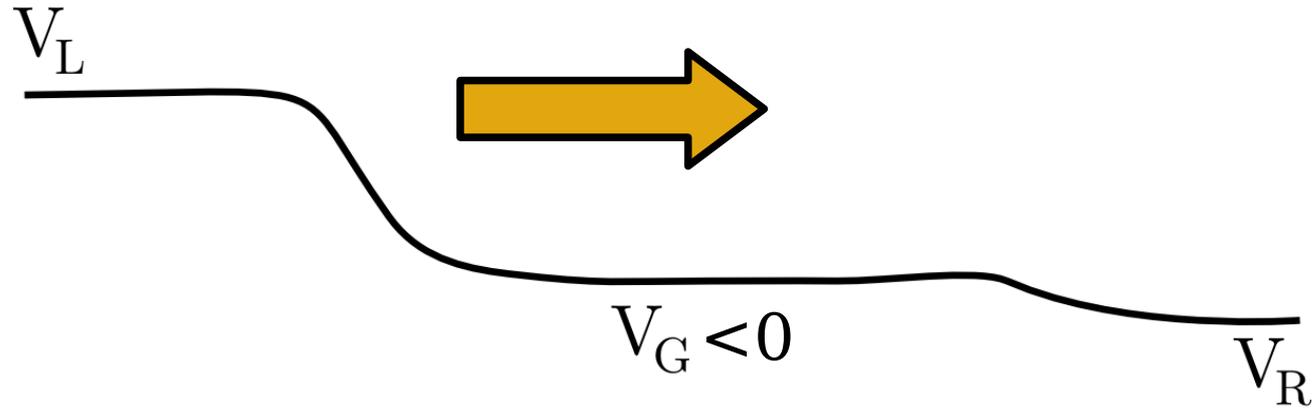
http://www.solid-state.com/display_article/316496/5/none/none/Dept/IEDM-shows-real-details-of-materials-technology-devices/

- Principe de fonctionnement d'un transistor MOSFET



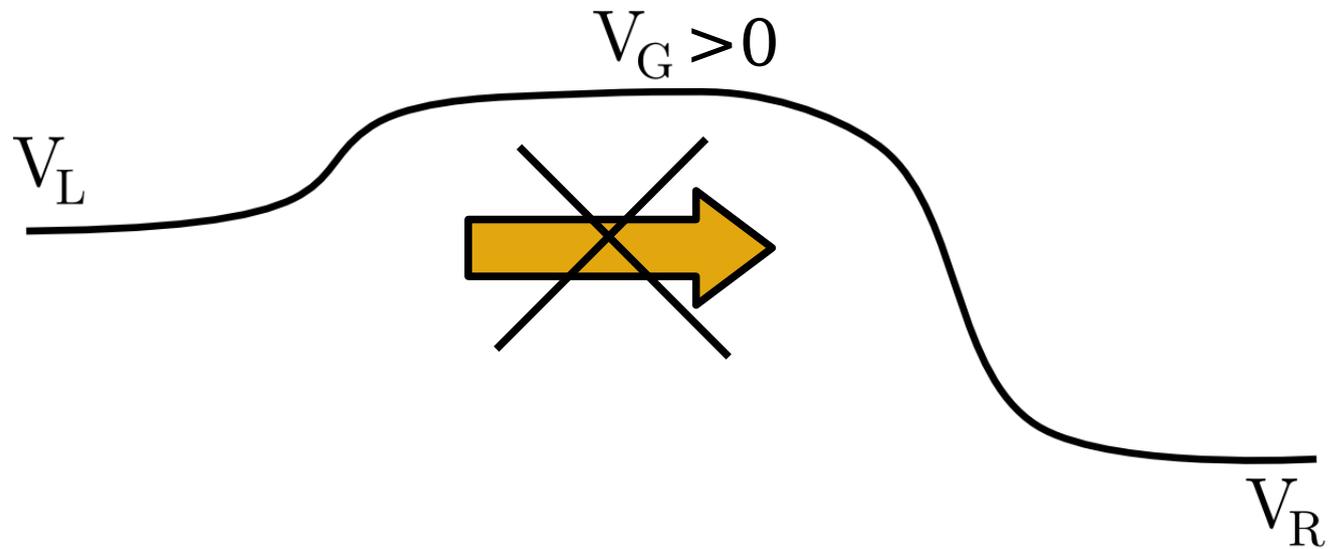
ETAT BLOQUANT

- Principe de fonctionnement d'un transistor MOSFET



ETAT PASSANT

- Principe de fonctionnement d'un transistor MOSFET

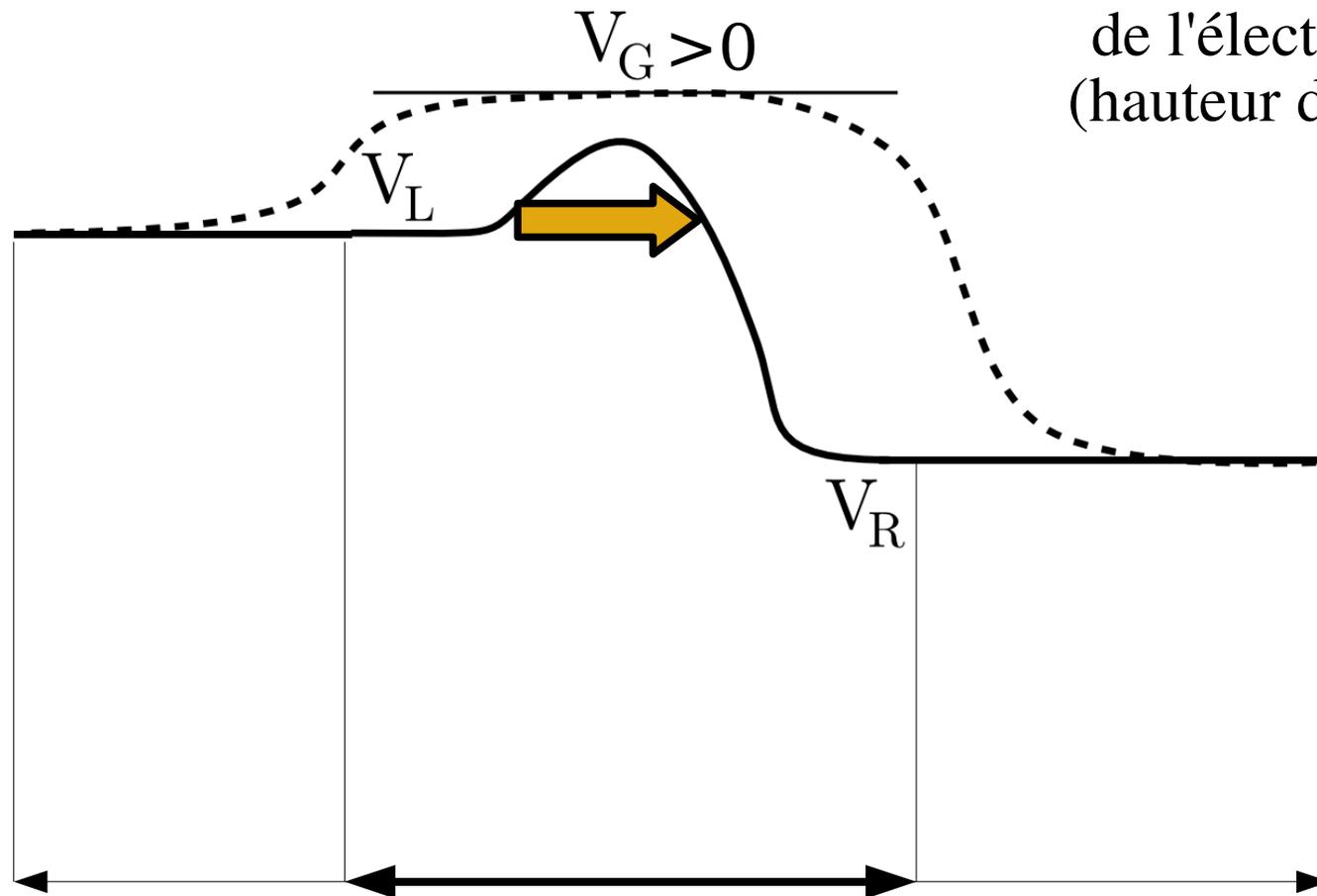


ETAT BLOQUANT

- Effets de canaux courts
- Dégradation des performances du transistor

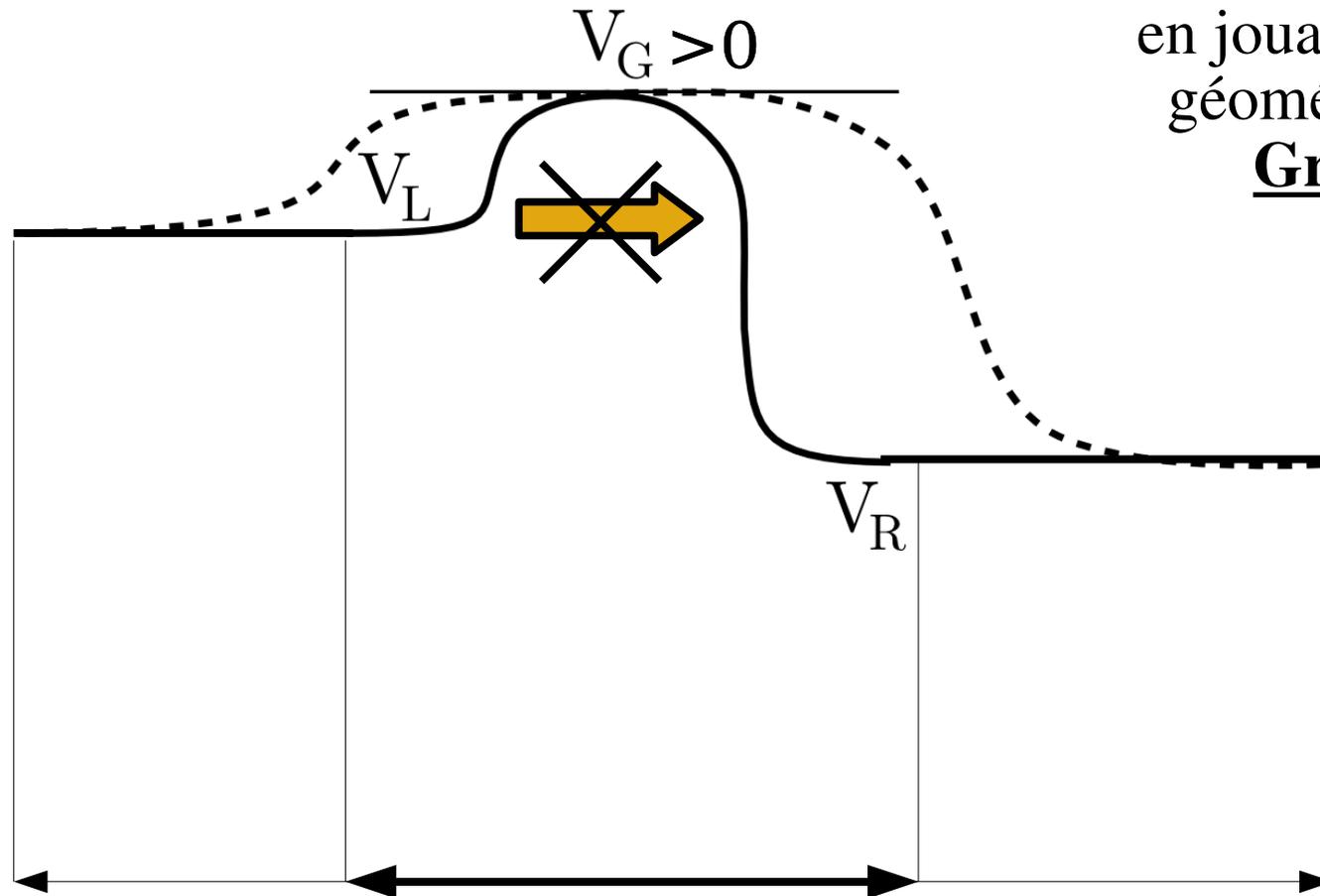
Fuite par effet tunnel

Mauvais contrôle de l'électrostatique (hauteur de barrière)



- Effets de canaux courts
- Dégradation des performances du transistor

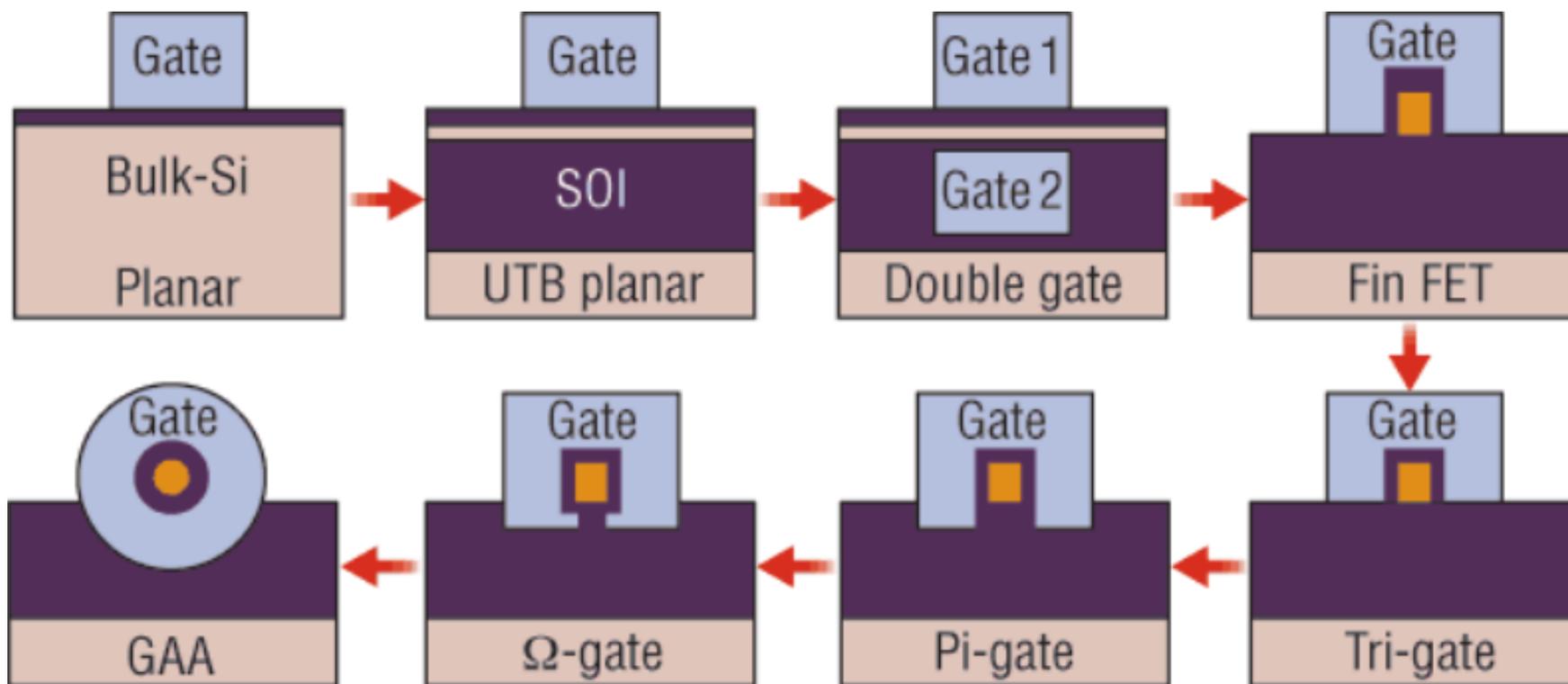
Augmenter le
contrôle
électrostatique
en jouant sur la
géométrie de
Grille



Amélioration de l'effet de champ par contrôle électrostatique.

Différentes solutions de géométrie de grille :

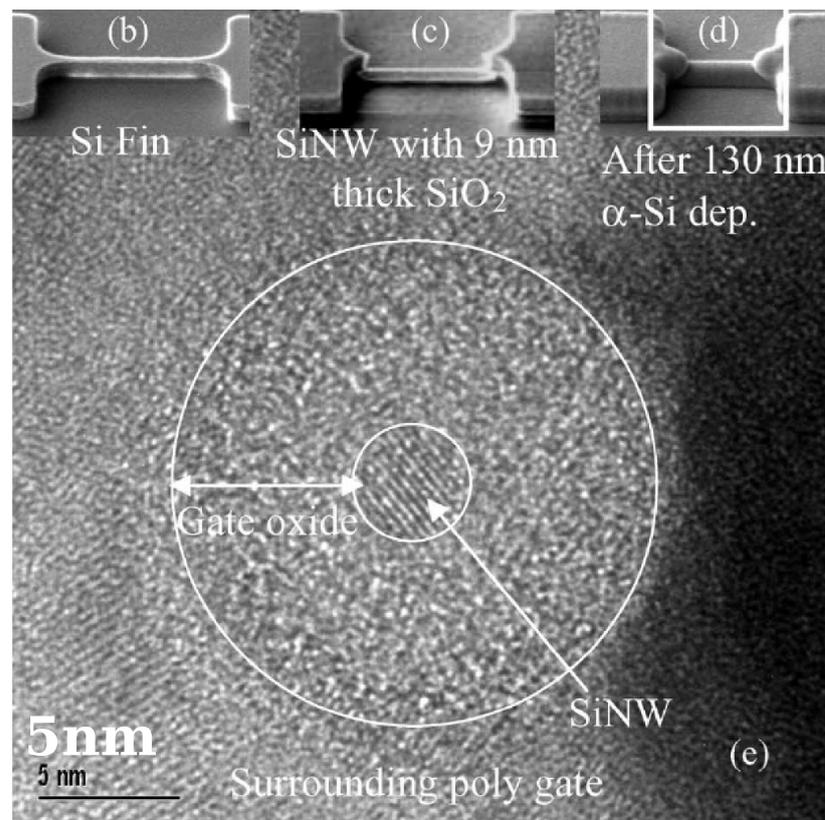
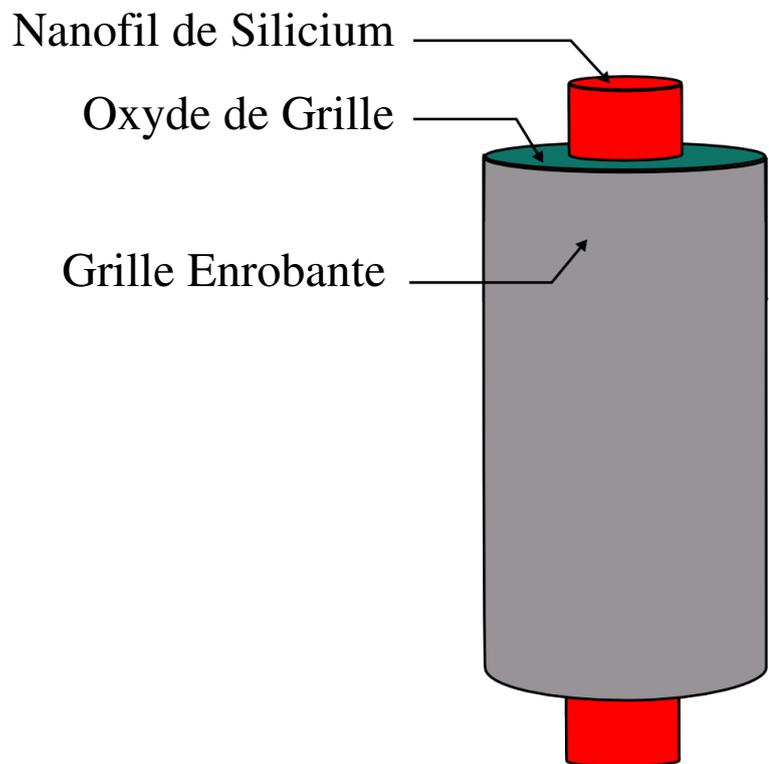
- Géométrie ultime du MOSFET: « grille enrobante »



Source: Fully gate-all-around silicon nanowire CMOS devices

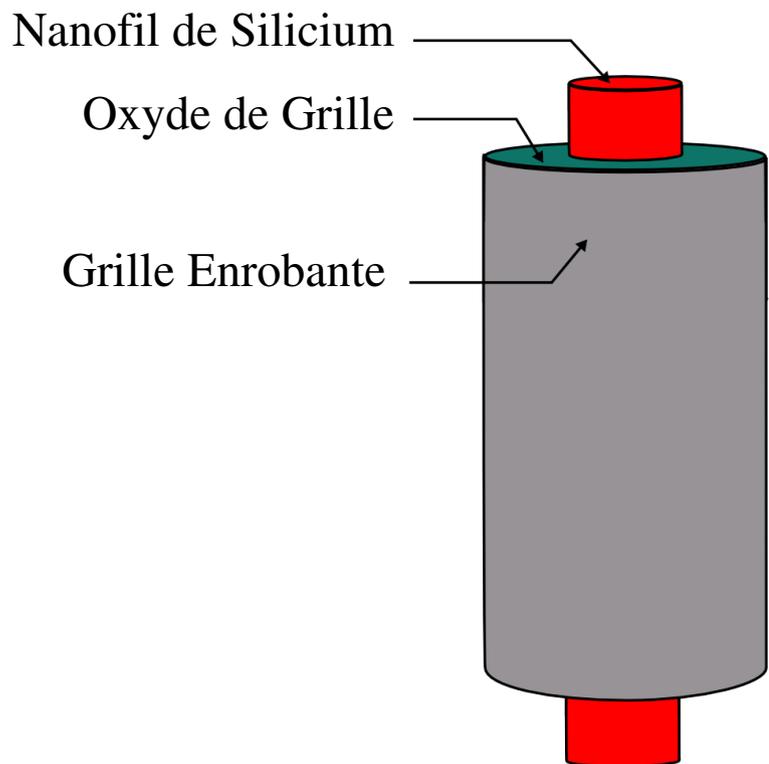
By: N. Singh, K.D. Buddharaju, S.C. Rustagi, G.Q. Lo, N. Balasubramanian, D.L. Kwong
Solid State Technology (mai 2008)

- Les nanofils sont bien adaptés à la géométrie « grille enrobante ».
- Les nanofils potentiellement futur briques de base de l'électronique.

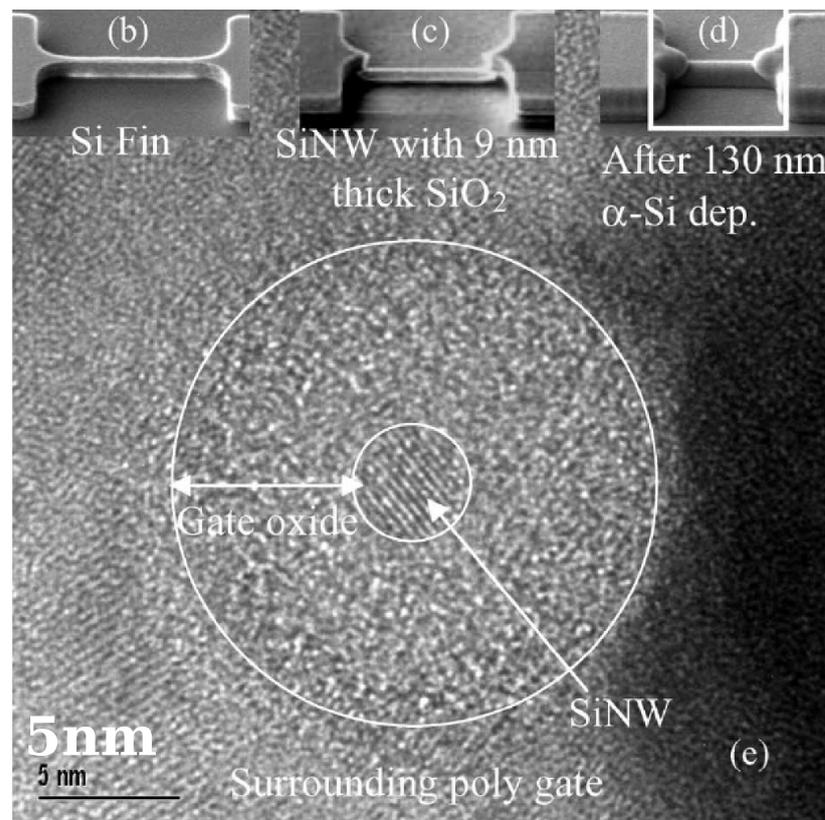


N. Singh, A. Agarwal, L. K. Bera, T. Y. Liow, R. Yang, S. C. Rustagi, C. H. Tung, R. Kumar, G. Q. Lo, N. Balasubramanian and D. L. Kwong,
 IEEE Electron Device Letters 27, (2006)

- Les nanofils sont bien adaptés à la géométrie « grille enrobante ».
- Les nanofils potentiellement futur briques de base de l'électronique.



TOP-DOWN

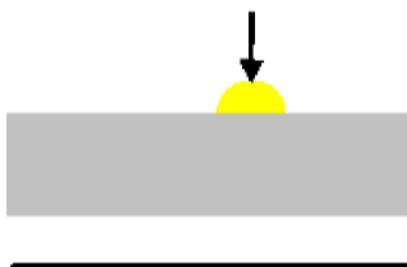


N. Singh, A. Agarwal, L. K. Bera, T. Y. Liow, R. Yang, S. C. Rustagi, C. H. Tung, R. Kumar, G. Q. Lo, N. Balasubramanian and D. L. Kwong,
 IEEE Electron Device Letters 27, (2006)

En laboratoire:

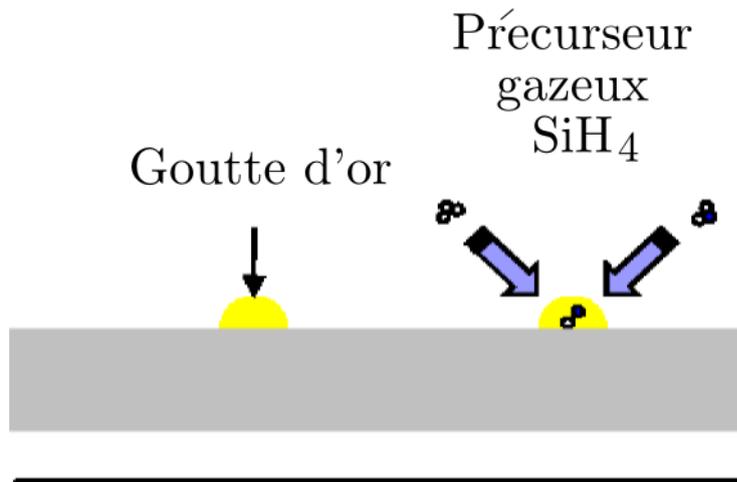
- l'approche BOTTOM-UP permet la croissance de nano-objets à partir des constituants élémentaires.
- La méthode VLS (Vapeur-Liquide-Solide) utilisé pour réaliser la croissance de nanofils semiconducteurs.

Goutte d'or



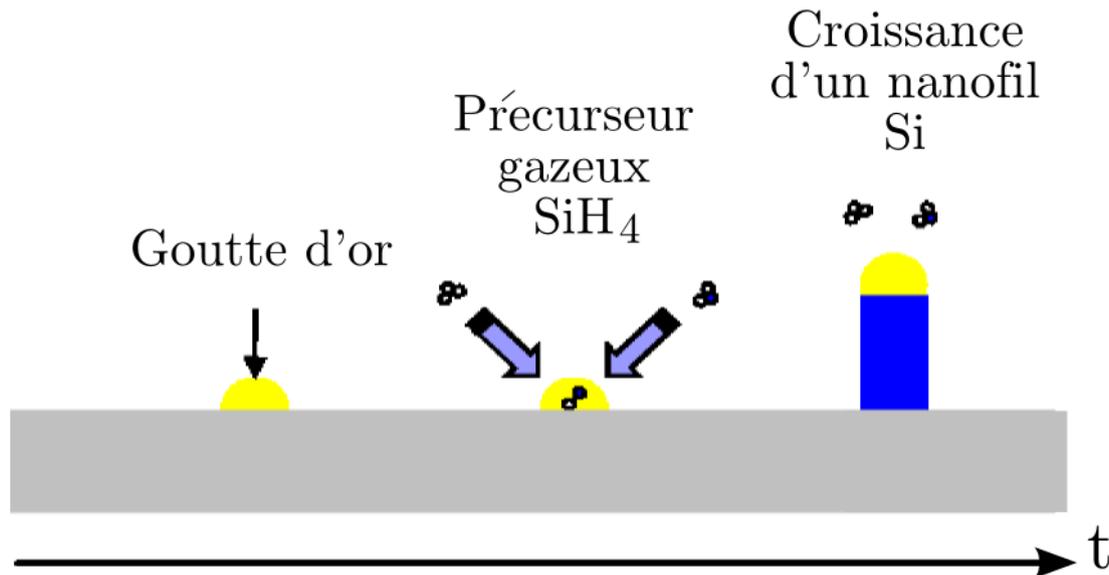
En laboratoire:

- l'approche BOTTOM-UP permet la croissance de nano-objets à partir des constituants élémentaires.
- La méthode VLS (Vapeur-Liquide-Solide) utilisé pour réaliser la croissance de nanofils semiconducteurs.



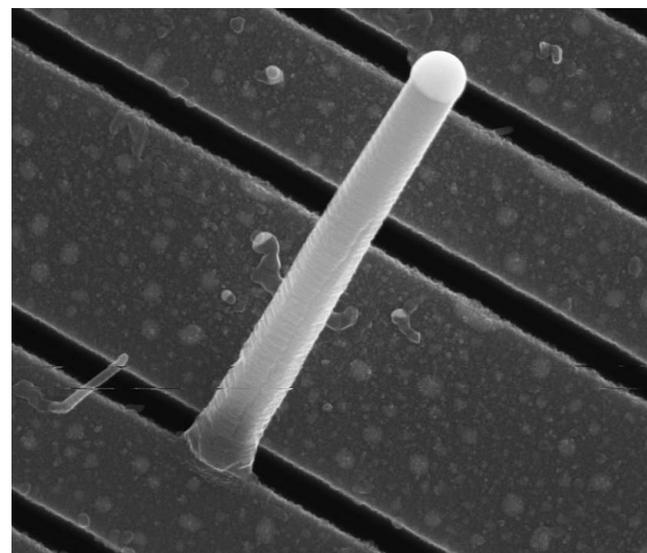
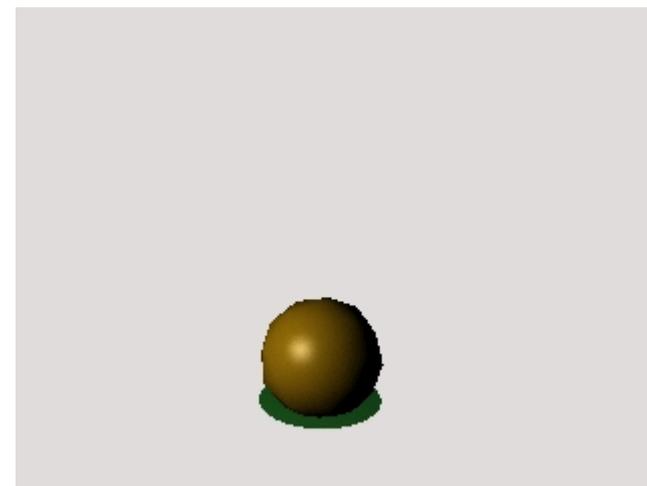
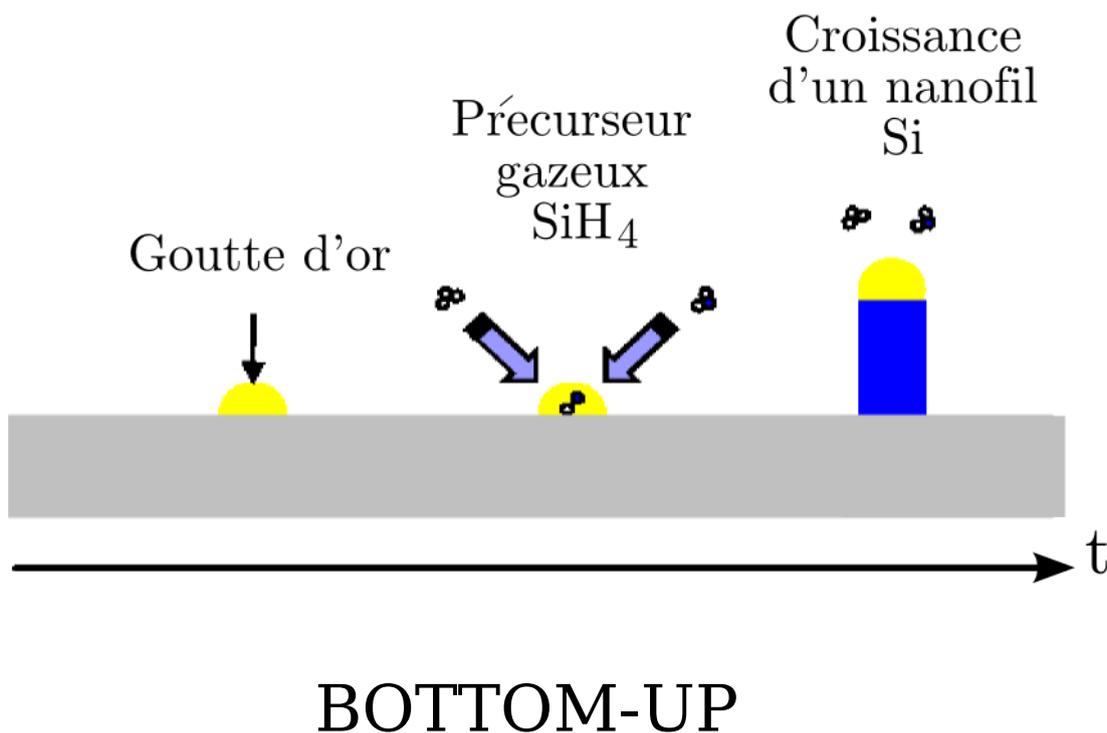
En laboratoire:

- l'approche BOTTOM-UP permet la croissance de nano-objets à partir des constituants élémentaires.
- La méthode VLS (Vapeur-Liquide-Solide) utilisé pour réaliser la croissance de nanofils semiconducteurs.



En laboratoire:

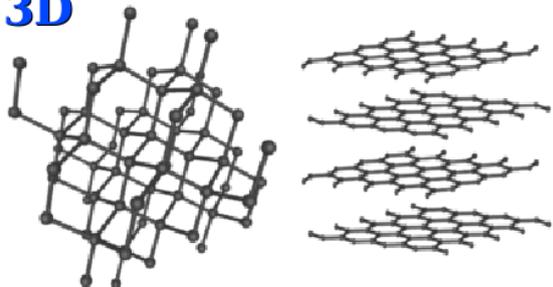
- l'approche BOTTOM-UP permet la croissance de nano-objets à partir des constituants élémentaires.
- La méthode VLS (Vapeur-Liquide-Solide) utilisé pour réaliser la croissance de nanofils semiconducteurs.



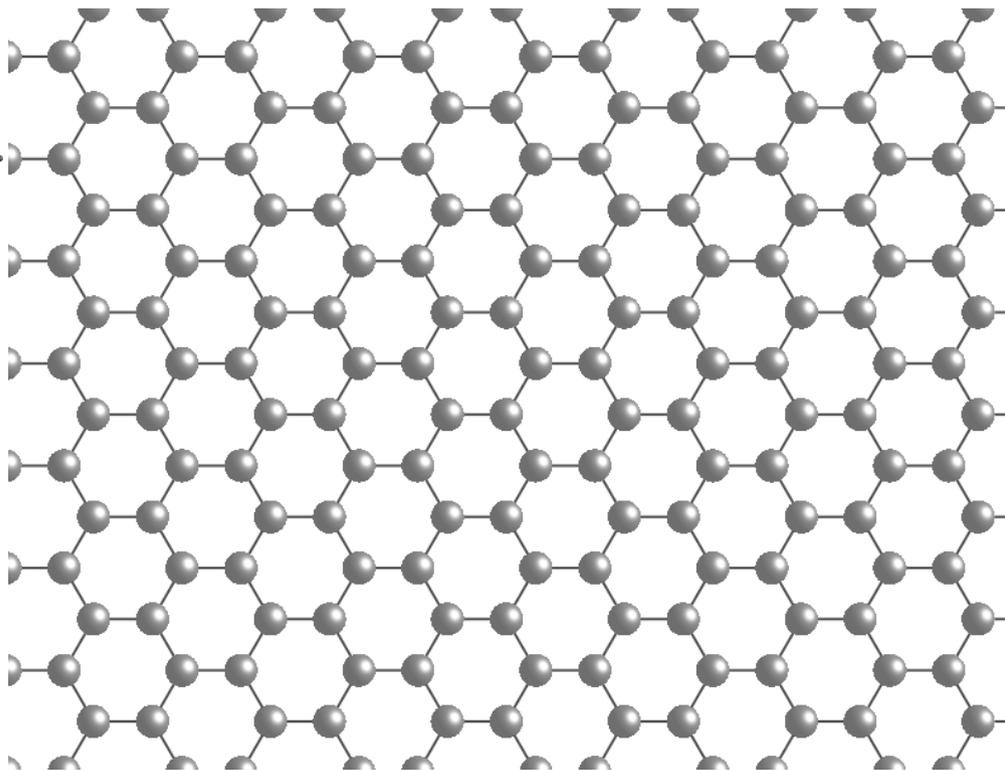
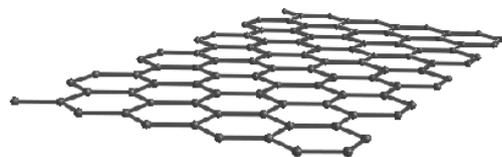
- Le graphène 2D est le dernier allotrope de la famille du carbone (2004)
- Le graphène (2D) est le dénominateur commun du graphite (3D) et des nanotubes de carbone (1D).

Réseau hexagonale Nid d'abeilles

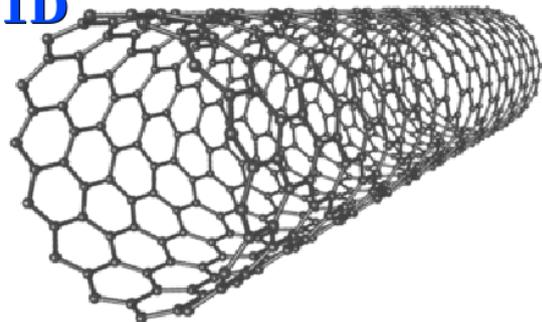
3D



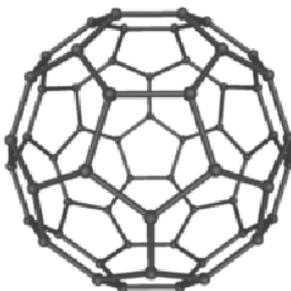
2D



1D

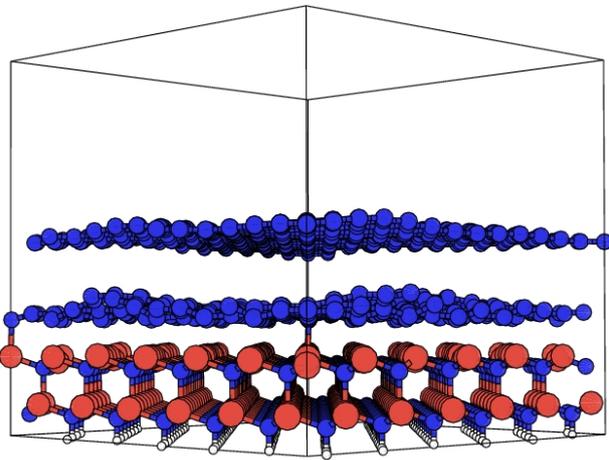


0D



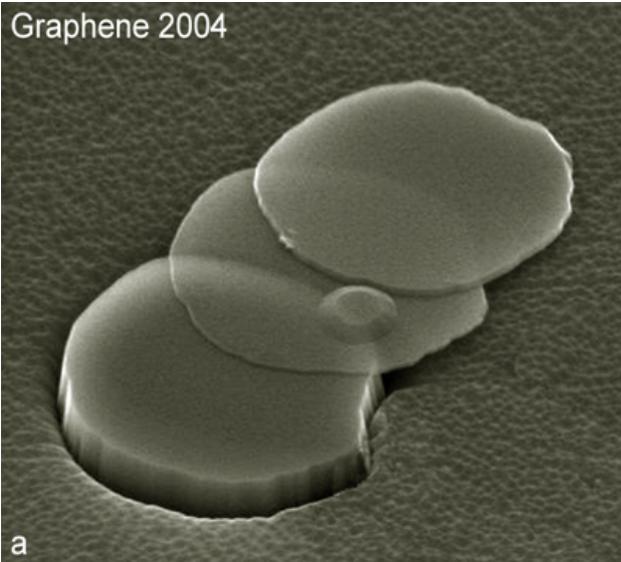
Le graphène est obtenu principalement par 2 méthodes:

- Par **décomposition thermique** d'un substrat SiC (carbure de silicium)
- Par micro-clivage, autrement dit par **exfoliation** du graphite.



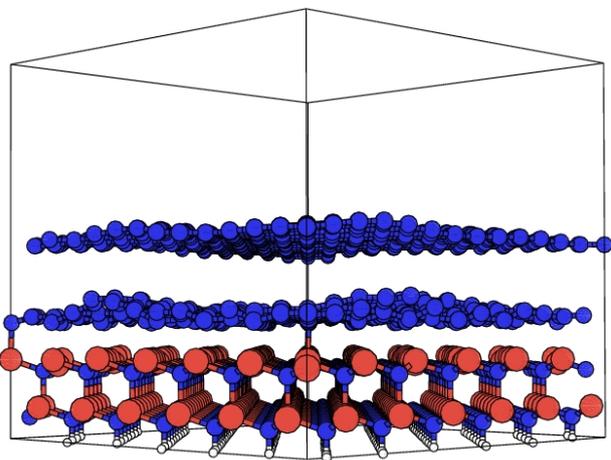
Courtesy of F. Varchon

Credit: Kostya Novoselov, Andre Geim & Mesoscopic Physics Group, 2004. Source: ScideaNews.com

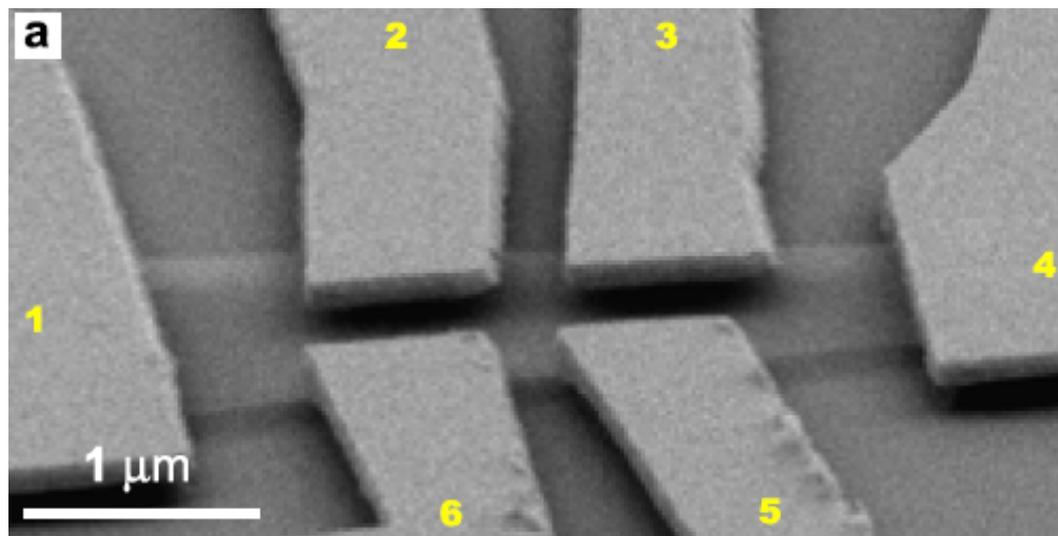


Le graphène est obtenu principalement par 2 méthodes:

- Par **décomposition thermique** d'un substrat SiC (carbure de silicium)
- Par micro-clivage, autrement dit par **exfoliation** du graphite.

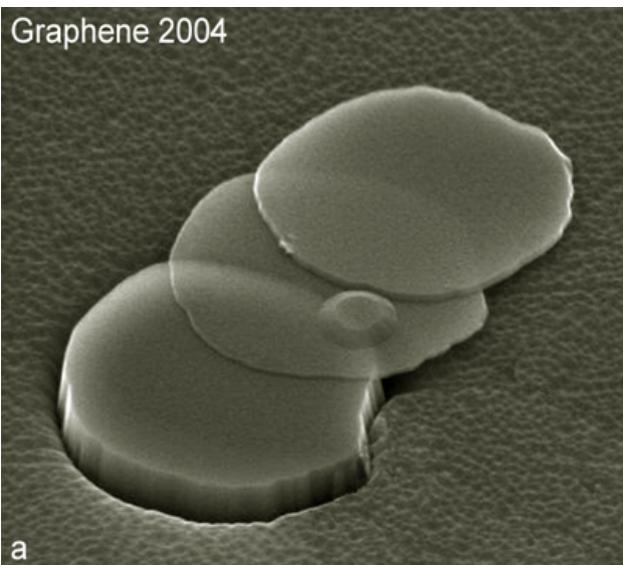


Courtesy of F. Varchon



K. I Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, H. L. Stormer, Ultrahigh electron mobility in suspended graphene, ArXiv:**0802.2389** (2008)

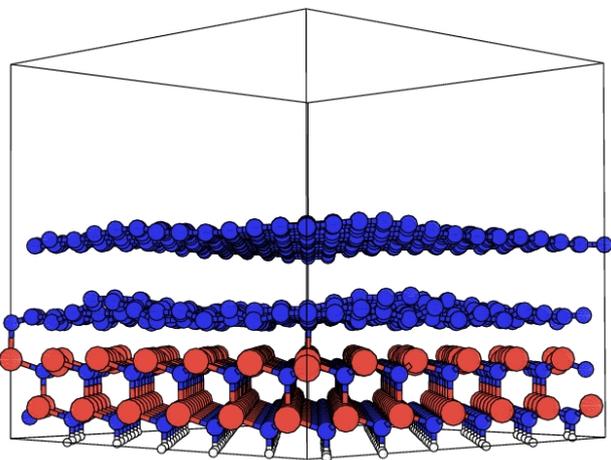
Graphene 2004



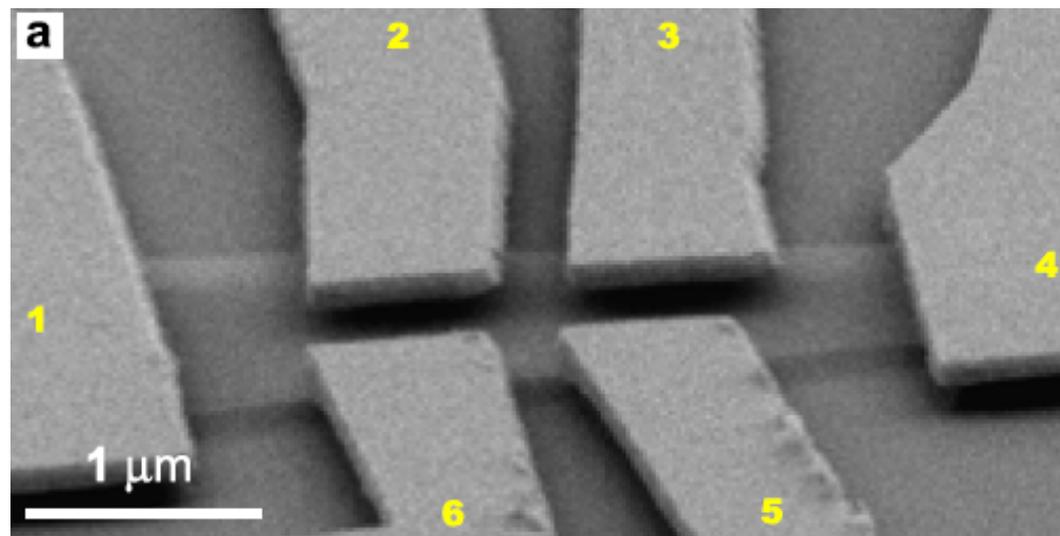
Credit: Kostya Novoselov, Andre Geim & Mesoscopic Physics Group, 2004. Source: ScideaNews.com

Le graphène est obtenu principalement par 2 méthodes:

- Par décomposition thermique d'un substrat SiC (carbure de silicium)
- Par micro-clivage, autrement dit par exfoliation du graphite.



Courtesy of F. Varchon



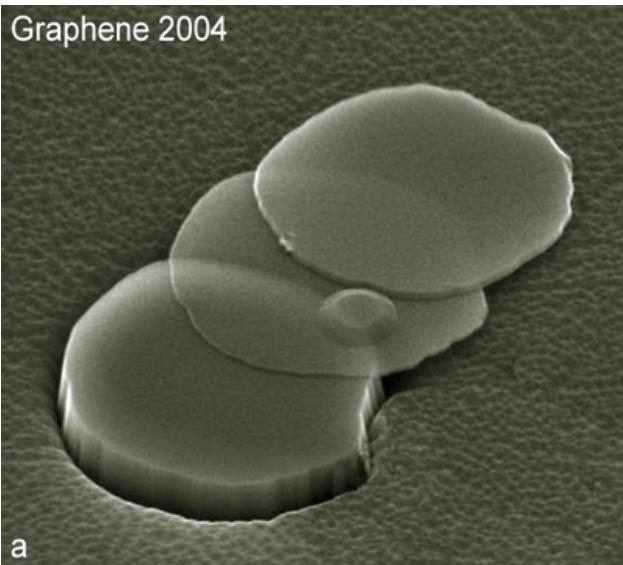
K. I Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, H. L. Stormer, Ultrahigh electron mobility in suspended graphene, ArXiv:0802.2389 (2008)

Mobilité élevée dans le graphène

$$\mu \sim 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

Le graphène possède des propriétés électroniques particulières

Graphene 2004



Credit: Kostya Novoselov, Andre Geim & Mesoscopic Physics Group, 2004. Source: ScideaNews.com

1) Nano-objets:

Nanofils semiconducteurs.
Plans de Graphène.

2) Théorie et Simulation:

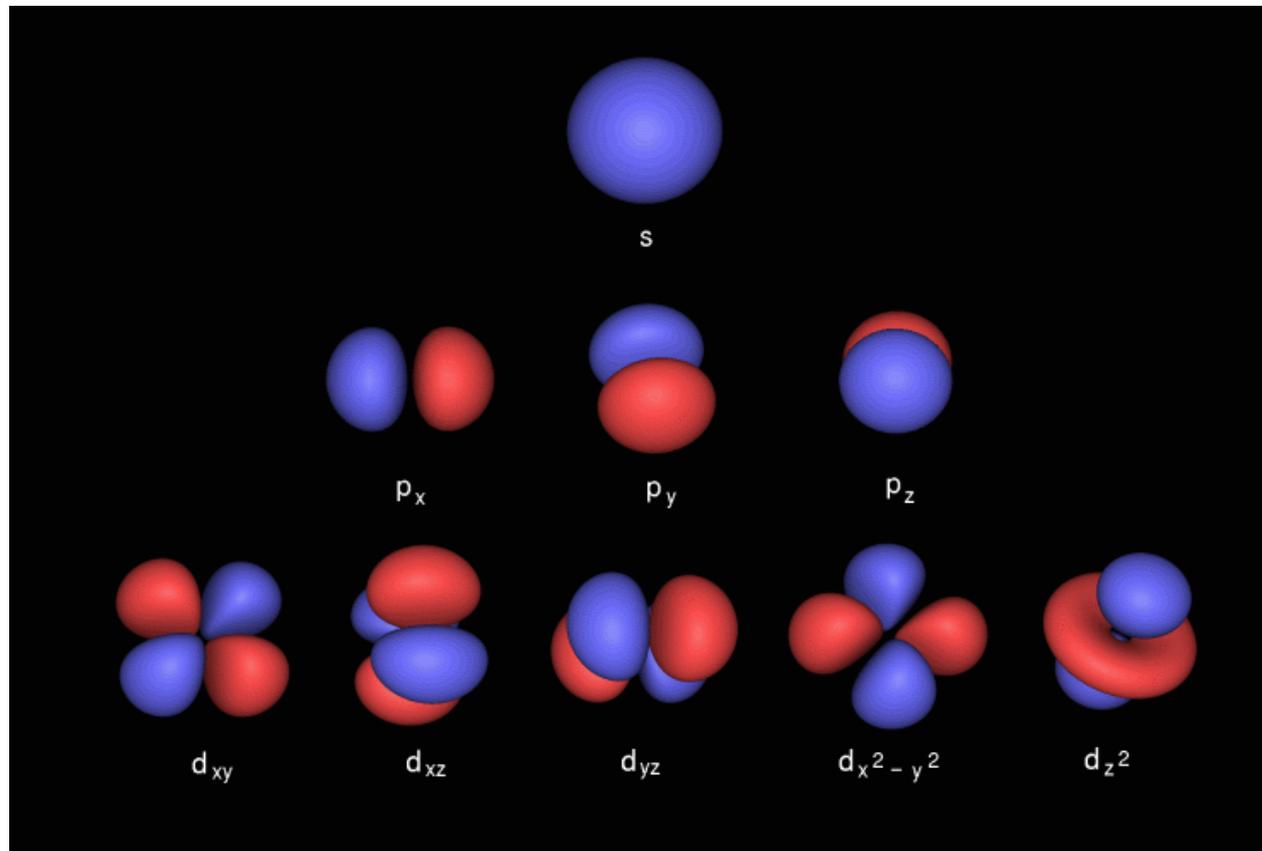
Méthode des liaisons fortes.
Approche du transport de Kubo-Greenwood.
Méthode de récursion.

3) Nanofils de silicium rugueux:

Modèle de rugosité.
Structure électronique de nanofils de silicium.
Propriétés de transport de nanofils de silicium rugueux.

4) Plans de Graphène dopés bore:

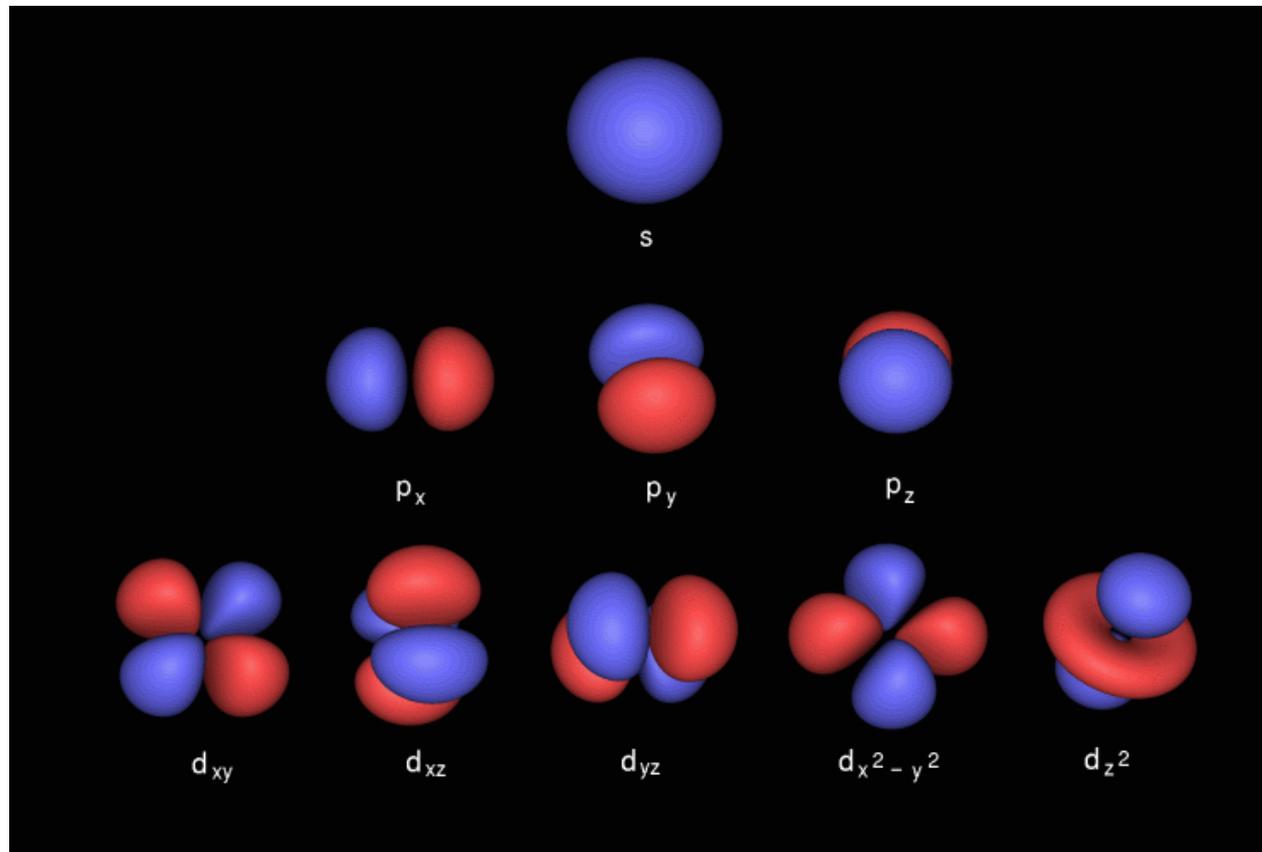
Structure Electronique de plans de graphène.
Effets des dopants sur le transport dans les plans de graphène.



Le principe des liaisons fortes est de développer les fonctions d'ondes en une **combinaison linéaires d'orbitales atomiques**.

Modèle de liaisons fortes:

- Base d'orbitales atomiques : $s, sp^3, sp^3d^5, sp^3d^5s^*$
- Portée des interactions : 1^{ers}, 2^{èmes}, 3^{èmes} voisins.
- Orthogonalité ou non.



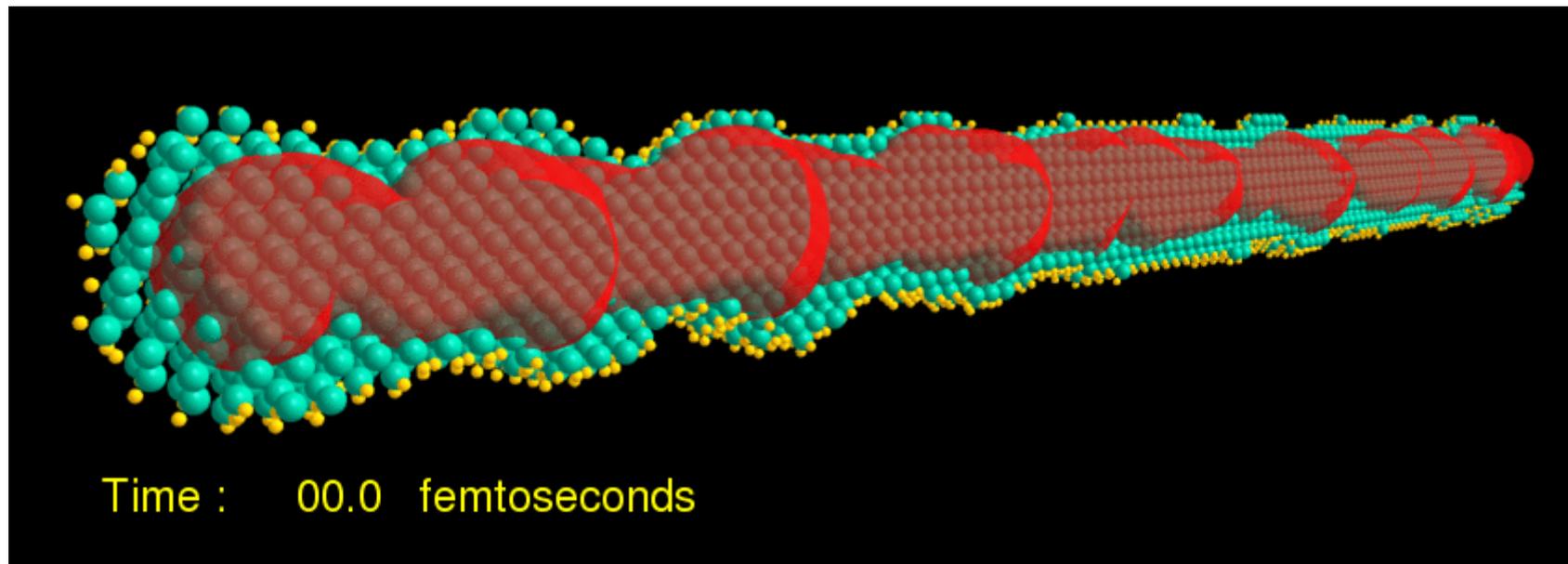
Le principe des liaisons fortes est de développer les fonctions d'ondes en une combinaison linéaires d'orbitales atomiques.

- Les éléments de matrice du Hamiltonien sont des **paramètres ajustables**.
- La matrice du Hamiltonien est « **creuse** » : algorithme d'ordre N pour le calcul du transport.

L'approche de Kubo-Greenwood:

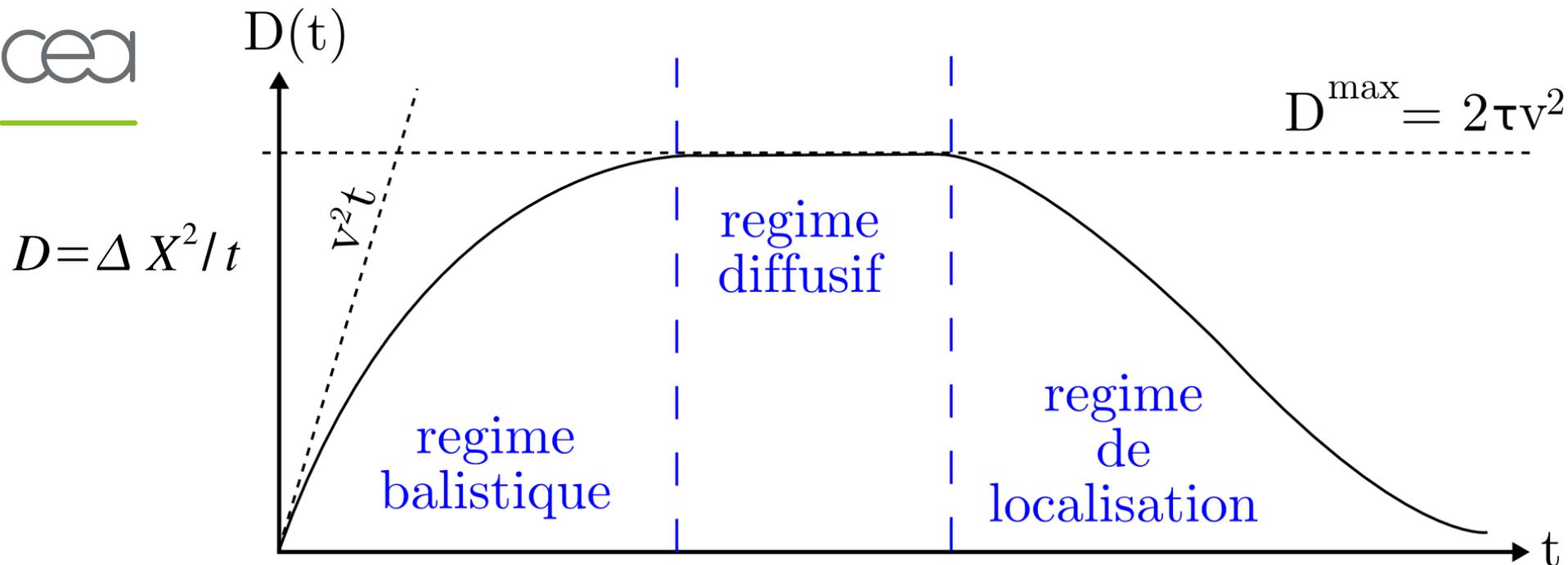
- Basée sur la théorie de la **réponse linéaire**.
- Transport électronique dans un **formalisme quantique** proche de l'équilibre.
- Adapté au cas de systèmes semiconducteurs **multi-orbitales**.
- Approche en espace réel et d'ordre $\sim N$

- Calcul de **l'étalement quadratique moyen** $\Delta X^2(E, t) = \langle |\hat{X}(t) - \hat{X}(0)|^2 \rangle_E$
- Calcul de la **conductivité semiclassique** σ_{sc} , et des propriétés **intrinsèques**.

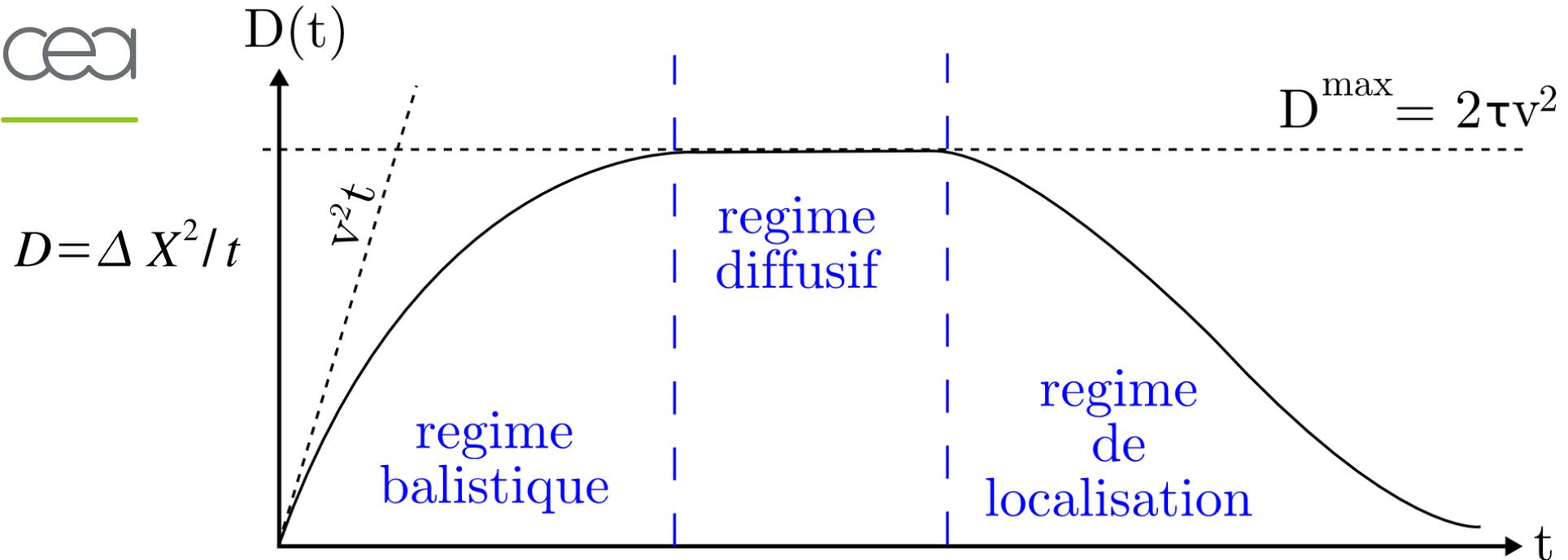


$$\sigma_{sc}(E_F) = \frac{e^2}{2} \rho(E_F) \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} \Delta X^2(E_F, t) \right]$$

Les propriétés de transport des nanofils de silicium rugueux peuvent être extraites à partir du calcul de l'étalement quadratique moyen (ΔX^2), ou plus précisément à partir de la diffusivité (D).



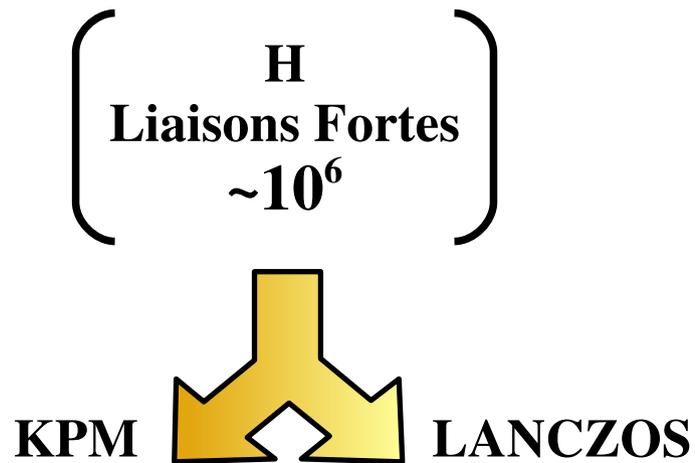
Les propriétés de transport des nanofils de silicium rugueux peuvent être extraites à partir du calcul de l'étalement quadratique moyen (ΔX^2), ou plus précisément à partir de la diffusivité (D).



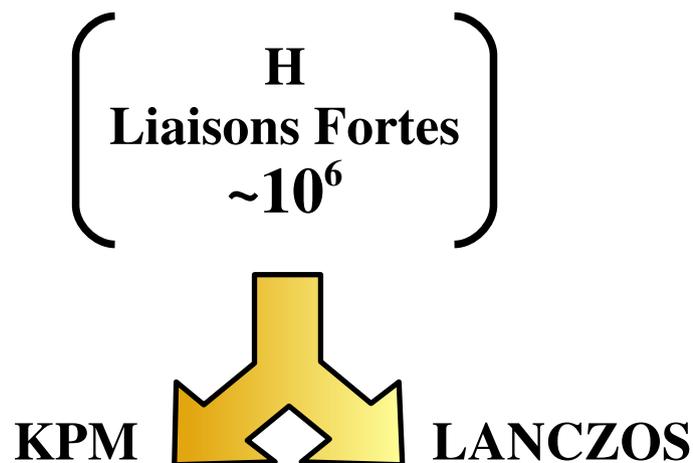
$$\sigma_{sc}(E_F) = \frac{e^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\partial f(E - E_F)}{\partial E} \rho(E) D^{max}(E)$$

$$\mu(E_F) = \frac{\sigma_{sc}(E_F)}{n(E_F)e}$$

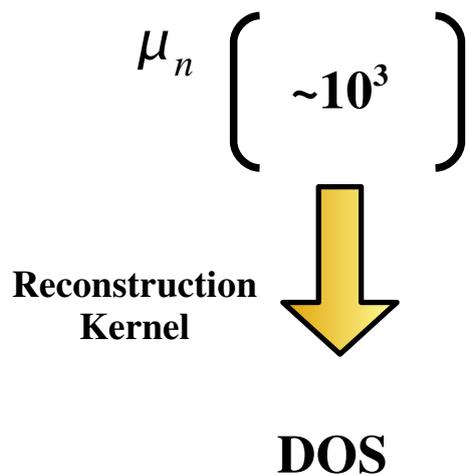
- Application d'une suite récursive d'opération sur le Hamiltonien du système.



- Application d'une suite récursive d'opération sur le Hamiltonien du système.

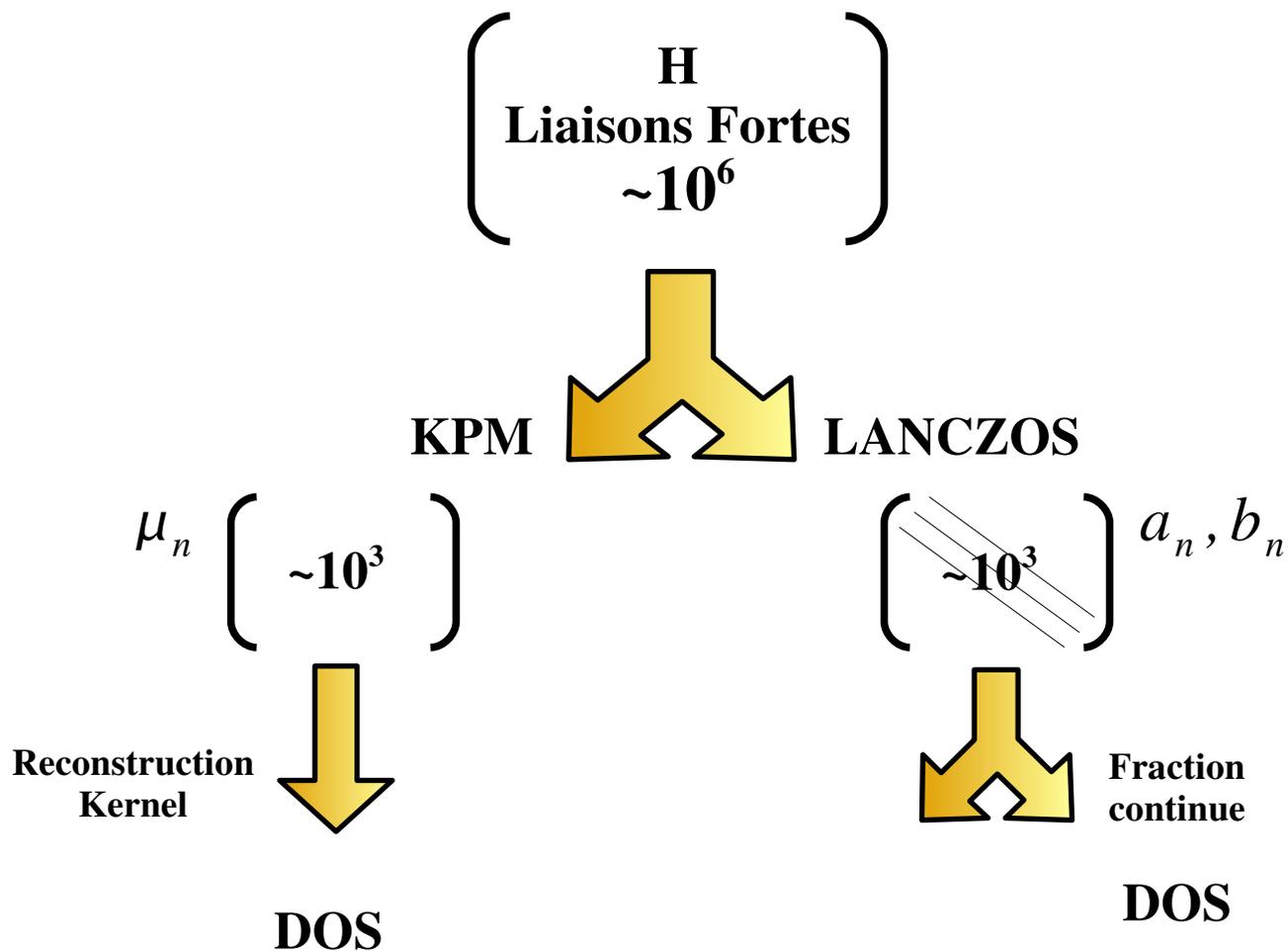


Plus précis
Moins rapide



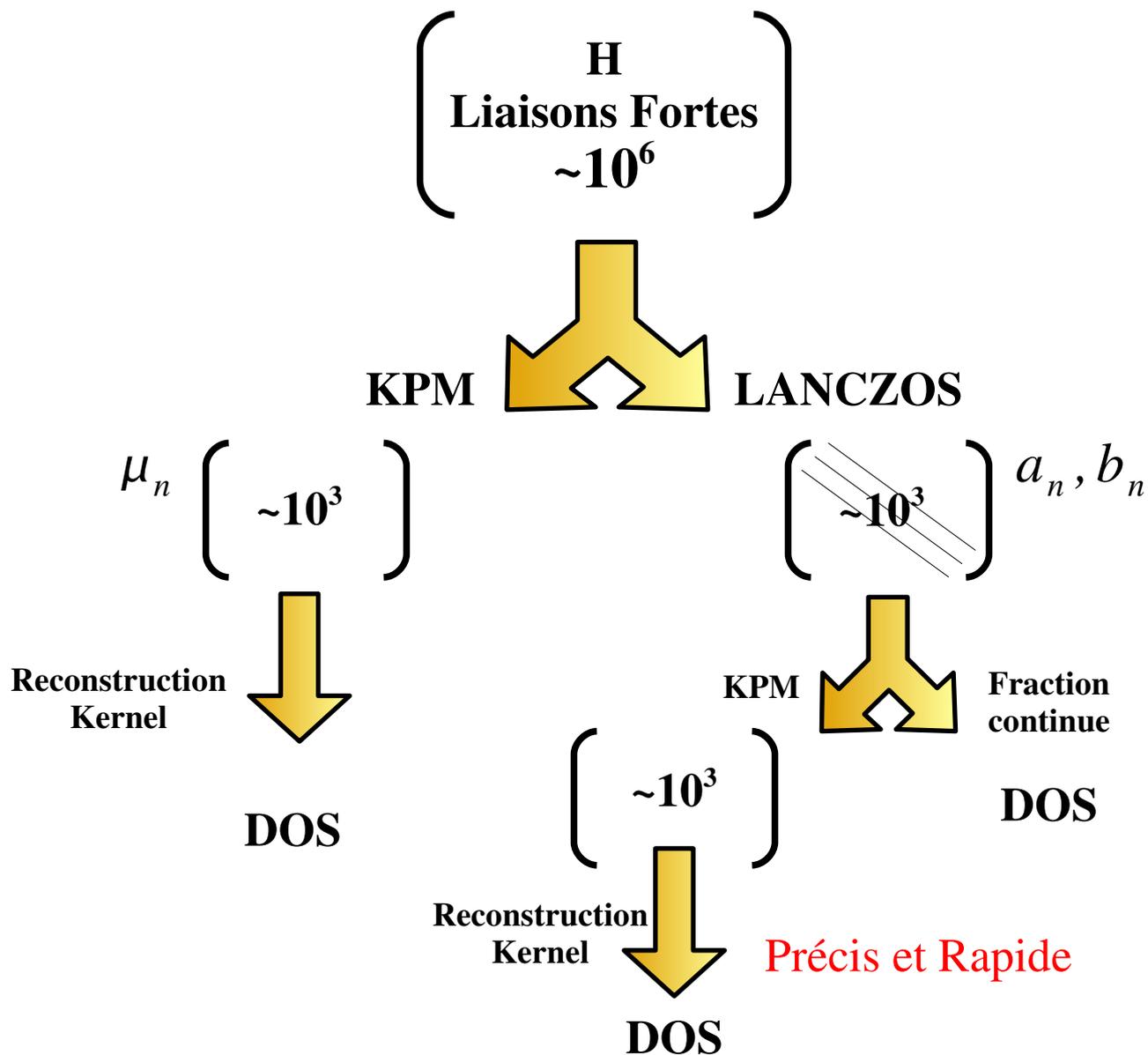
- Application d'une suite récursive d'opération sur le Hamiltonien du système.

Plus précis
Moins rapide



Moins précis
Plus rapide

- Application d'une suite récursive d'opération sur le Hamiltonien du système.



1) Nano-objets:

Nanofils semiconducteurs.
Plans de Graphène.

2) Théorie et Simulation:

Méthode des liaisons fortes.
Approche du transport de Kubo-Greenwood.
Méthode de récursion.

3) Nanofils de silicium rugueux:

Modèle de rugosité.
Structure électronique de nanofils de silicium.
Propriétés de transport de nanofils de silicium rugueux.

4) Plans de Graphène dopés bore:

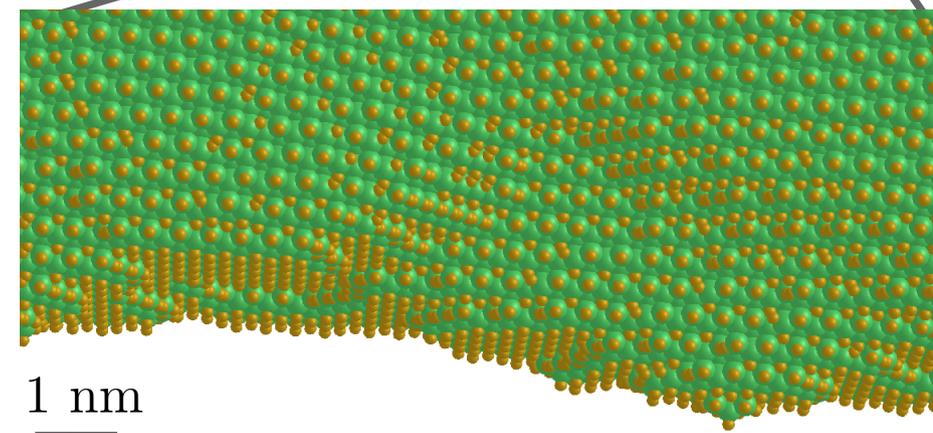
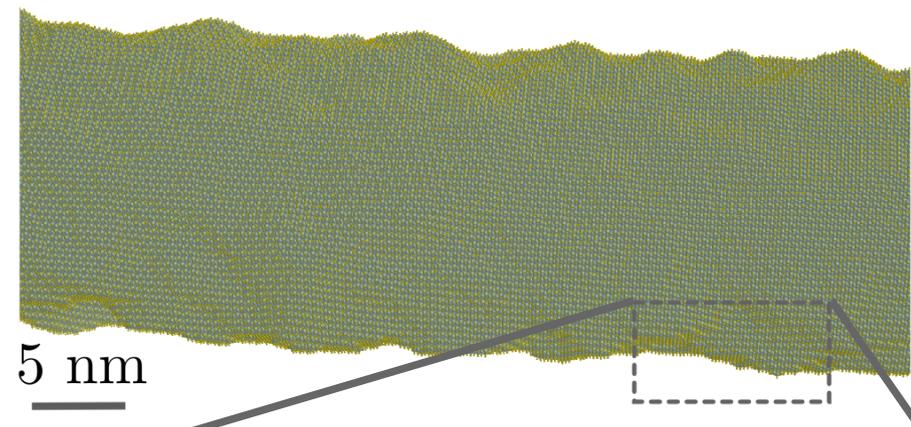
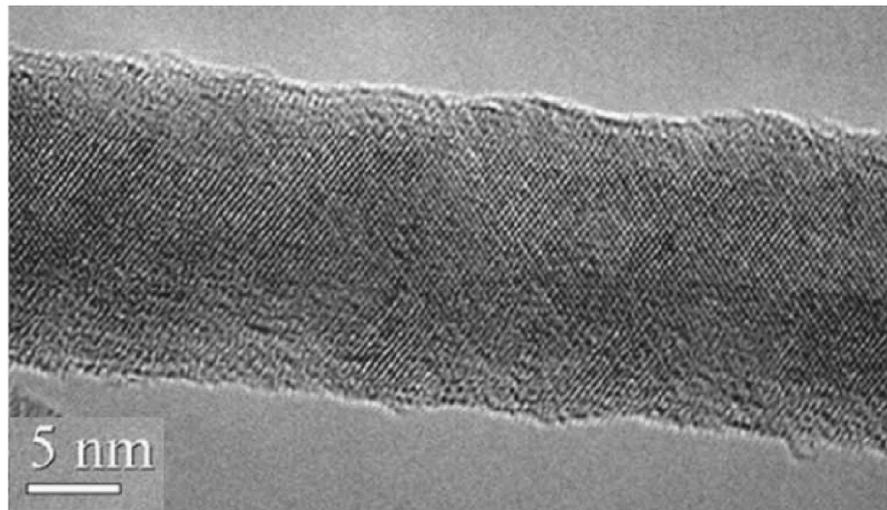
Structure Electronique de plans de graphène.
Effets des dopants sur le transport dans les plans de graphène.

Nanofils de silicium rugueux

Les nanofils peuvent être rugueux.

- Pour des dimensions $\sim 1-5$ nm le rapport surface/volume ($=2/R$) est élevé.
- La rugosité de surface peut impacter le transport de manière importante.

D. McClain, R. Solanki, L. Dong and J. Jiao, J. Vac. Sci. Techno. B **24**, 1071 (2006)

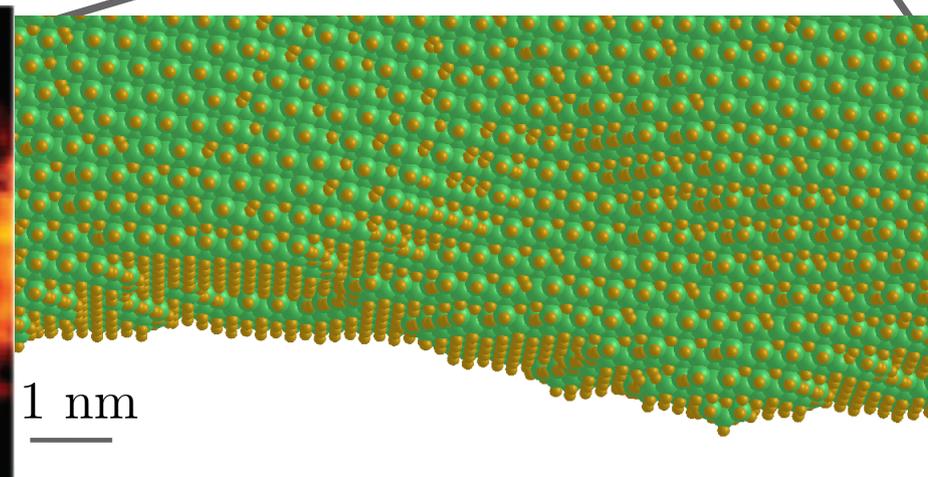
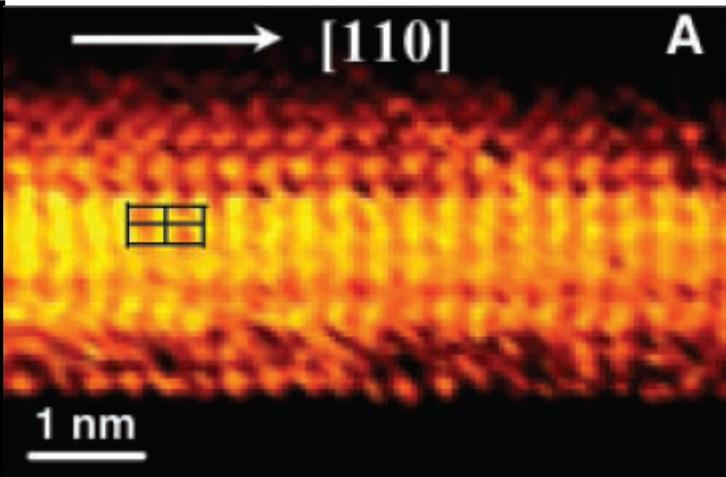
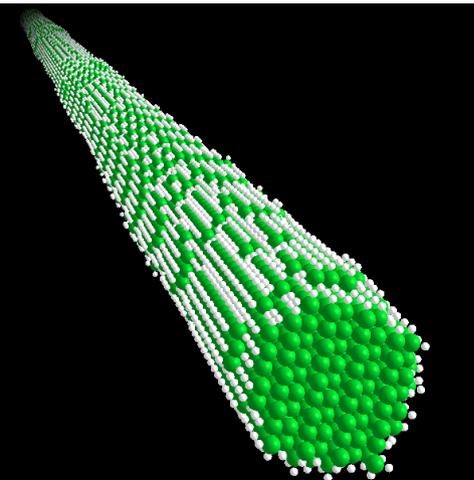
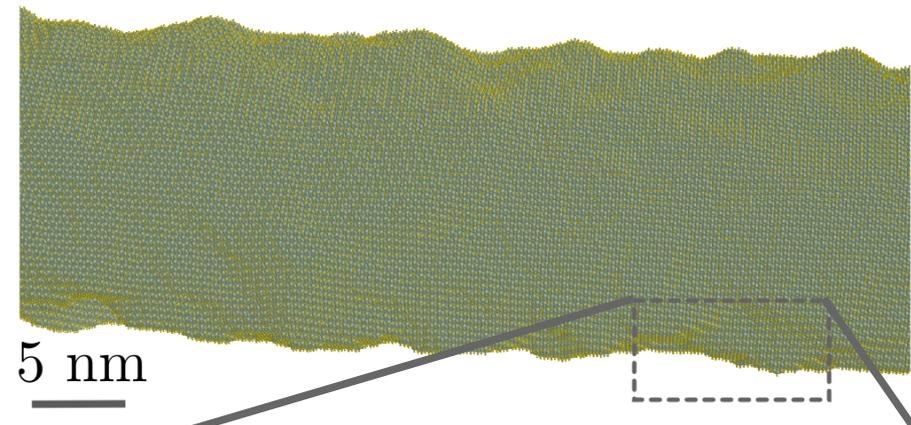
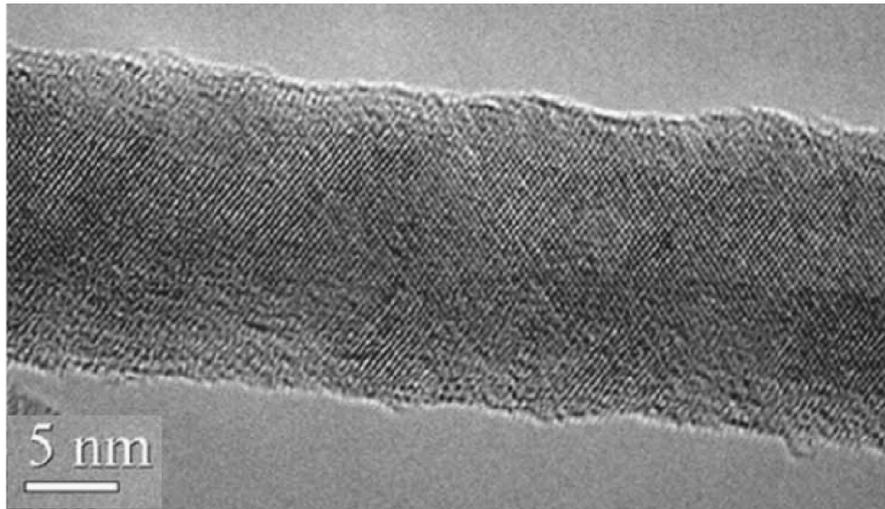


Nanofils de silicium rugueux

Les nanofils peuvent être rugueux.

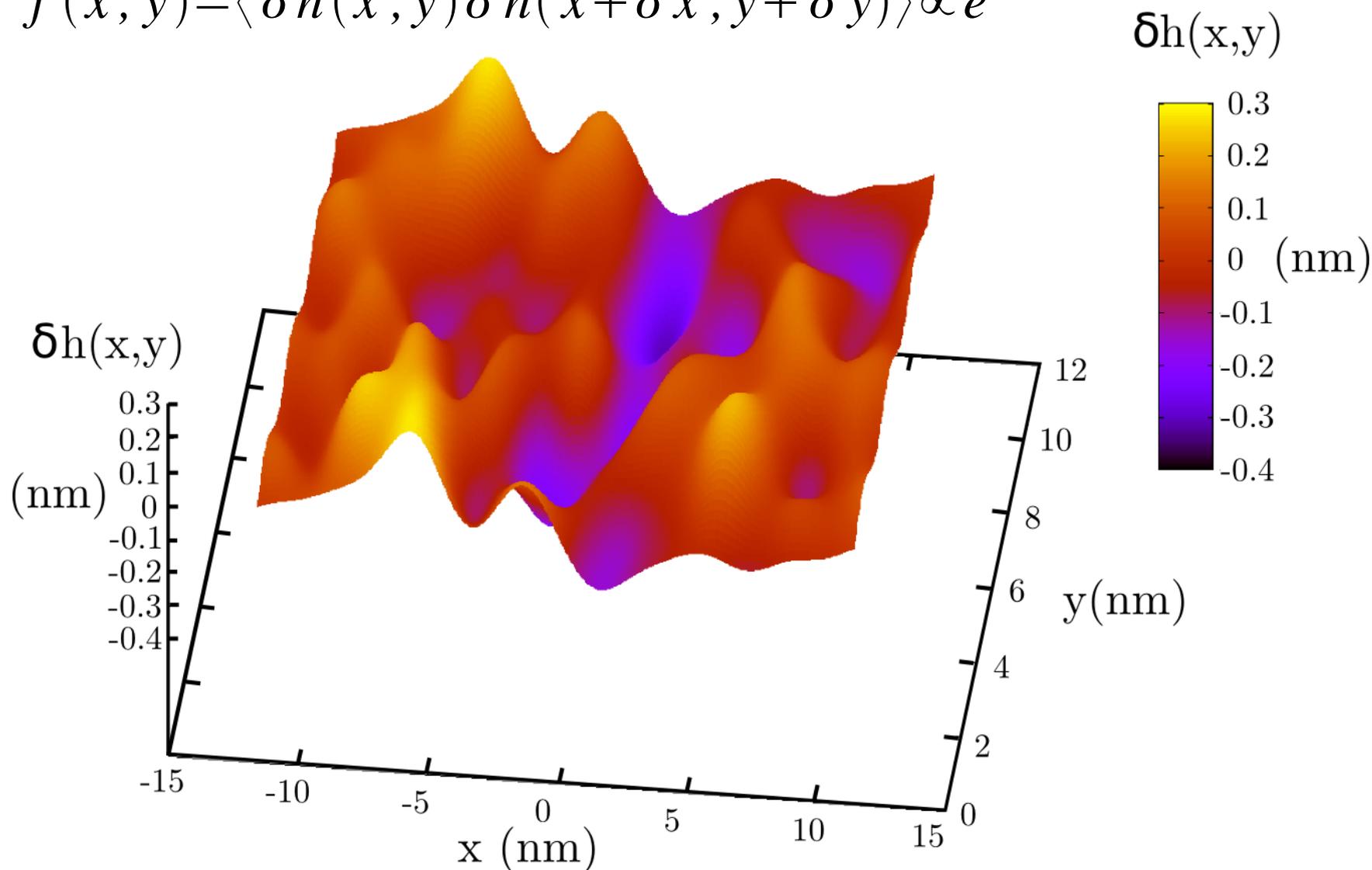
- Pour des dimensions $\sim 1-5$ nm le **rapport surface/volume** ($=2/R$) est élevé.
- La rugosité de surface peut devenir le **facteur limitant** du transport électronique.

D. McClain, R. Solanki, L. Dong and J. Jiao, J. Vac. Sci. Techno. B **24**, 1071 (2006)



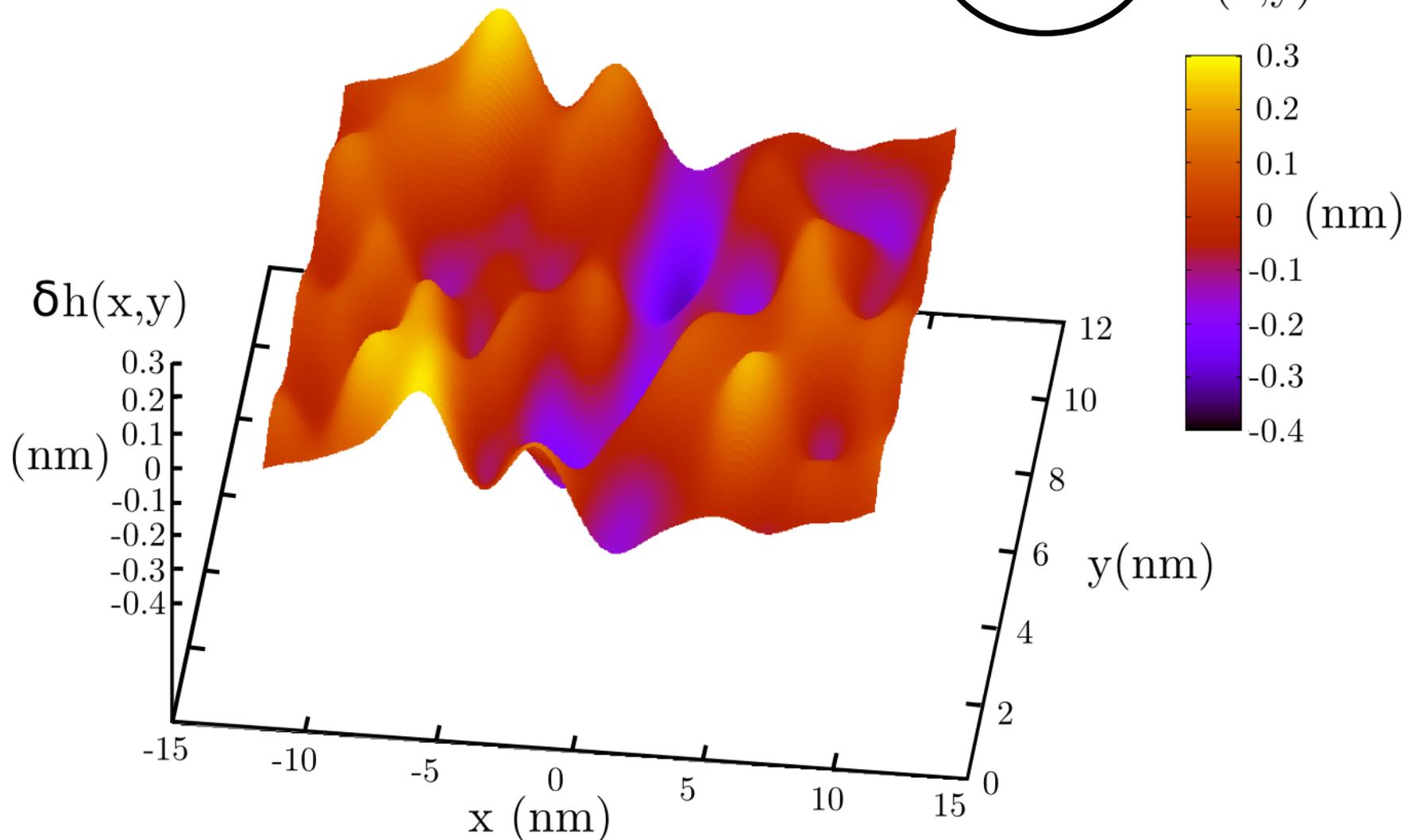
- Modèle incluant les **corrélations dans le désordre**.
- **Fonction d'autocorrélation** exponentielle.

$$f(x, y) = \langle \delta h(x, y) \delta h(x + \delta x, y + \delta y) \rangle \propto e^{-\frac{\Delta R}{L_r}}$$



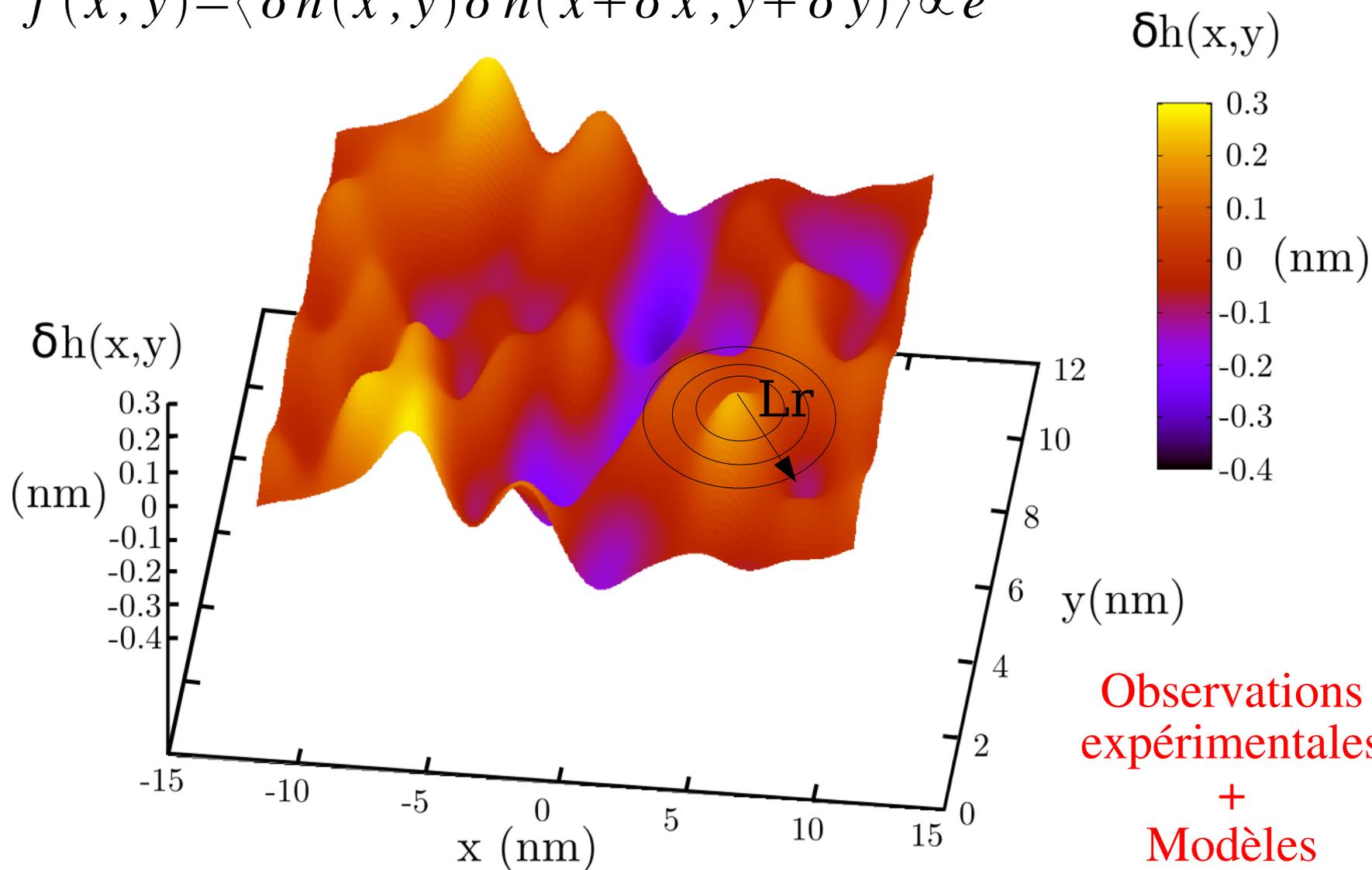
- Modèle incluant les **corrélations dans le désordre**.
- **Fonction d'autocorrélation** exponentielle.

$$f(x, y) = \langle \delta h(x, y) \delta h(x + \delta x, y + \delta y) \rangle \propto e^{\frac{-\Delta R}{L_r}} \delta h(x, y)$$



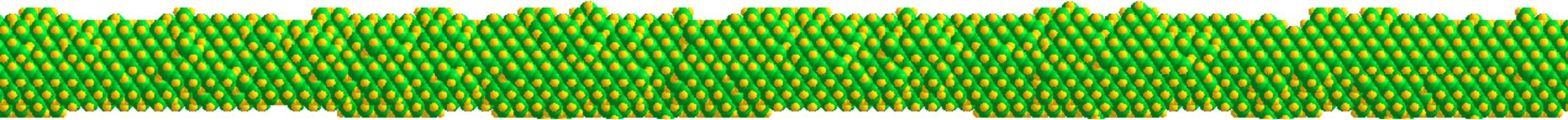
- Modèle incluant les corrélations dans le désordre.
- Fonction d'autocorrélation exponentielle

$$f(x, y) = \langle \delta h(x, y) \delta h(x + \delta x, y + \delta y) \rangle \propto e^{-\frac{\Delta R}{L_r}}$$

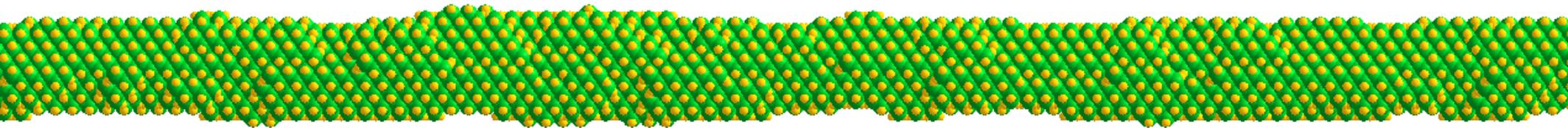


Nanofils de silicium rugueux / Modèle de rugosité

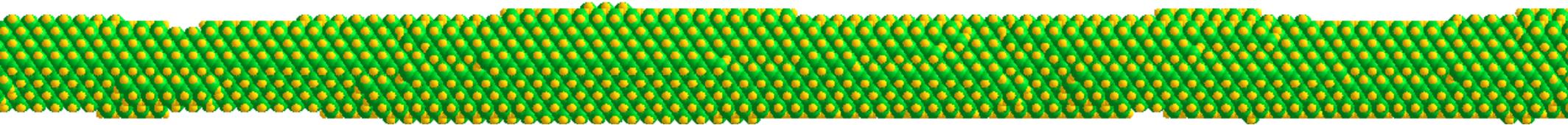
Lr = 0.54 nm



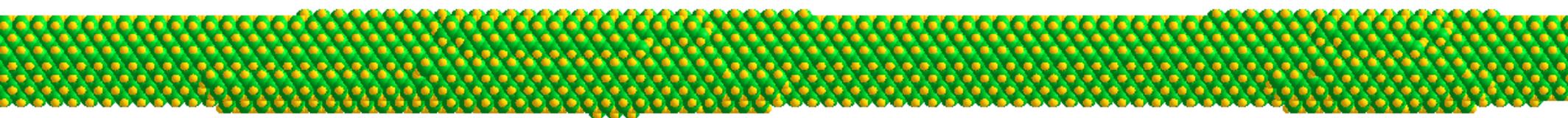
Lr = 1.09 nm



Lr = 2.17 nm



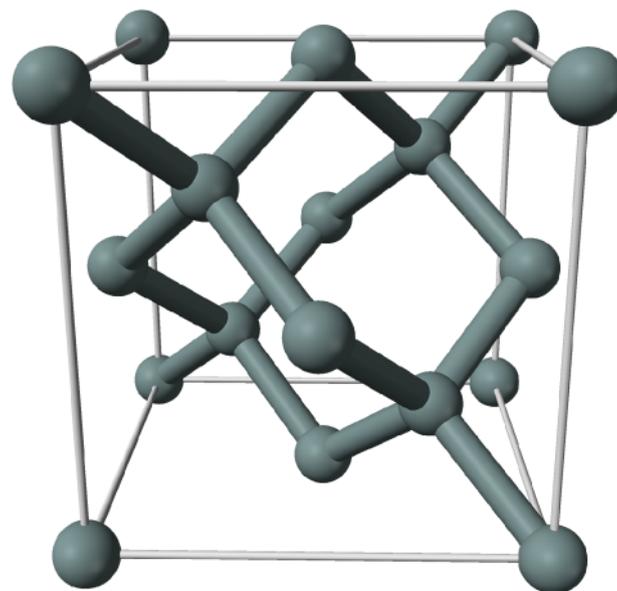
Lr = 4.34 nm



La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

Silicium massif

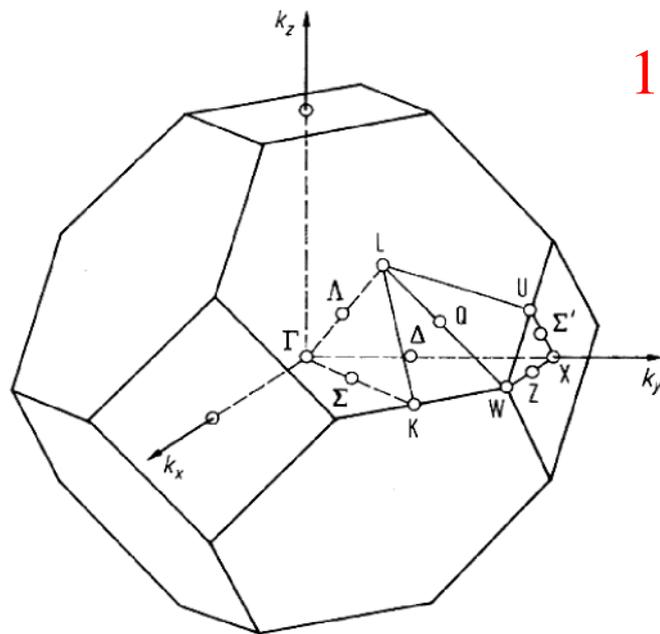


La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

Silicium massif

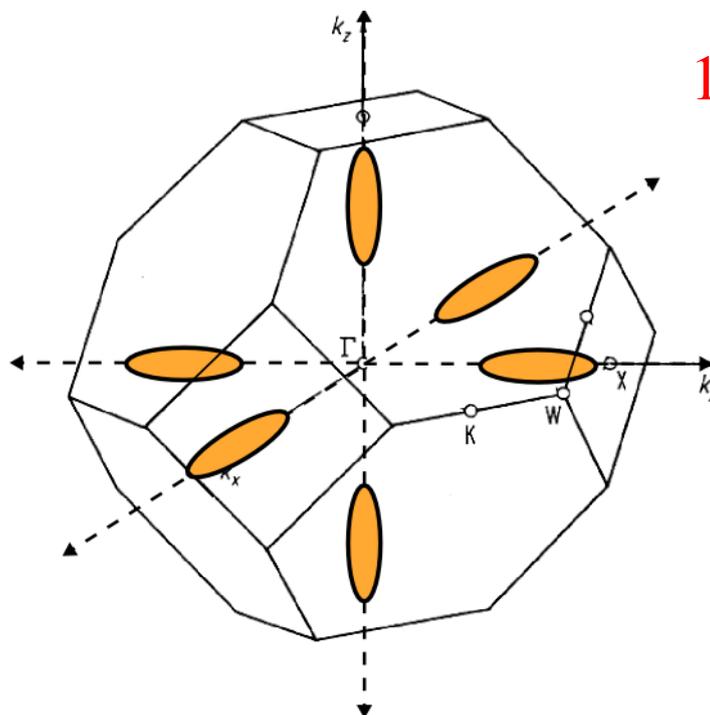
1^{ère} zone de Brillouin



La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

Silicium massif



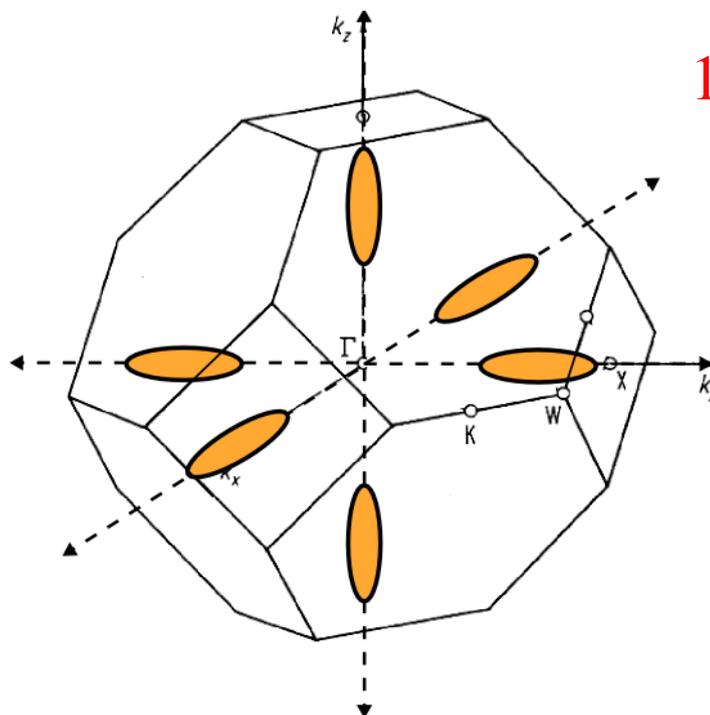
1^{ère} zone de Brillouin

6 minima de conduction

La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

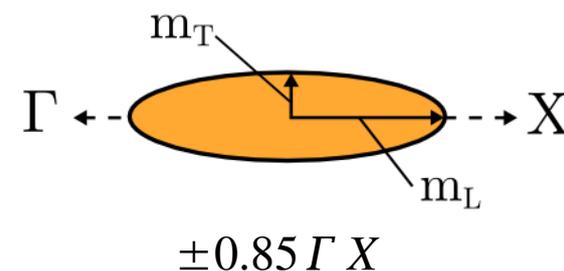
- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

Silicium massif



1^{ère} zone de Brillouin

6 minima de conduction



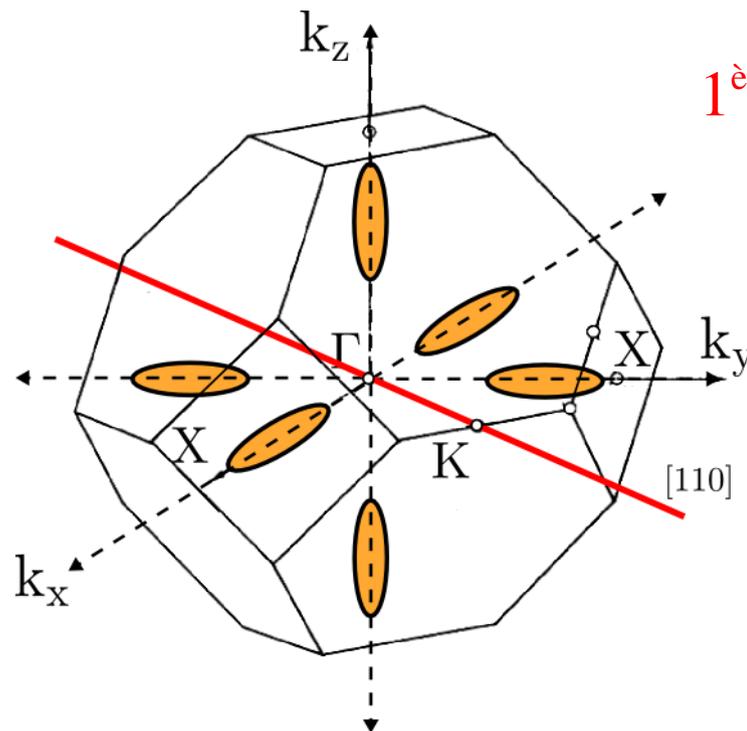
$$m_T = 0.19 m_0$$

$$m_L = 0.92 m_0$$

La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

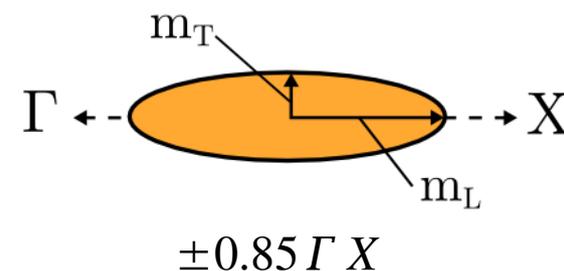
- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

Silicium massif



1^{ère} zone de Brillouin

6 minima de conduction



1^{ère} zone de Brillouin
du nanofil de silicium
[110]

$$m_T = 0.19 m_0$$

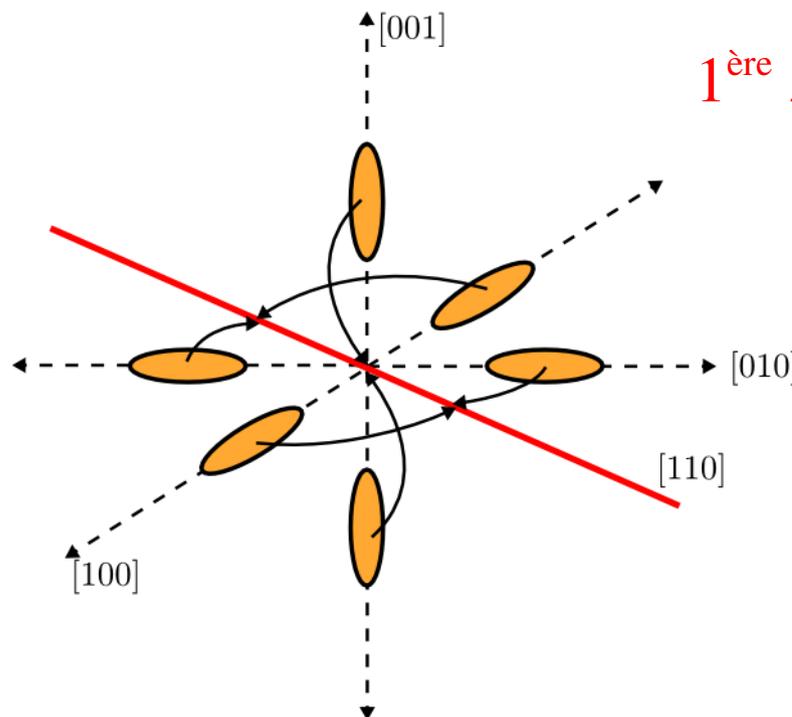
$$m_L = 0.92 m_0$$

La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

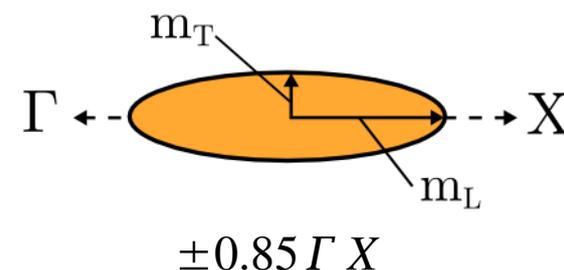
Silicium massif

1^{ère} zone de Brillouin



Projection des minima sur l'axe.

6 minima de conduction



1^{ère} zone de Brillouin du nanofil de silicium [110]

$$m_T = 0.19 m_0$$

$$m_L = 0.92 m_0$$

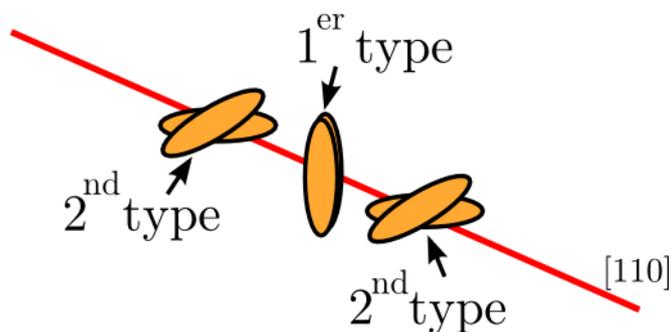
La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

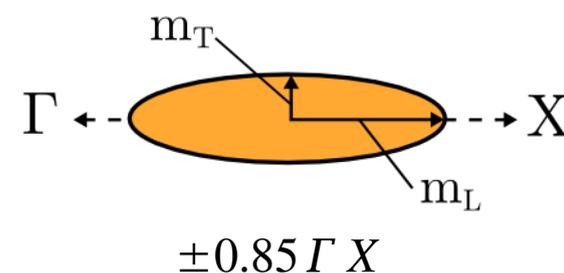
Nanofil de silicium ↔ Silicium massif

1^{ère} zone de Brillouin

Projection des minima sur l'axe.



6 minima de conduction



1^{ère} zone de Brillouin du nanofil de silicium [110]

$$m_T = 0.19 m_0$$

$$m_L = 0.92 m_0$$

La structure électronique des nanofils de silicium (Si) est pilotée par:

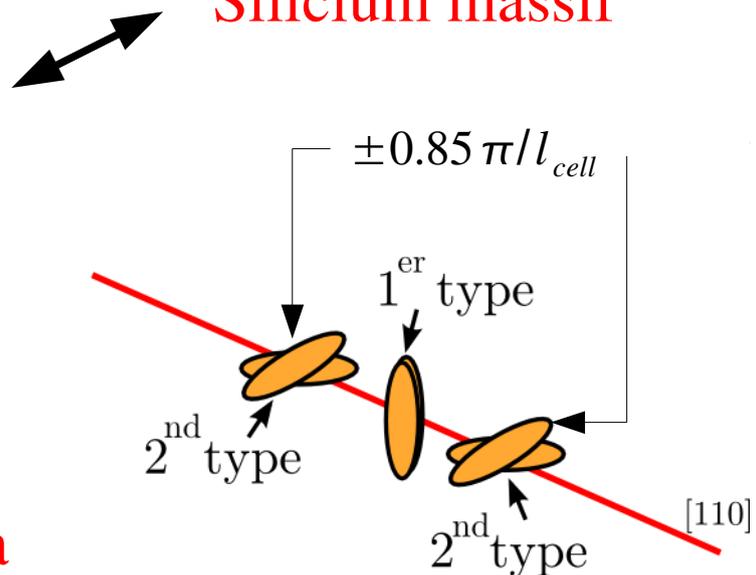
- La structure électronique du silicium massif
- Le potentiel de confinement

Nanofil de silicium

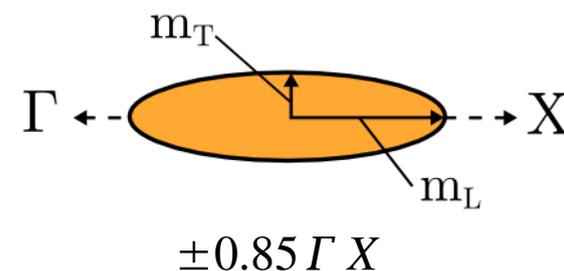
Silicium massif

1^{ère} zone de Brillouin

Projection des minima sur l'axe.



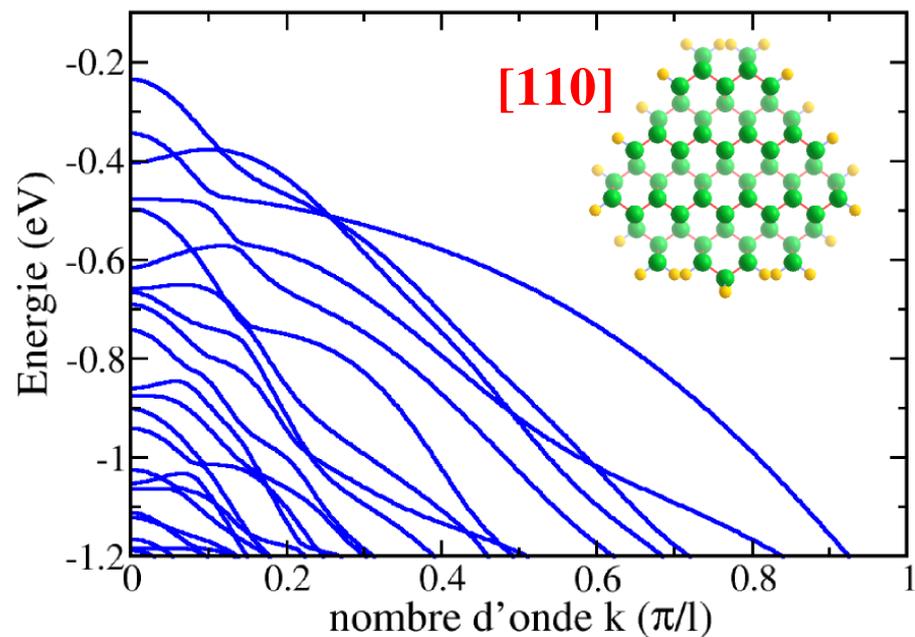
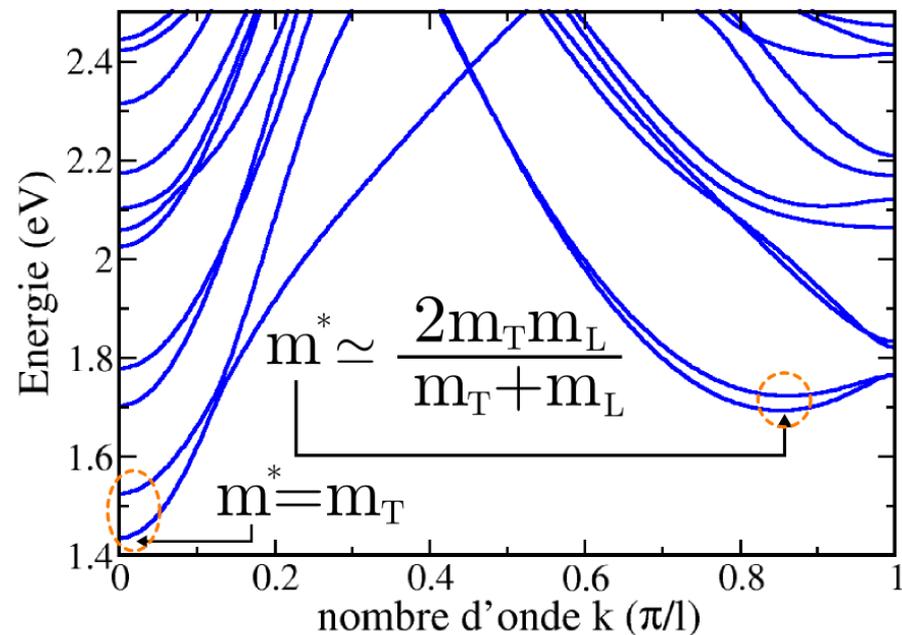
6 minima de conduction



1^{ère} zone de Brillouin du nanofil de silicium [110]

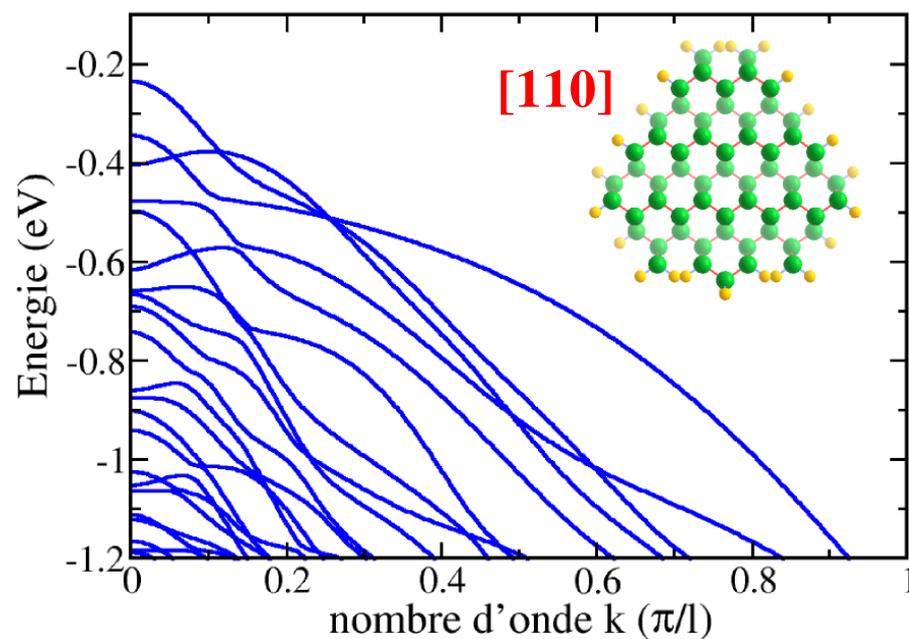
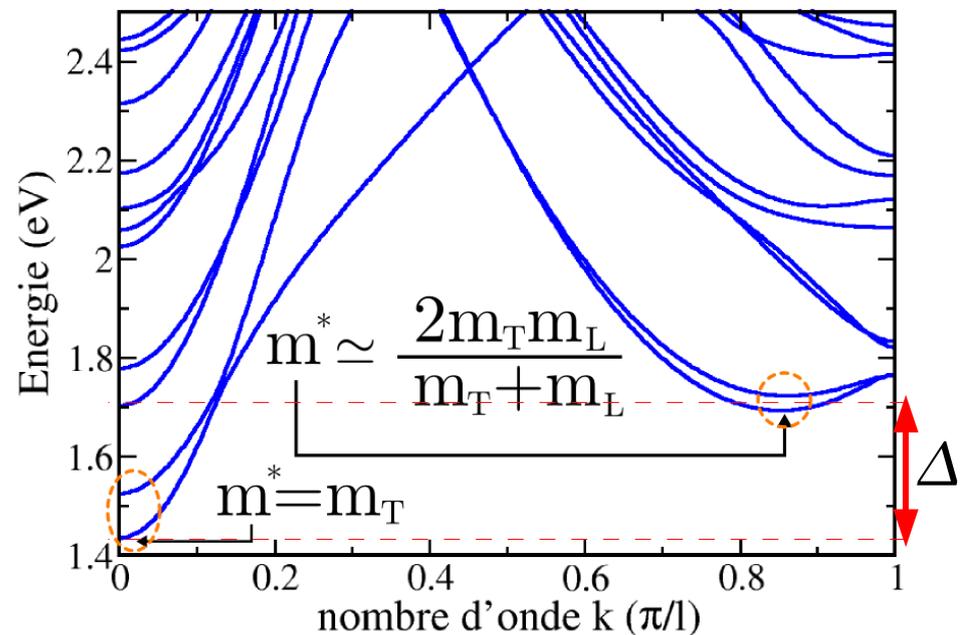
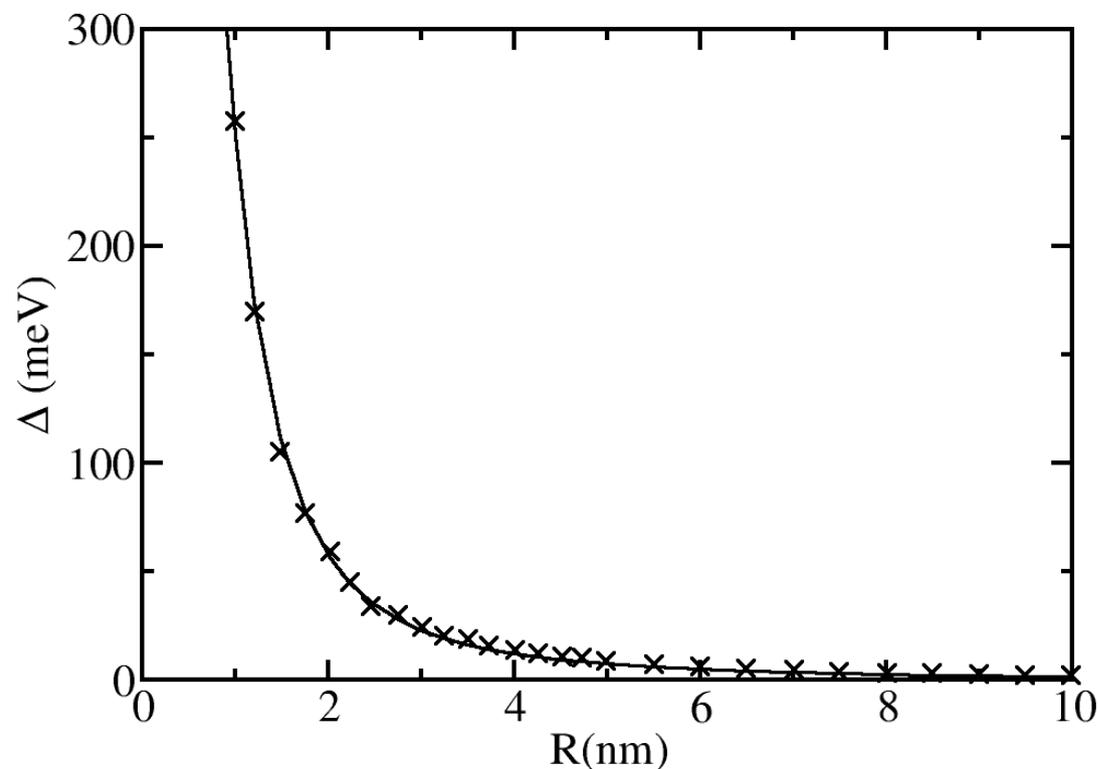
$$m_T = 0.19 m_0$$

$$m_L = 0.92 m_0$$



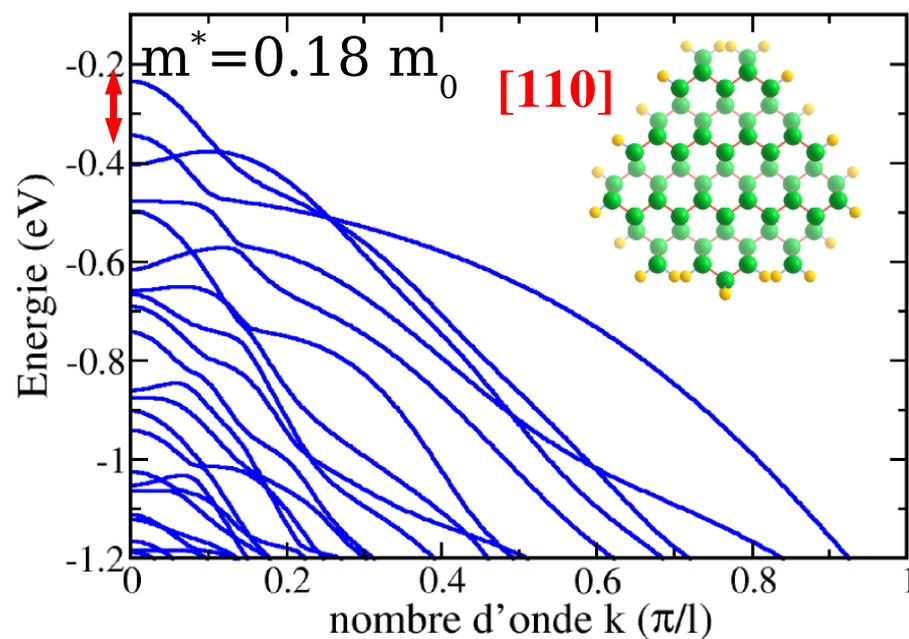
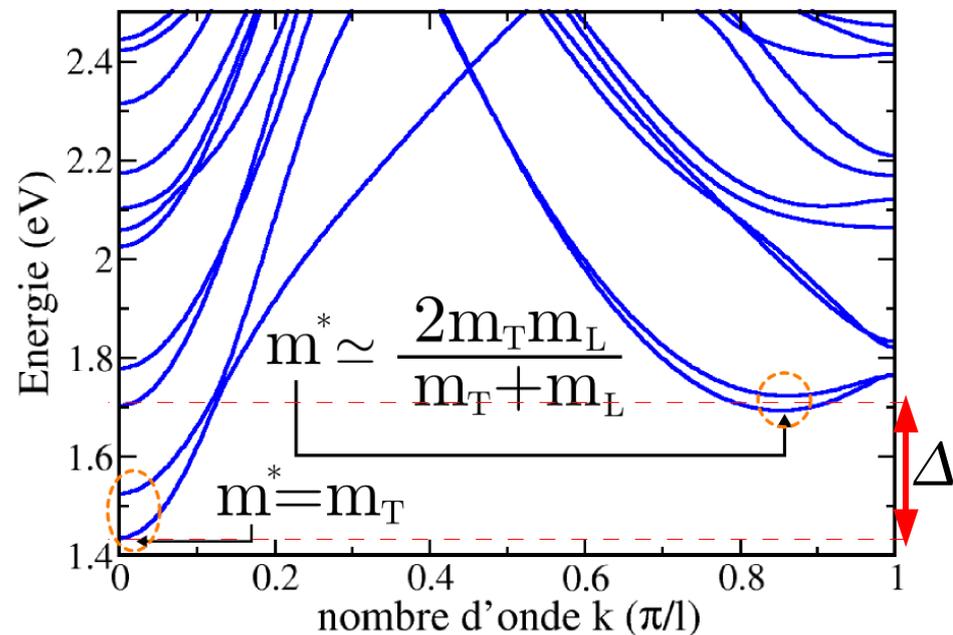
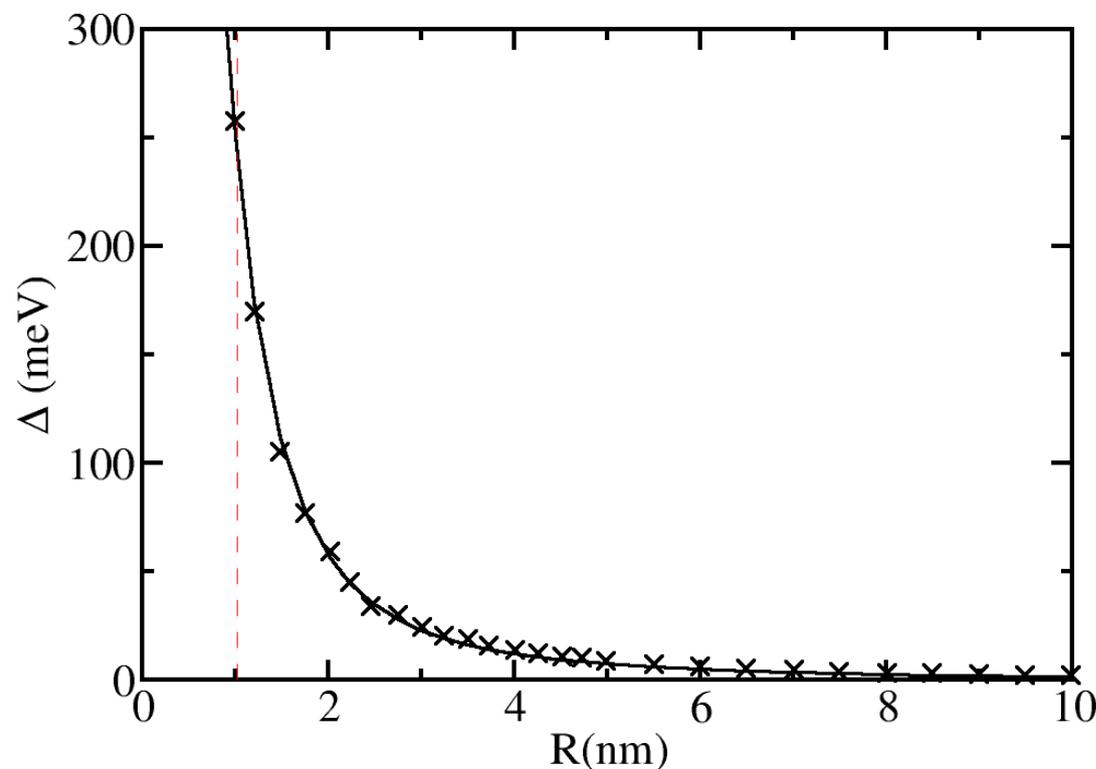
Le confinement sépare les sous-bandes électroniques.

Le confinement agit plus efficacement sur les minima de masses effectives élevées.

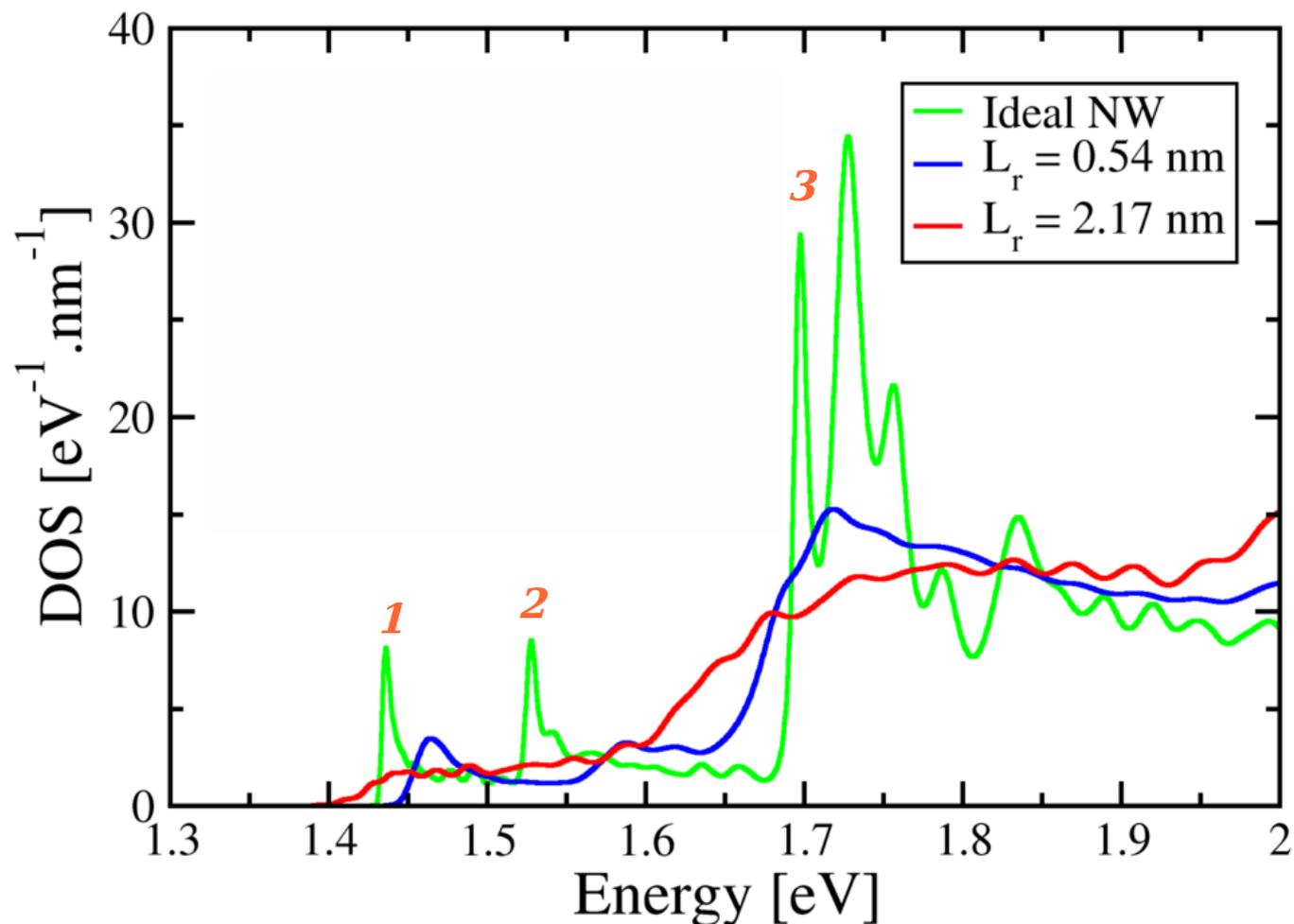
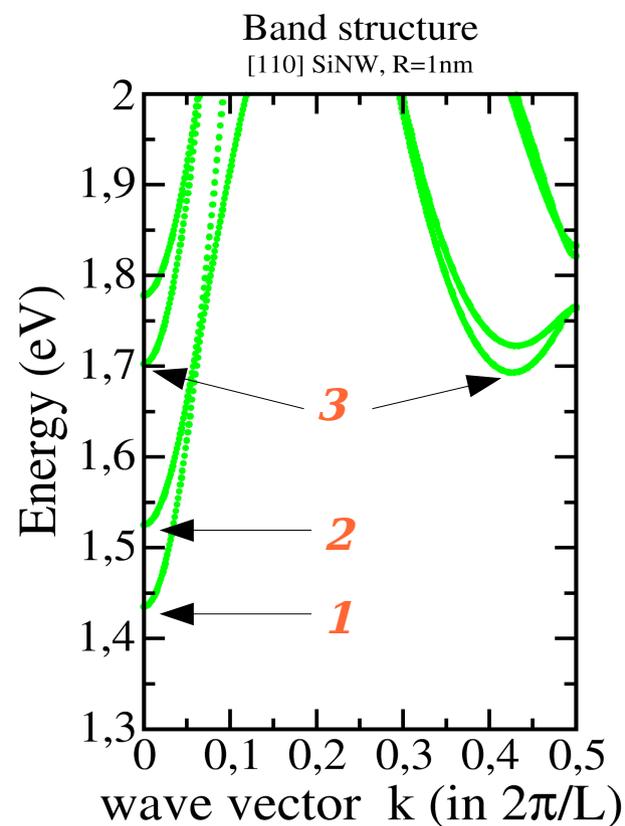


Le confinement sépare les sous-bandes électroniques.

Le confinement agit plus efficacement sur les minima de masses effectives élevées.



La **DOS** des systèmes **1D** présente des **singularités de Van Hove** (pics dans la DOS)



La **DOS** des systèmes **1D** présente des **singularités de Van Hove** (pics dans la DOS)

$L_r = 0.54 \text{ nm}$

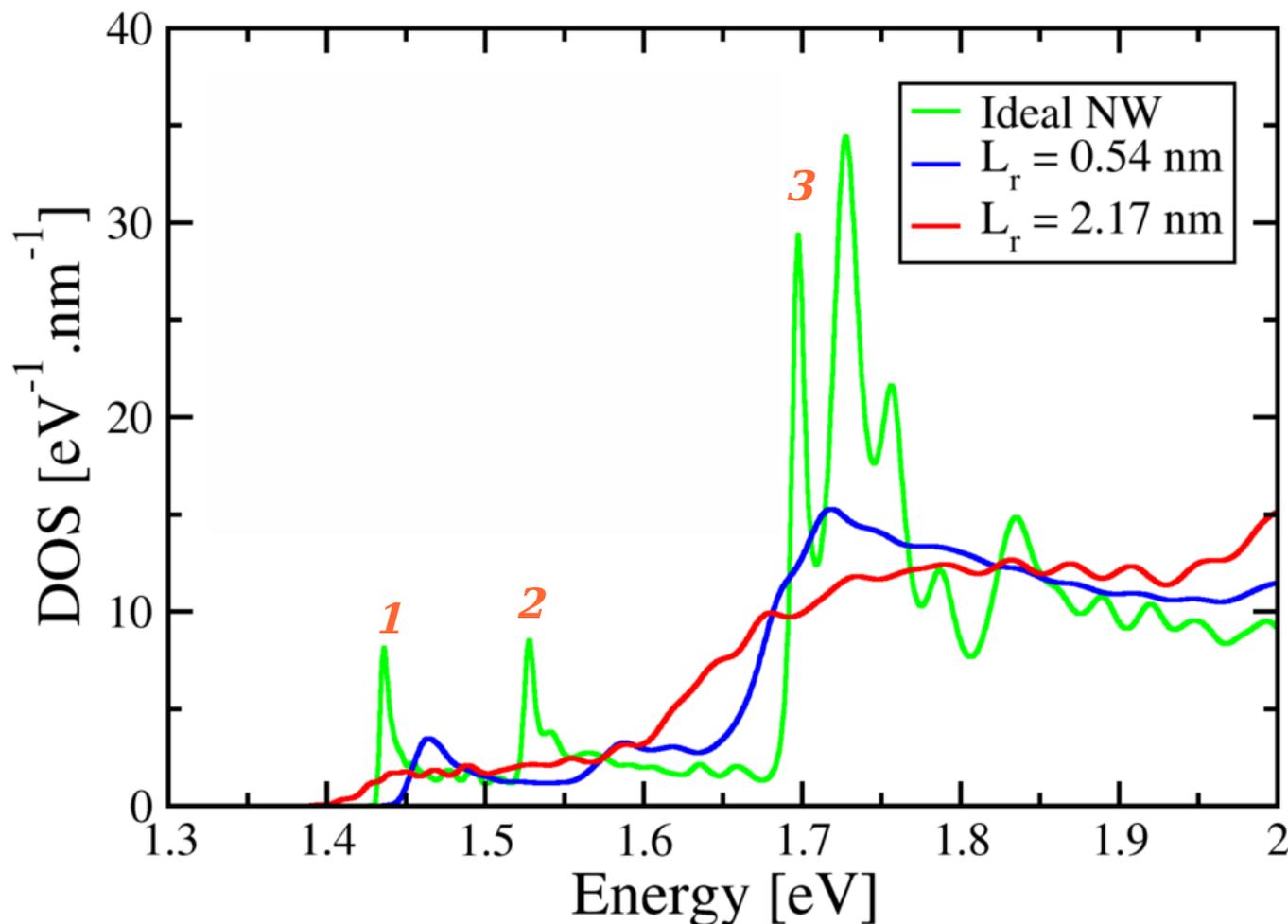
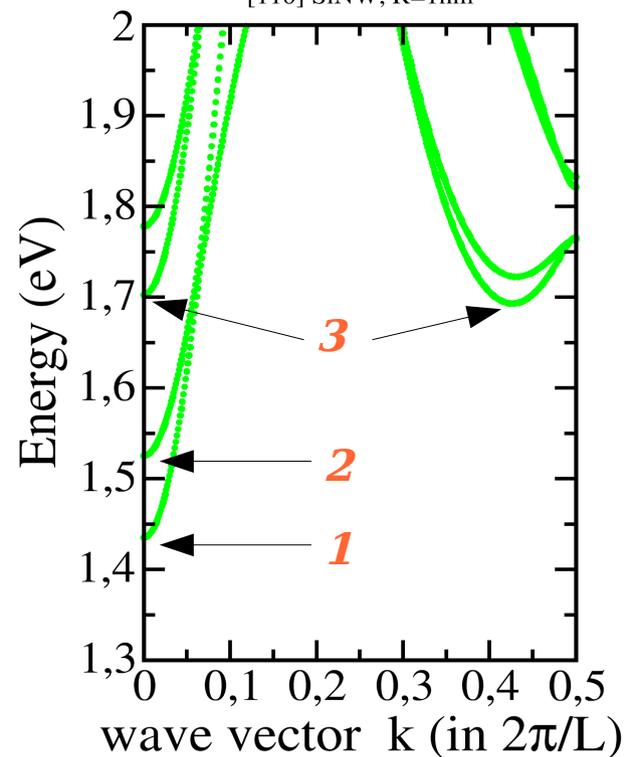


$L_r = 2.17 \text{ nm}$



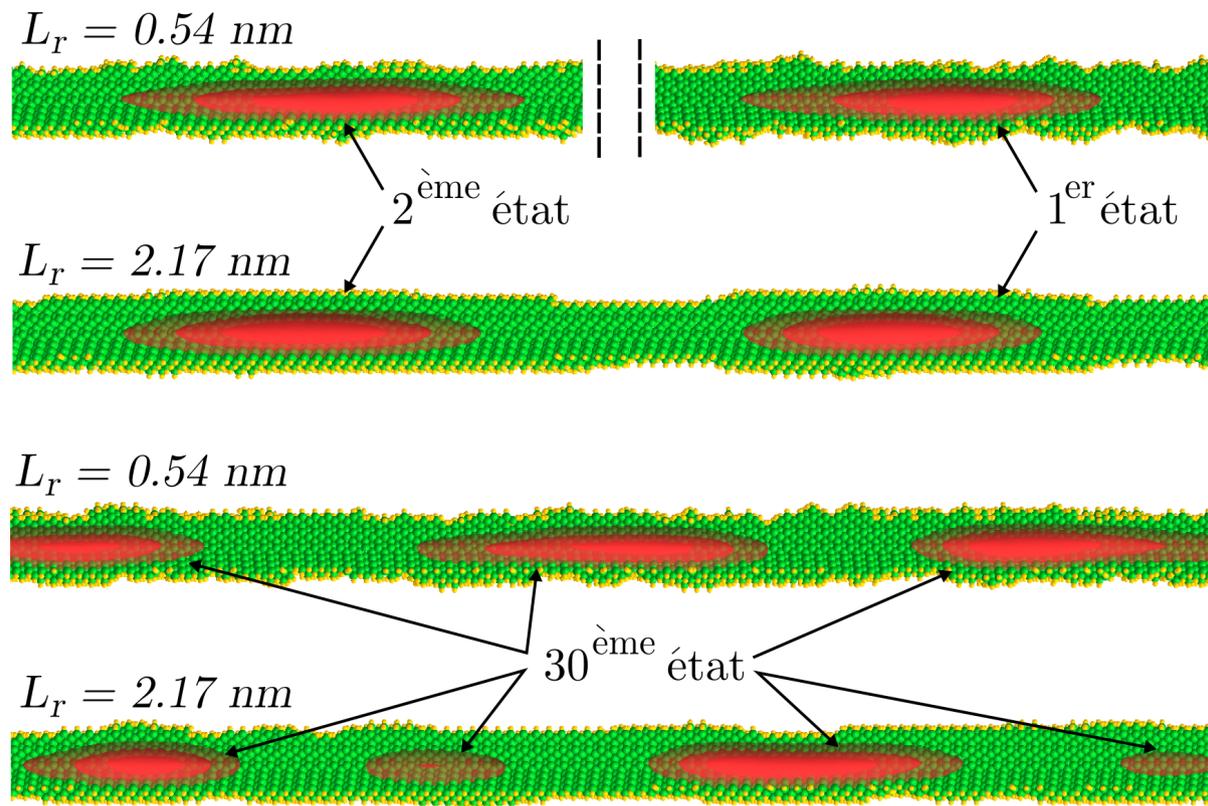
Dégradation des singularités de Van Hove.
Perte de la signature 1D dans la DOS.

Band structure
[110] SiNW, R=1nm



La **DOS** des systèmes **1D** présente des **singularités de Van Hove**.

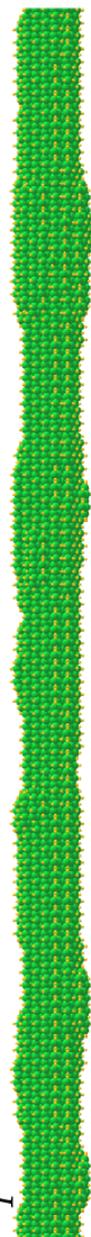
- **Mélange des bandes** électroniques opéré par la rugosité de surface.
- $L_r > 2\text{nm}$ la signature 1D du système disparaît.
- La rugosité de surface crée un grand nombre d'états localisés.



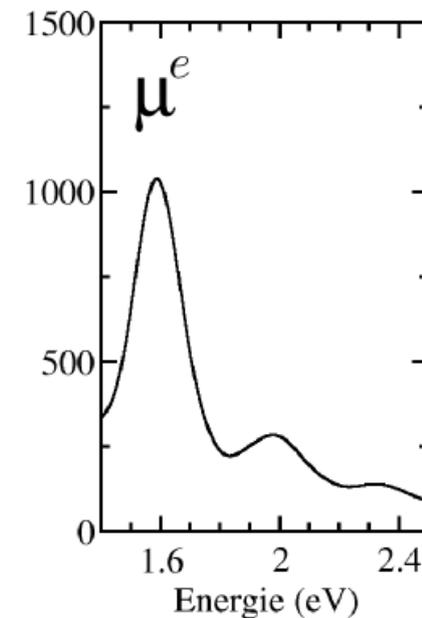
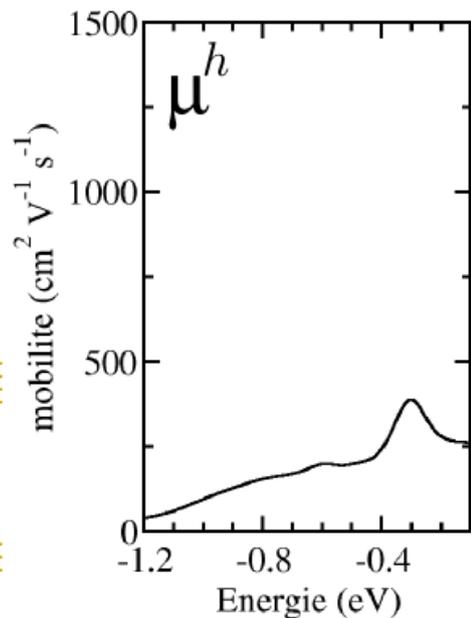
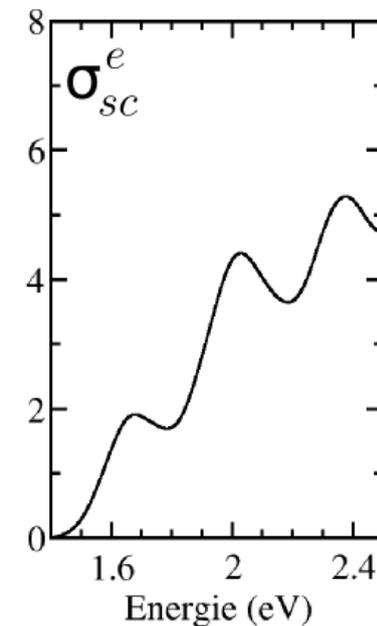
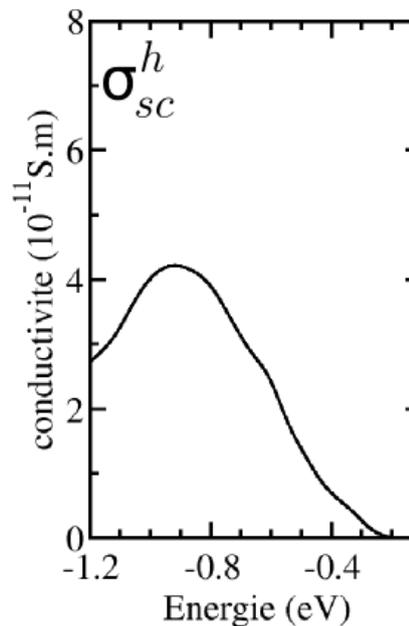
- La conductivité augmente progressivement avec l'énergie.

- La **mobilité** présente un **pic en bord de bande interdite** et diminue ensuite.

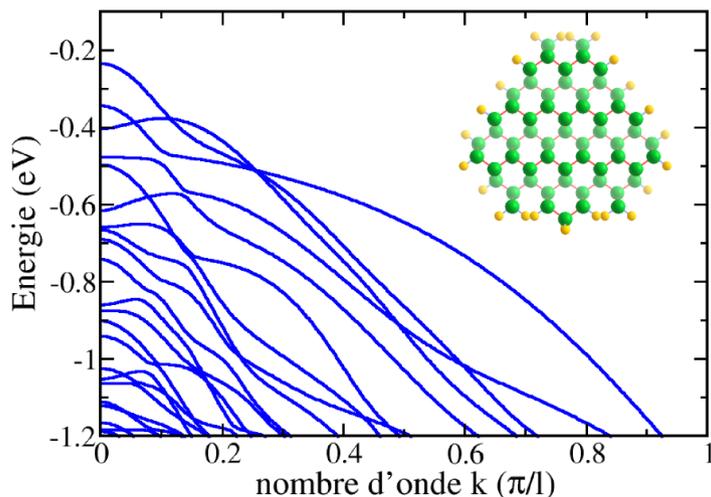
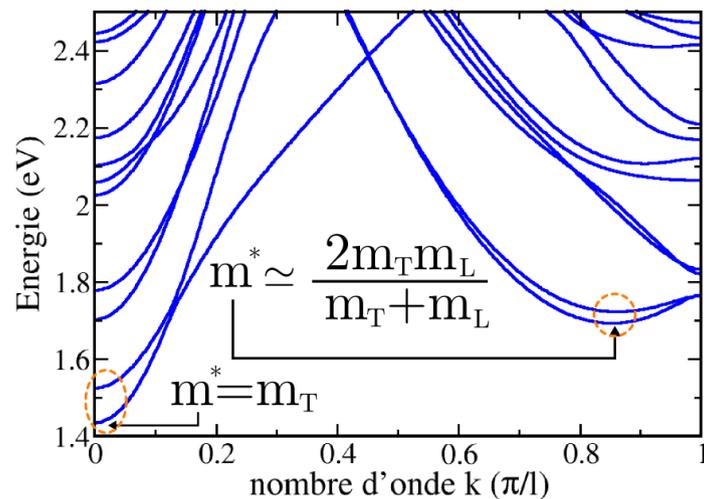
[110]



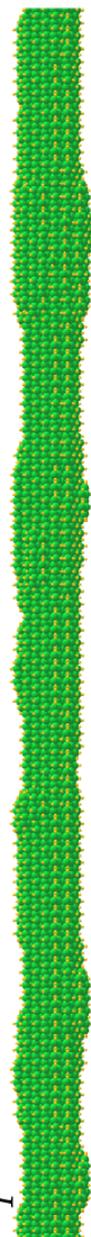
$L_T = 2.17 \text{ nm}$



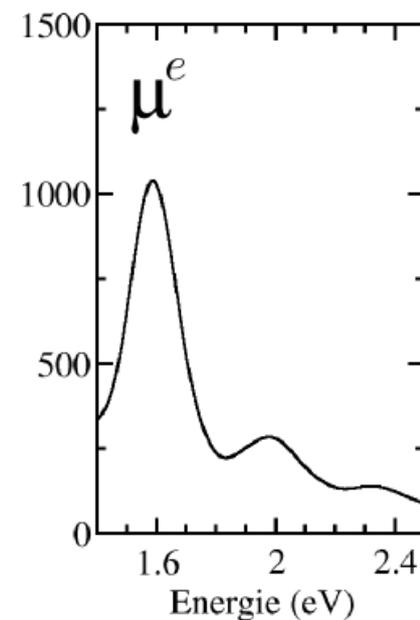
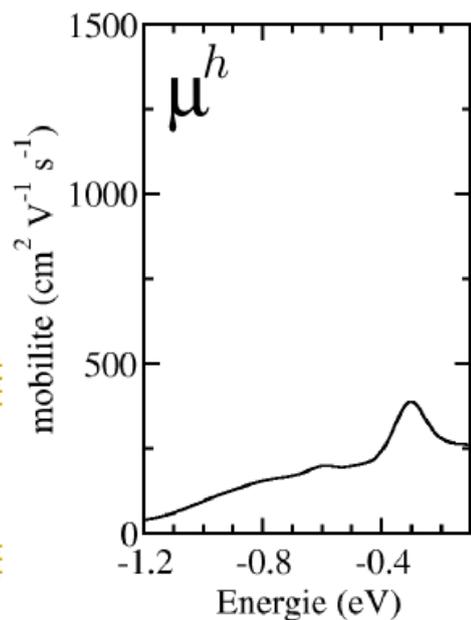
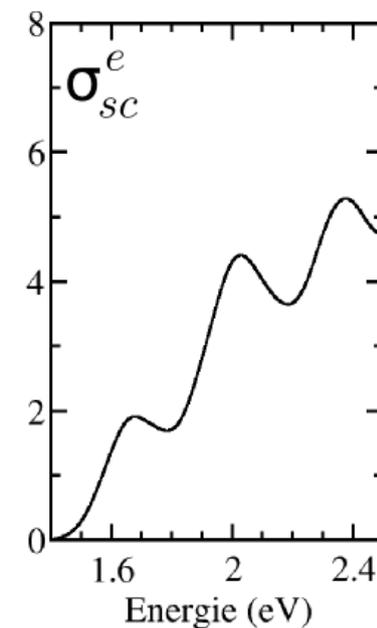
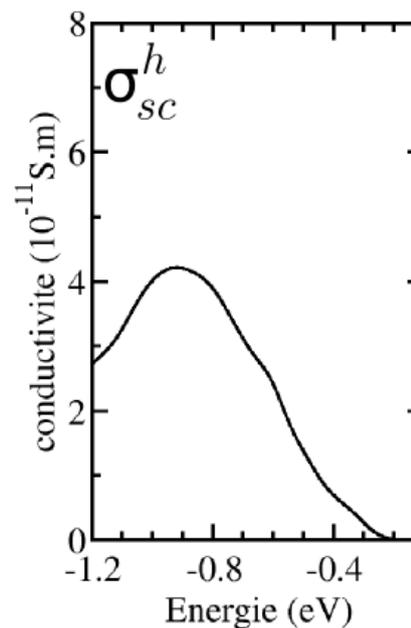
- La conductivité augmente progressivement avec l'énergie.
- La **mobilité** présente un **pic en bord de bande interdite** et diminue ensuite.



[110]

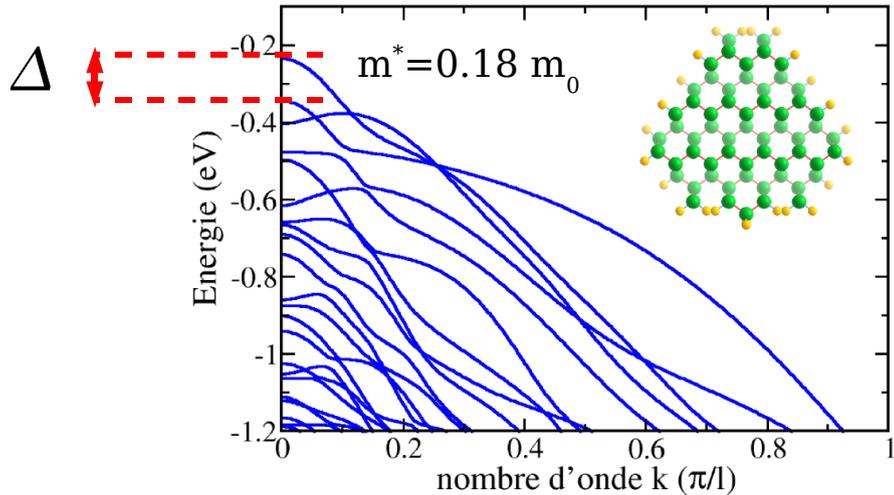
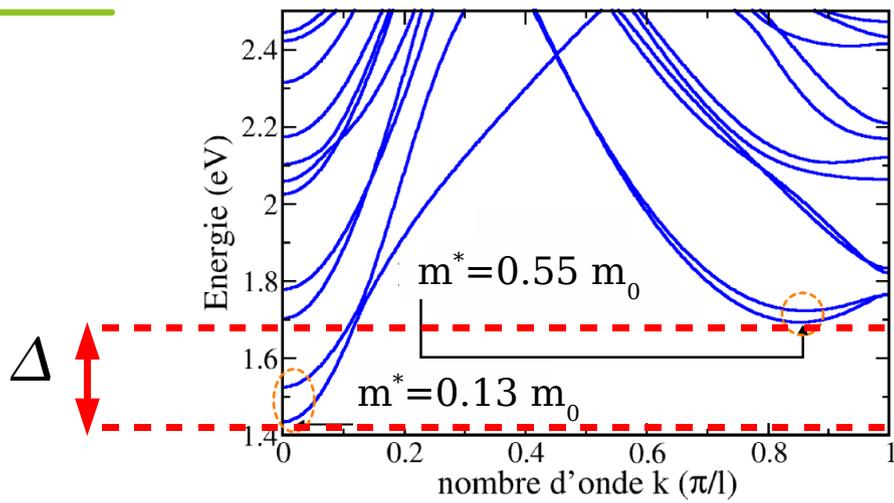


$L_T = 2.17 \text{ nm}$

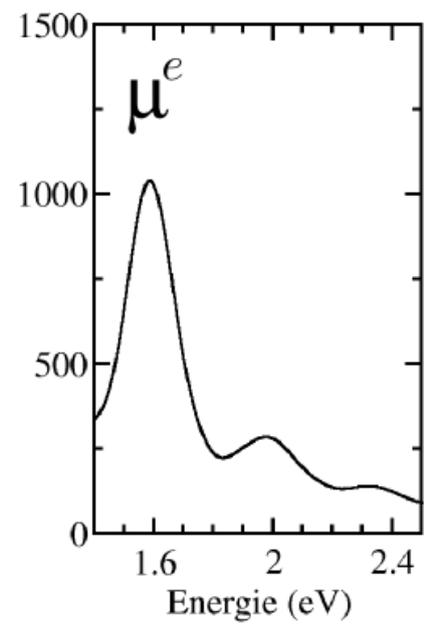
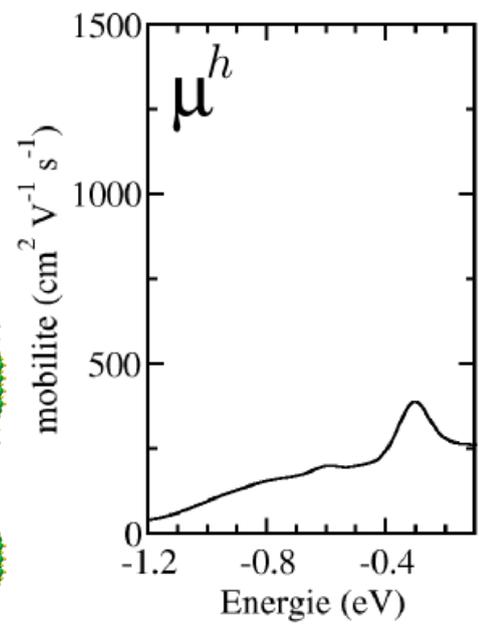
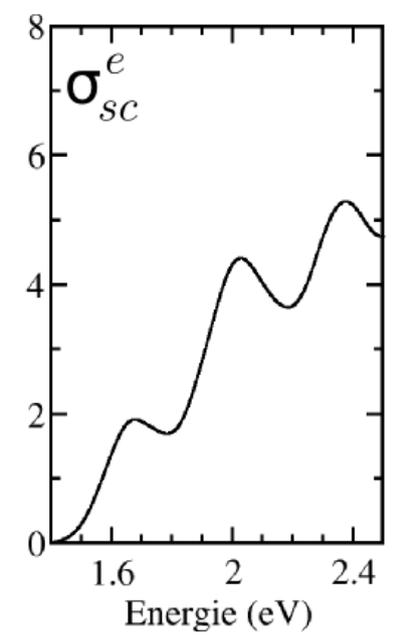
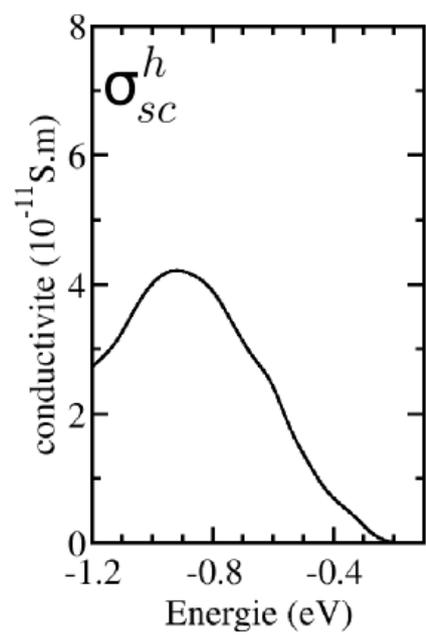
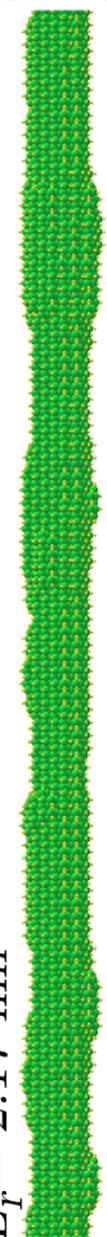


- La conductivité augmente progressivement avec l'énergie.

- La **mobilité** présente un **pic en bord de bande interdite** et diminue ensuite.

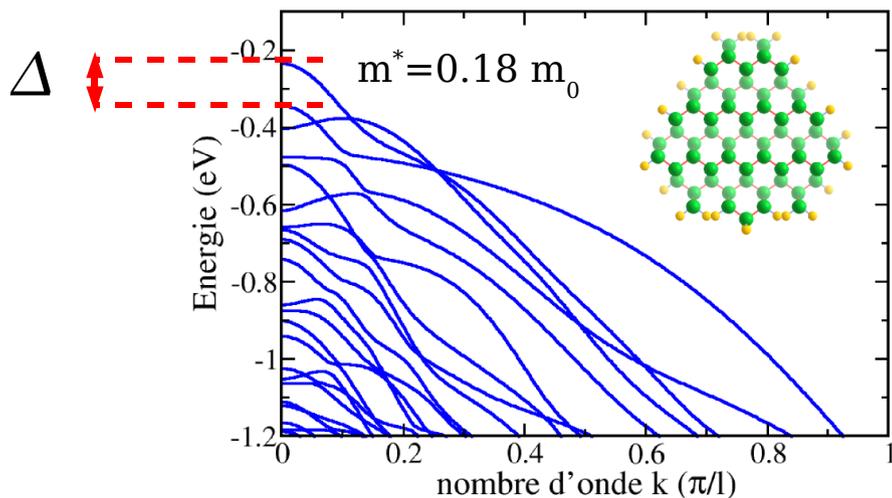
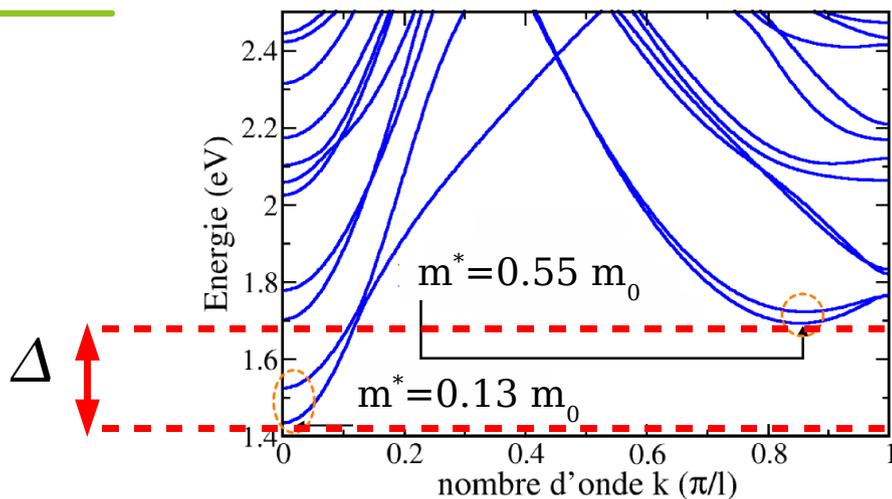


[110]

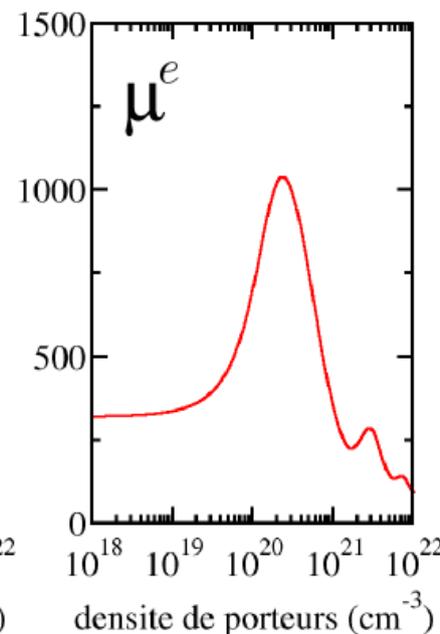
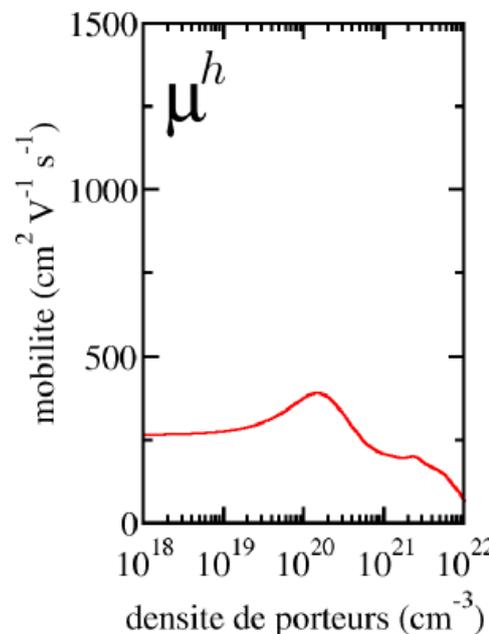
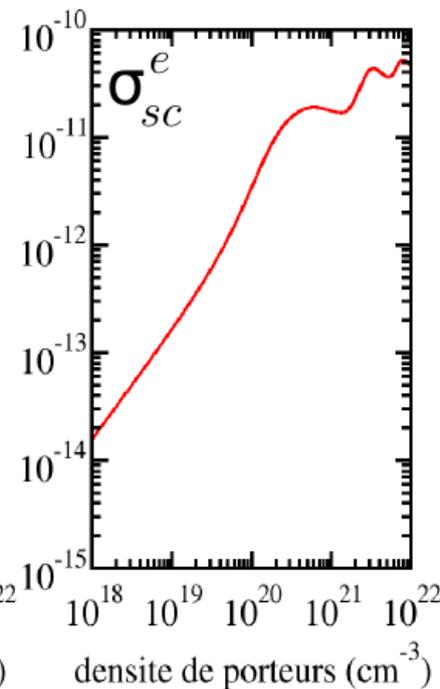
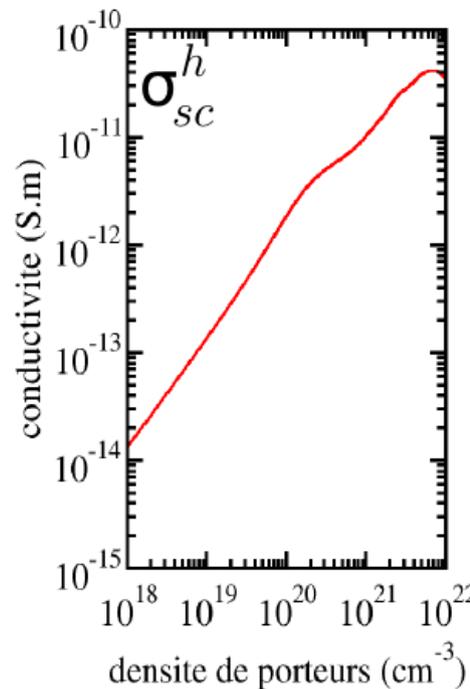
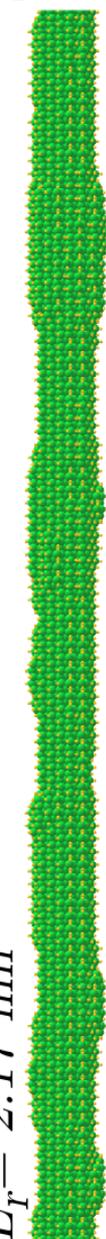


- La conductivité augmente progressivement avec l'énergie.

- La **mobilité** présente un **pic en bord de bande interdite** et diminue ensuite.

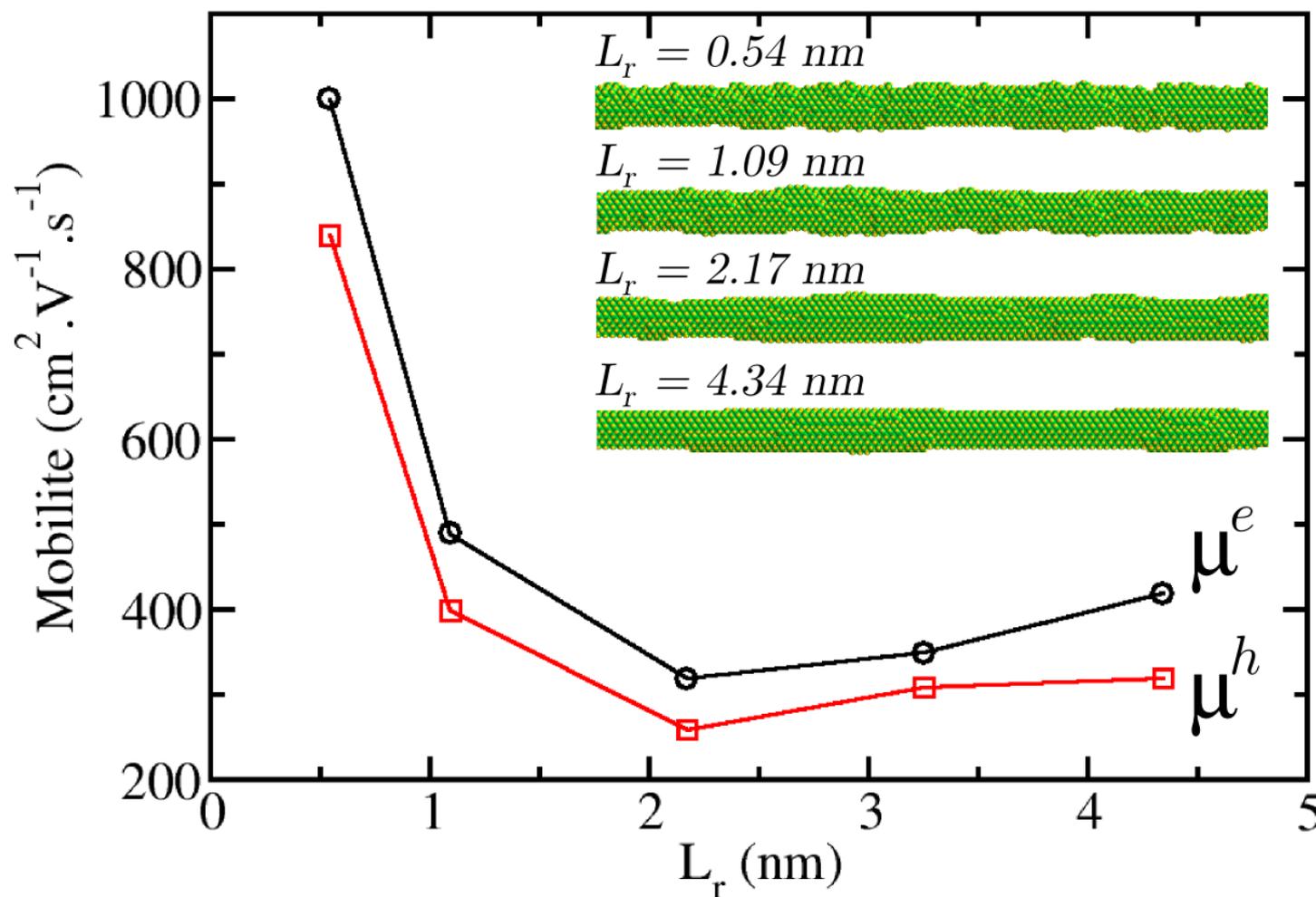


[110]



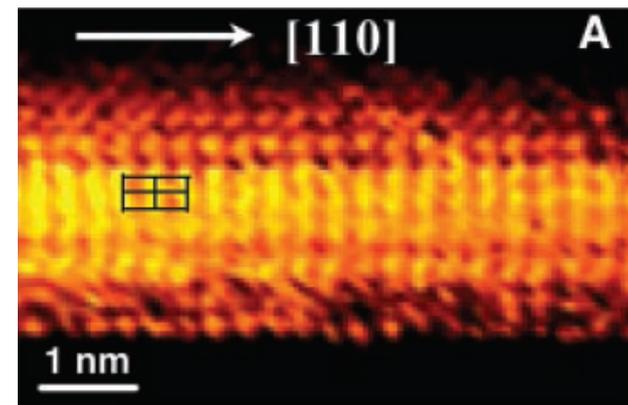
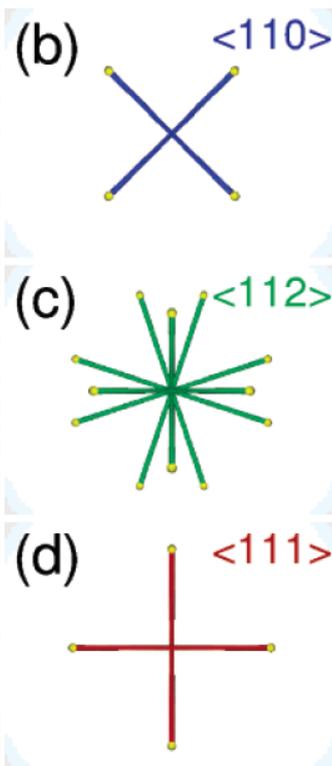
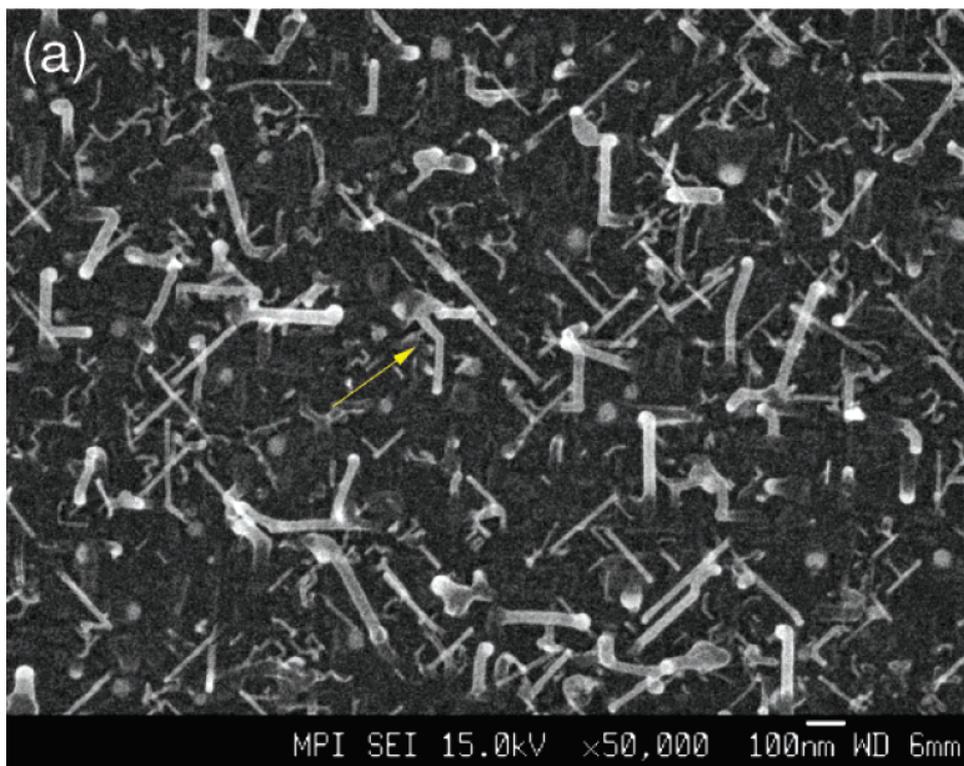
La longueur de corrélation (L_r) fixe la taille moyenne des plateaux de rugosité.

- Pour L_r **grand**, les **paquets d'ondes** sont **relativement étendus**.
- Pour L_r **moyen**, l'**extension moyenne** des paquets d'ondes **diminue**.
- Pour L_r **petit**, les **fluctuations** du rayon du nanofil sont trop **rapides** pour que les électrons se localisent efficacement.

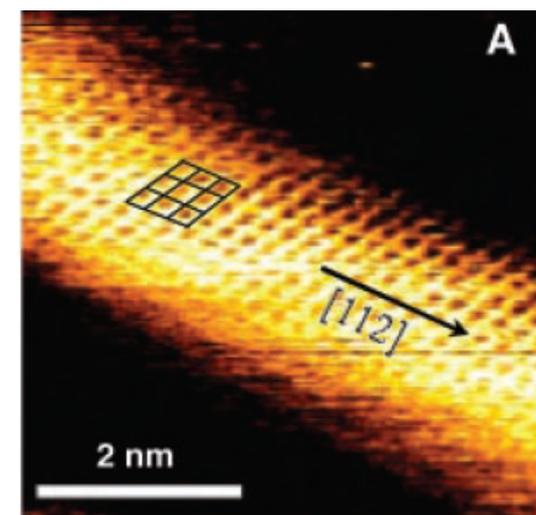


- Le silicium massif possède une structure électronique anisotrope.
- **Différentes orientations cristallines = Différentes structures électroniques.**
- On s'intéresse ici au nanofils orientés: **[100], [110], [111]**

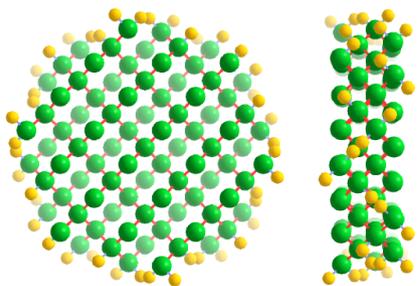
V. Schmidt, S. Senz and U. Gösele, Nano Lett. **5**, 931 (2005)



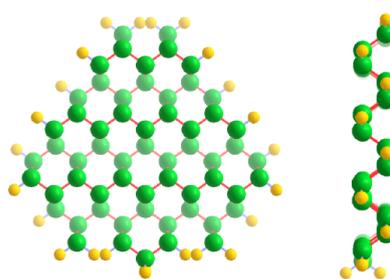
D. D. D. Ma, C. S. Lee, F. C. K. Au, S. Y. Tong and S. T. Lee, Science **299**, 1874 (2003)



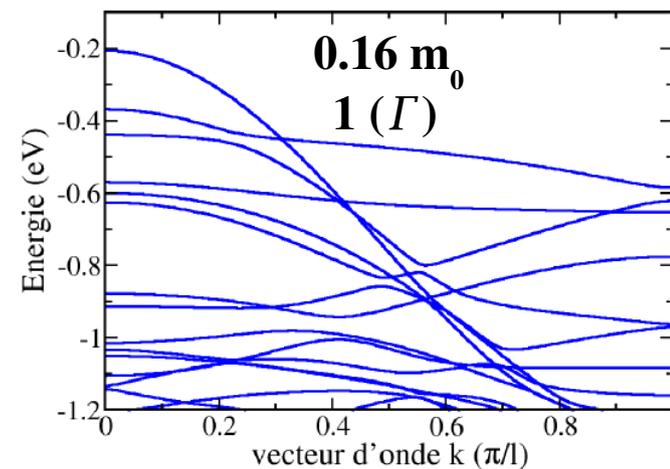
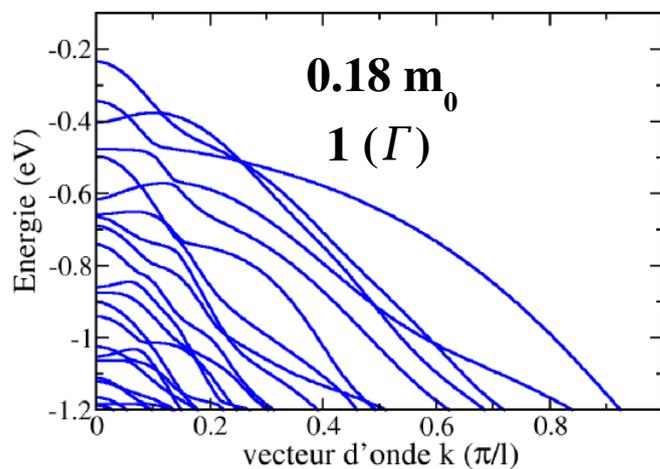
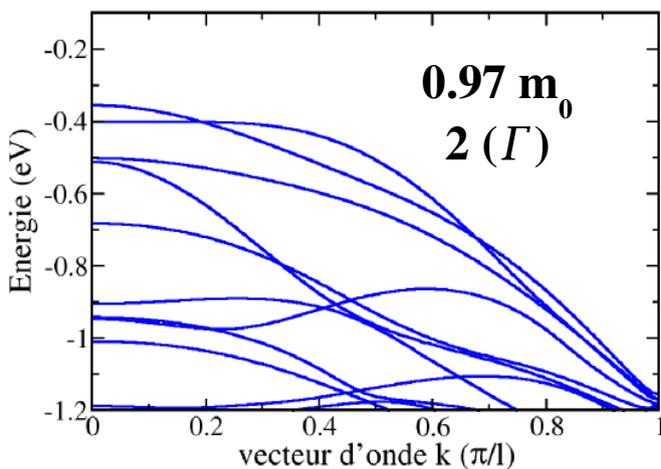
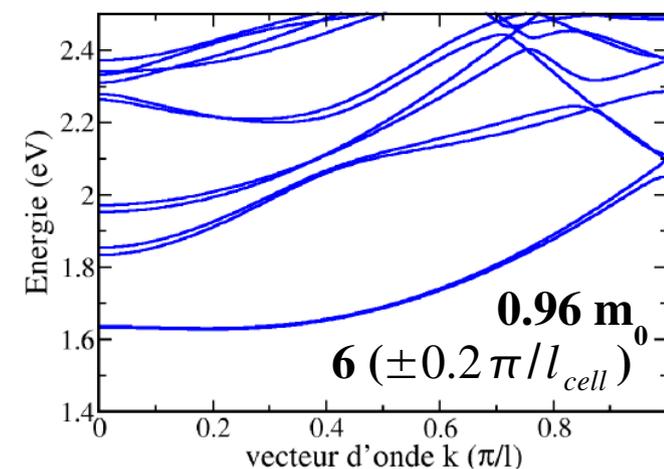
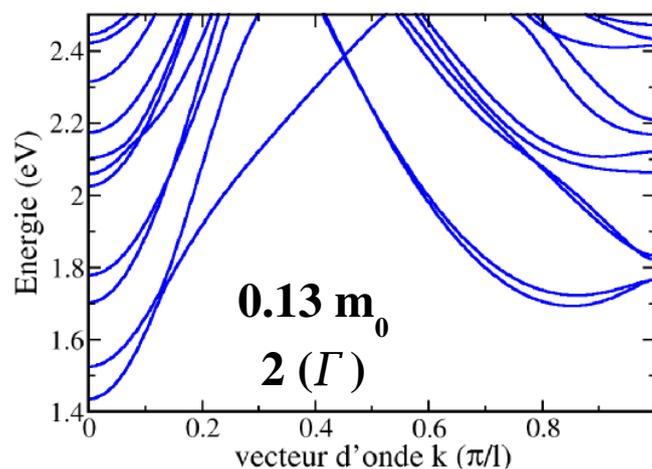
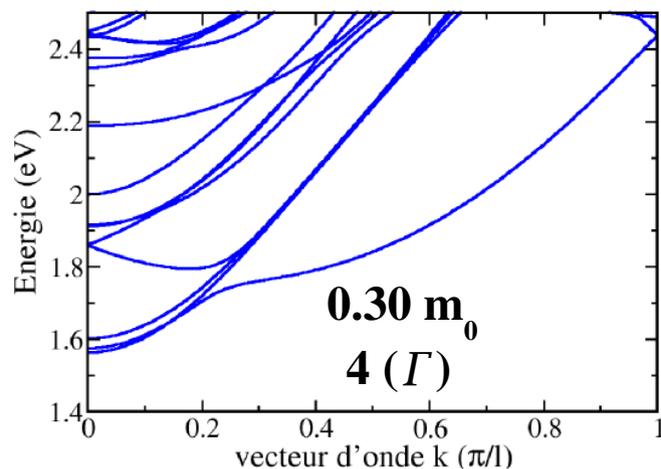
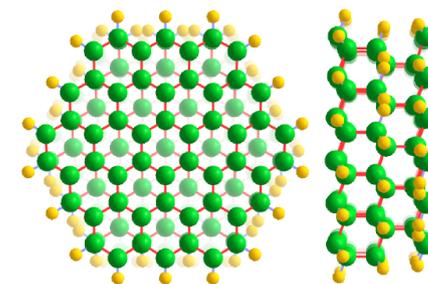
[100]



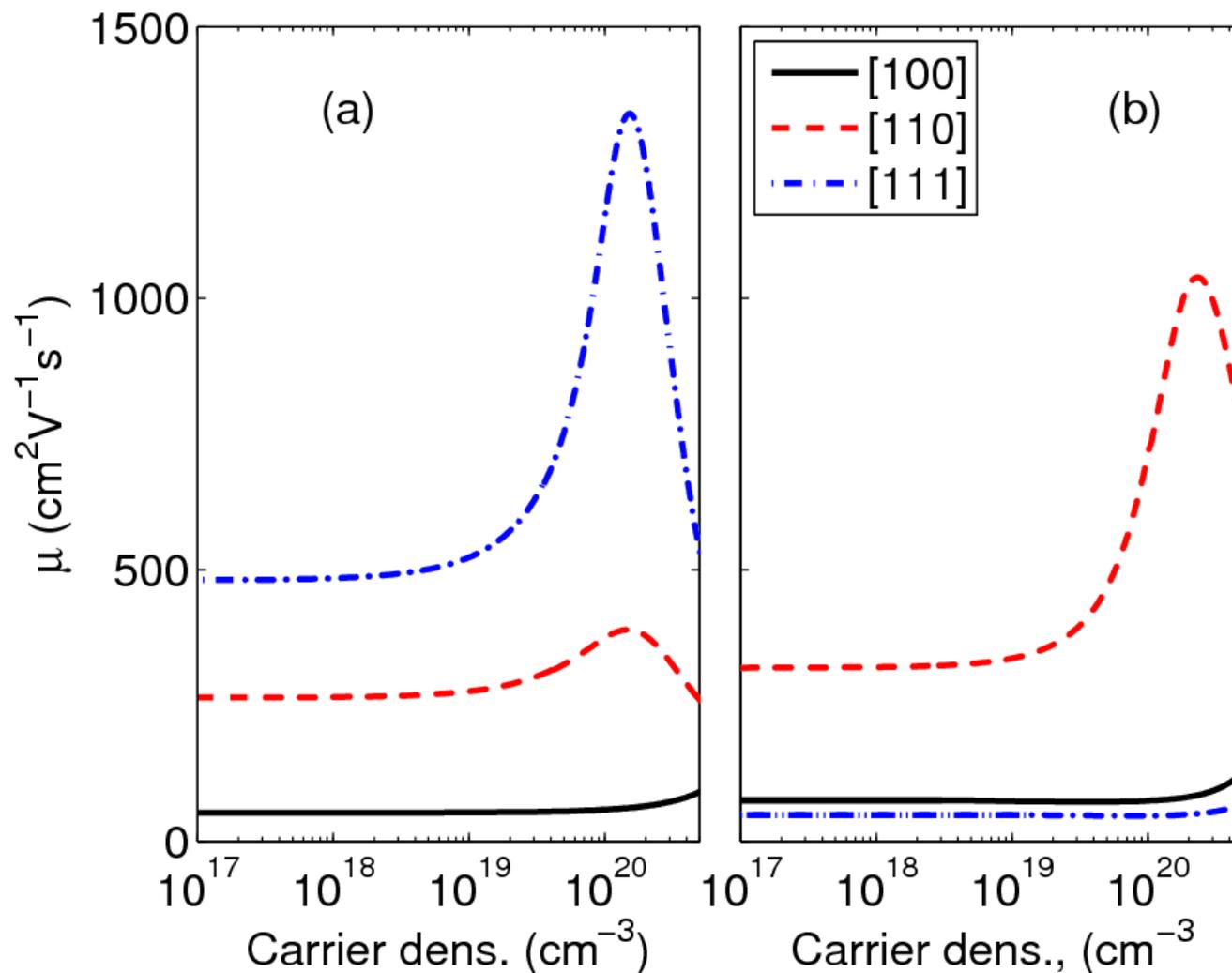
[110]



[111]



- La **mobilité des électrons** est plus élevée dans les nanofils orientés [110].
- La **mobilité des trous** est plus élevée dans les nanofils orientés [111].





1) Nano-objets:

Nanofils semiconducteurs.
Plans de Graphène.

2) Théorie et Simulation:

Méthode des liaisons fortes.
Approche du transport de Kubo-Greenwood.
Méthode de récursion.

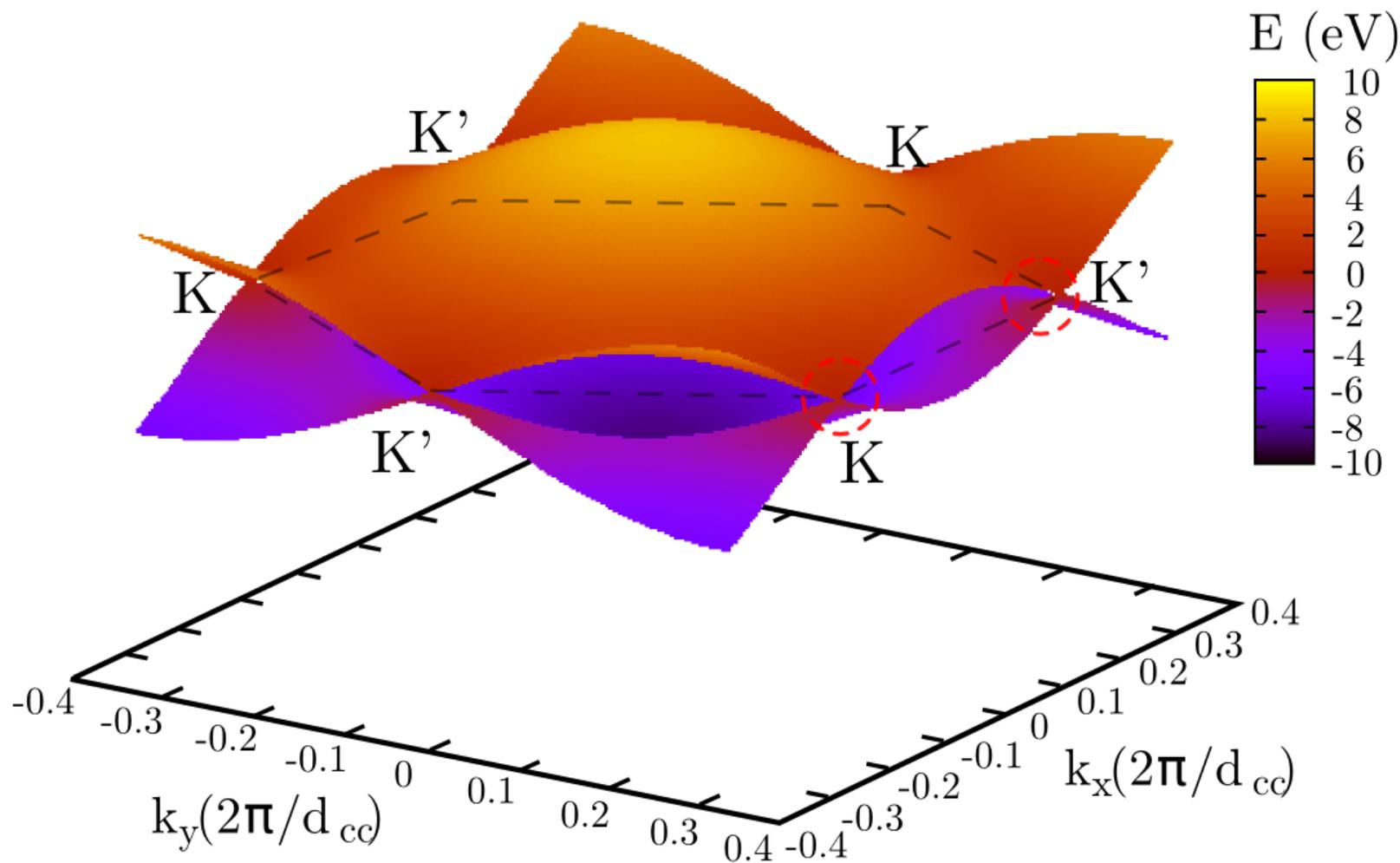
3) Nanofils de silicium rugueux:

Modèle de rugosité.
Structure électronique de nanofils de silicium.
Propriétés de transport de nanofils de silicium rugueux.

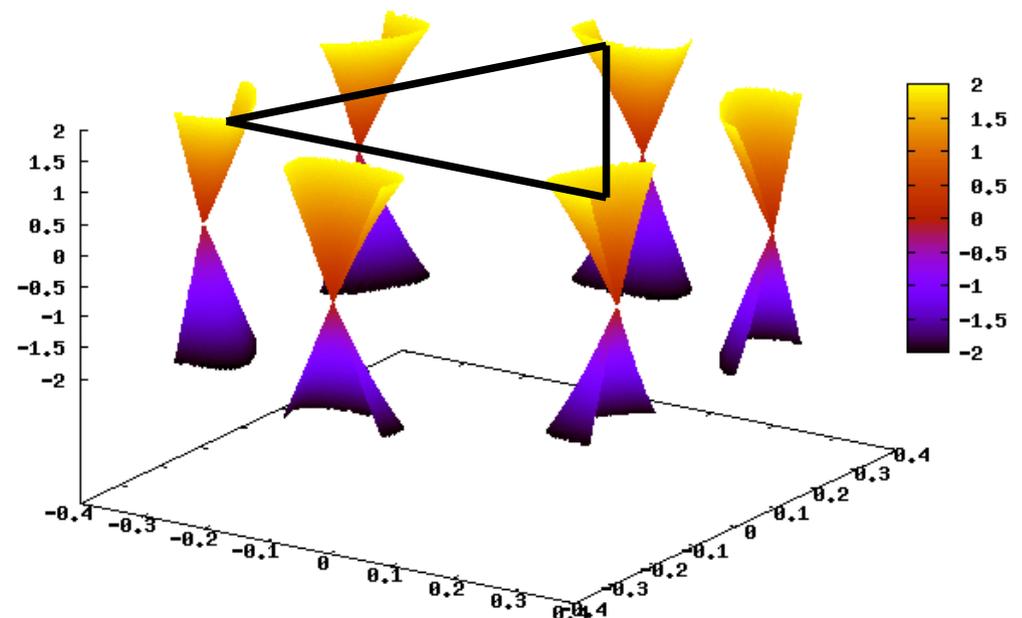
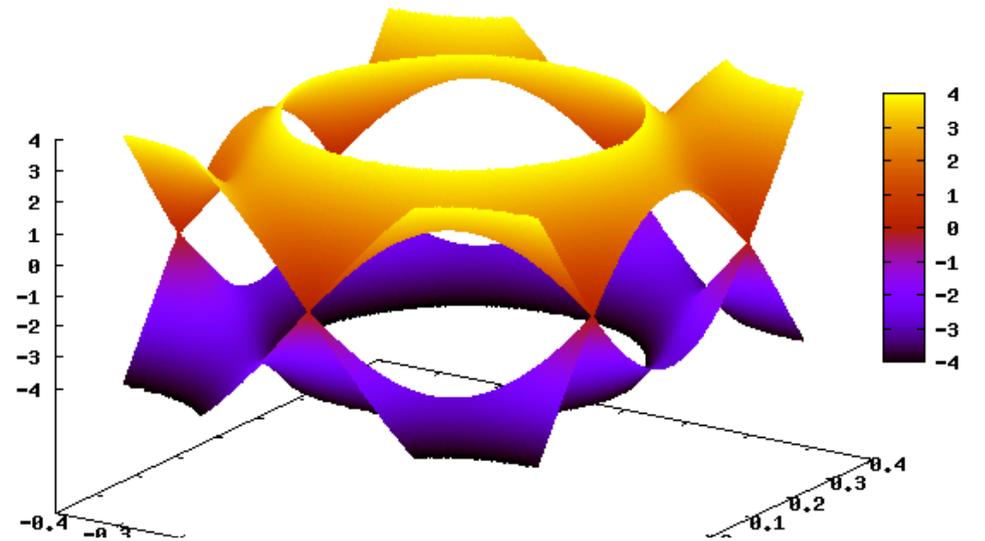
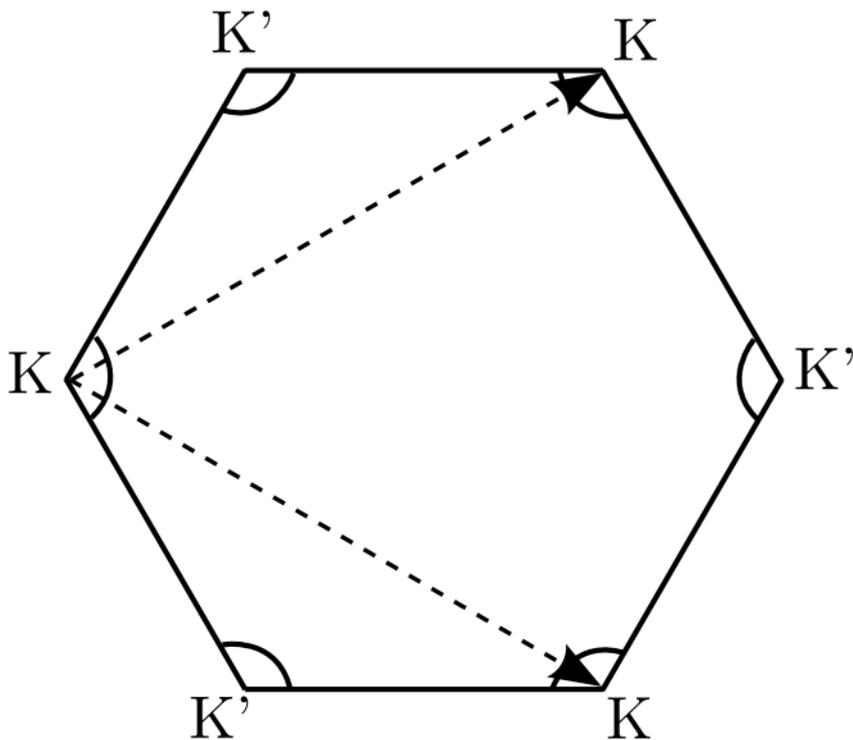
4) Plans de Graphène dopés bore:

Structure Electronique de plans de graphène.
Effets des dopants sur le transport dans les plans de graphène.

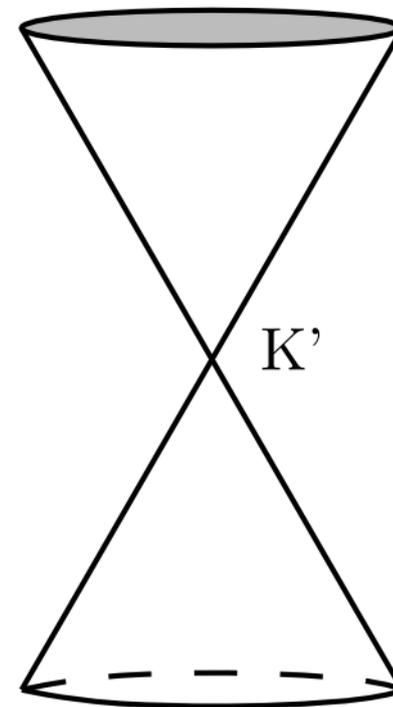
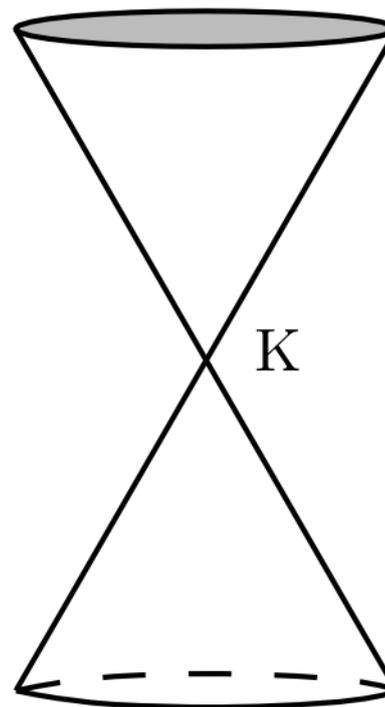
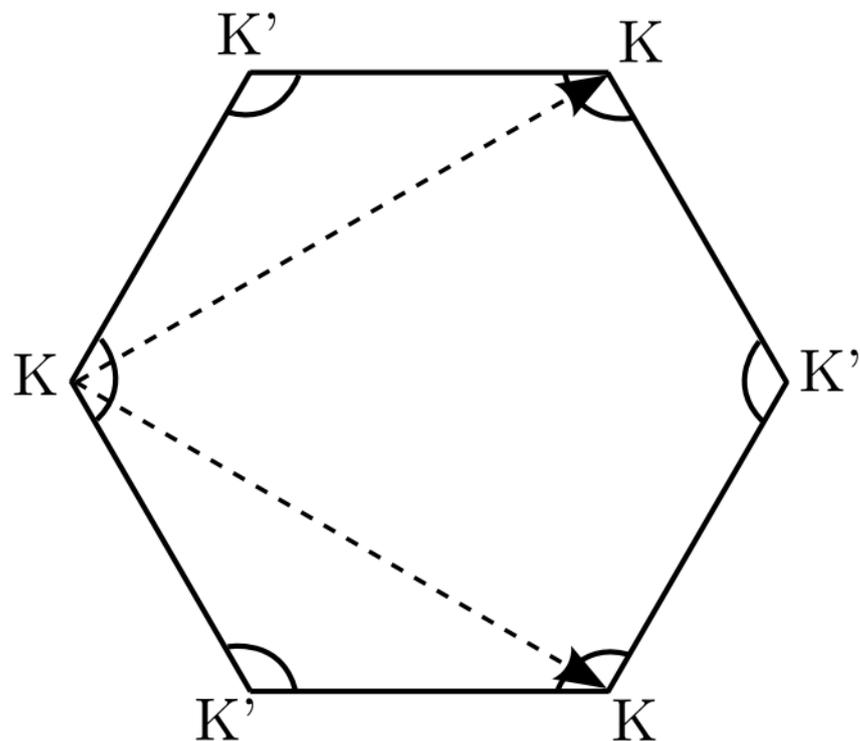
- Le graphène est un « **semi-métal** » = un semiconducteur à bande interdite nulle.
- Bandes de valence et de conduction se touchent aux points de Dirac K et K'.
- **Symétrie électrons/trous**



- Le graphène est un « **semi-métal** » = un semiconducteur à bande interdite nulle.
- Bandes de valence et de conduction se touchent aux points de Dirac K et K'.
- **Symétrie électrons/trous**
- Proche de K et K':

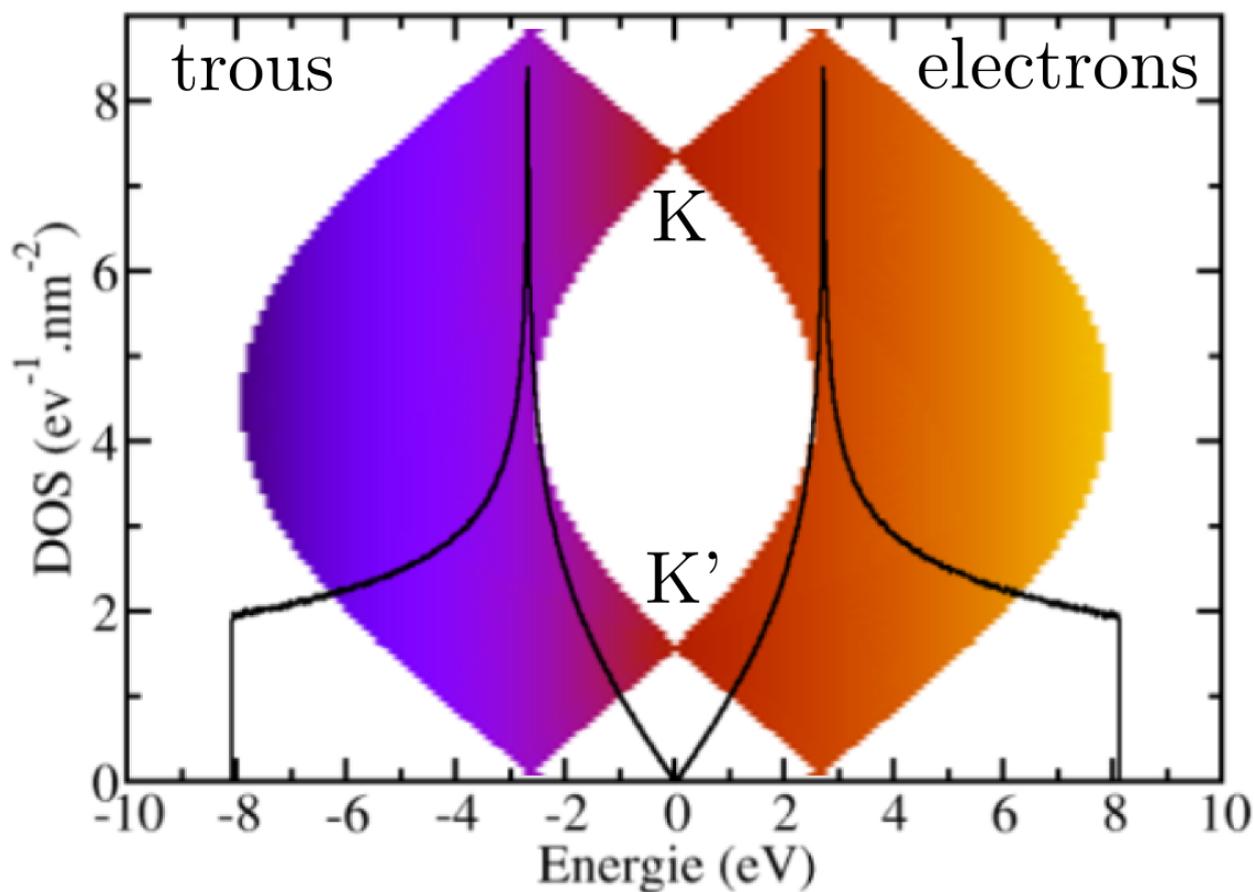


- Le graphène est un « **semi-métal** » = un semiconducteur à bande interdite nulle.
- Bandes de valence et de conduction se touchent aux points de Dirac K et K'.
- **Symétrie électrons/trous**
- Proche de K et K':
- **Isotropie**
- **Dispersion linéaire** (masse effective nulle).
- **Cône de Dirac, « fermions de Dirac sans masse ».**



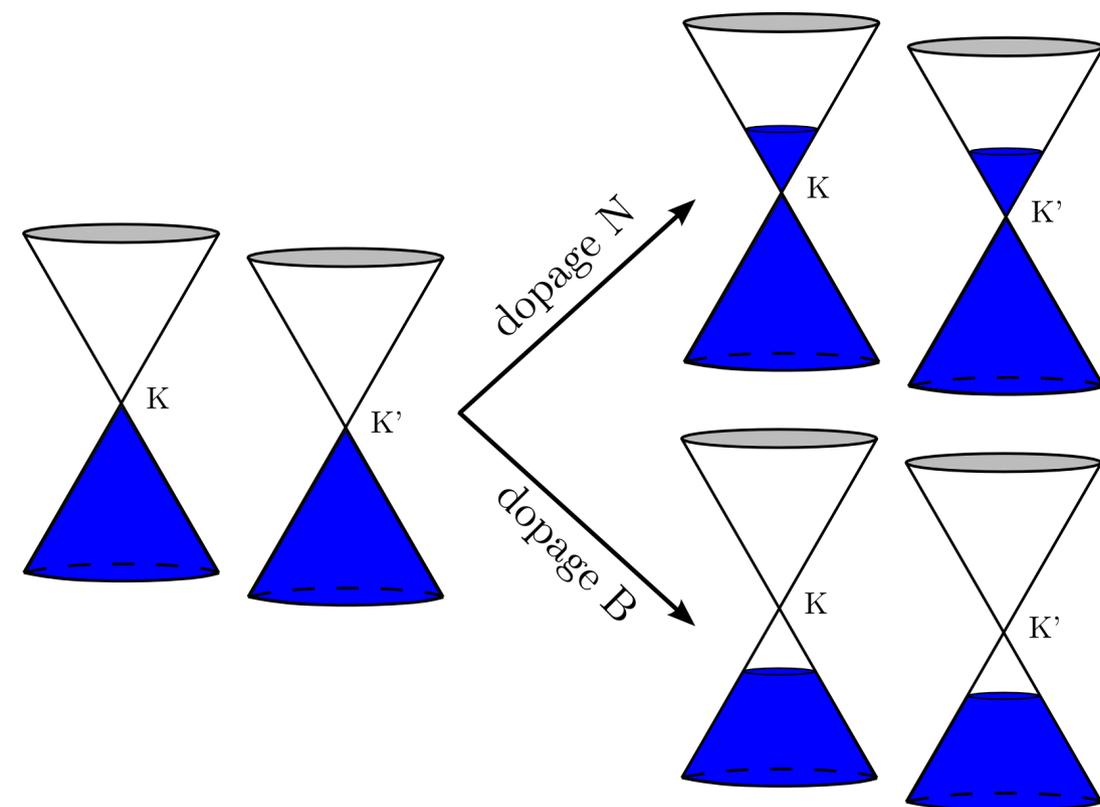
La densité d'états (DOS) est caractérisée par:

- 2 singularités de Van Hove
- 1 relation linéaire au voisinage des points de Dirac.

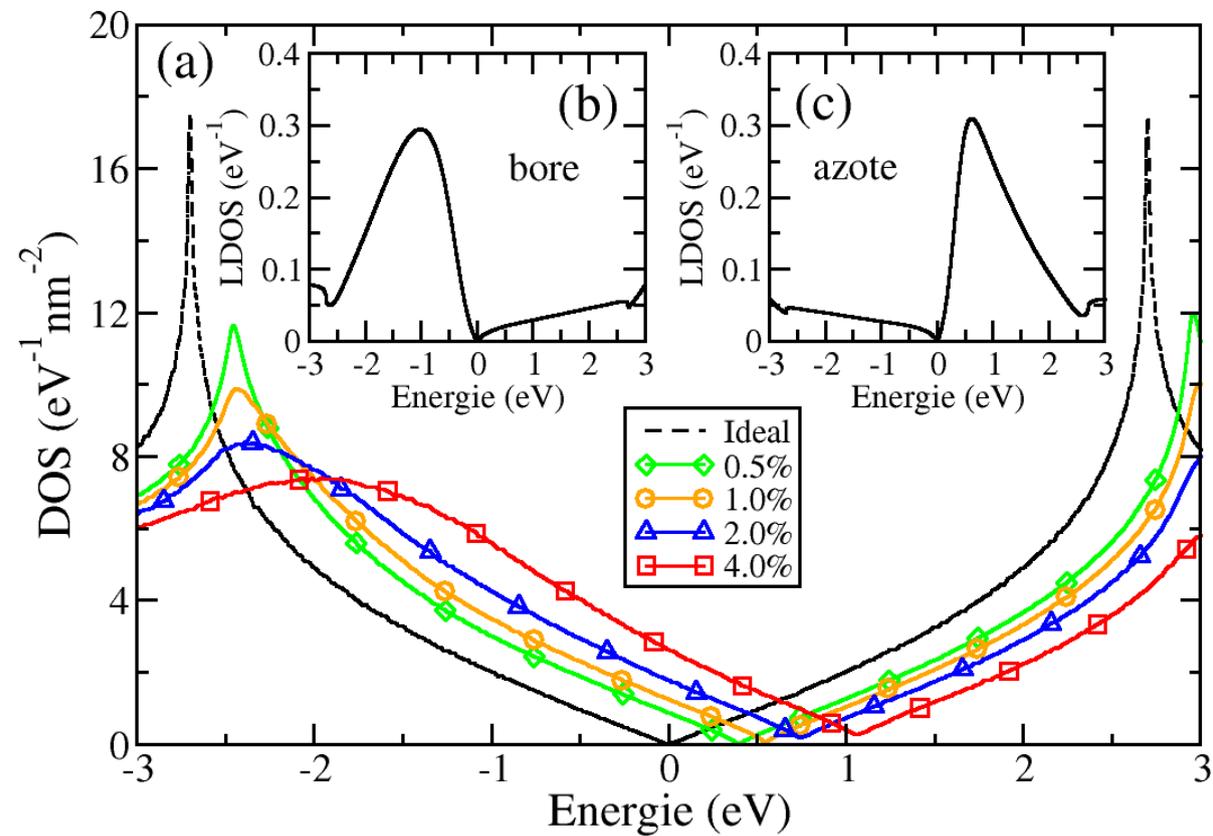
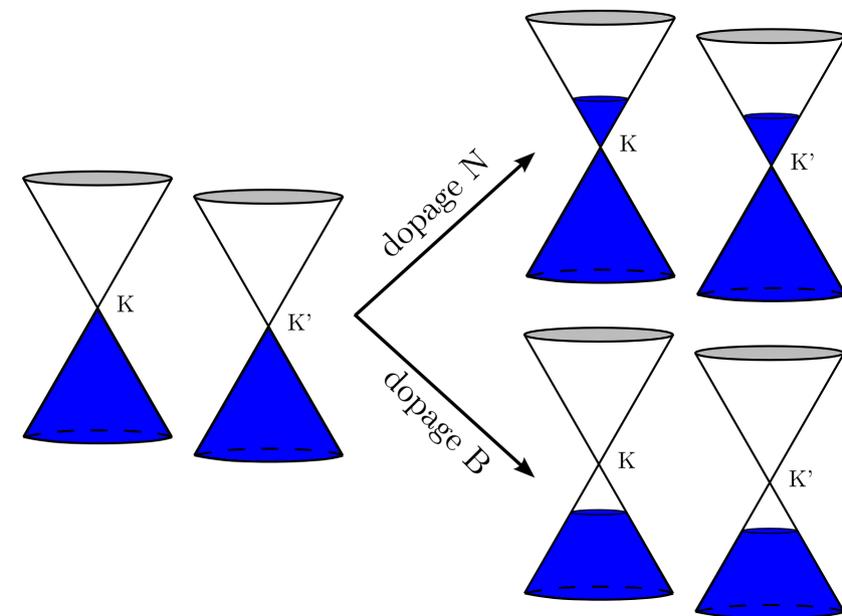


Plans de Graphène dopés bore / Propriétés de transport

Lorsqu'on dope le graphène on déplace le niveau de Fermi par rapport aux points de Dirac. Dans le cas d'un dopage au bore (B), le niveau de Fermi descend dans les bandes de valence.

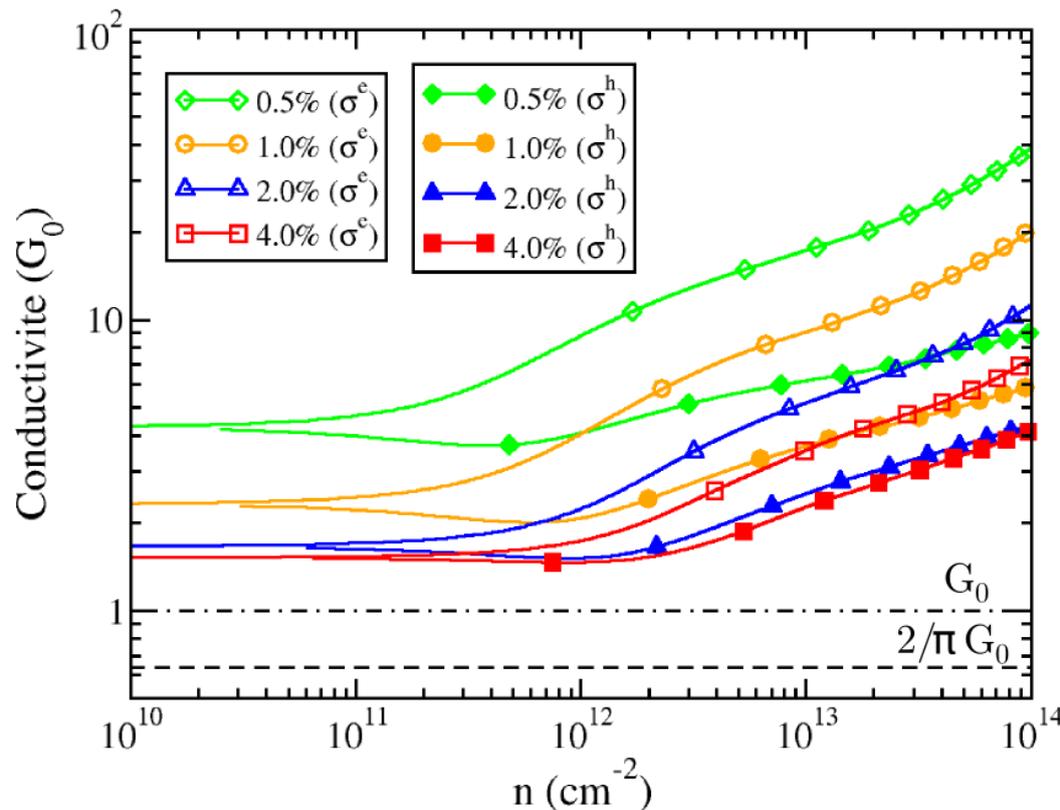
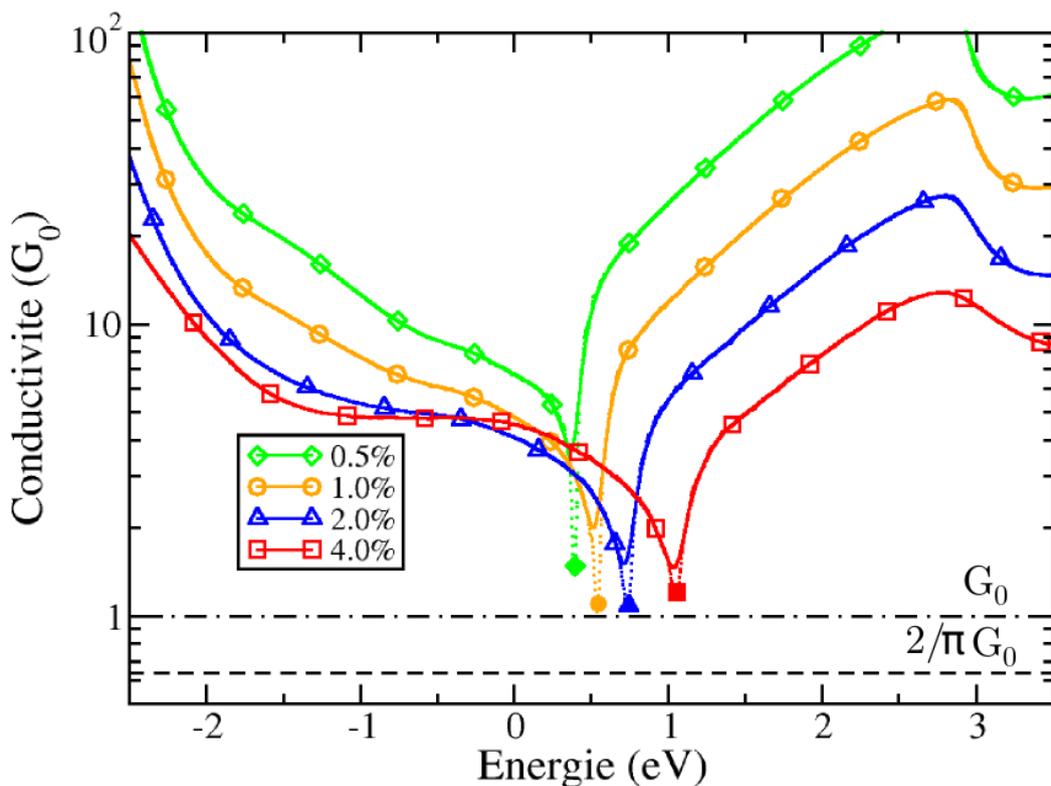


Décalage du **niveau de Fermi** \leftrightarrow **concentration de dopant**.
Asymétrie de la LDOS sur l'atome de bore.



- Observation d'un minimum de conductivité (σ_{min}) au niveau de l'énergie de Dirac.
- Une asymétrie se développe pour des densités de porteurs $n > [10^{11}-10^{12}]cm^{-2}$.
- L'existence d'un vrai minimum de conductivité est encore en plein débat.

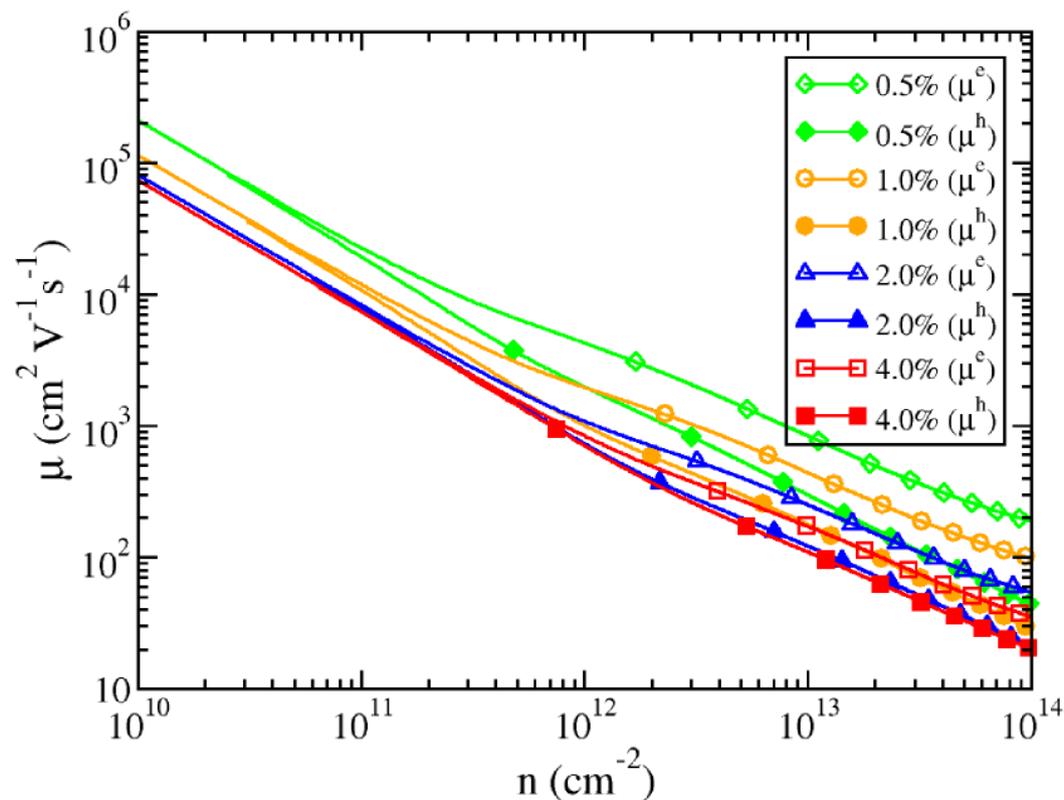
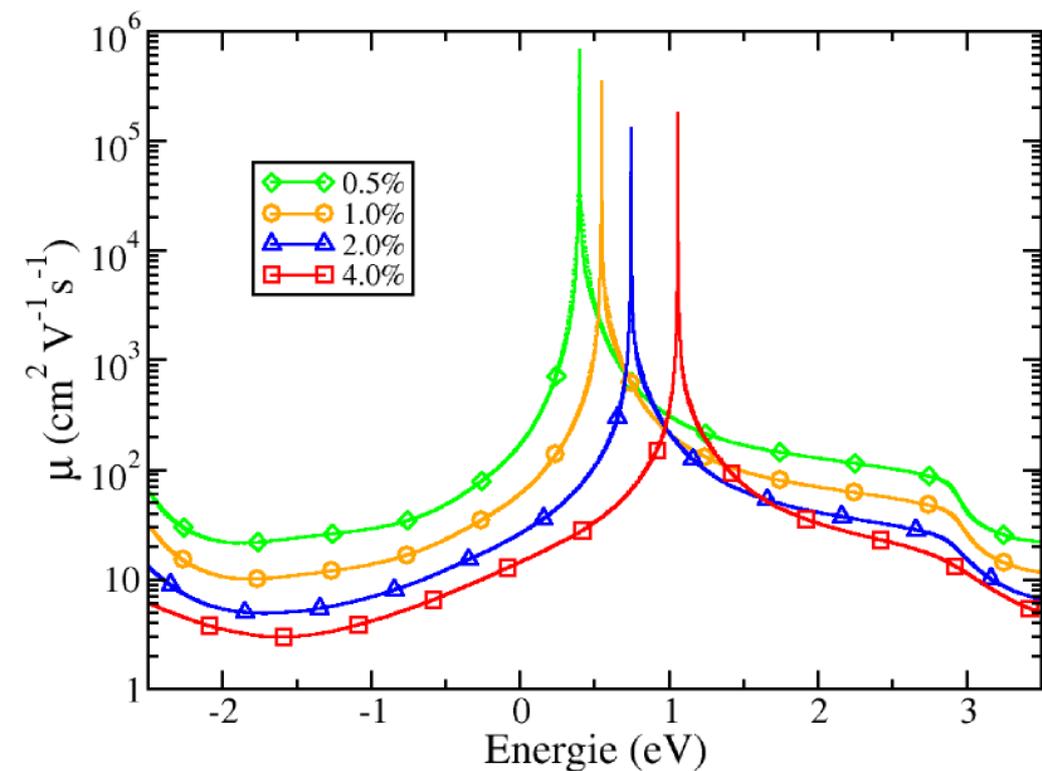
Dans cette étude, la conductivité (0K) ne semble pas pouvoir prendre des valeurs plus petites que $1G_0$, mais avec un désordre d'Anderson on obtient $2/\pi G_0$



- La mobilité à température ambiante (300K) diverge au niveau de l'énergie de Dirac.
- Une asymétrie électrons/trous se développe également pour des densités de porteurs $n > [10^{11}-10^{12}] \text{cm}^{-2}$.
- Pour $n=10^{12} \text{cm}^{-2}$ et pour une concentration en bore égale à 0.5%, on obtient:

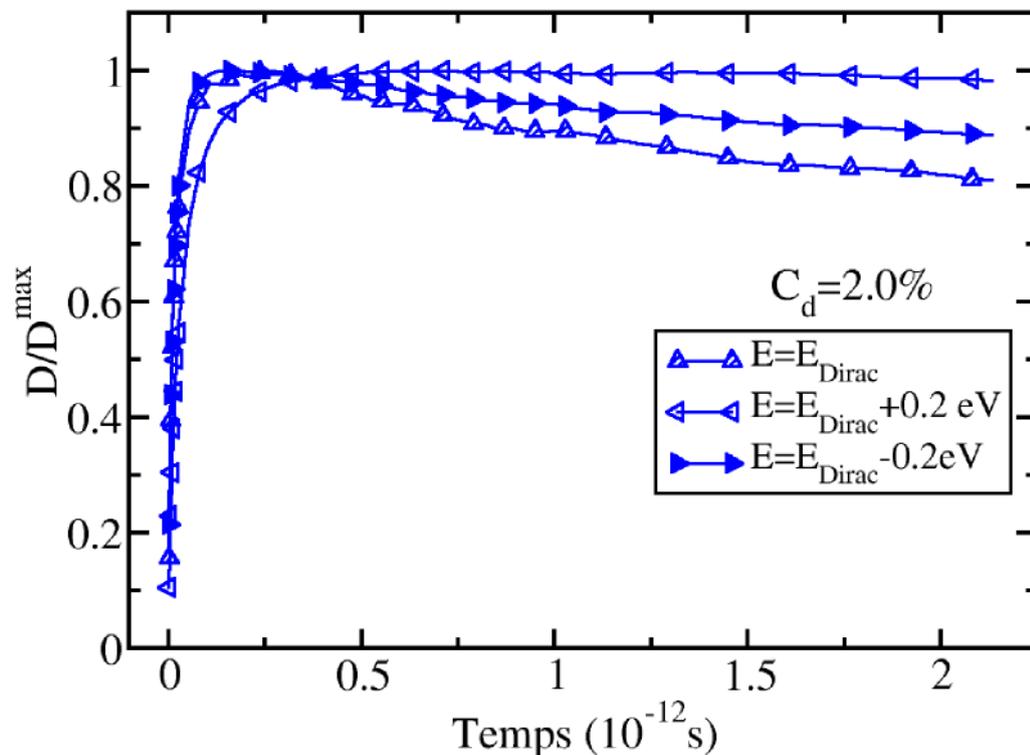
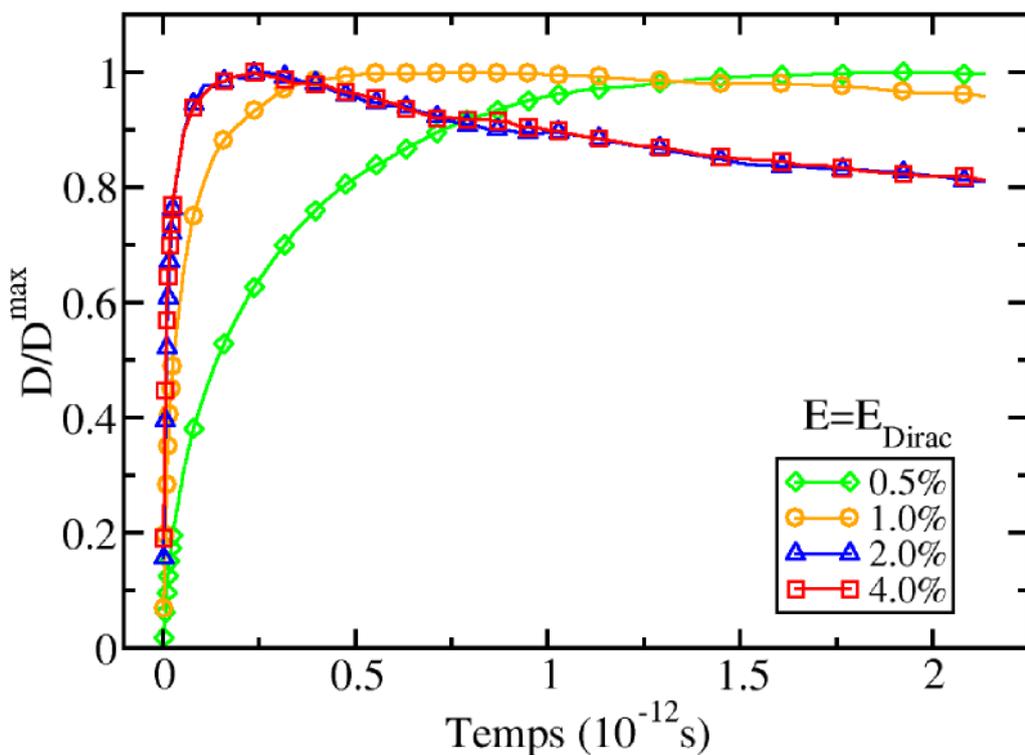
$$\mu_{0.5\%}^e = 4250 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\mu_{0.5\%}^h = 1970 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$



Plans de Graphène dopés bore / Propriétés de transport

- Dans le cas du graphène dopé bore, l'étude de la diffusivité permet de montrer qu'un **régime de localisation s'établit au temps long**.
L'asymétrie électrons/trous est également observable sur la diffusivité.
On constate que **les trous semblent se localiser plus efficacement que les électrons**.



Les nanofils de silicium et les plans de graphène sont deux types de nano-objets extrêmement prometteur pour la nanoélectronique mais si on ne peut pas encore parler d'industrialisation.

L'étude du transport mésoscopique dans ces nano-objets a permis de mettre en évidence les richesses et les possibilités liées à leur structure électronique.

En étudiant l'impact de la rugosité de surface sur le transport électronique dans les nanofils de silicium, nous avons pu comprendre l'importance de l'analyse de la structure de bande pour interpréter par exemple les performances en terme de mobilité. En particulier le confinement quantique qui existe dans ces systèmes permet d'obtenir un transport monobande sur une fenêtre d'énergie assez large.

L'étude du transport dans les plans de graphène 2D dopés au bore a permis d'une part d'étayer certains résultats expérimentaux, notamment l'observation d'un minimum de conductivité à l'énergie de Dirac et de fortes mobilités qui divergent à cette même énergie, et d'autre part de montrer une asymétrie entre le transport d'électrons et de trous. De plus l'observation de phénomènes de localisation apporte un résultat supplémentaire dans le débat actuel autour de la nature du transport dans le graphène.

L'utilisation du formalisme de Kubo-Greenwood développé en espace réel dans le cadre des liaisons fortes est efficace et permet d'accéder aux observables fondamentales du transport. De plus cette approche est complémentaire de l'approche de Landauer-Büttiker.



Remerciements

Merci à:



Yann-Michel Niquet
Stephan Roche
Thierry Barron
Frédéric Lançon
Thierry Deutsch
Pascal Pochet
Damien Caliste
Thomas Jourdan
Emmanuel Arras
Dulce Camacho Mojica
Martin Persson
Luigi Genovese
Ivetta Slipukhina
Konstantin Rushchanskii
Anders Bergman

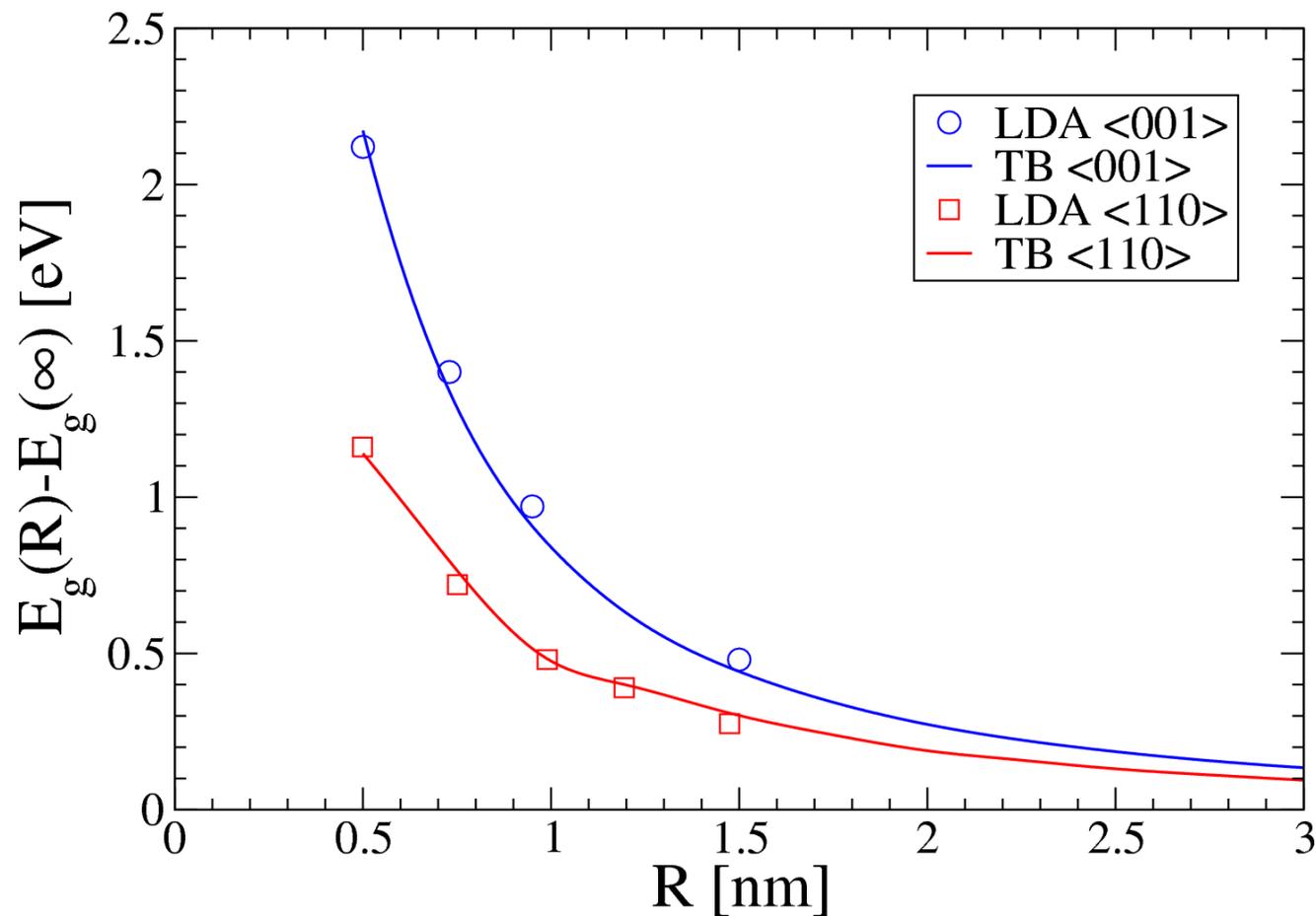
François Triozon
Xavier Blase
Rémi Avriller
Blanca Biel
Alejandro Lopez-Bezanilla
Ivana Savic
Natalio Mingo
Shidong Wang
Martien Den Hertog

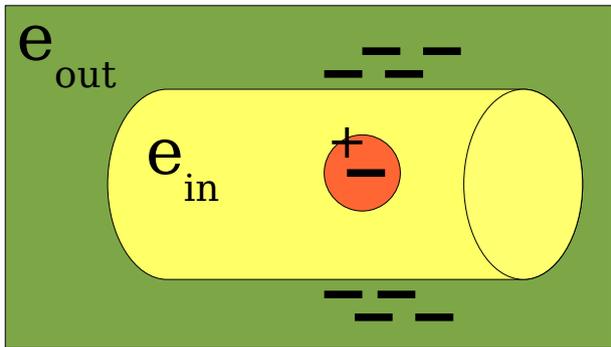
Ju, Emilie, Ben, Pam,
Sylvain, Julie, Chloé, Stef,
Nico, Faustine, Coco...

Merci à tous

pour votre attention

Tight-binding (TB) vs *ab initio* (LDA) bangaps



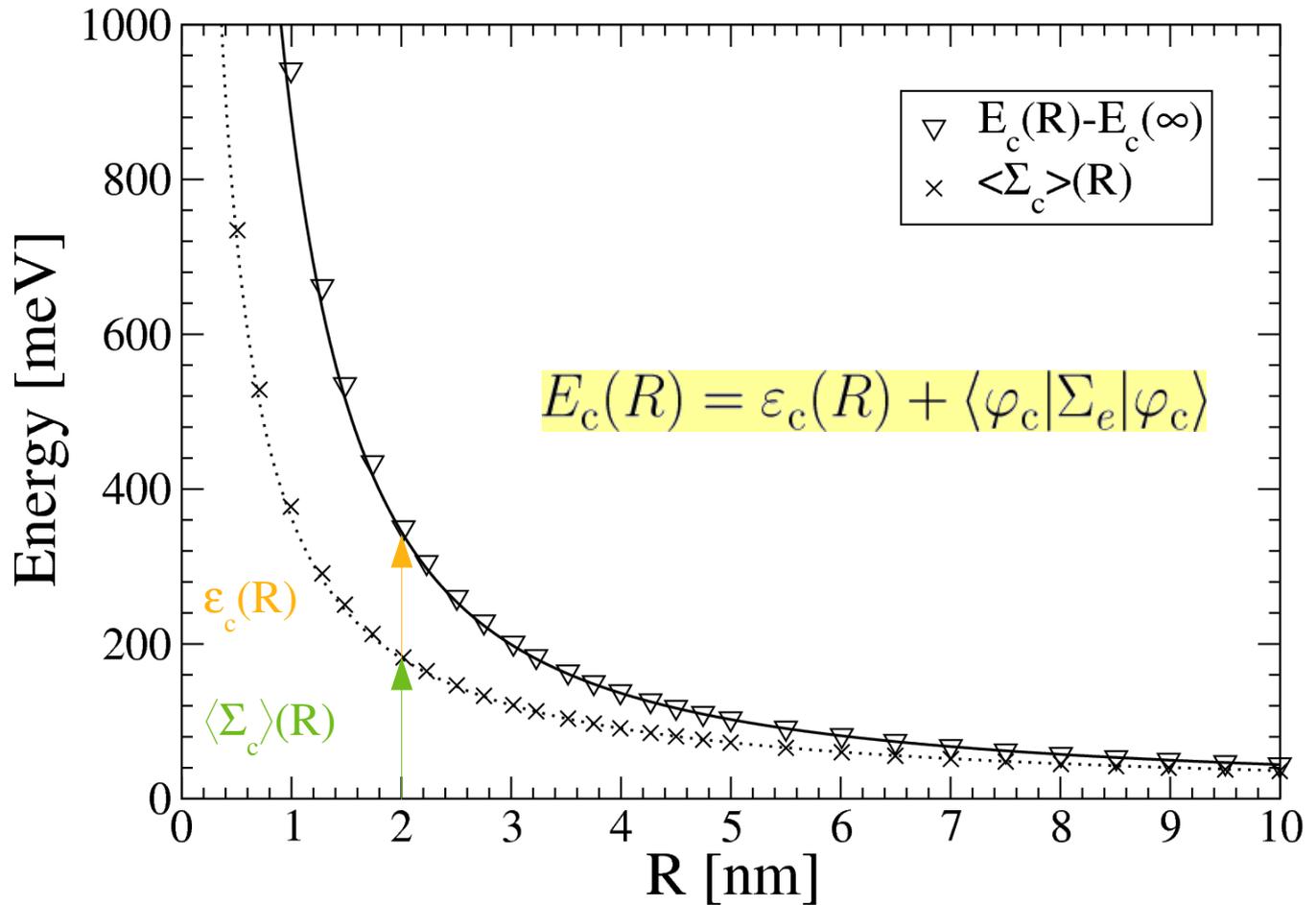


Bandgap with dielectric mismatch:

The self-energy correction significantly shifts the conduction bands upwards.

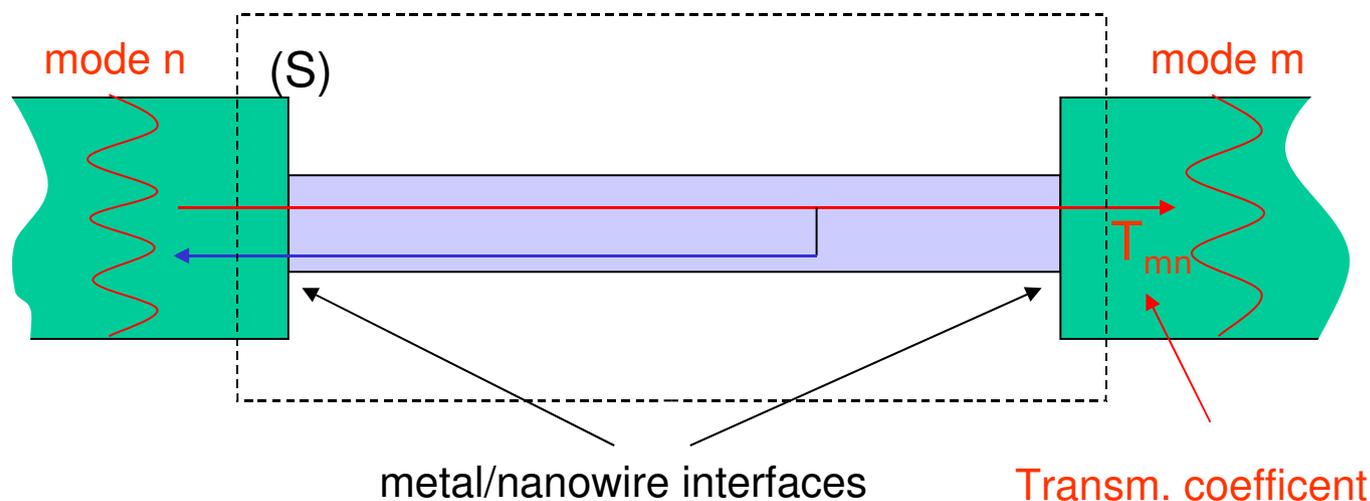
Self-energy corrections decrease slower than quantum confinement

$\langle 111 \rangle$ -oriented Si nanowires



Collaboration Lille (IEMN):
 Mamadou Diara, Yann-Michel Niquet, Christophe Delerue and
 Guy Allan,
 Phys Rev B **75**, 045301(2007)

The Landauer-Büttiker Formalism.



$$\frac{dI}{dV} = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{mn}(E) = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[\hat{\Gamma}_L \hat{G}^r \hat{\Gamma}_R \hat{G}^a]$$

$$\hat{G}^{r,a}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} - \hat{\Sigma}_L^{r,a}(E) - \hat{\Sigma}_R^{r,a}(E)}$$

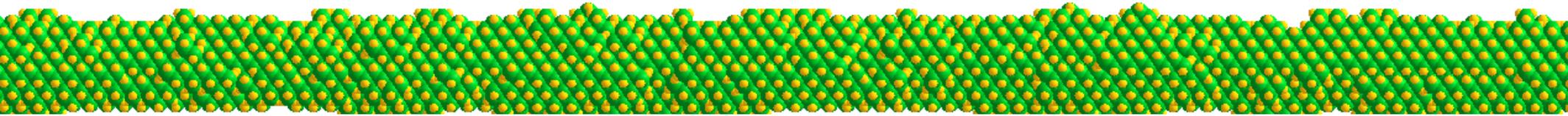
Green functions

Hamiltonian of the finite system (S) Self-energy of the electrodes

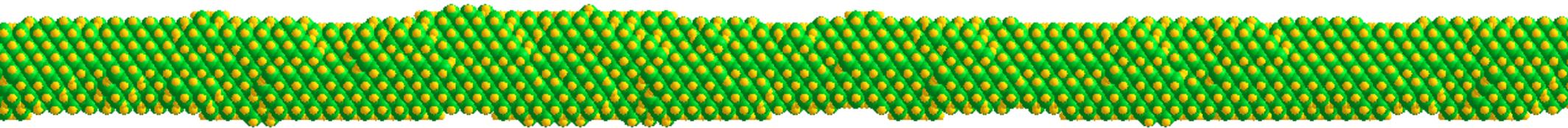
$$\hat{\Gamma}_{L,R} = i(\hat{\Sigma}_{L,R}^r - \hat{\Sigma}_{L,R}^a) \quad \Gamma / \hbar \approx \text{escape time from (S) to the contacts}$$

$L_r = 0.54 \text{ nm}$

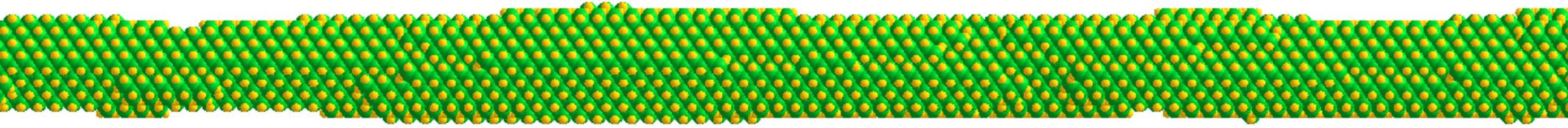
Lorentzian disorder :



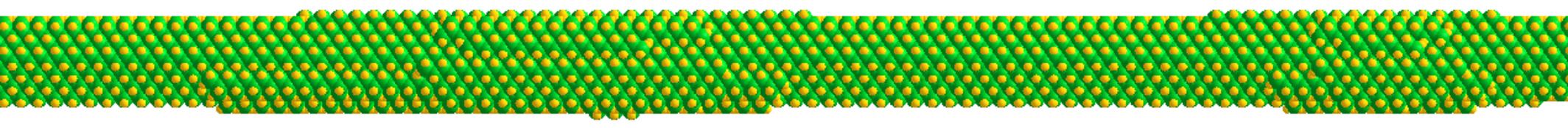
$L_r = 1.09 \text{ nm}$



$L_r = 2.17 \text{ nm}$

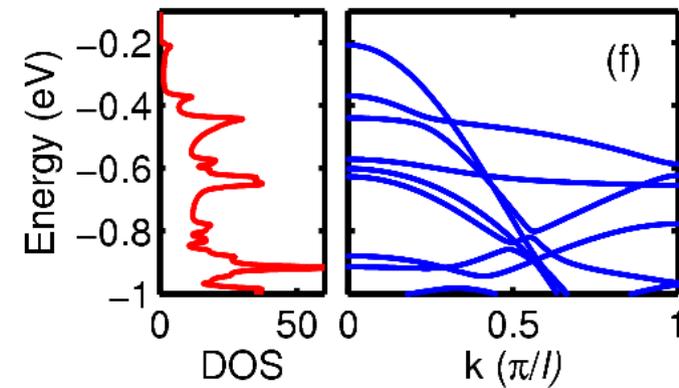
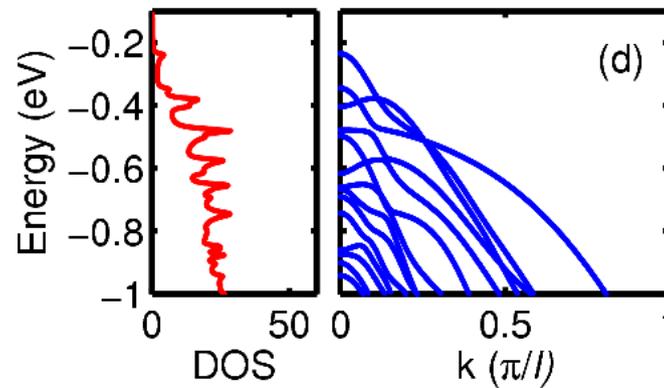
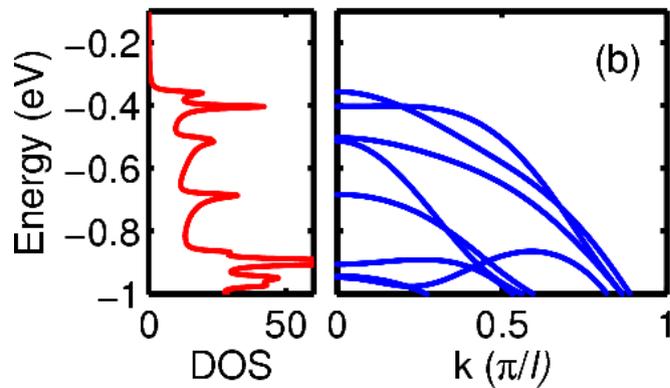
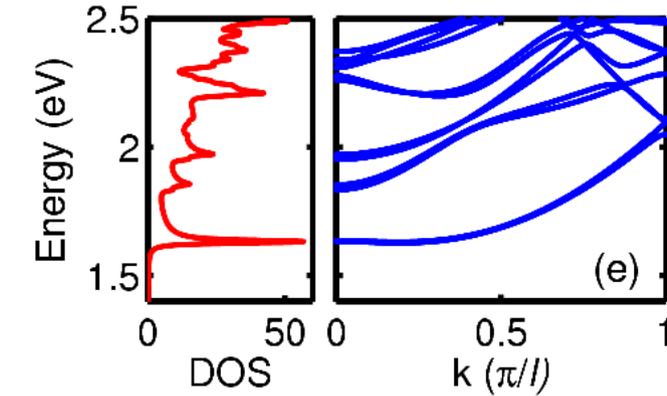
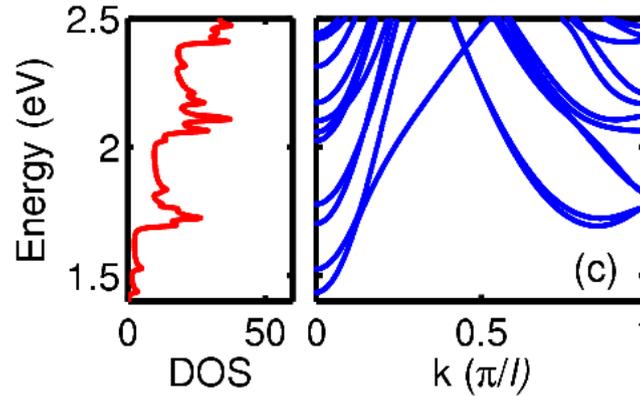
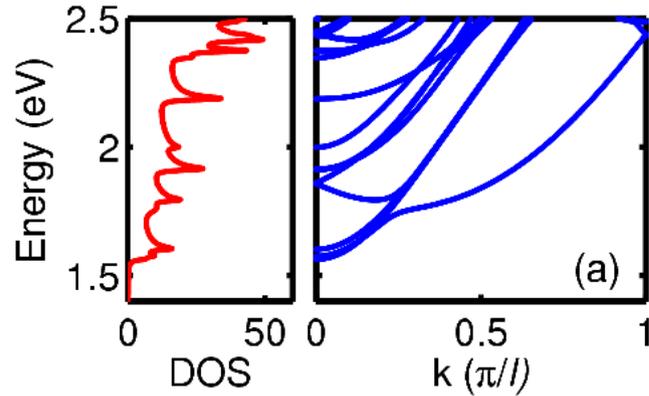
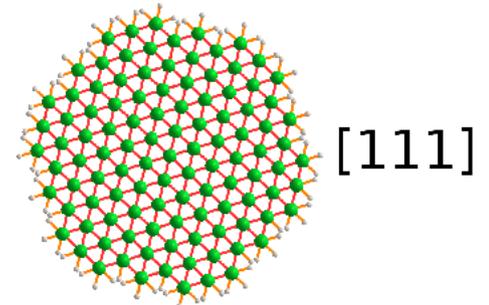
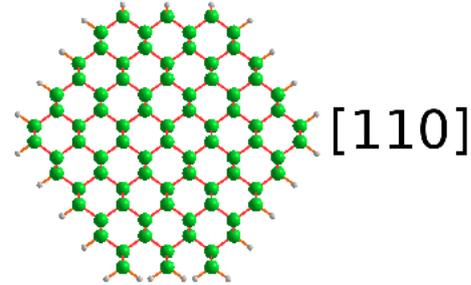
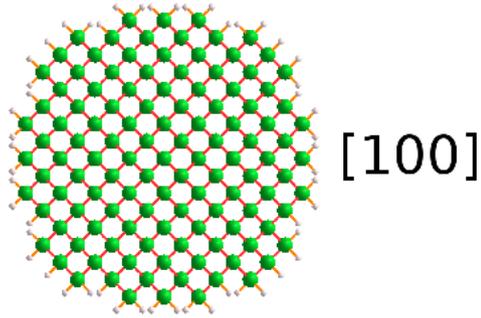


$L_r = 4.34 \text{ nm}$



$$\delta R(z, \theta) = \sum_k \sum_{n; (n, k) \neq (0, 0)} a_{nk} e^{\frac{2i\pi}{L} kz} e^{in\theta}$$
$$\langle \langle \delta R^2 \rangle \rangle^{1/2} = rms = 1 \text{ \AA}$$

$$a_{nk} = A e^{i\varphi} \frac{1}{\left\{ 1 + \left[\left(\frac{2\pi}{L} k \right)^2 + \left(\frac{n}{R} \right)^2 \right] L_r^2 \right\}^{3/4}}$$





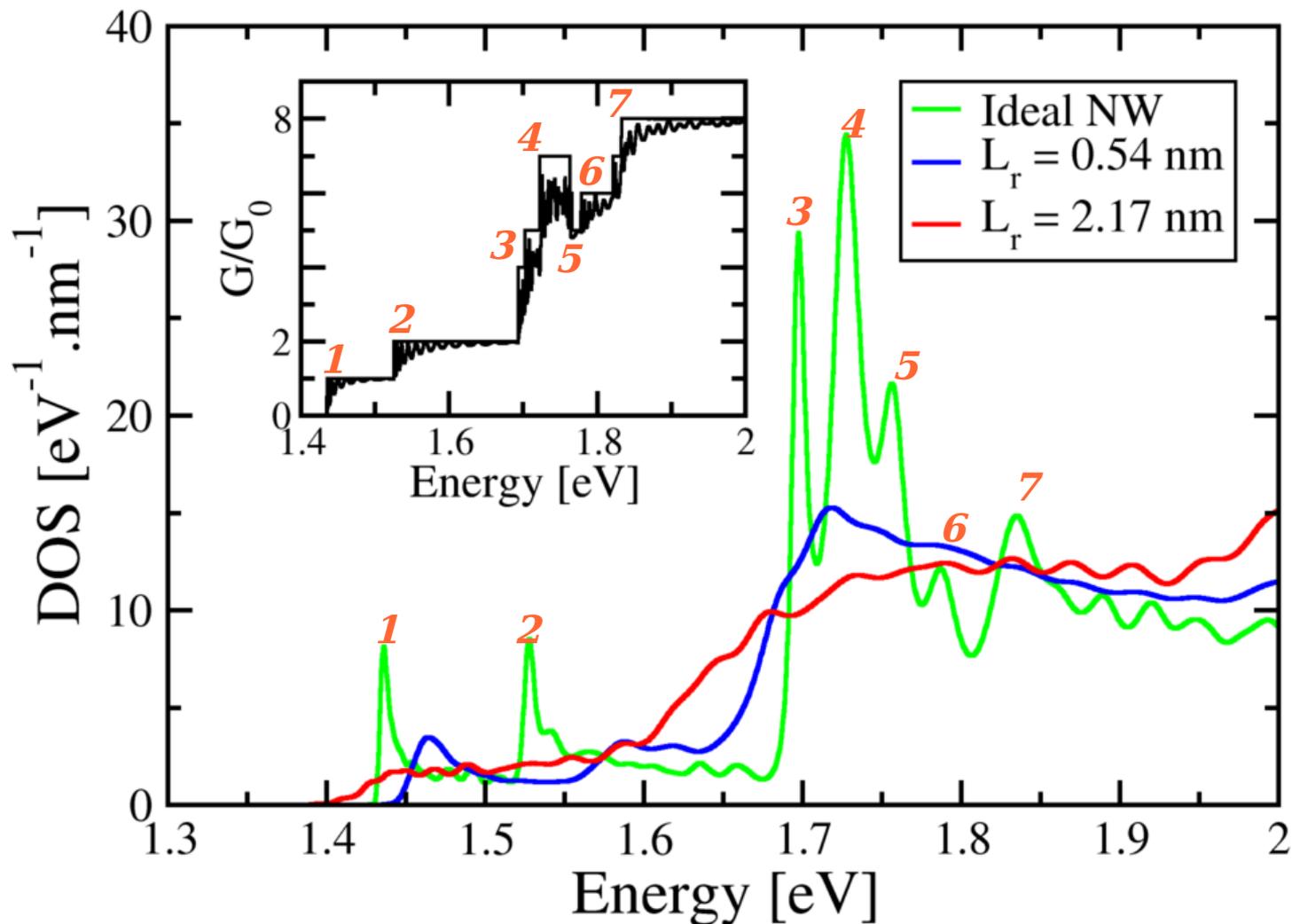
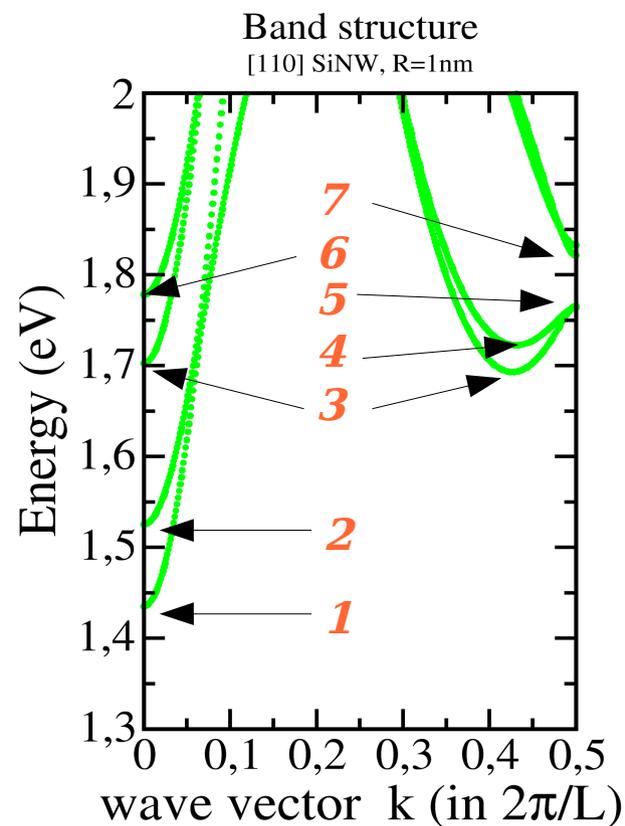
Effects of Surface Roughness on Density of States.

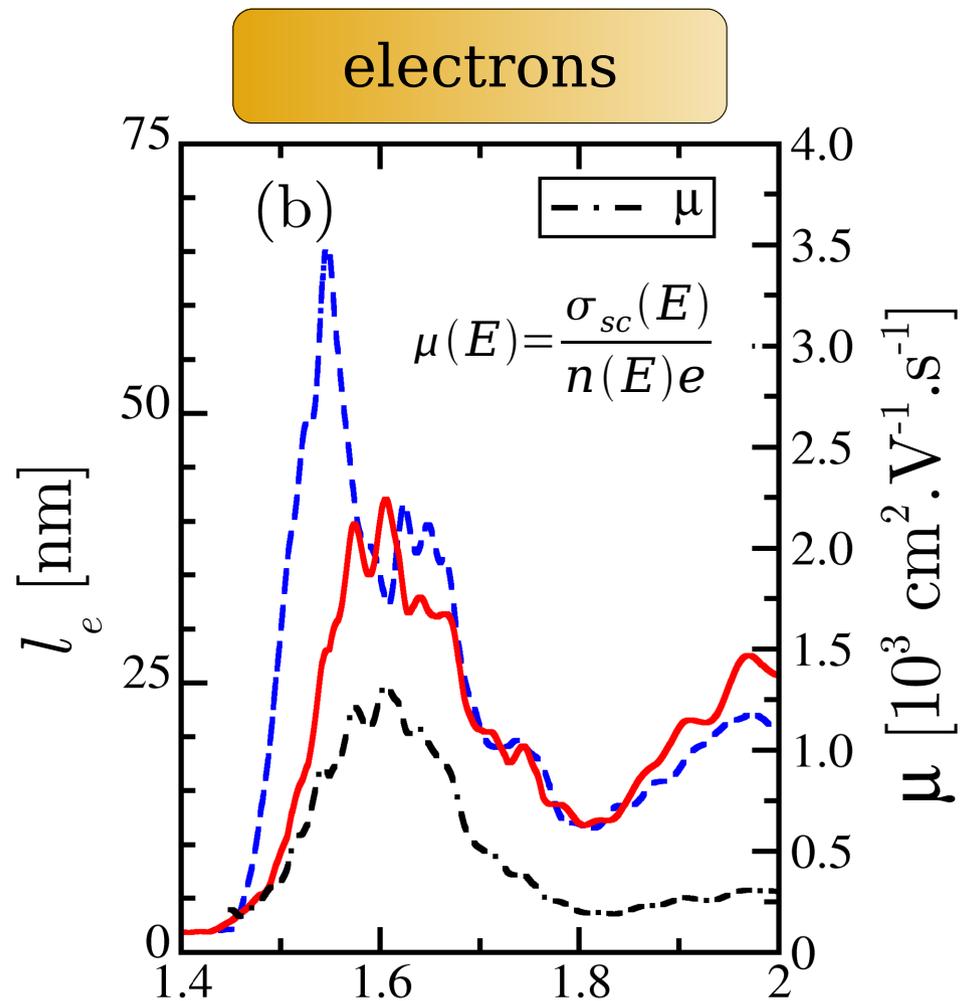
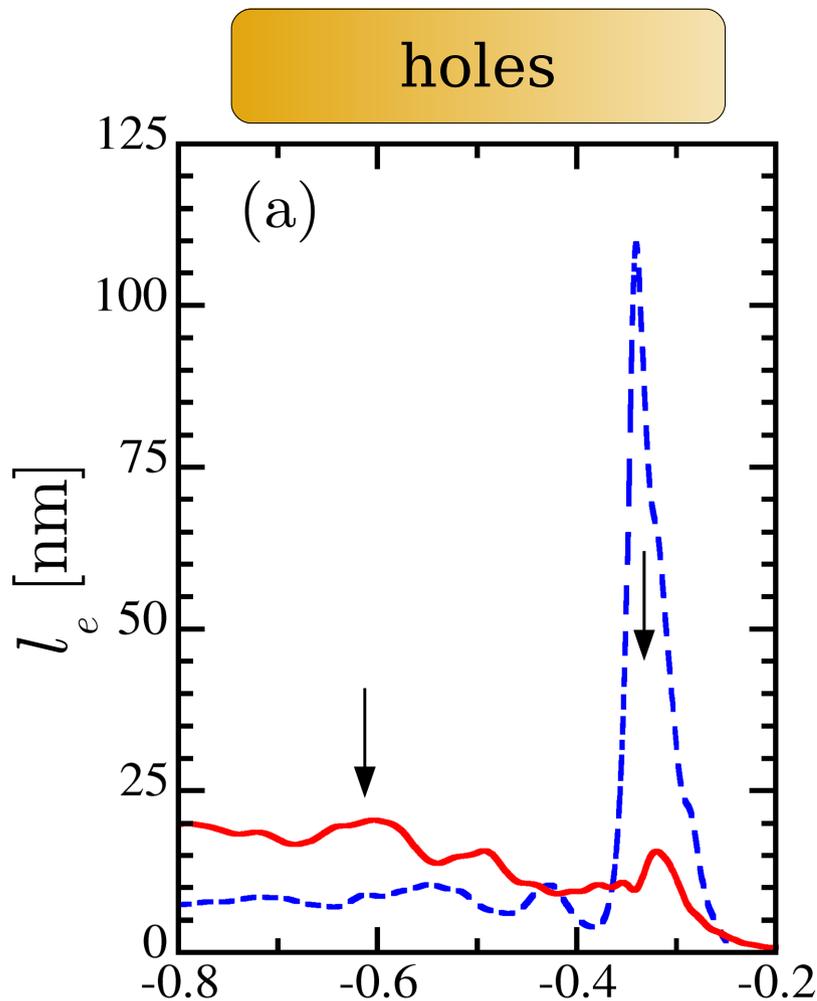
The roughness strongly affects the DOS. The fine structure is progressively degraded with increasing L_r .

$L_r = 0.54 \text{ nm}$



$L_r = 2.17 \text{ nm}$

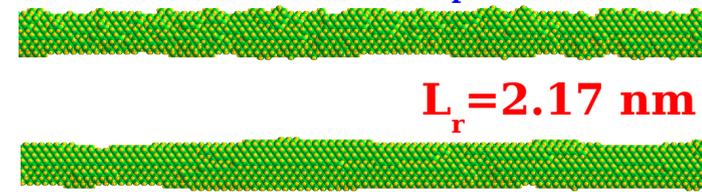




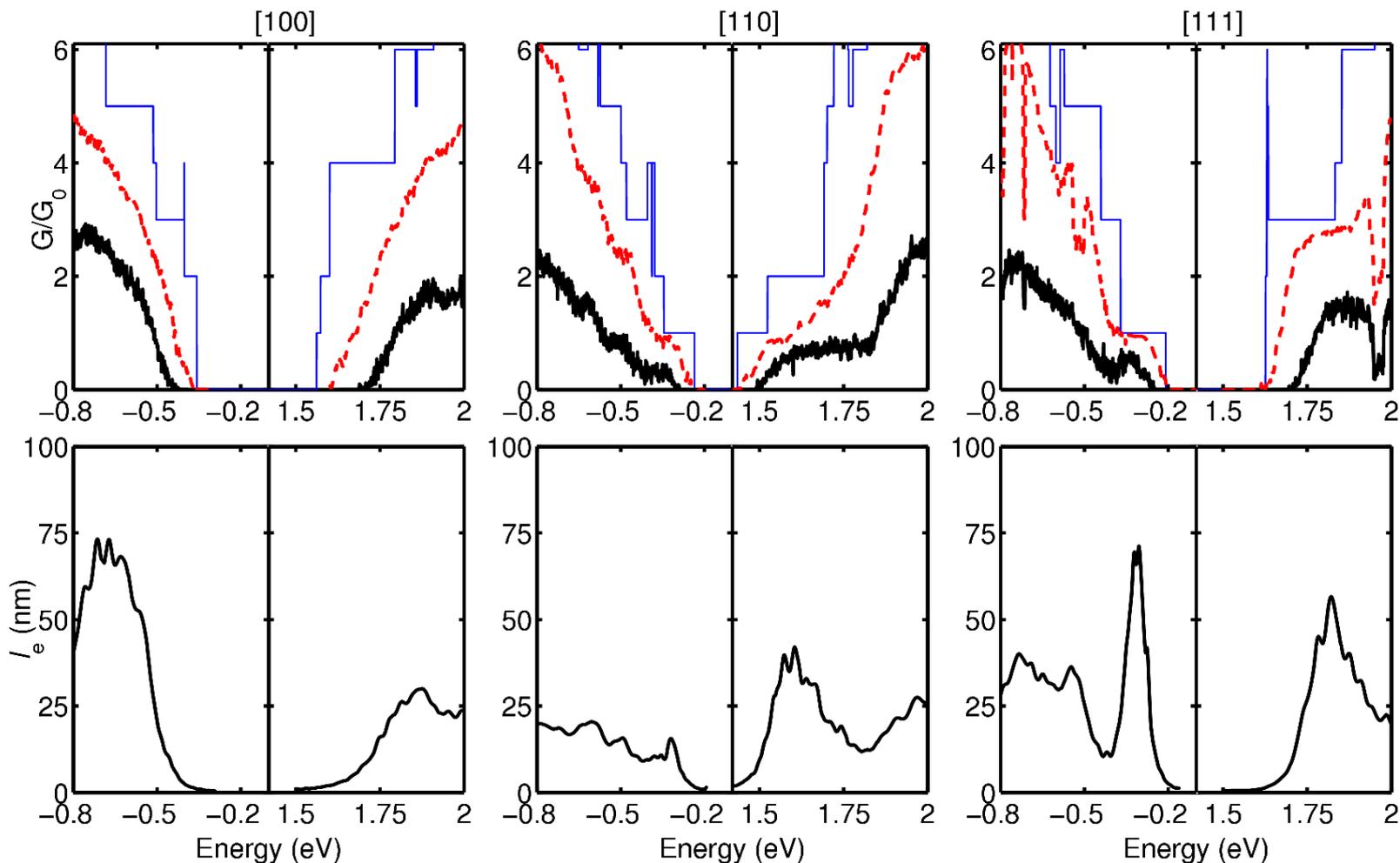
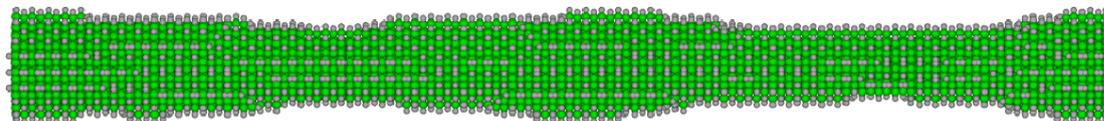
Energy [eV]

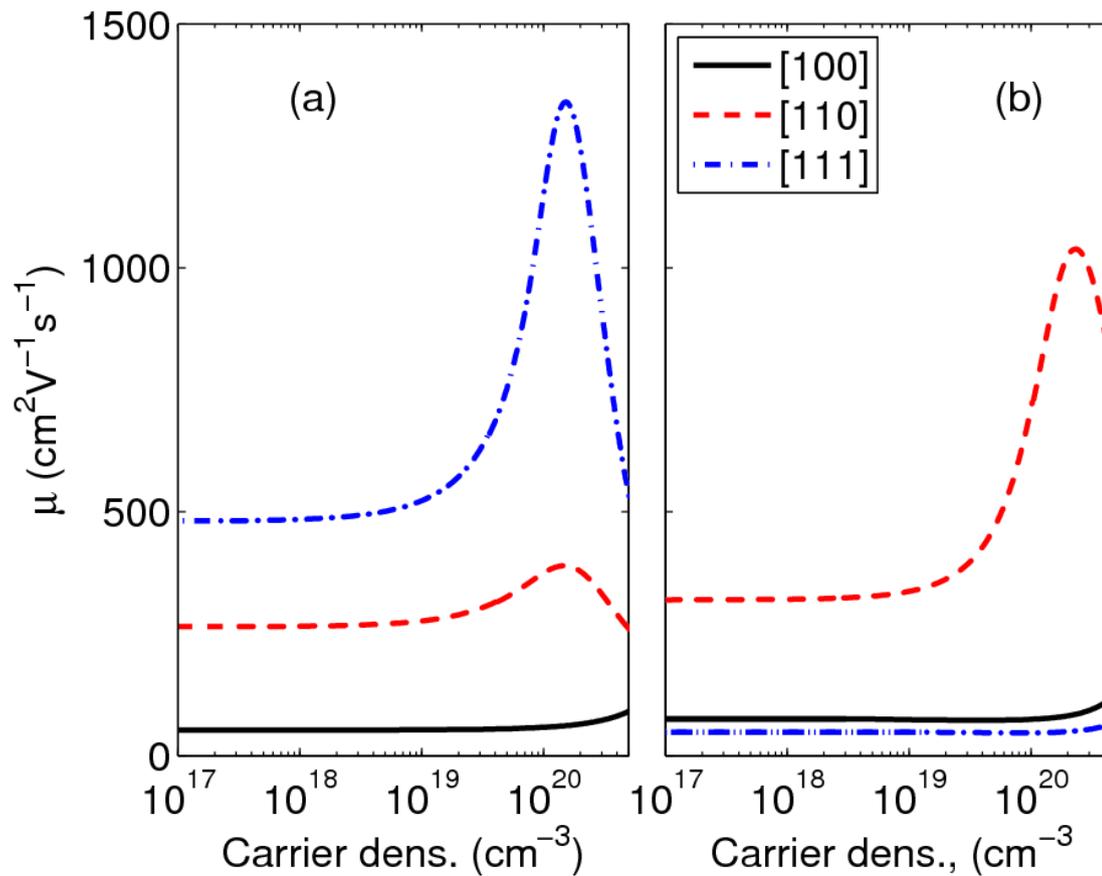
$L_r = 0.54 \text{ nm}$

$L_r = 2.17 \text{ nm}$



- Mean free path are in the range [10-100] nm.
- Mean free path is degrade as L_r is increased.
- Mobility energy dependence follows mean free path energy dependence.



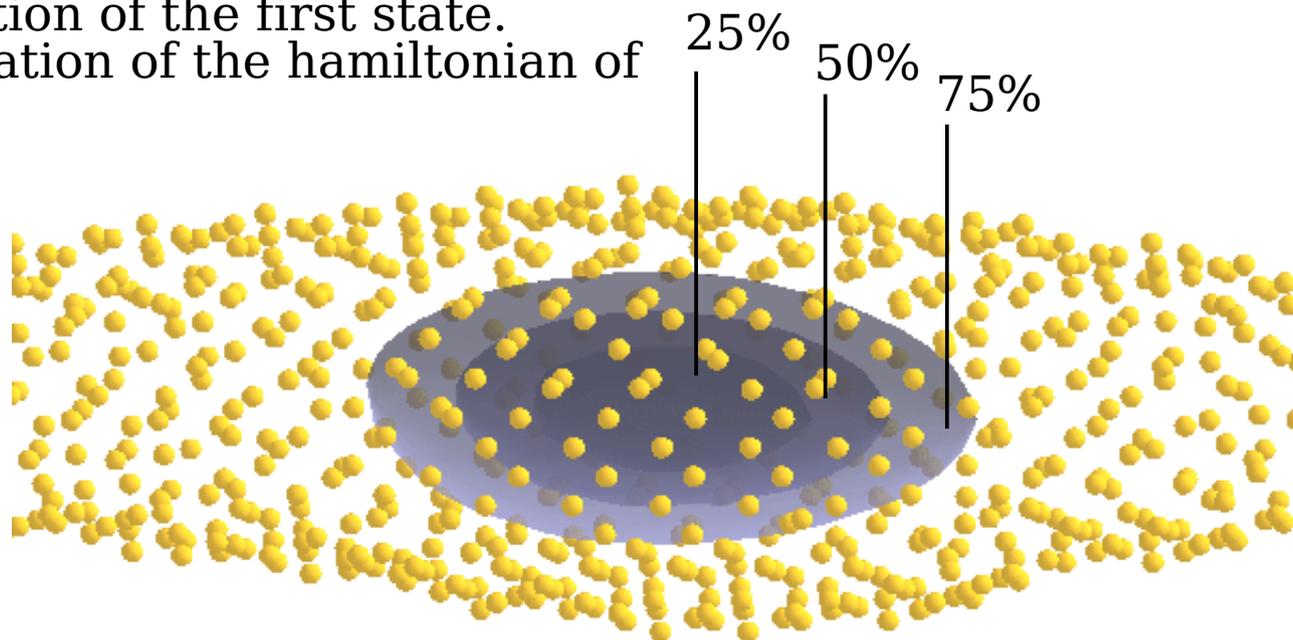


- Best orientation for **hole** transport : $\langle 111 \rangle$.
- Best orientation for **electron** transport : $\langle 110 \rangle$.

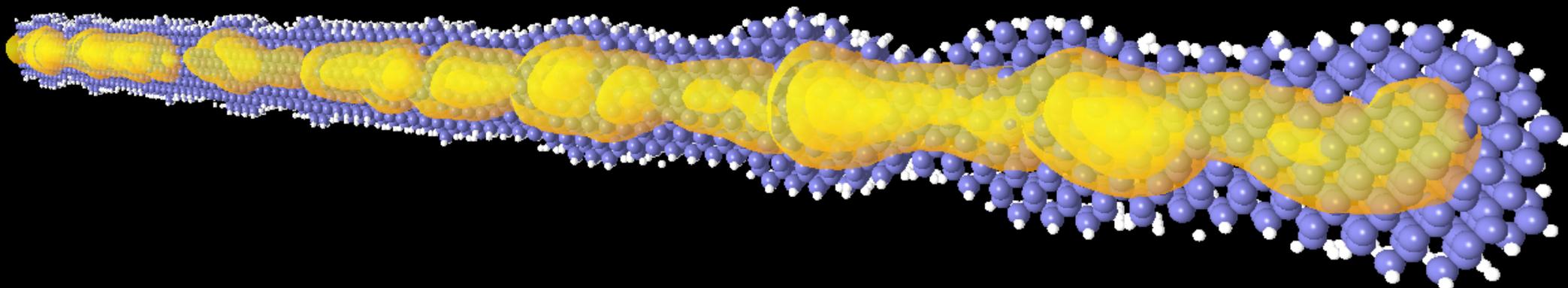


Localization Effects induced by Surface Roughness.

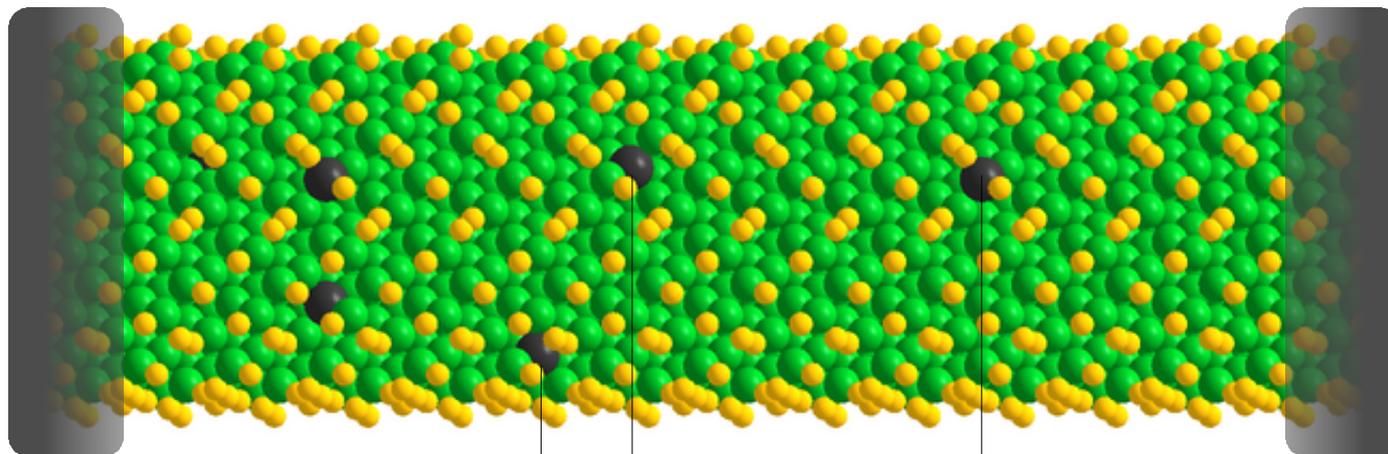
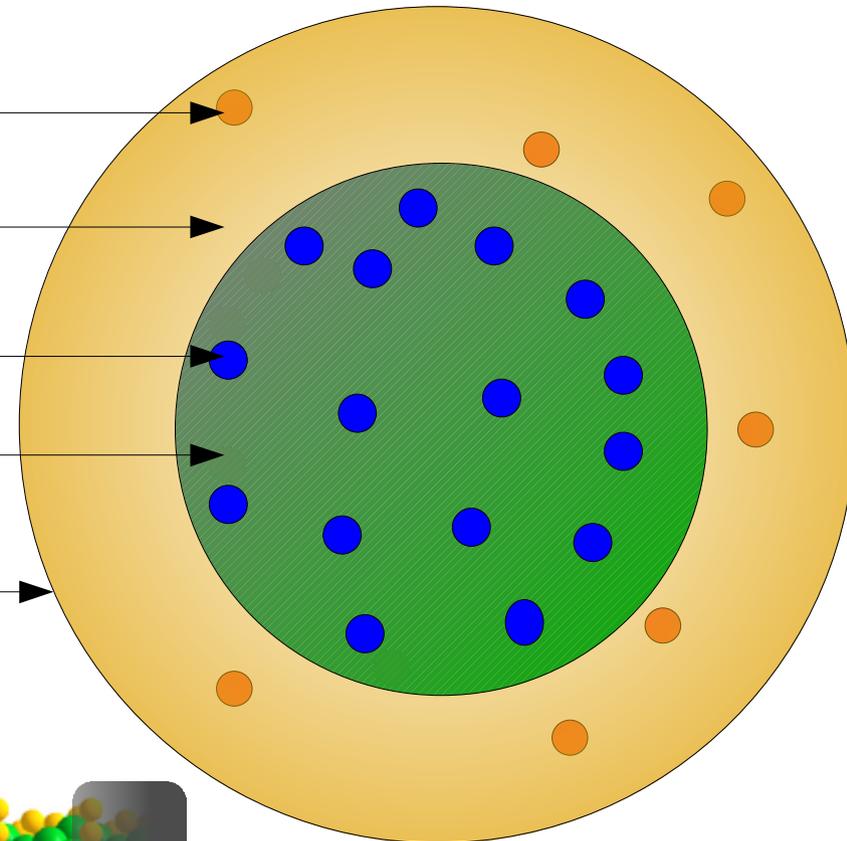
Plot of the wavefunction of the first state.
Obtain by diagonalisation of the hamiltonian of
a rough wire.



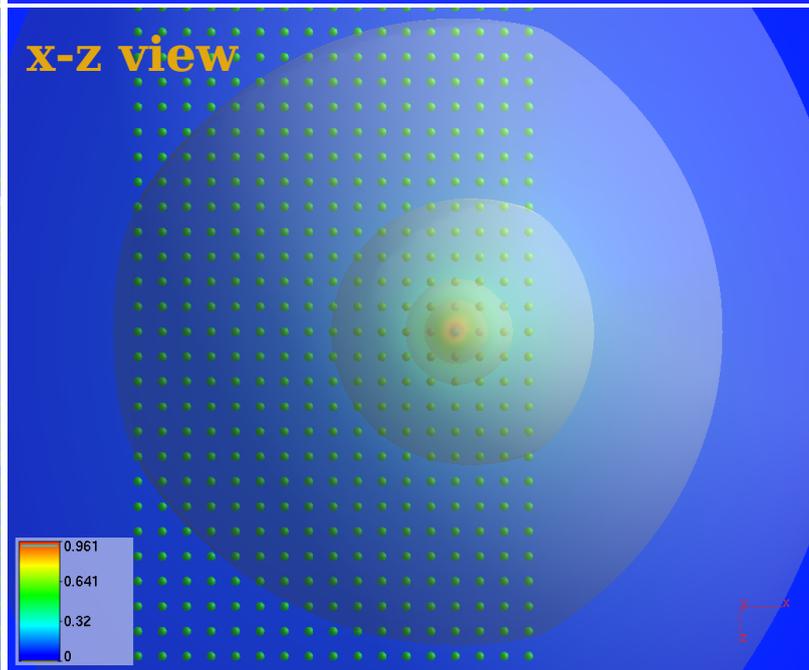
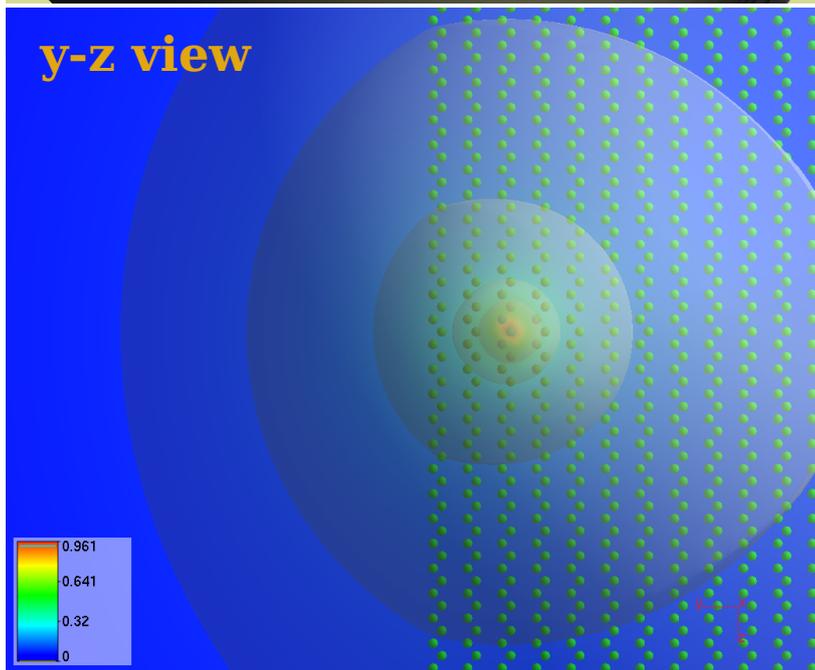
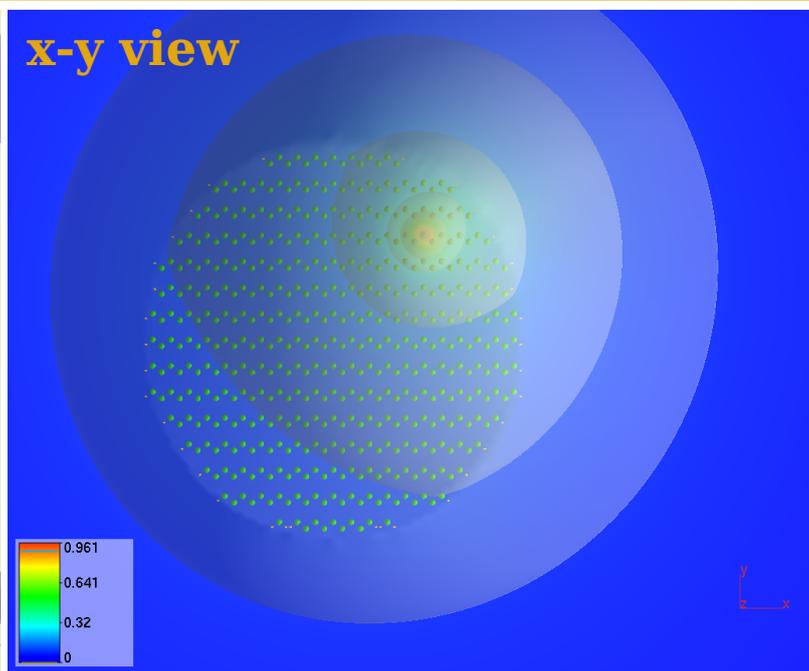
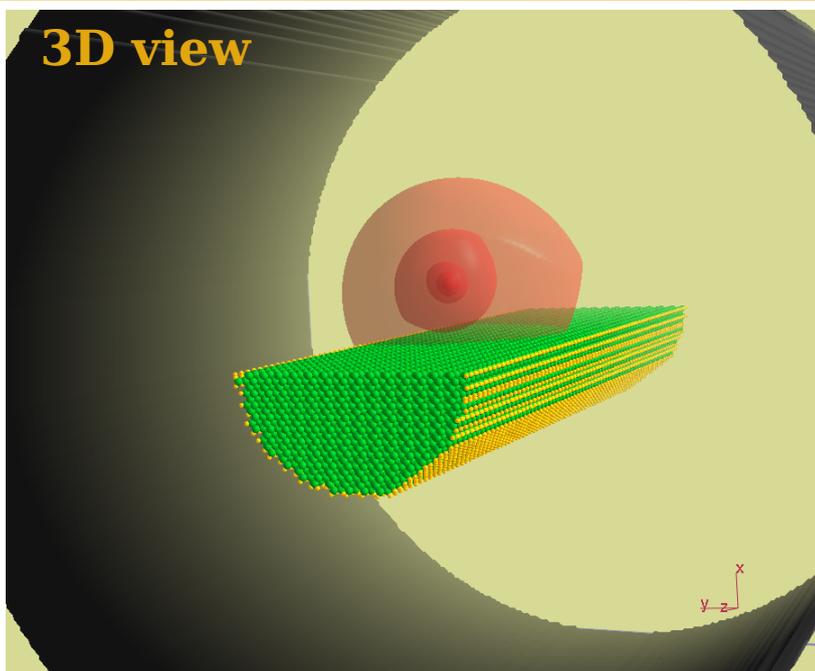
A waves packet in a rough
wire showing a pearl chain
shape.

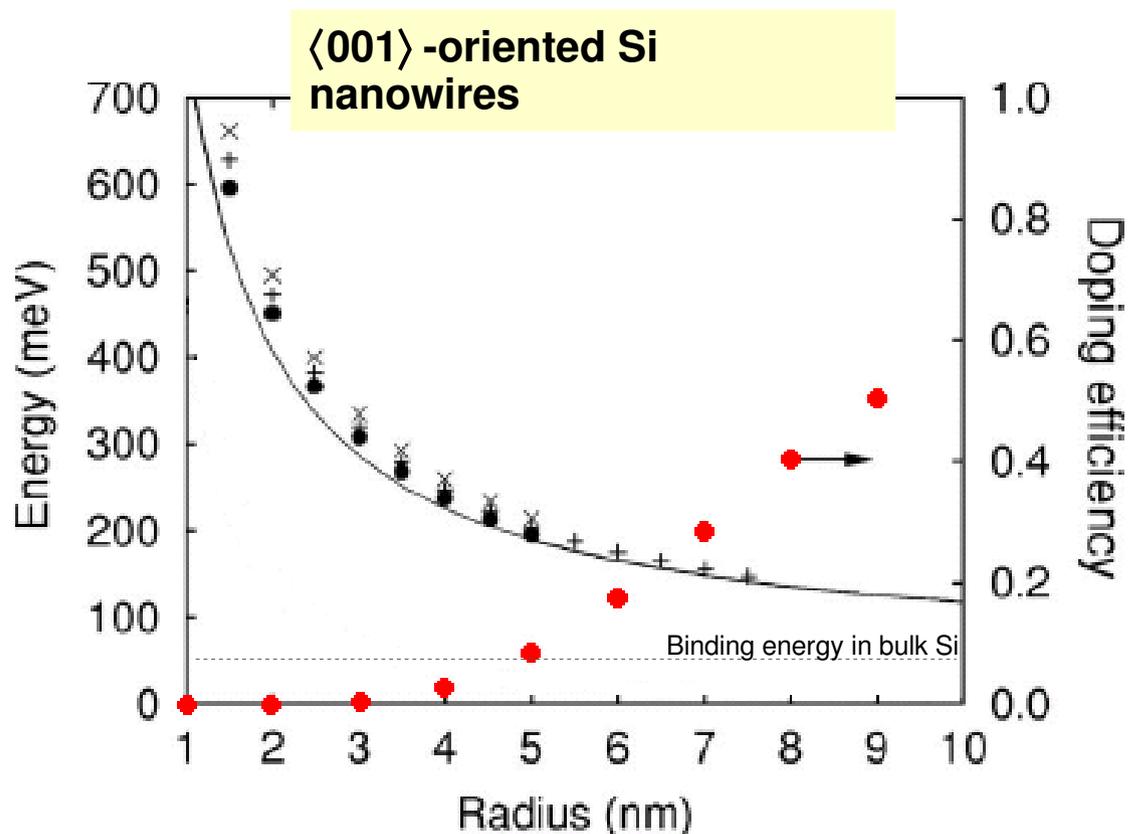


- impurity
- surrounding dielectric
- dopants
- silicon
- gate all around



dopants



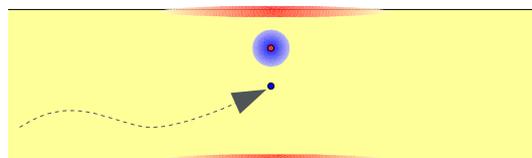


Binding energy of a donor in a Si nanowire as a function of its radius.

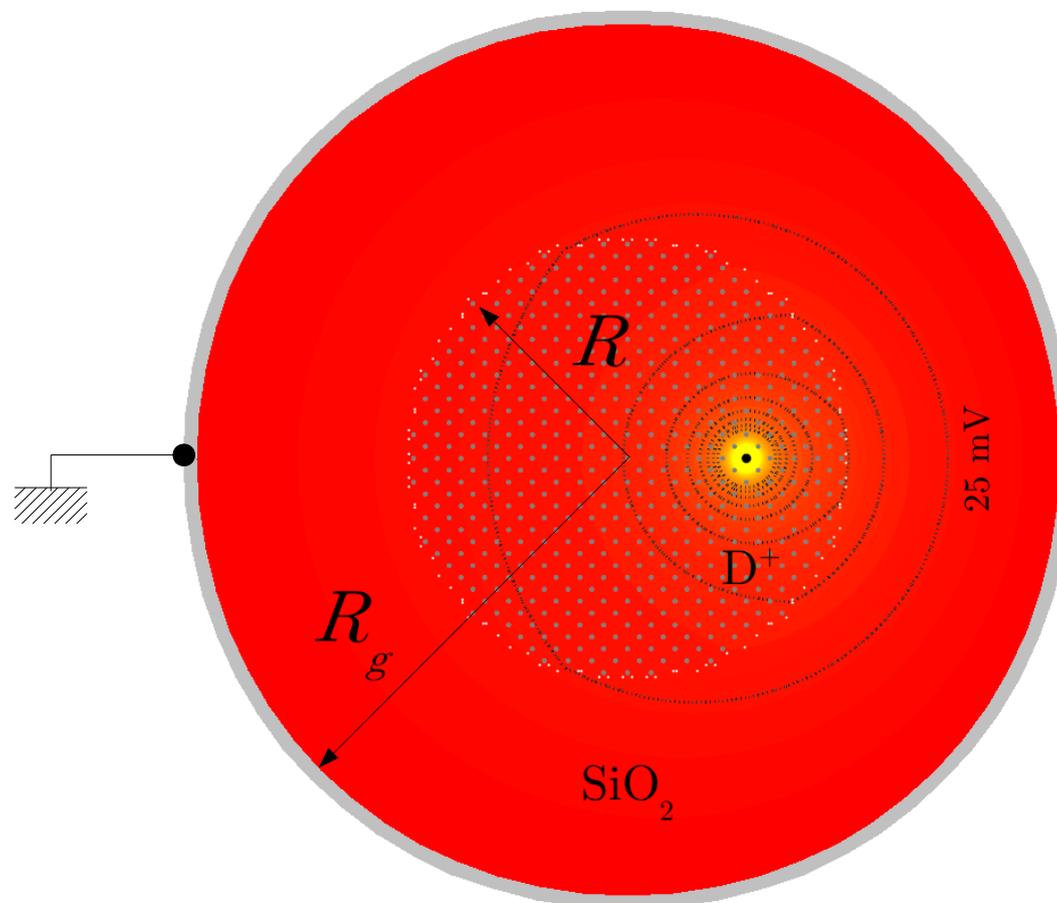
The donor is located along the nanowire axis.

- + P (45 meV in bulk)
- × As (54 meV in bulk)
- Sb (39 meV in bulk)

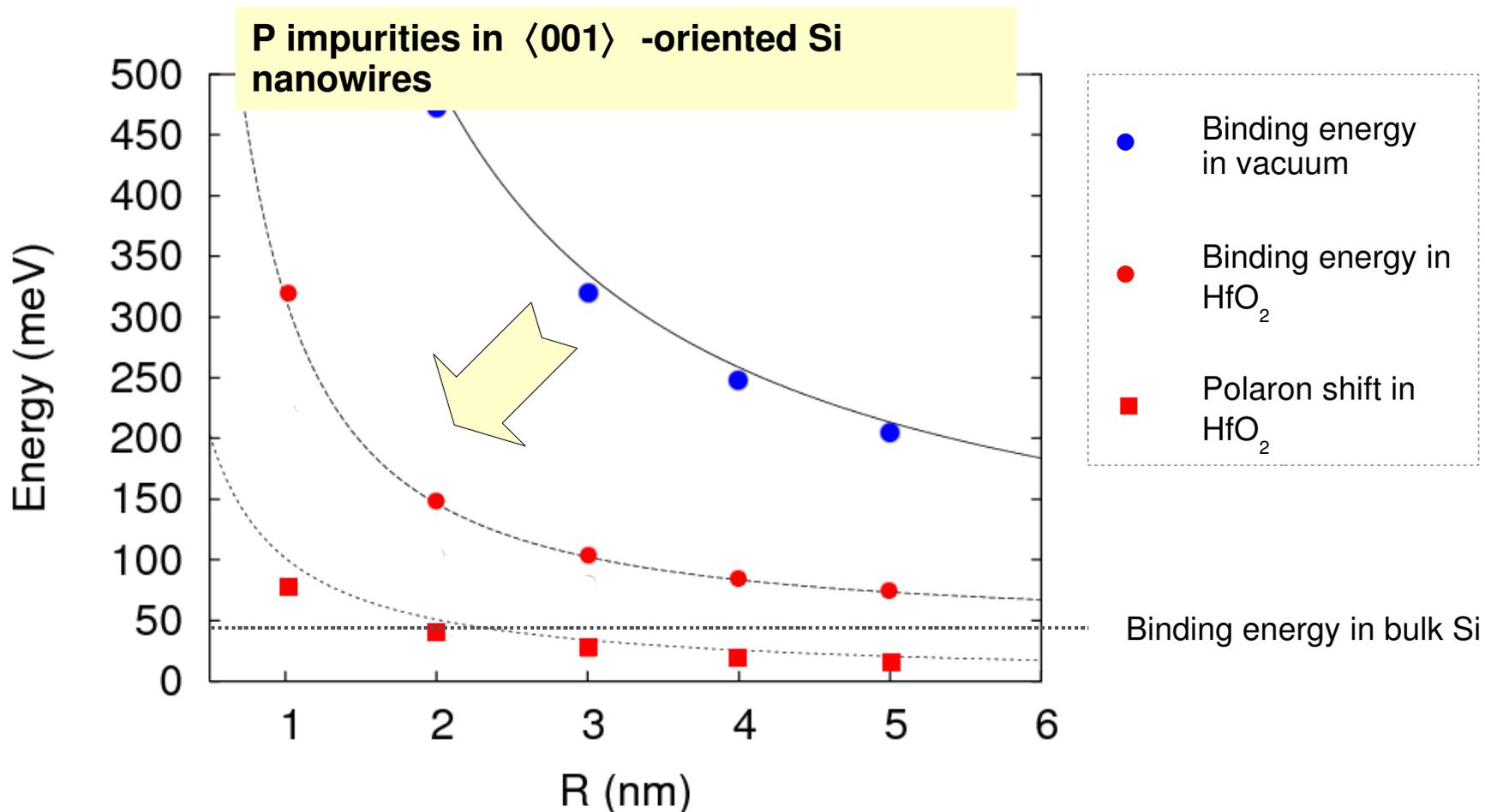
• The image charges **increase the binding energy of the donor up to a few hundreds of meV** in the smallest nanowires !!



The electron is trapped around the donor by the impurity and its image charges.



- Oxydes and metallic gates screen the impurity potential...
 ⇒ **Decrease of the binding energy**
... BUT ...
- The dielectric response of the oxydes is slow...
 ⇒ **Polaronic enhancement of the binding energy !**



• Strong increase of the doping efficiency ($T = 300 \text{ K}$) :

- $P_{\text{ionization}} = 6\%$ @ $R = 5 \text{ nm}$ in vacuum.
- $P_{\text{ionization}} = 47\%$ @ $R = 5 \text{ nm}$ in SiO_2 .
- $P_{\text{ionization}} = 78\%$ @ $R = 5 \text{ nm}$ in HfO_2 .



Screening of dopants



Wire :

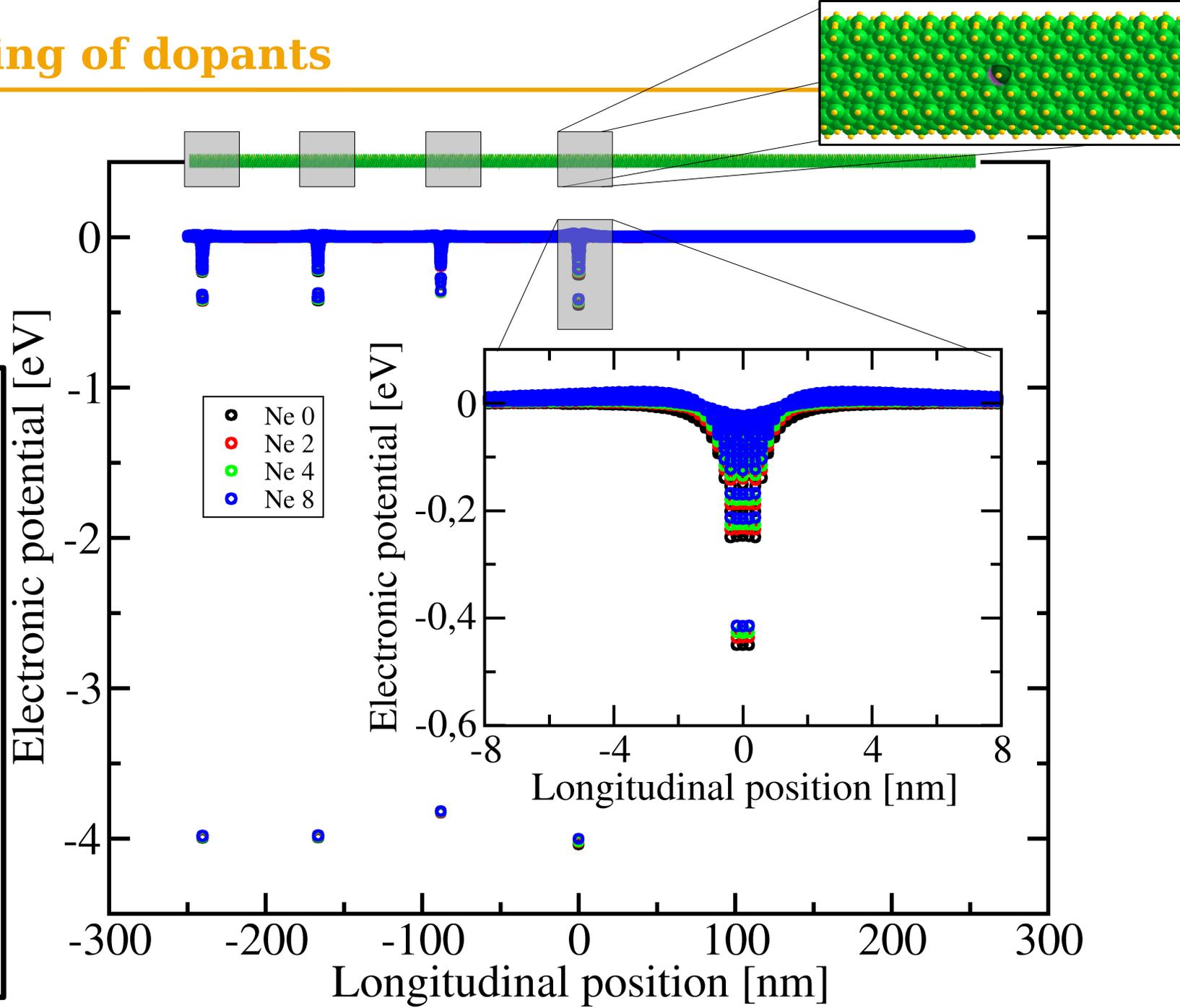
[110]
Length = 500nm
Radius = 1nm

Dopant :

Phosphorus
 $C_p = 2.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Dielectric :

HfO₂ (2nm)
Gate all around
R_{gate} = 3nm

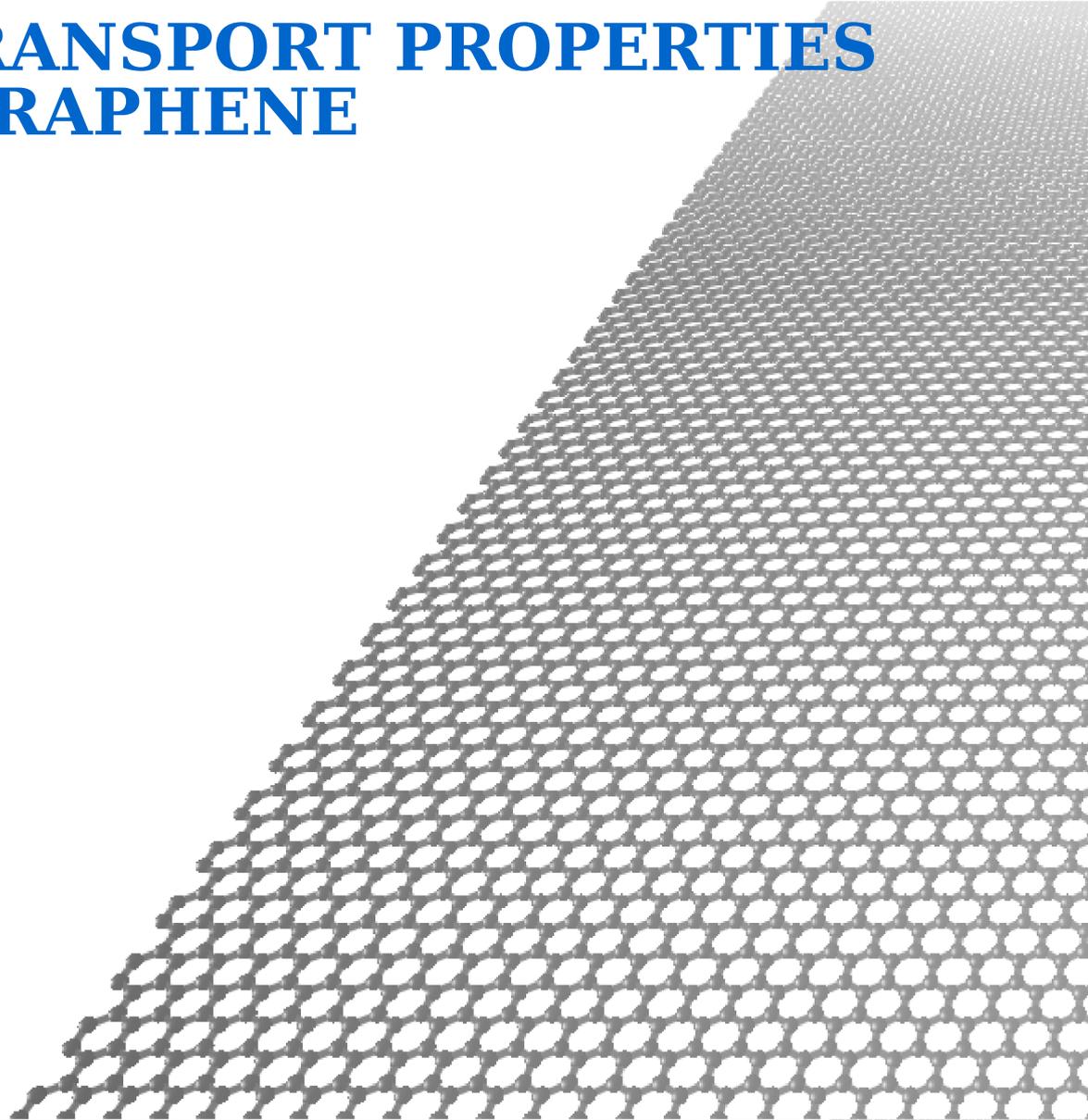




ELECTRONIC TRANSPORT PROPERTIES OF GRAPHENE

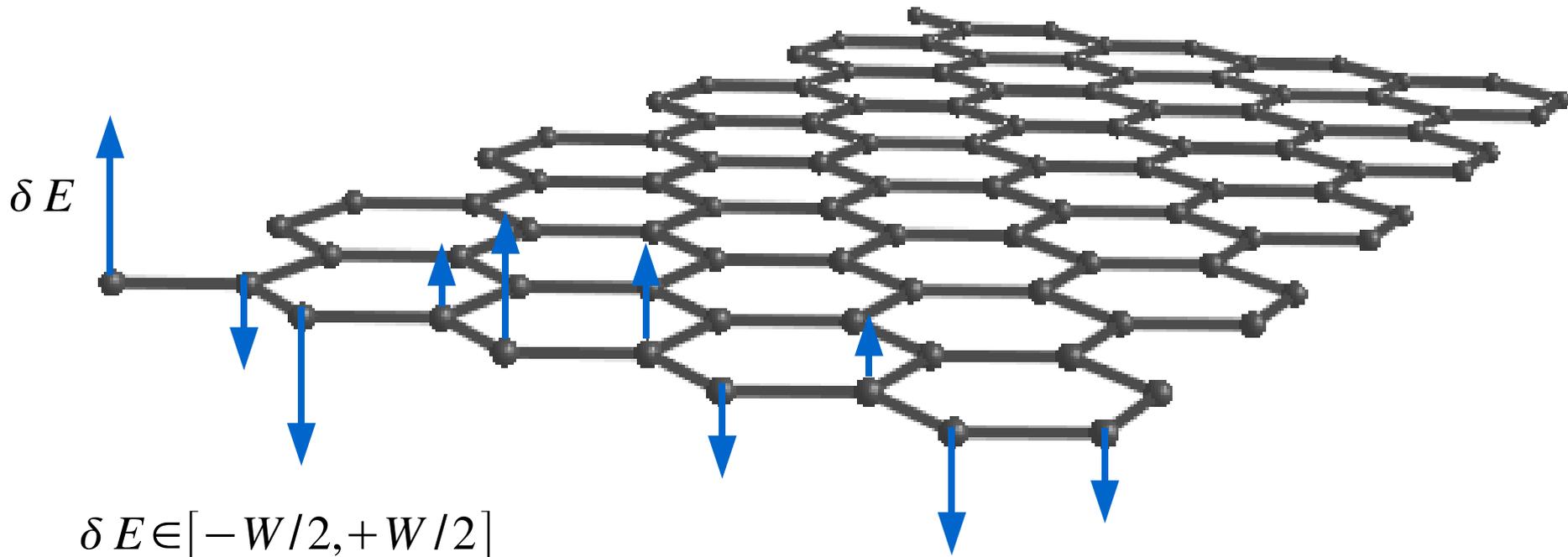


- **Blanca Biel**
- **Yann-Michel Niquet**
- **Stephan Roche**
- **Xavier Blase**
- **François Triozon**



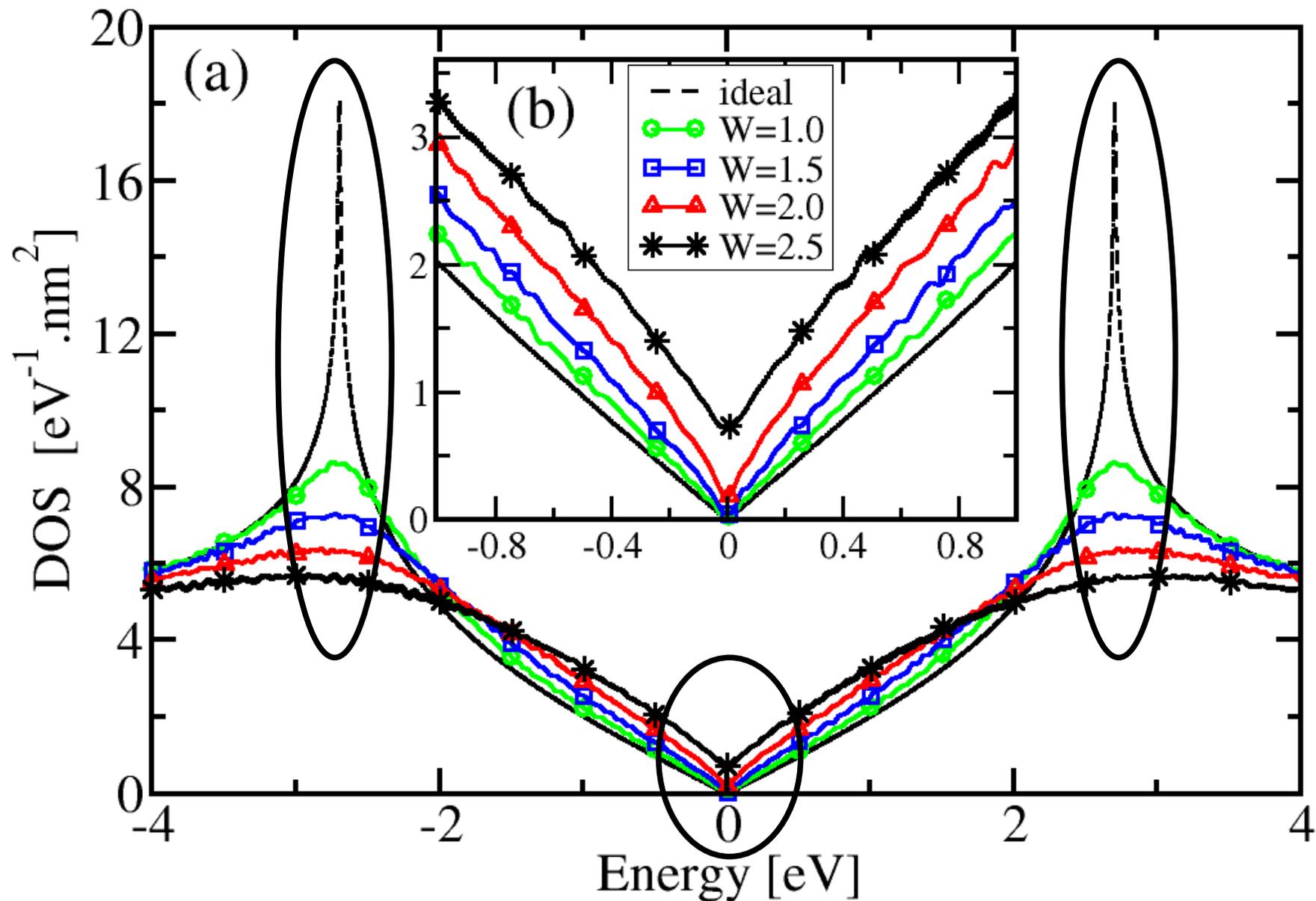
- **Anderson disorder**

- The Anderson disorder is an academic model in which we randomly modify the onsite energy of each atom. It is a kind of white noise disorder.
- The strength of the disorder is fixed by a single parameter W .

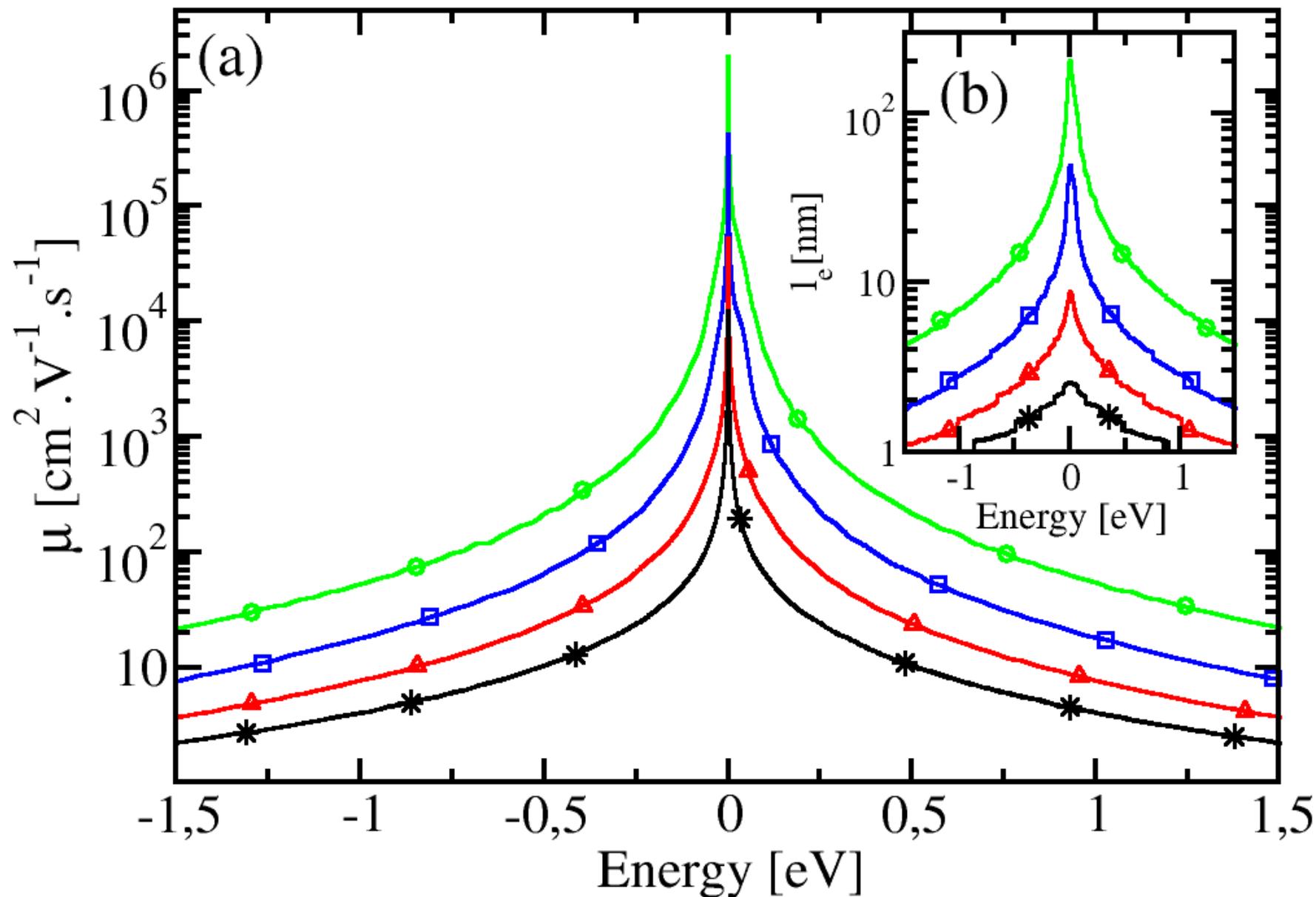


- The Anderson disorder is clearly a **short range** disorder

- Anderson disorder

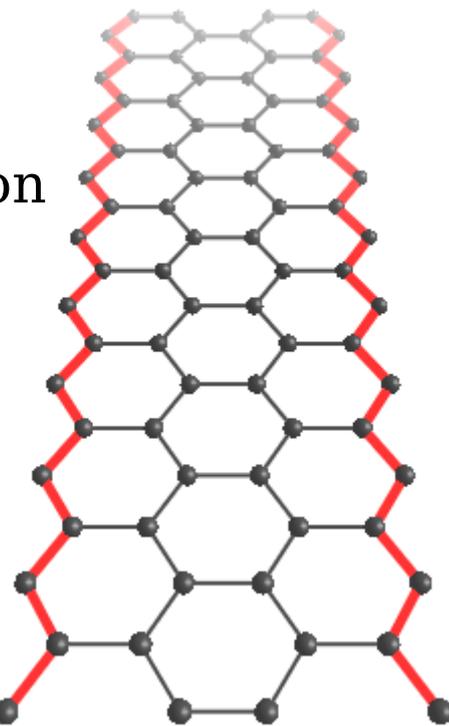


- Anderson disorder

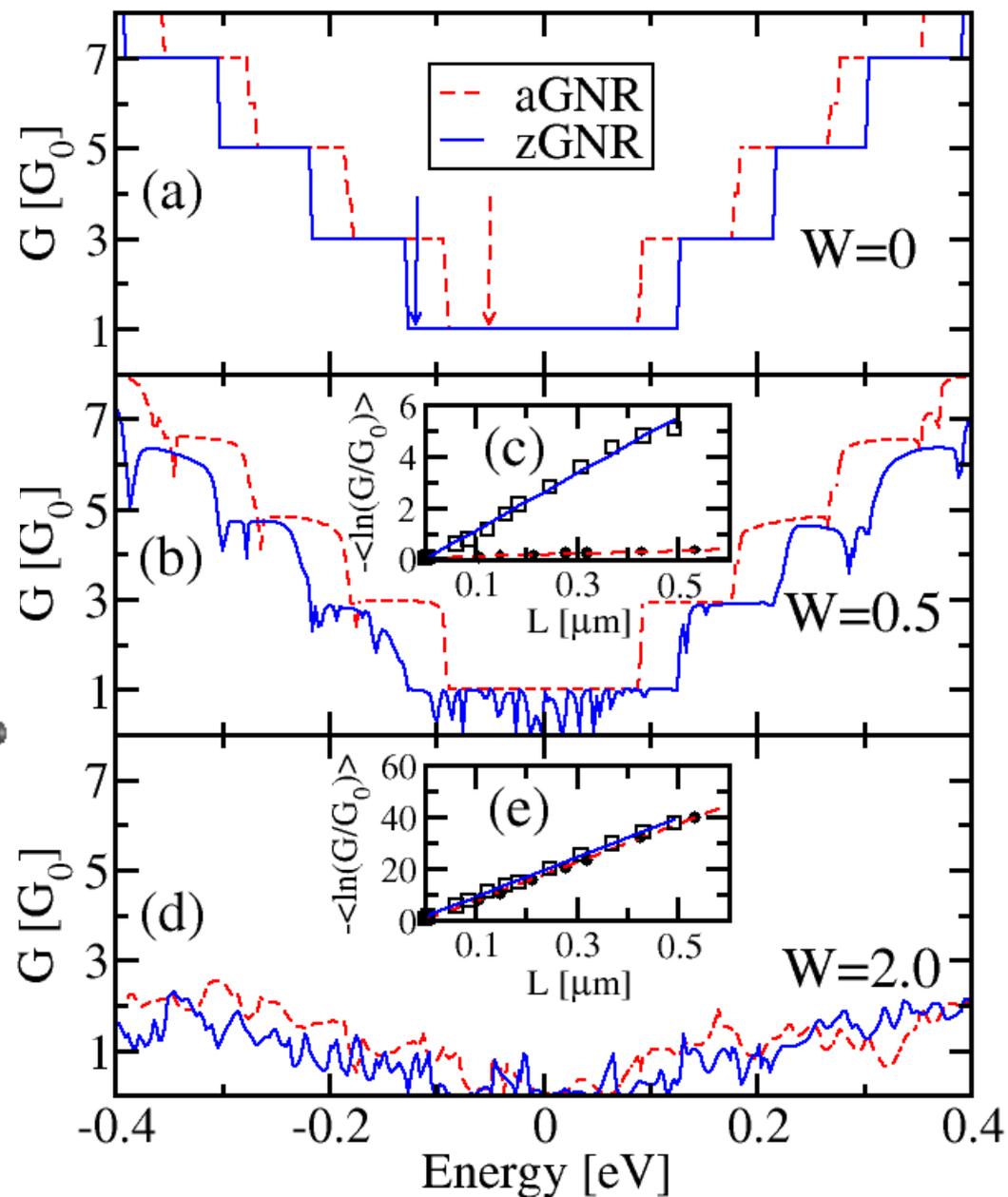
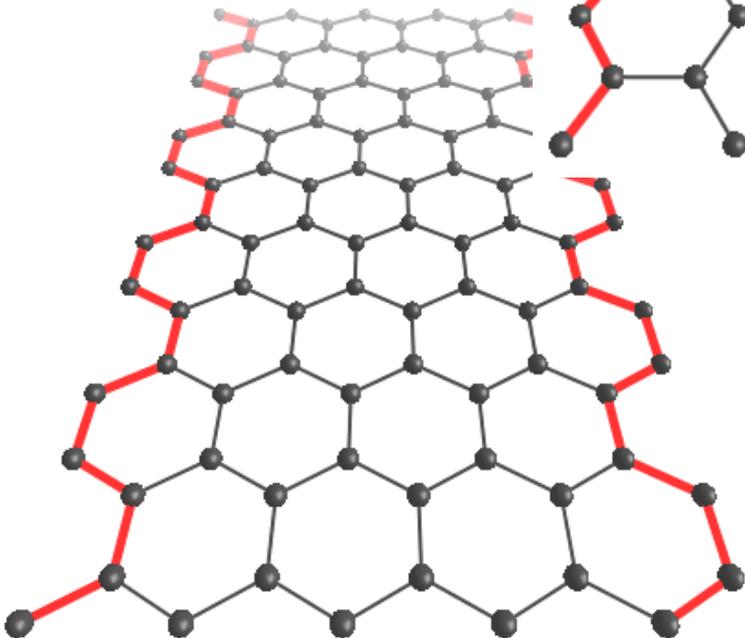


- Anderson disorder

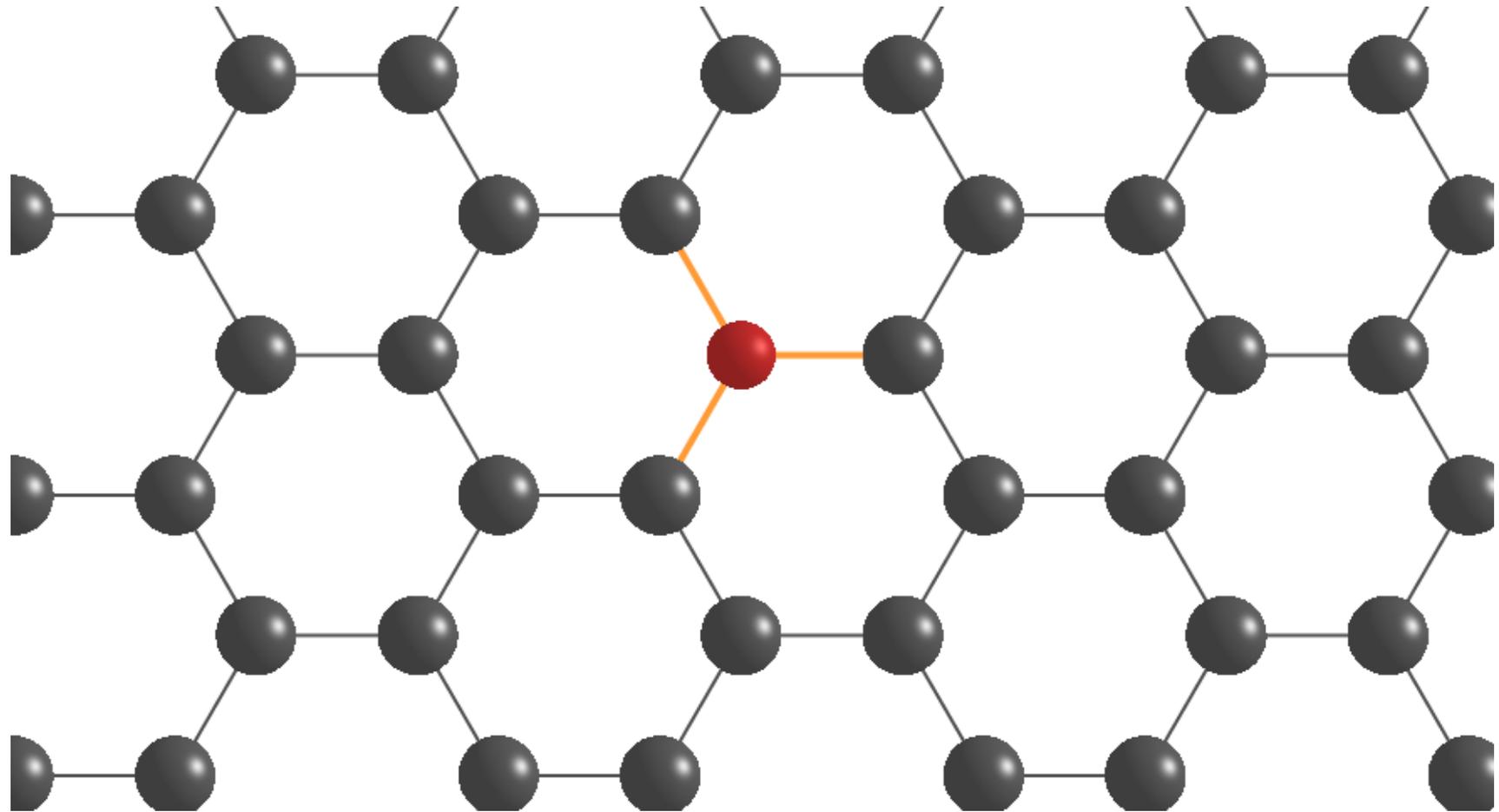
- Zigzag Graphene NanoRibbon



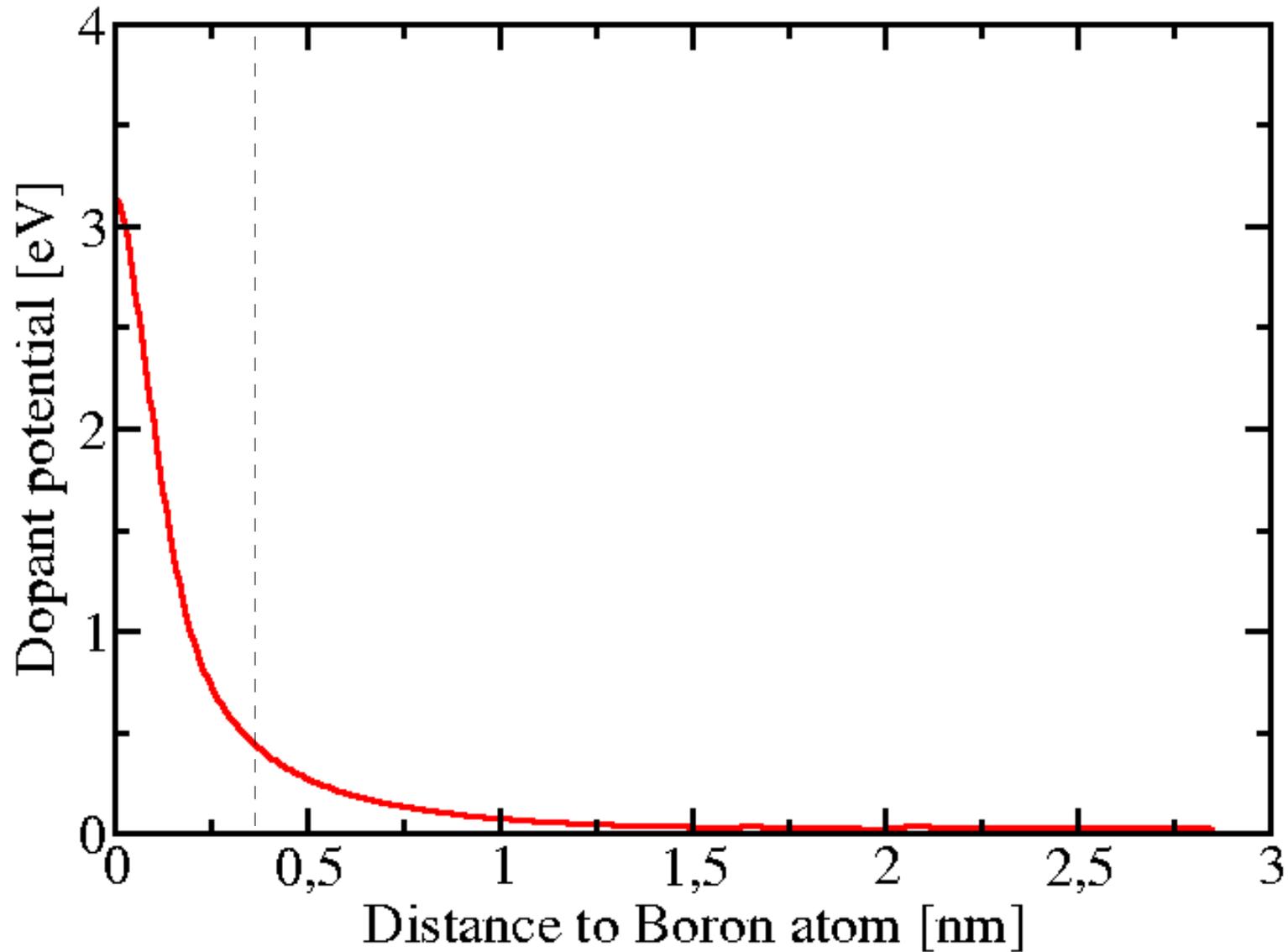
- Armchair Graphene NanoRibbon



- Boron doped graphene



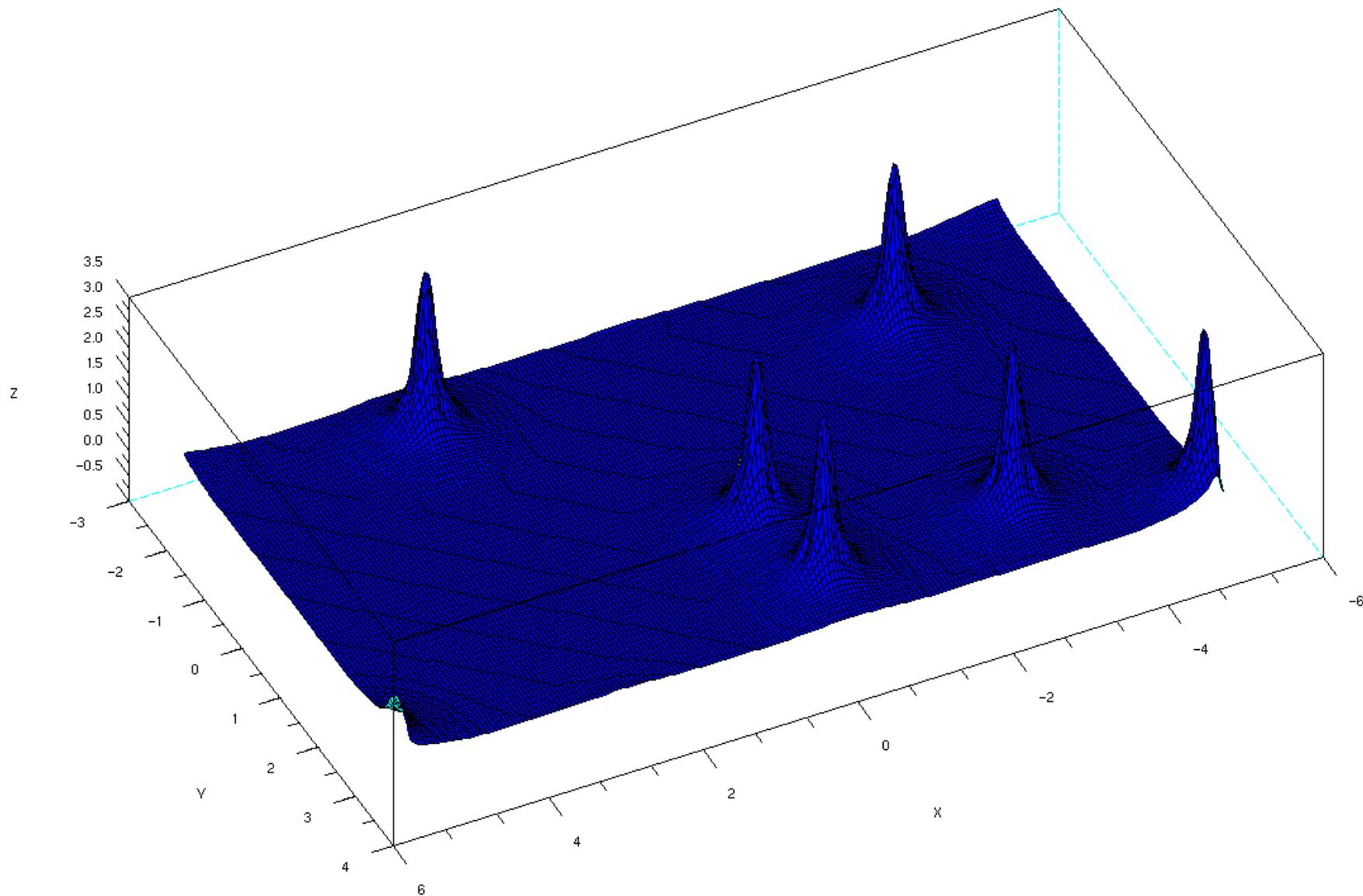
- Boron doped graphene



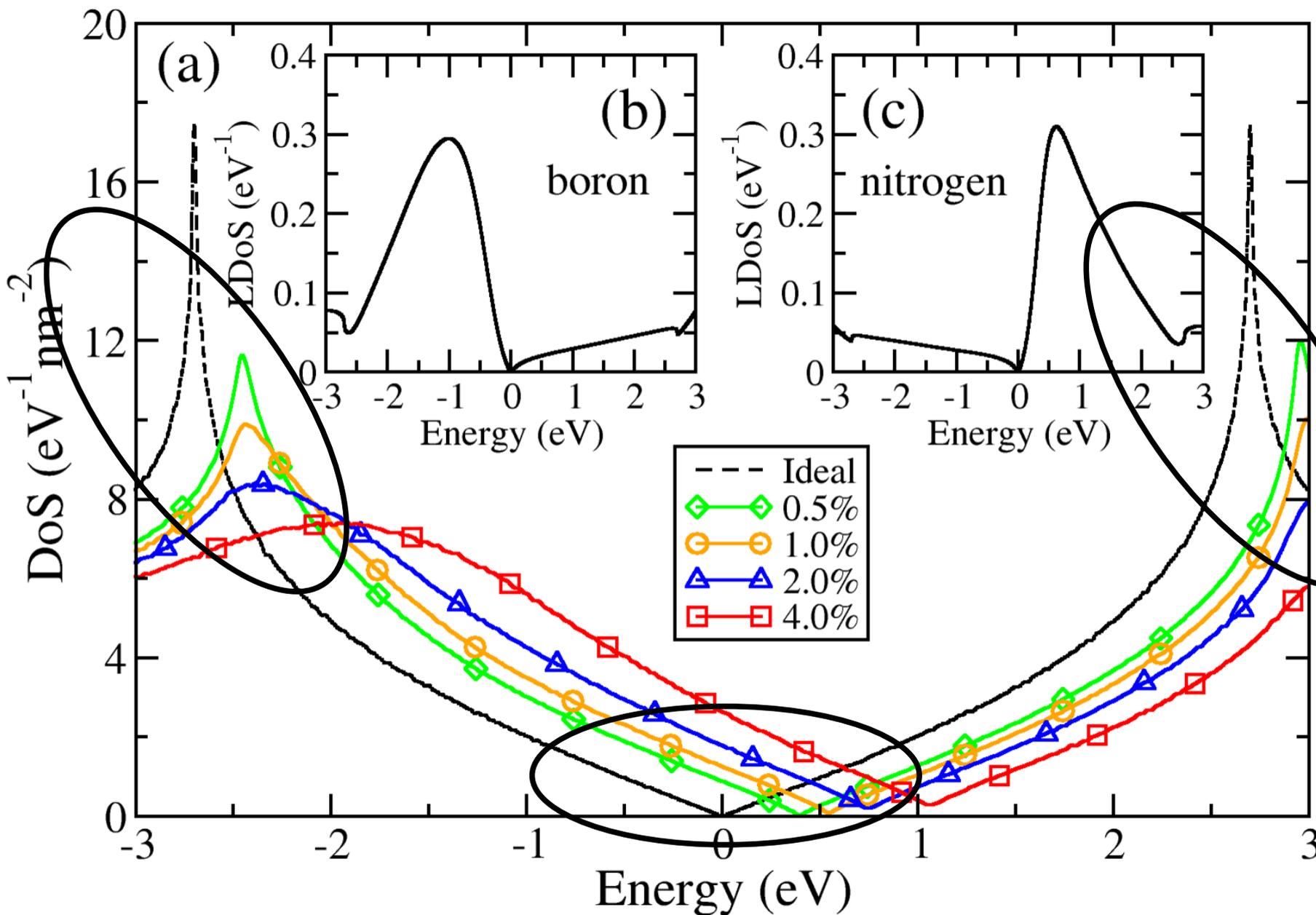


Electronic Transport Properties of Graphene

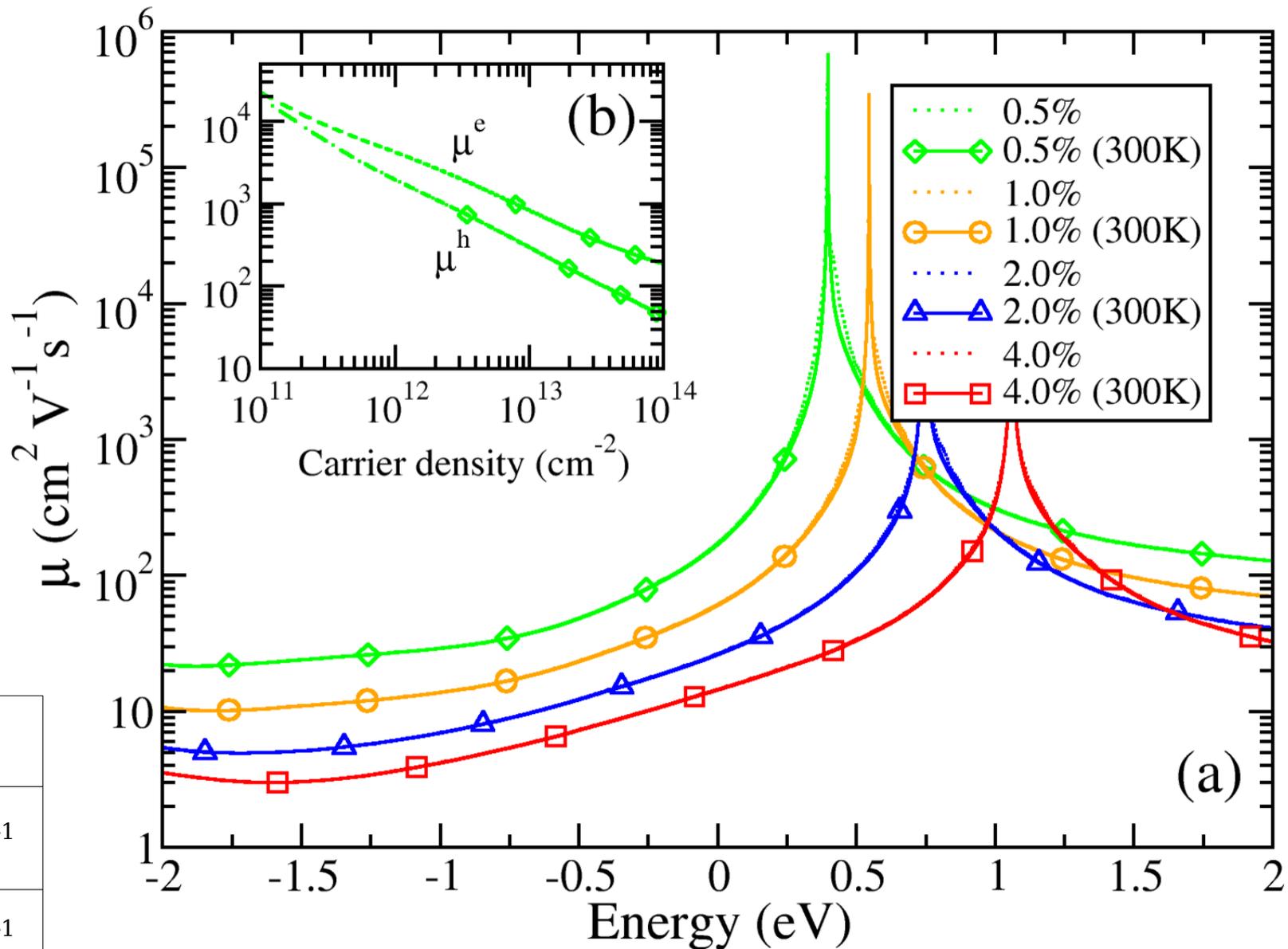
- Boron doped graphene



Boron doped graphene



Boron doped graphene



	mobility ($n=10^{12} \text{cm}^{-2}$)
e^-	$4250 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
h^+	$1970 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



Publications and Collaborators

Publications :

Electronic structure of semiconductor nanowires

Y. M. Niquet, A. Lherbier, N. H. Quang, M. V. Fernandez-Serra, X. Blase and C. Delerue, Phys. Rev. B **73**, 165319 (2006).

Electronic and optical properties of InAs/GaAs nanowire superlattices

Y. M. Niquet, Phys. Rev. B. **74**, 155304 (2006).

Ionization energies of donor and acceptor impurities in semiconductor nanowires : Importance of dielectric confinement

M. Diarra, Y. M. Niquet, C. Delerue and G. Allan, Phys. Rev. B **75**, 045301 (2007).

Electronic properties of InAs/GaAs nanowire superlattices

Y. M. Niquet, Physica E **37**, 204 (2007).

Effects of a shell on the electronic properties of nanowire superlattices

Y. M. Niquet, Nano Lett. **7**, 1105 (2007).

Quantum transport length scales in Silicon-based semiconducting nanowires : Surface roughness effects

A. Lherbier, M. Persson, Y. M. Niquet, F. Triozon and S. Roche, Phys. Rev. B. **77**, 085301 (2008).

Quantum dots and tunnel barriers in InAs/InP nanowire heterostructures : Electronic and optical properties

Y. M. Niquet and D. Camacho, Phys. Rev. B. **77**, 15316 (2008).

Screening and polaronic effects induced by a metallic gate and a surrounding oxide on donor and acceptor impurities...

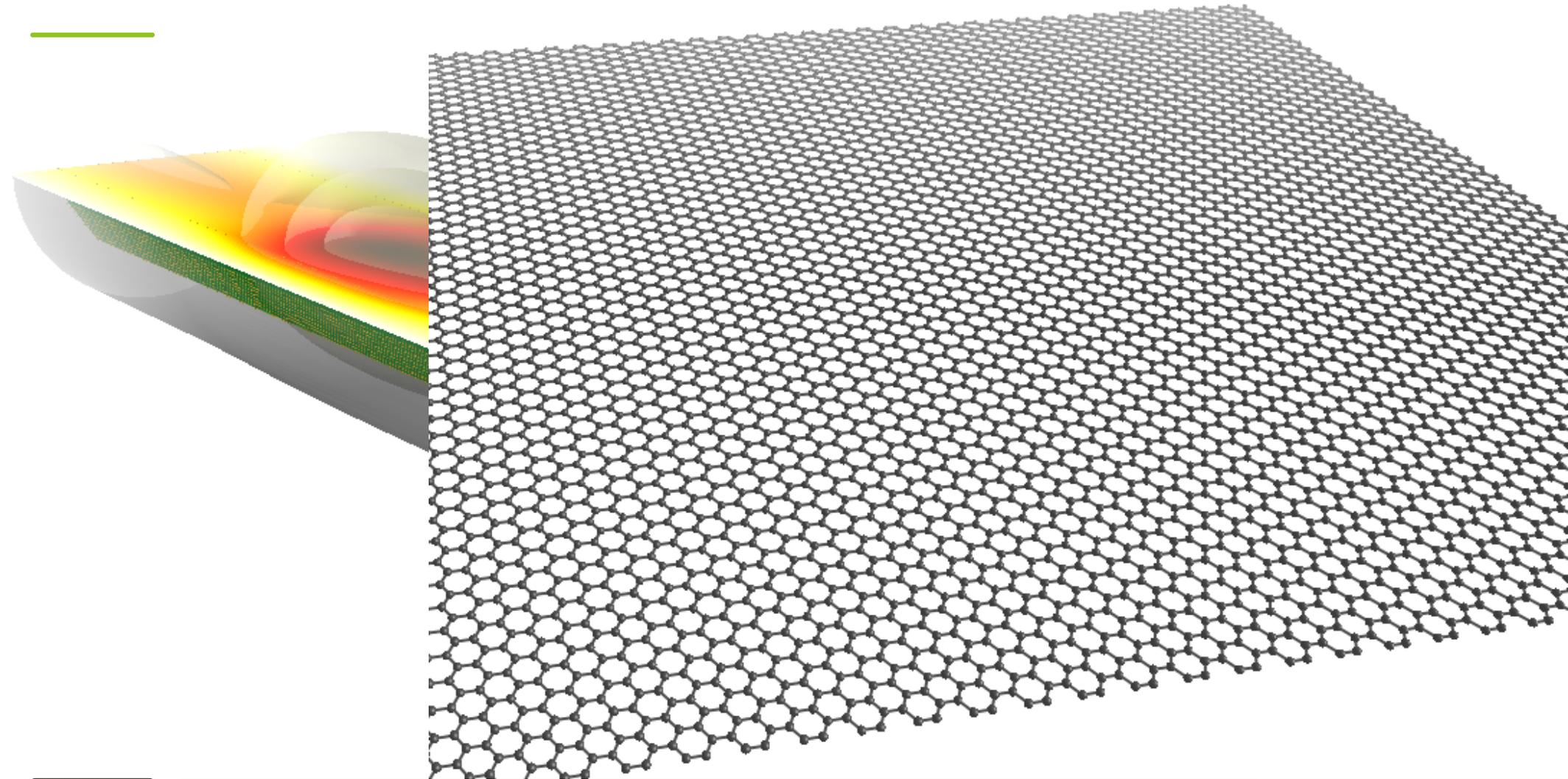
M. Diarra, C. Delerue, Y. M. Niquet and G. Allan, J. Appl. Phys. **103**, 073703 (2008).

Thanks to :

- Y. M. Niquet
- S. Roche
- T. Baron
- C. Delerue
- X. Blase
- F. Triozon
- M. Diarra
- M. Persson
- D. C. Camacho

FIN

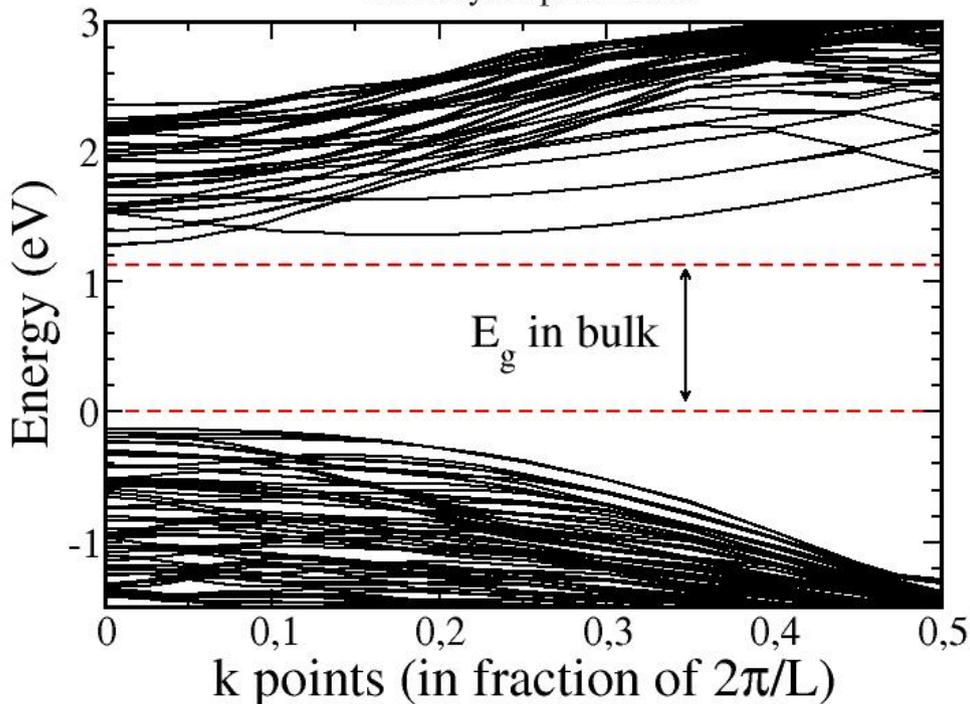
M



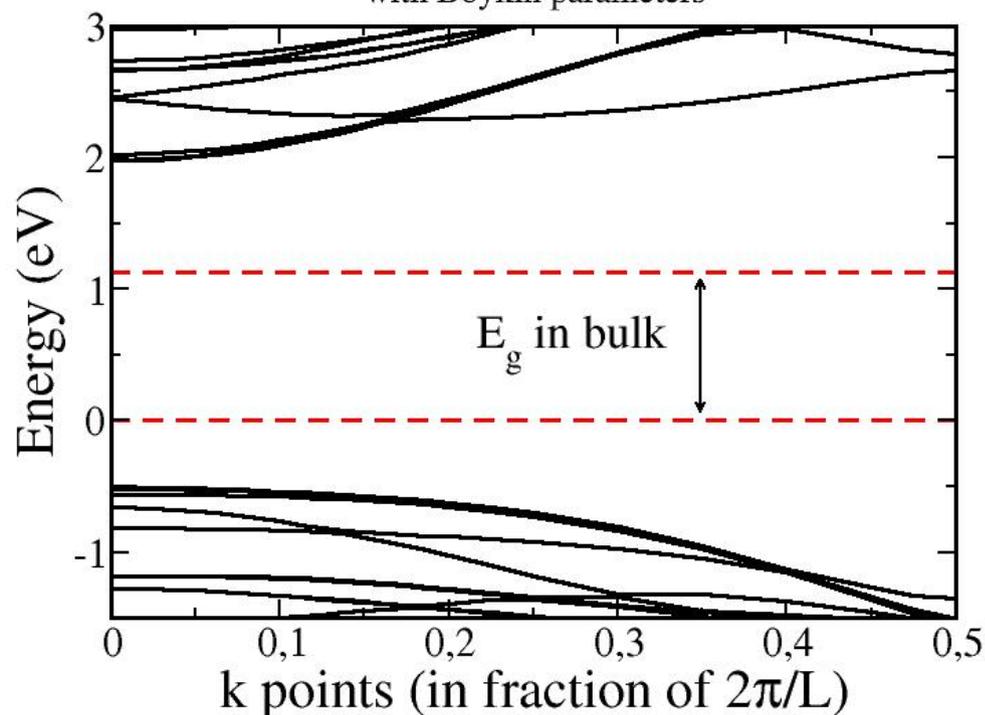
$D = 4.00 \text{ nm}$

$D = 1.46 \text{ nm}$

Band Structure of 2nm radius Si nanowire [001]
with Boykin parameters

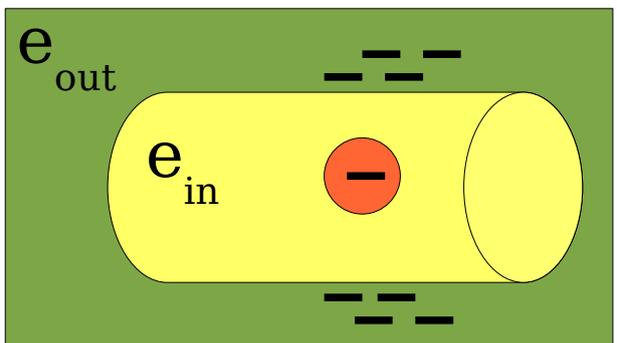
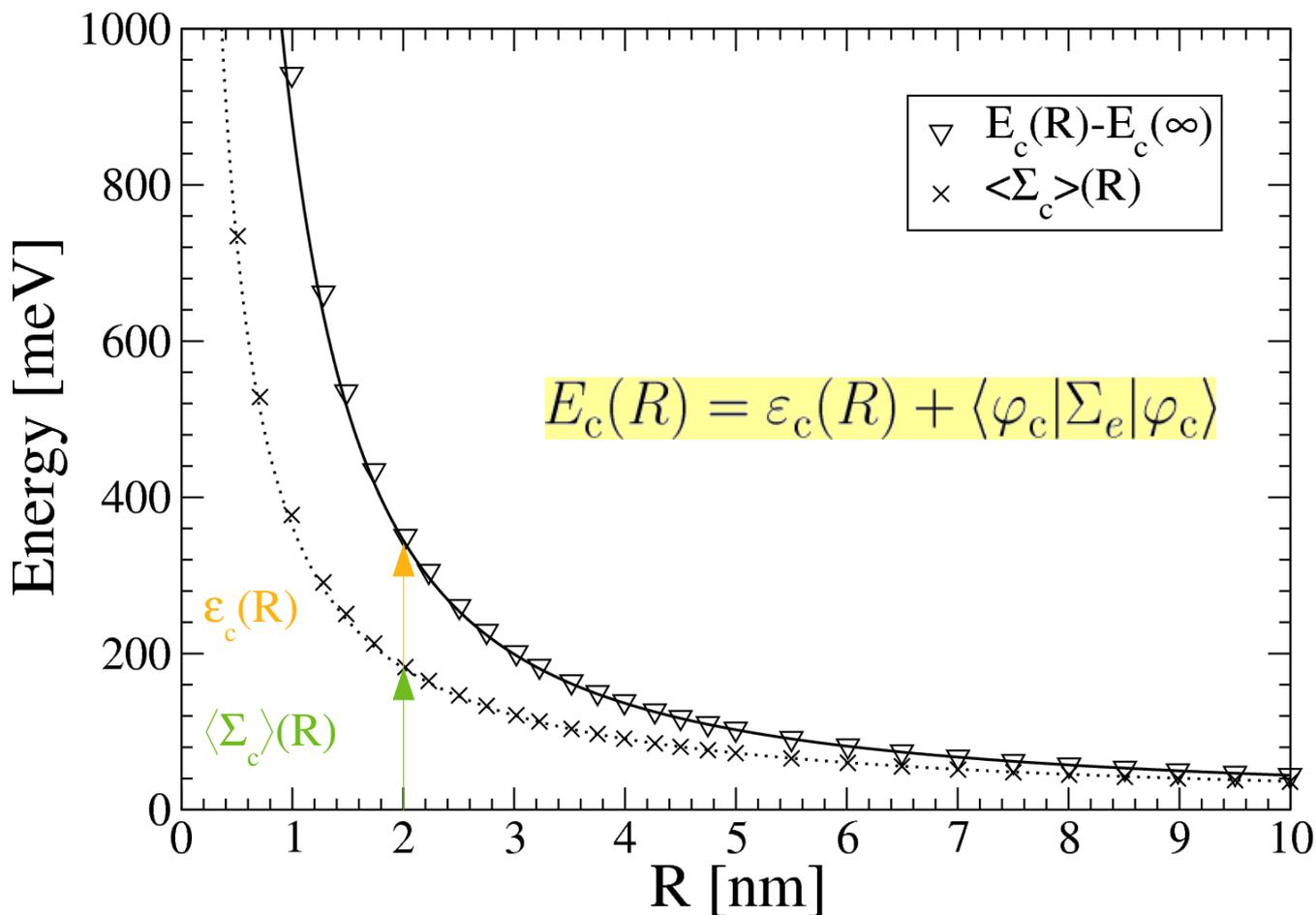


Band Structure of 0.73nm radius Si nanowire [001]
with Boykin parameters



Bandgap increases with decreasing nanowire diameter. Conduction (valence) bands are shifted to higher (lower) energies.

$\langle 111 \rangle$ -oriented Si nanowires



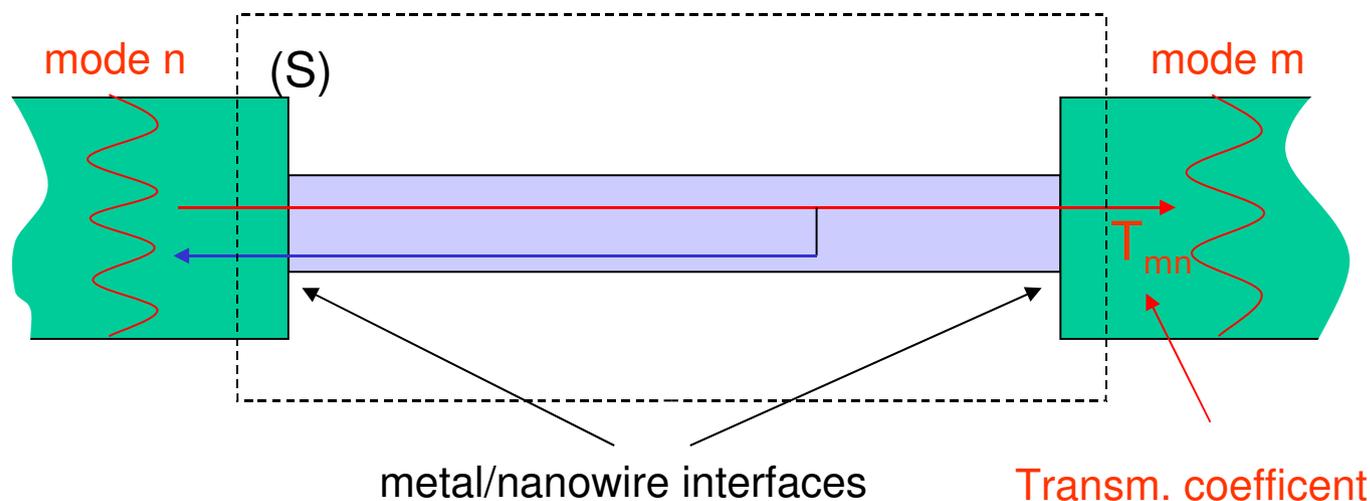
Bandgap with dielectric mismatch:

The self-energy correction significantly shifts the conduction bands upwards.

Self-energy corrections decrease slower than quantum confinement

Collaboration Lille (IEMN):
 Mamadou Diara, Yann-Michel Niquet, Christophe Delerue and Guy Allan,
 Phys Rev B **75**, 045301(2007)





$$\frac{dI}{dV} = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{mn}(E) = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[\hat{\Gamma}_L \hat{G}^r \hat{\Gamma}_R \hat{G}^a]$$

$$\hat{G}^{r,a}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} - \hat{\Sigma}_L^{r,a}(E) - \hat{\Sigma}_R^{r,a}(E)}$$

Green functions

Hamiltonian of the finite system (S) Self-energy of the electrodes

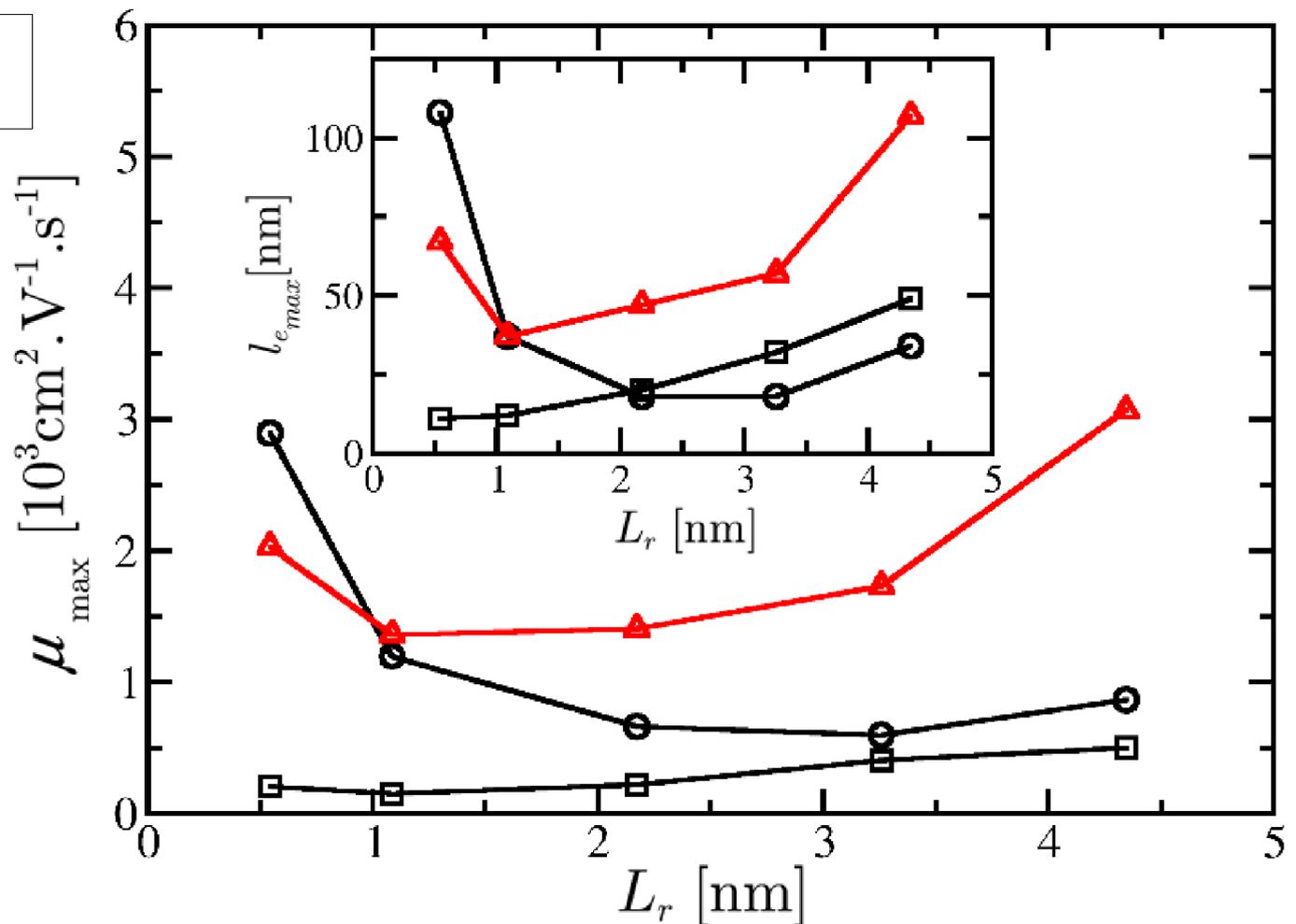
$$\hat{\Gamma}_{L,R} = i(\hat{\Sigma}_{L,R}^r - \hat{\Sigma}_{L,R}^a) \quad \Gamma / \hbar \approx \text{escape time from (S) to the contacts}$$

[110] SiNW
R = 1 nm

Maximum value of mobility and mean free path for electrons and holes (1st and 2nd pics) are plotted versus L_r .

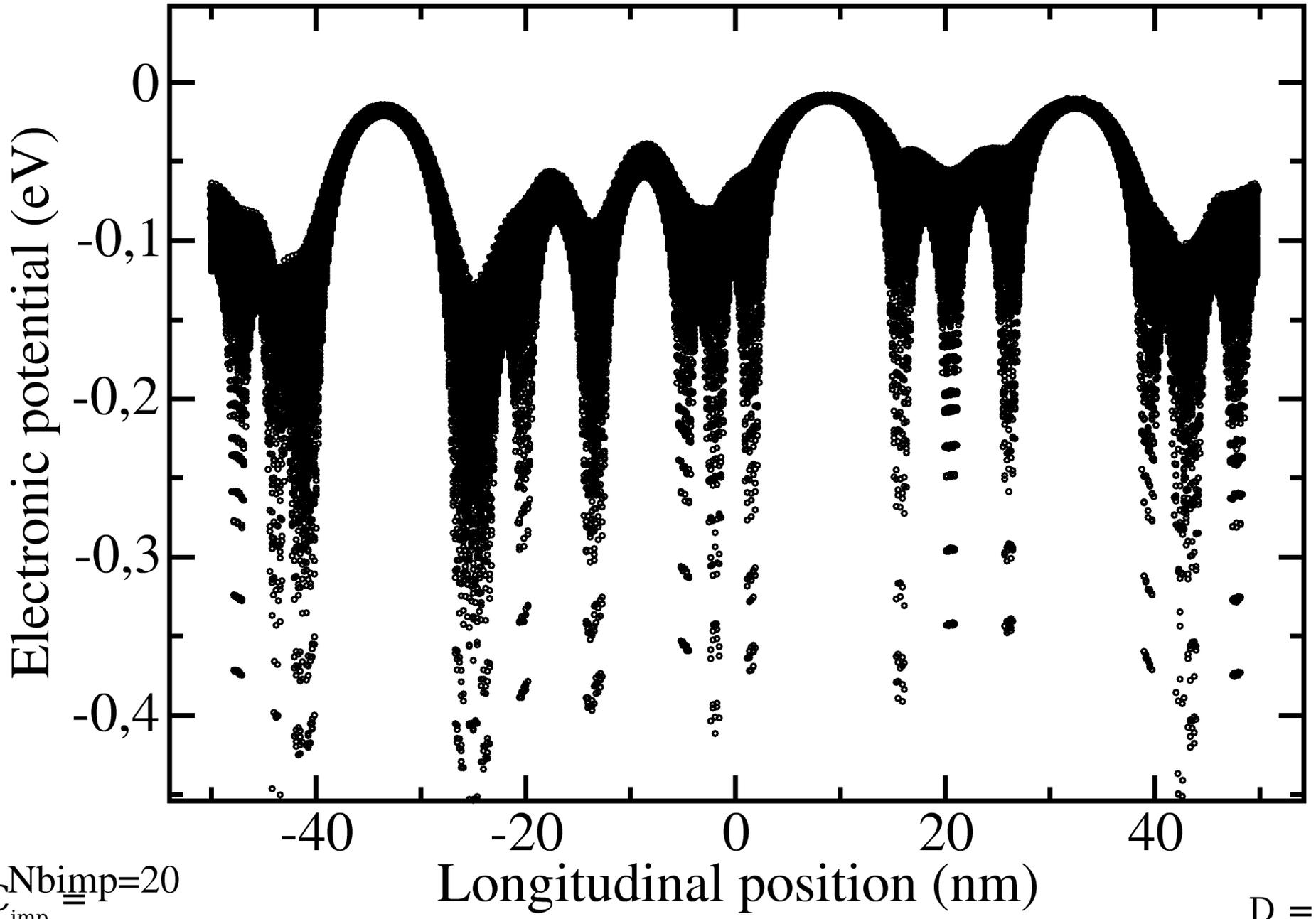
There is a crossing between holes and electrons at $L_r \sim 1$ nm.

There is also a crossing in the mean free path between 1st and 2nd pic of holes.



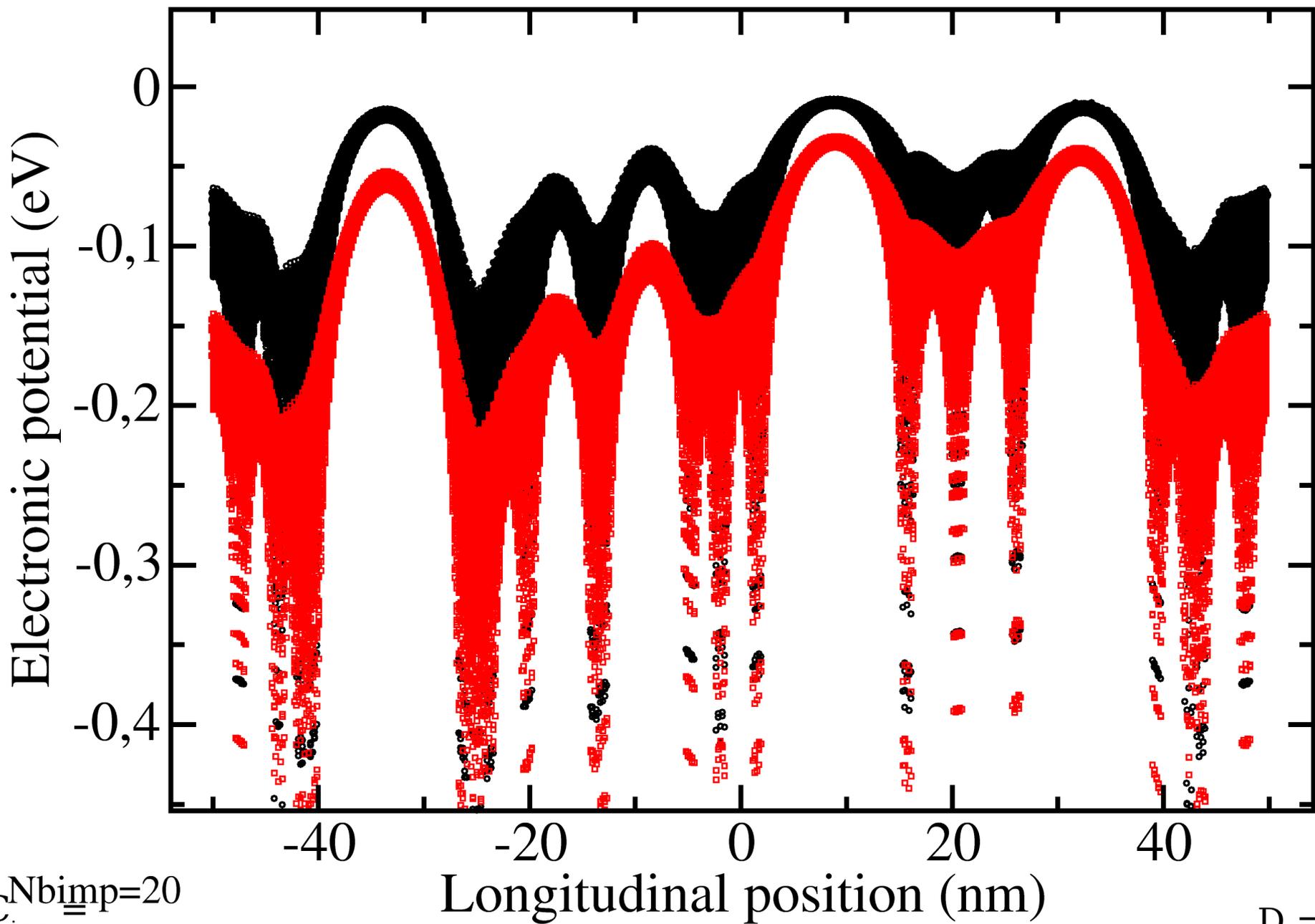
The trend of the curve is parabolic. At short L_r the fluctuations are too fast that the charge carriers don't feel the roughness. At intermediate value of L_r the effects of roughness is maximum, the charge can efficiently backscatter. At large L_r the transport properties rise up because we progressively recover the clean case.

• $V_{\text{Ne}=0, R_g=4\text{nm}}$



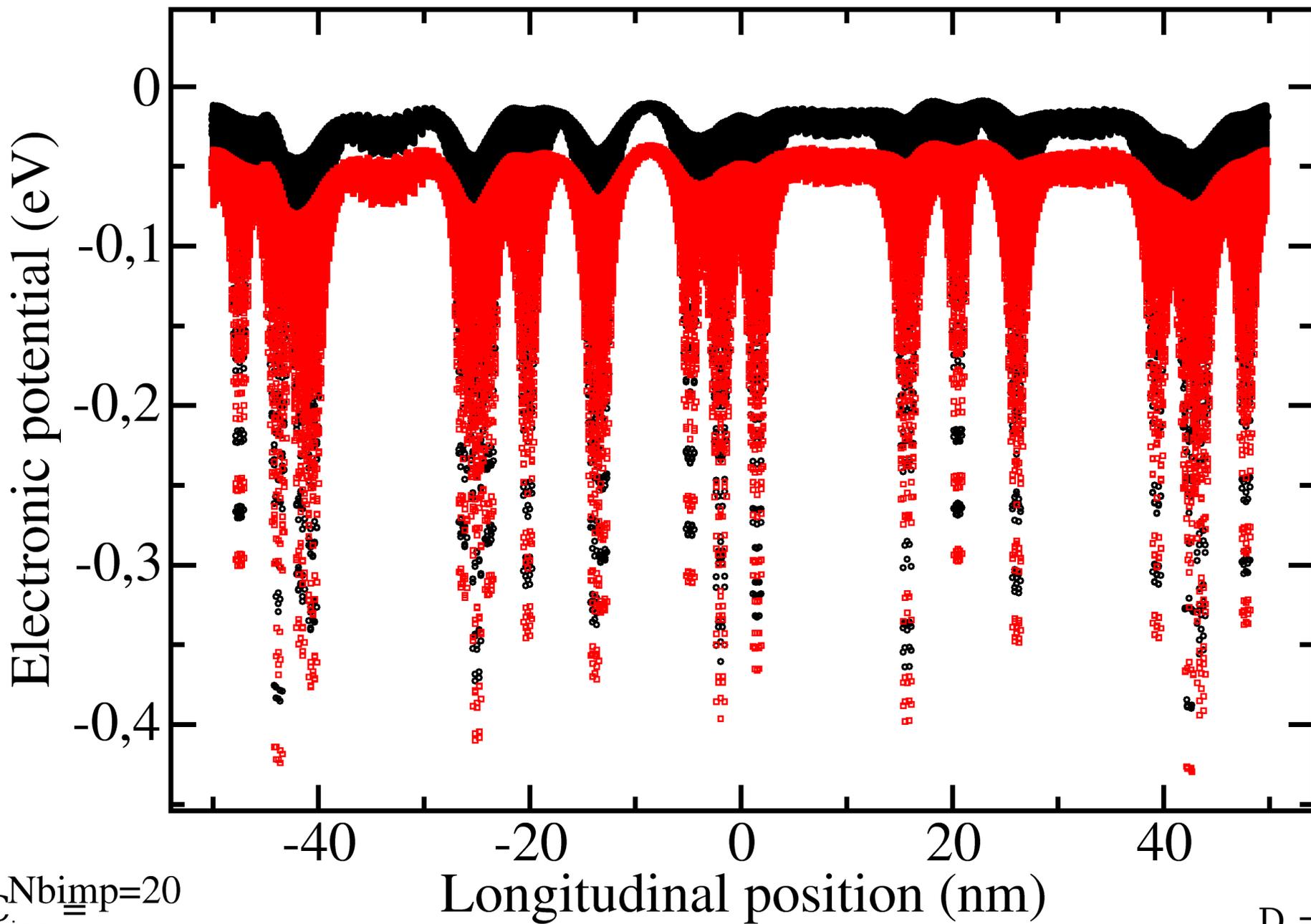
$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}}=20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

$D = 5$
nm



$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}} = 20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

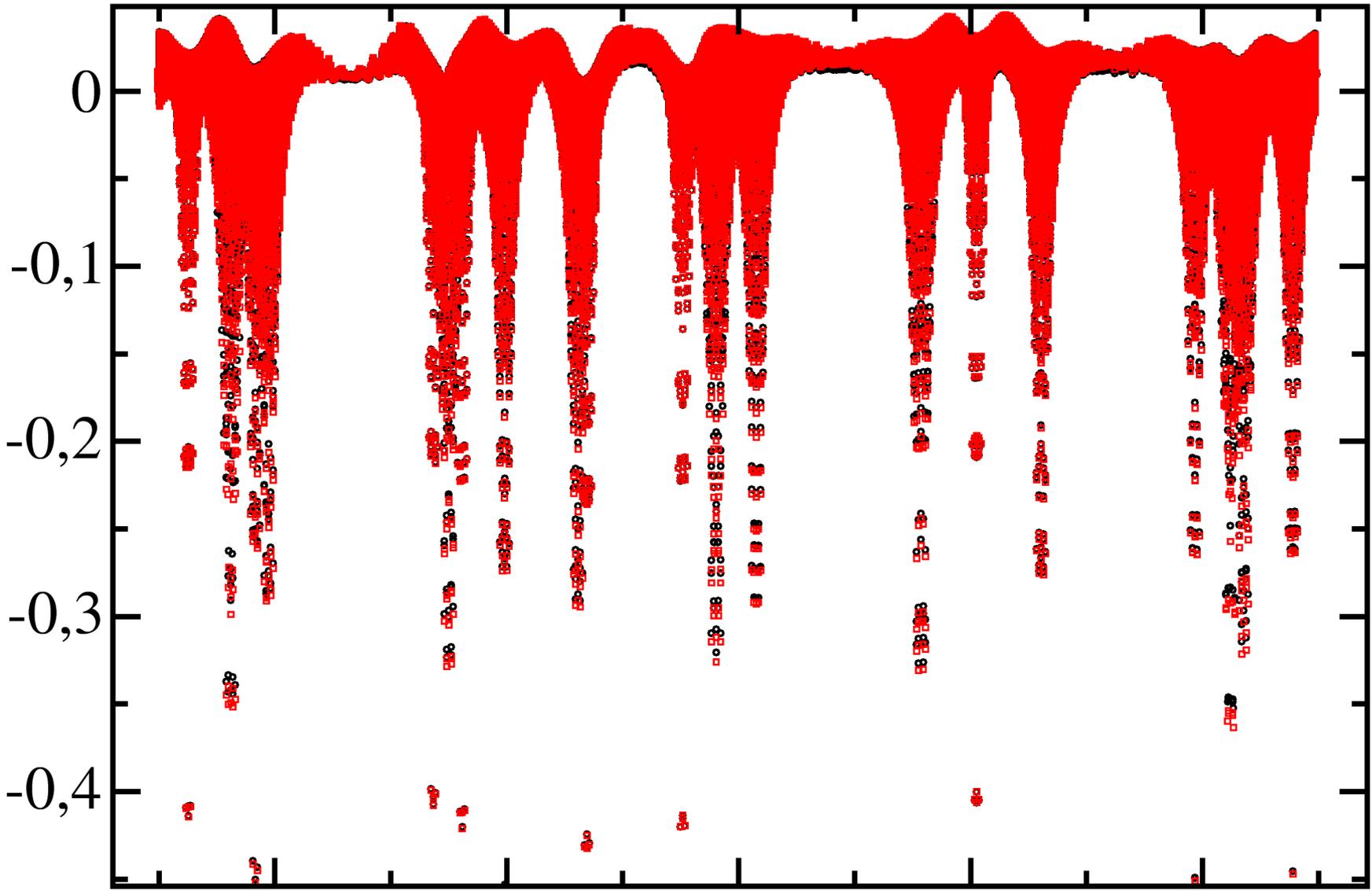
$D = 5$
nm



$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}} = 20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

$D = 5$
 nm

Electronic potential (eV)

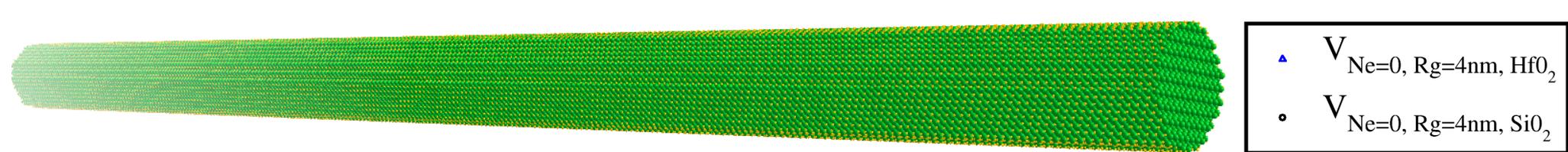


○ $V_{\text{Ne}=20, Rg=4\text{nm}}$
□ $V_{\text{Ne}=20, Rg=6\text{nm}}$

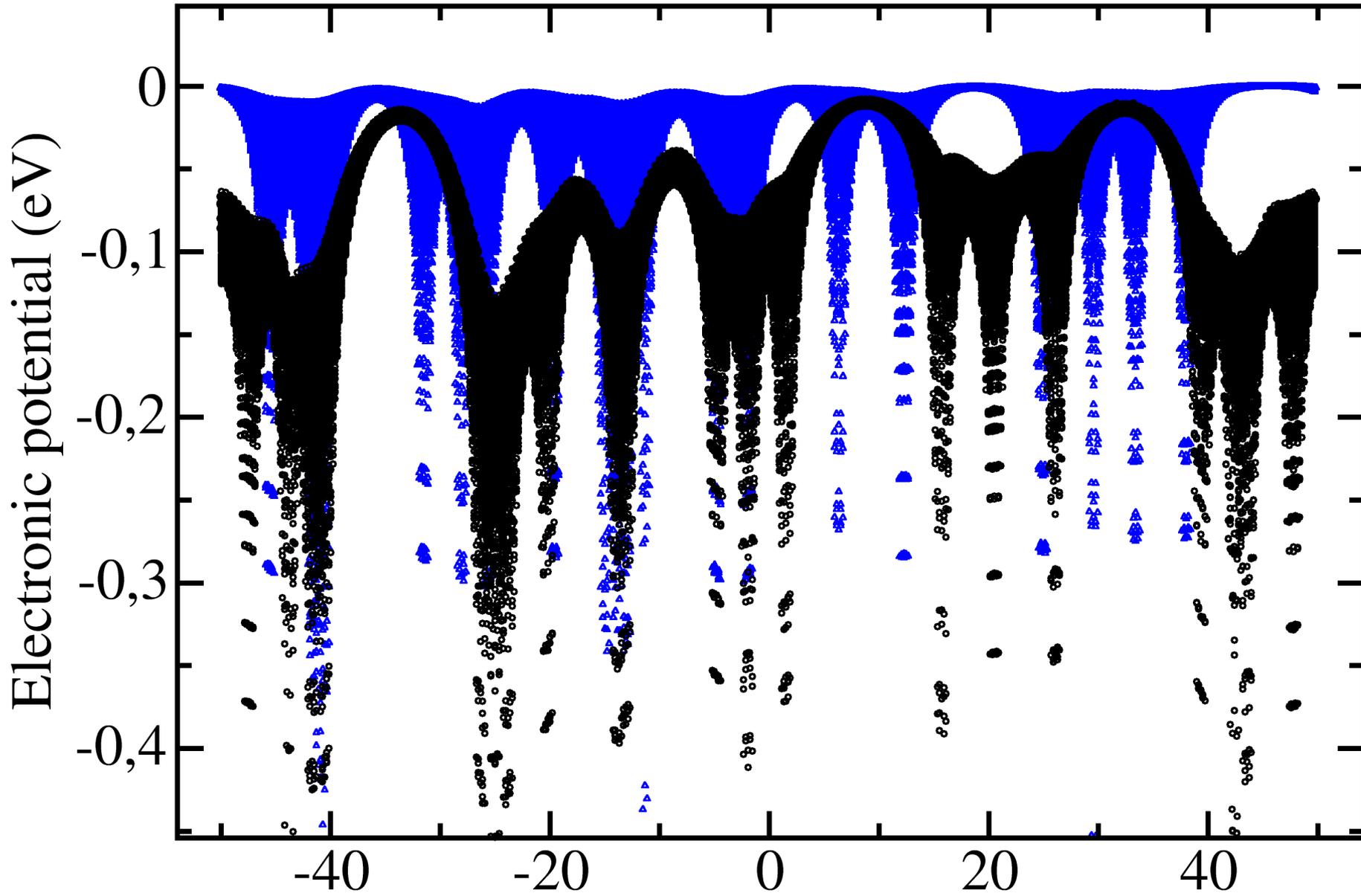
$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}}=20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

Longitudinal position (nm)

$D = 5$
nm

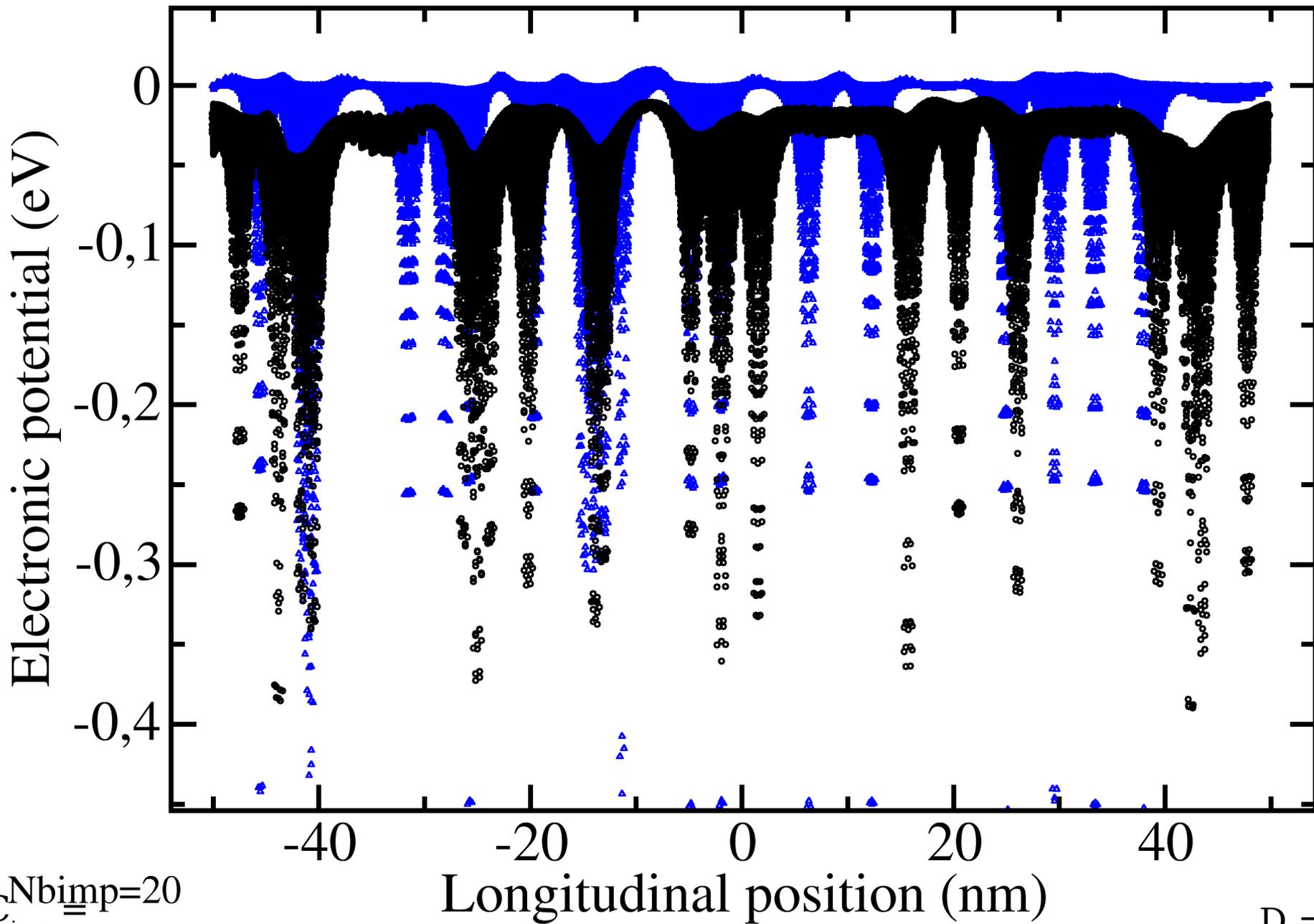
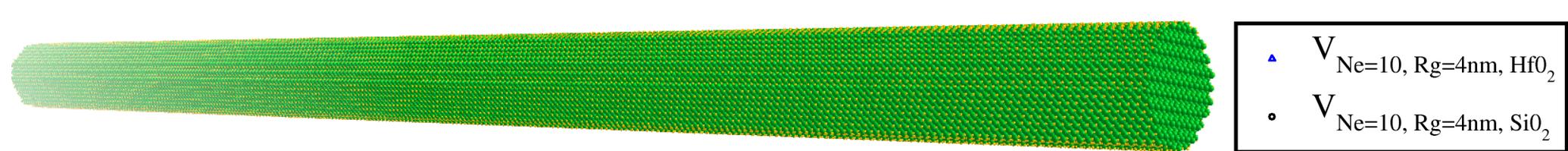


\blacktriangle $V_{\text{Ne}=0, R_g=4\text{nm}, \text{HfO}_2}$
 \circ $V_{\text{Ne}=0, R_g=4\text{nm}, \text{SiO}_2}$



$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}} = 20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

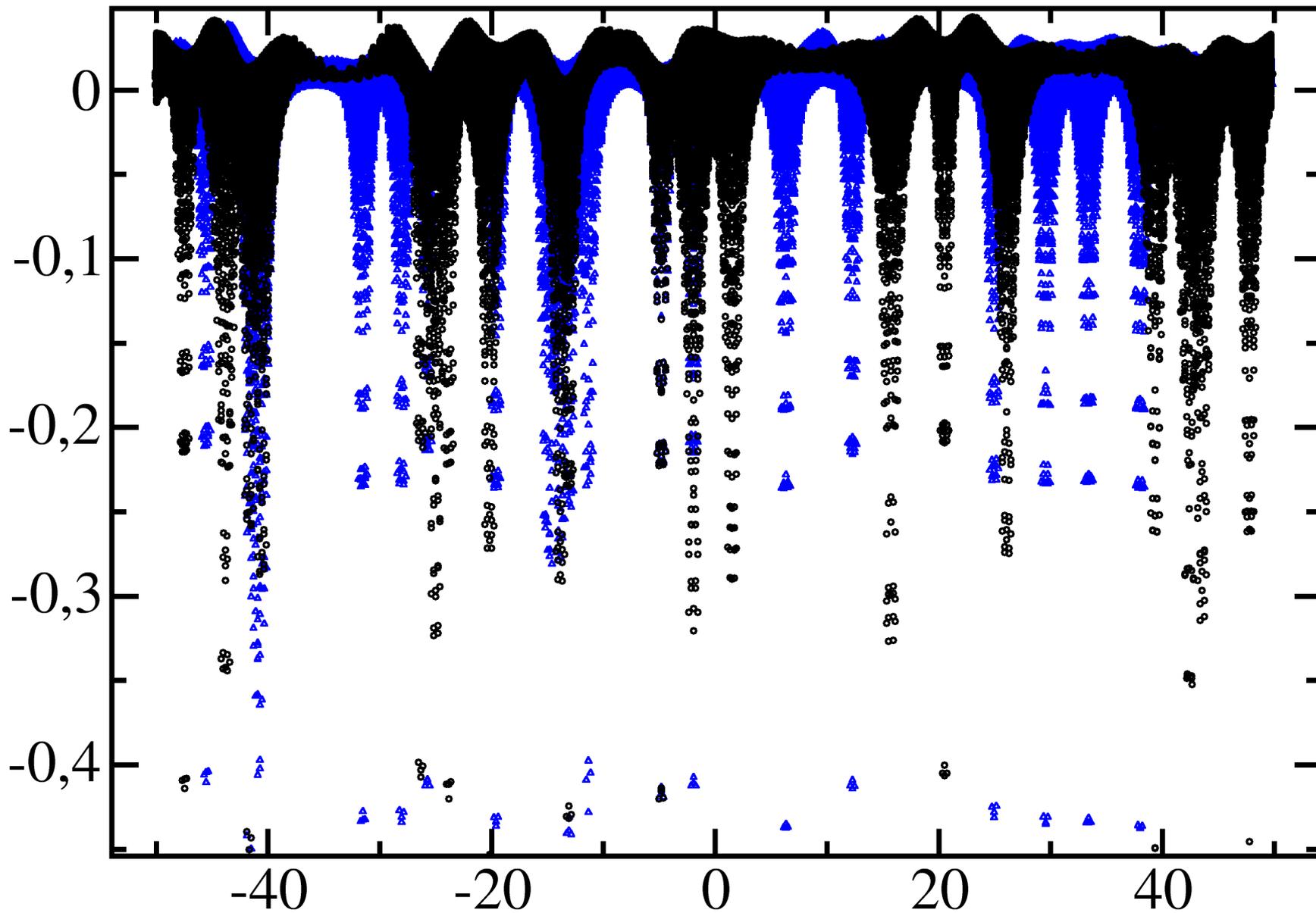
$D = 5$
 nm



$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}} = 20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

$D = 5$
 nm

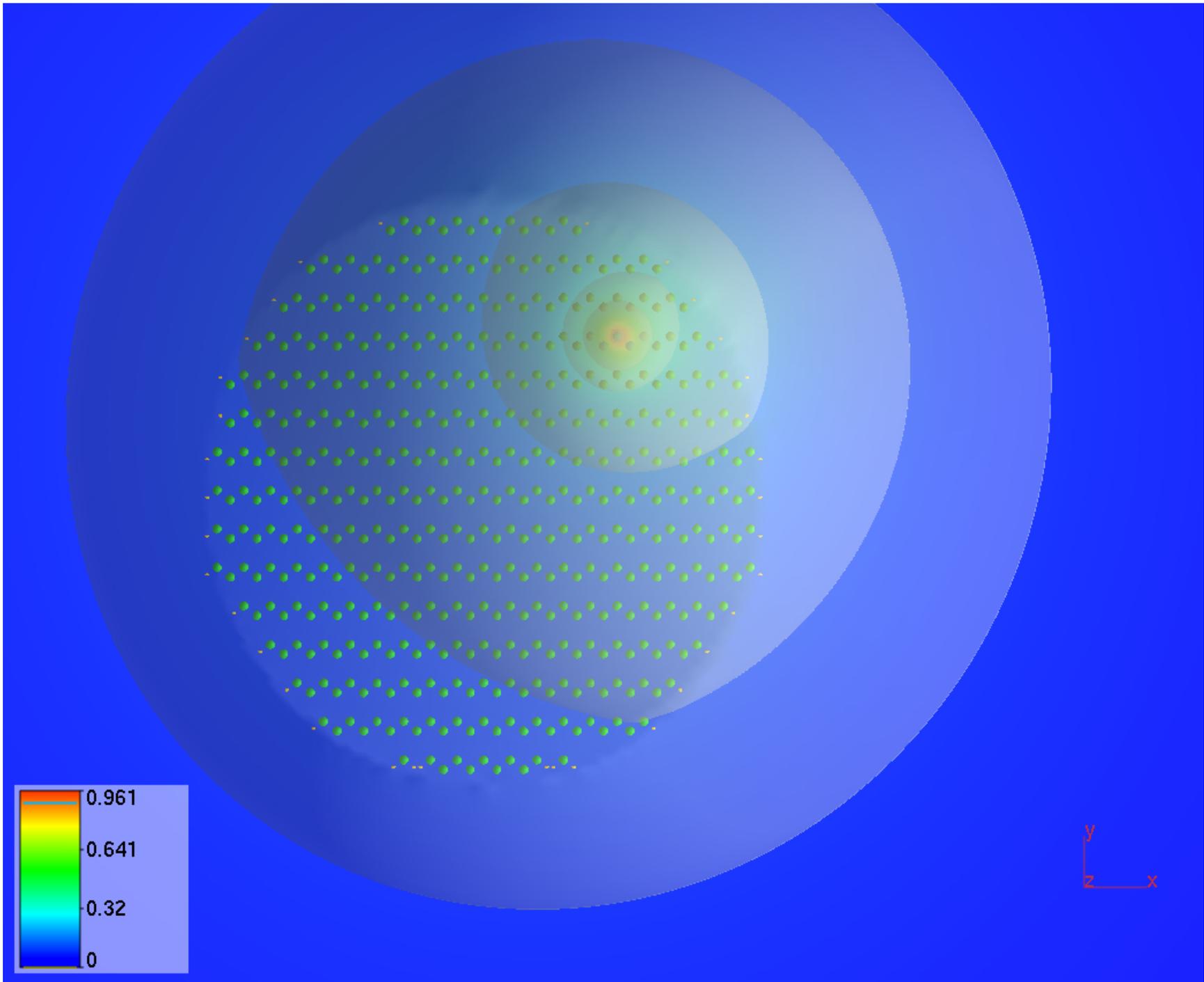
Electronic potential (eV)

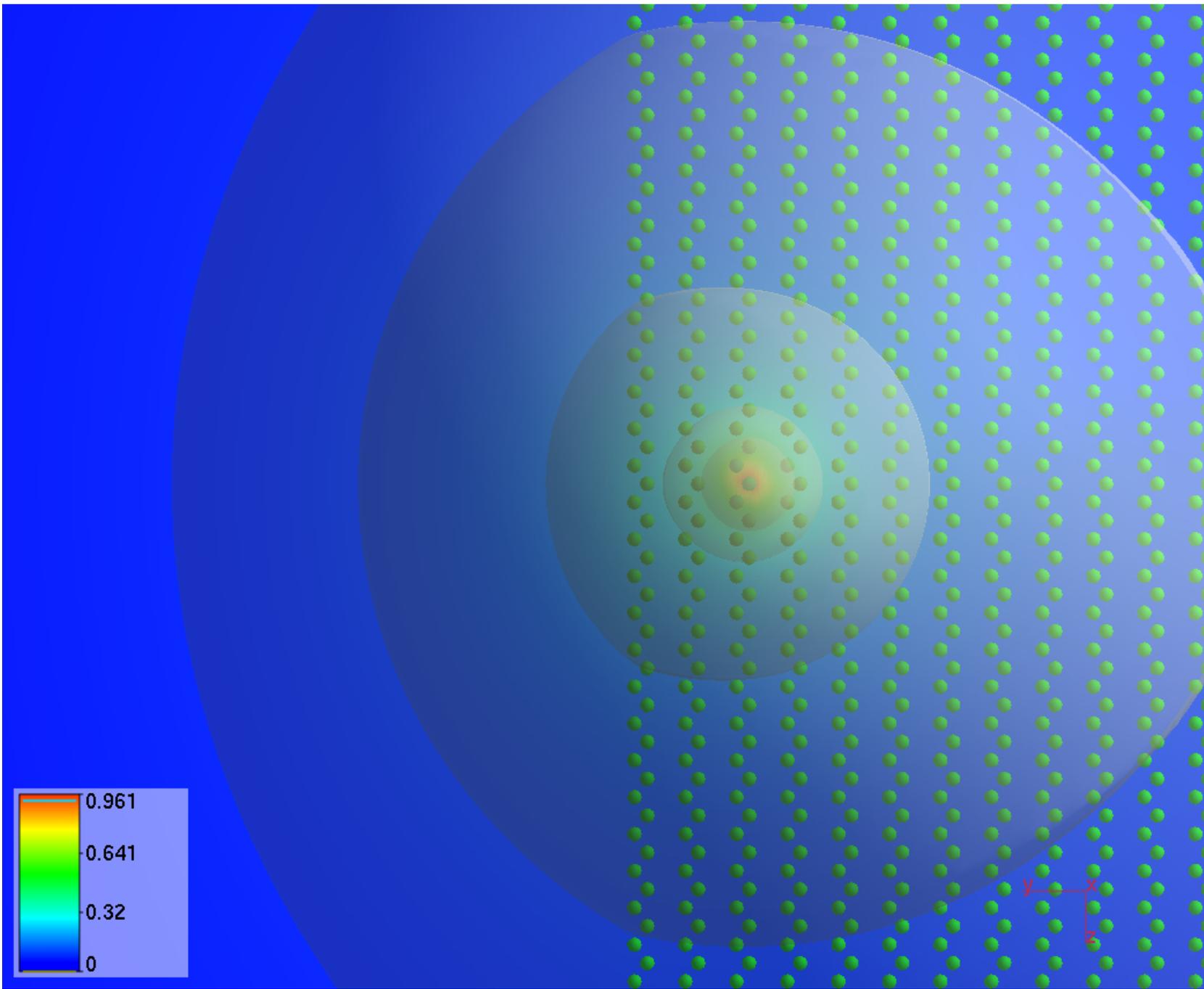


$C_{\text{imp}}^{\text{Nb}} = 20$
 $1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

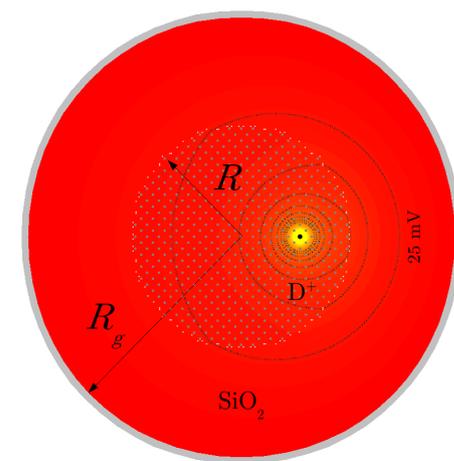
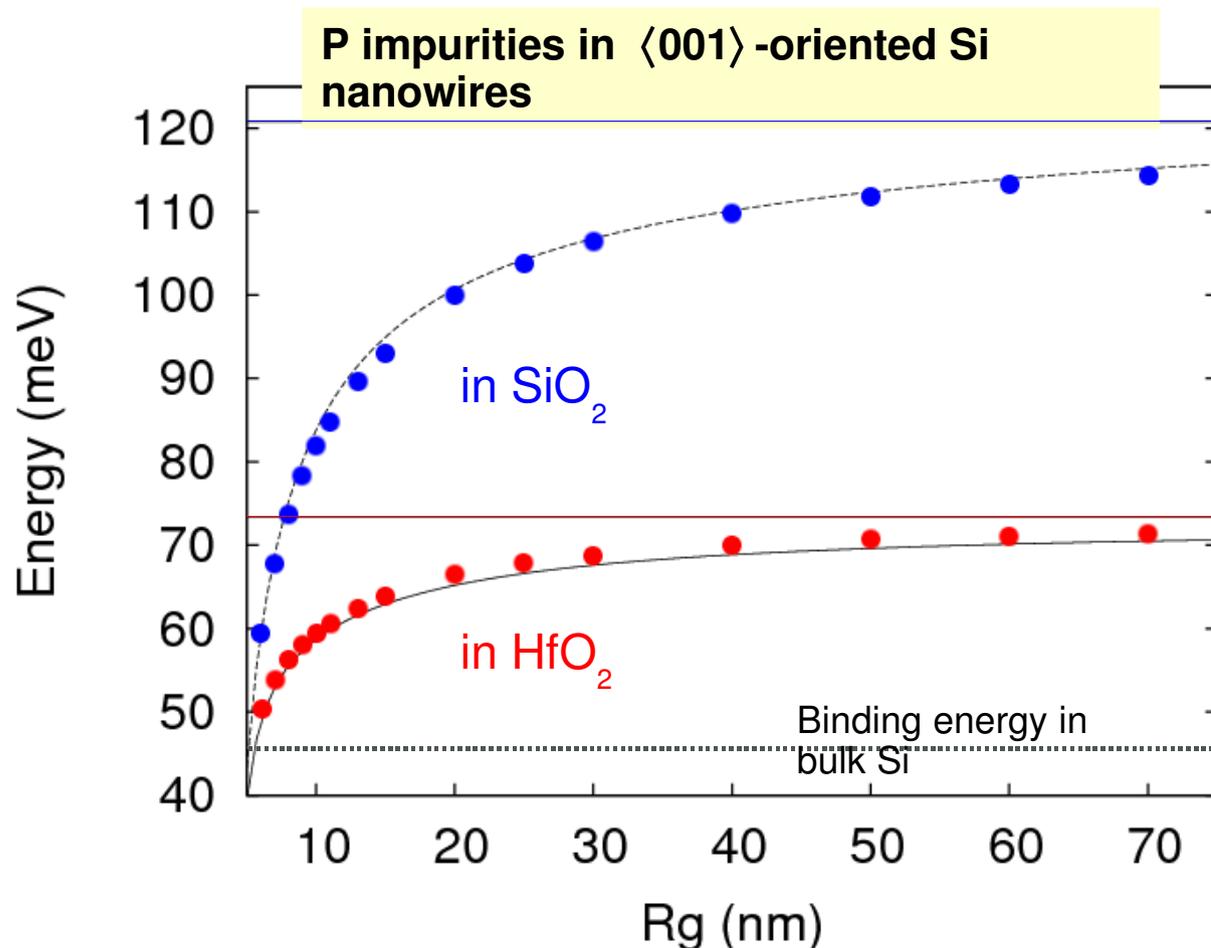
Longitudinal position (nm)

$D = 5$
nm





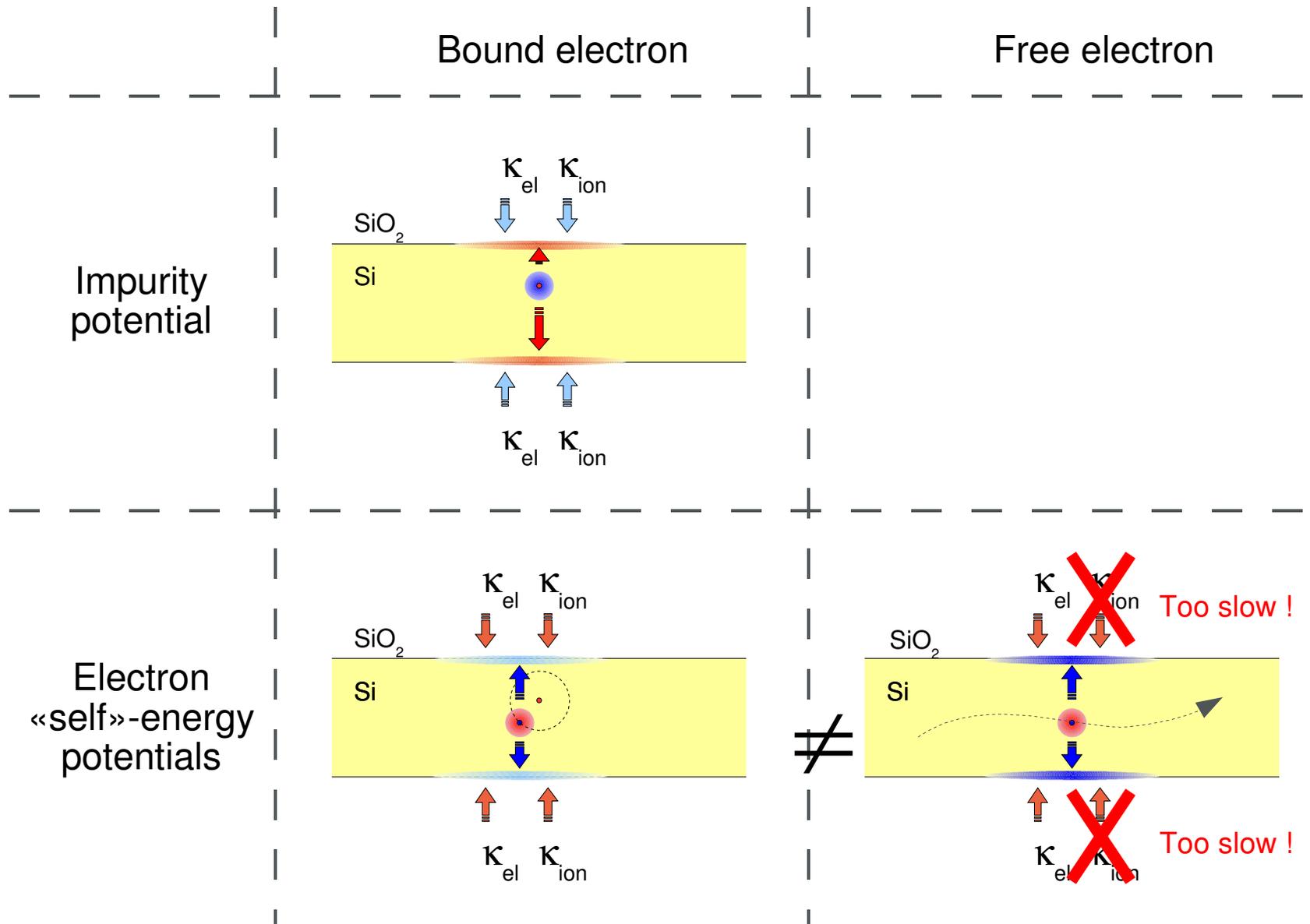
Effect of an « all-around » metallic gate



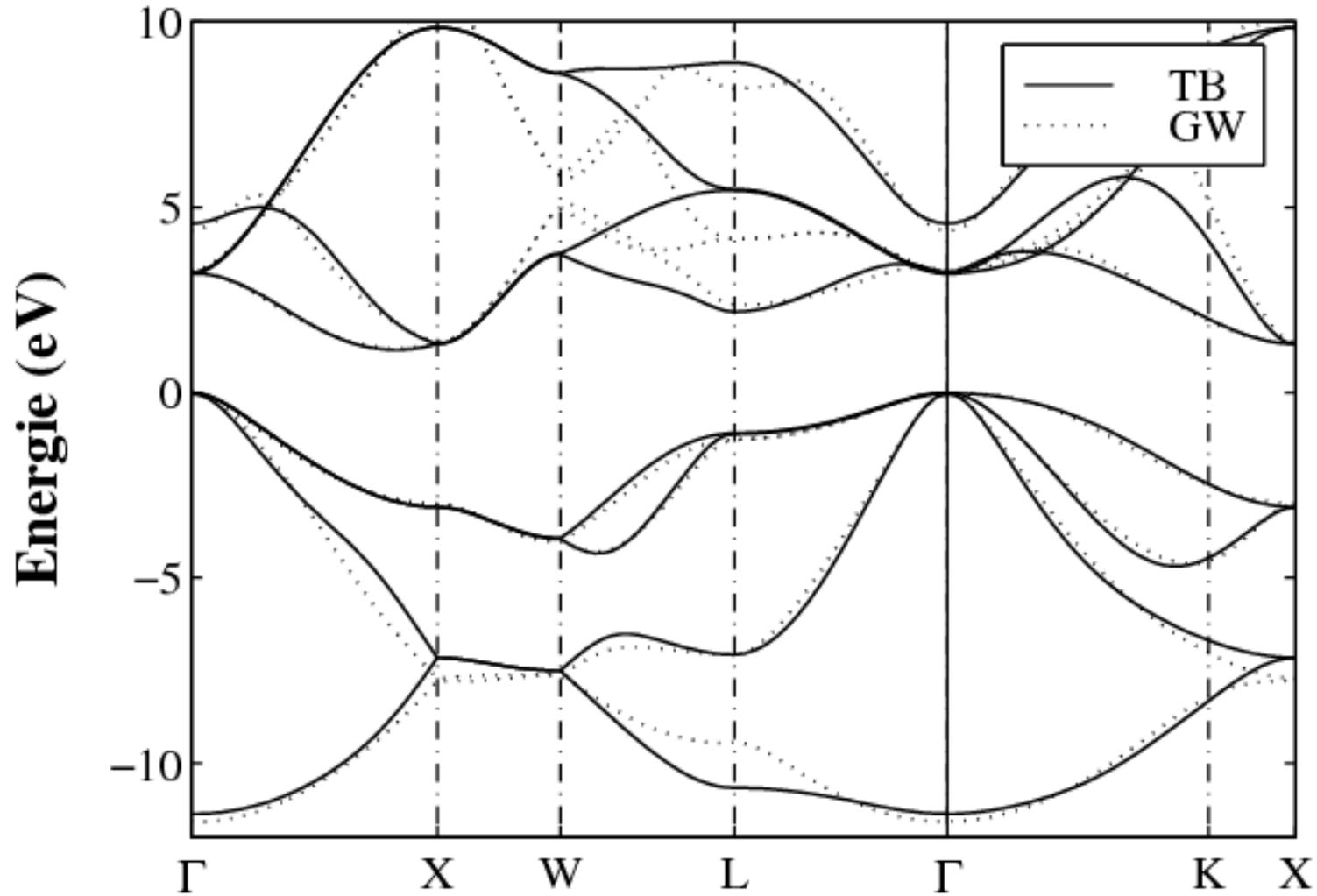
R = 5 nm

- Strong decrease of the binding energy.
- **Analytical model available for any κ_{in} , κ_{out} , R and $R_g \Rightarrow$ Can easily be taken into account in device simulation.**

...and polaron problem



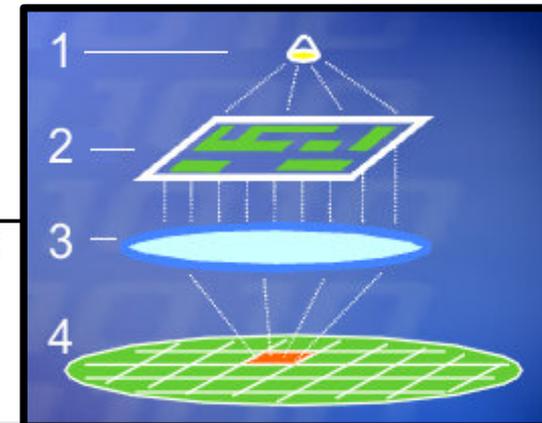
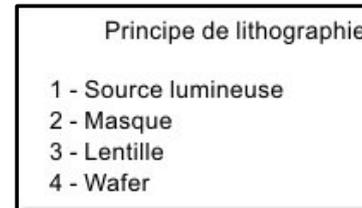
- The dielectric response of the ions binds the electron to the impurity (polaron) !



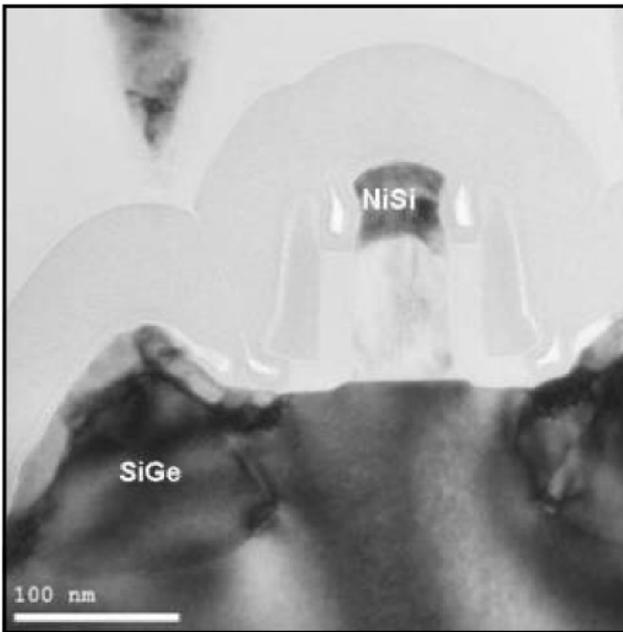
Le transistor atteint désormais des tailles nanométriques. Il devient de plus en plus compliqué de manufacturer de tels nano-objets sur de larges plaques de silicium.

http://www.onversity.com/cgi-bin/progactu/actu_aff.cgi?Eudo=bgteob&P=00000924

L'approche traditionnelle consiste à graver un wafer à l'aide de masques et de lentilles. On parle d'approche TOP-DOWN.

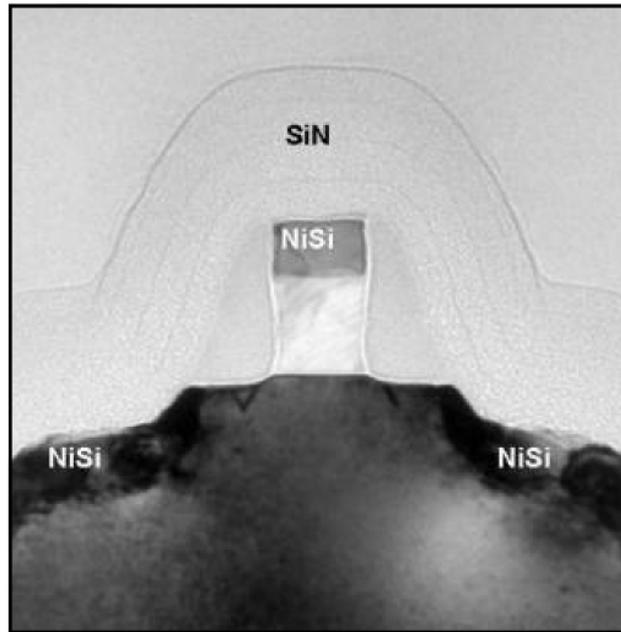


90nm



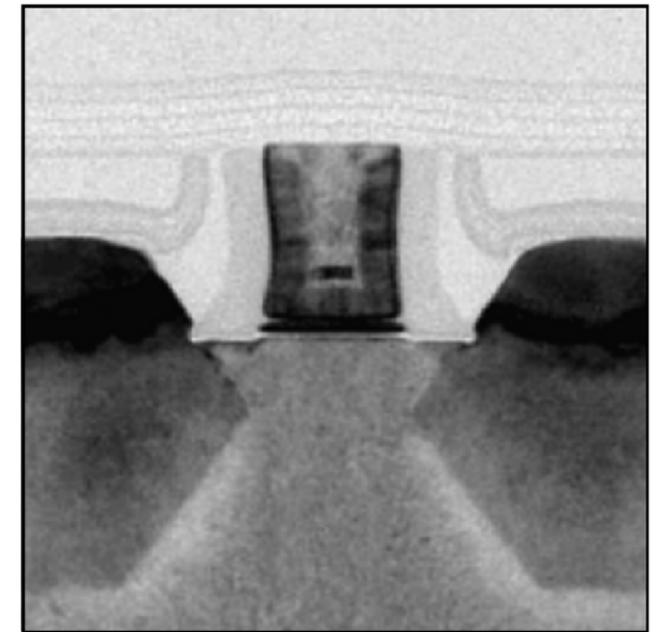
2003

65nm



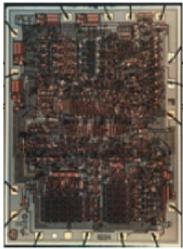
2005

45nm

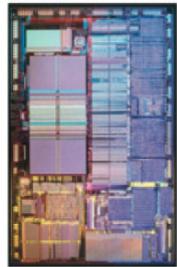


2007

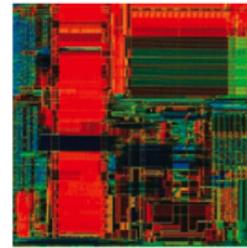
http://www.solid-state.com/display_article/316496/5/none/none/Dept/IEDM-shows-real-details-of-materials-technology-devices/



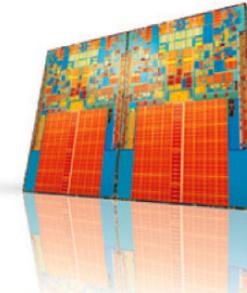
1971



1989



2002



2007

Intel® 4004 processor
Introduced 1971
Initial clock speed

108 KHz

Number of transistors

2,300

Manufacturing technology

10μ

Intel486™ processor
Introduced 1989
Initial clock speed

25 MHz

Number of transistors

1,200,000

Manufacturing technology

1μ

Intel® Itanium® 2 processor
Introduced 2002
Initial clock speed

1 GHz

Number of transistors

220,000,000

Manufacturing technology

0.13μ

Quad-Core Intel® Xeon® processor (Penryn)
Dual-Core Intel® Xeon® processor (Penryn)
Quad-Core Intel® Core™2 Extreme processor (Penryn)
Introduced 2007
Initial clock speed

> 3 GHz

Number of transistors

820,000,000

Manufacturing technology

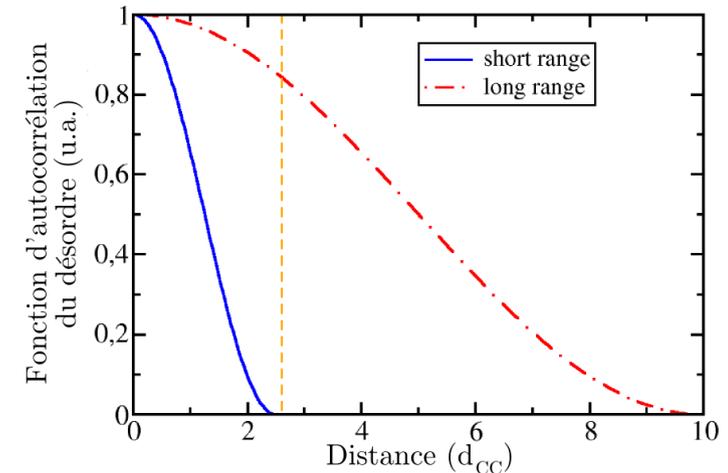
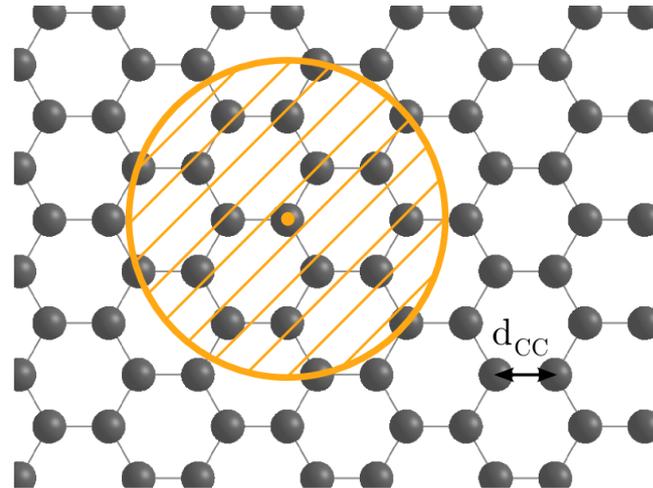
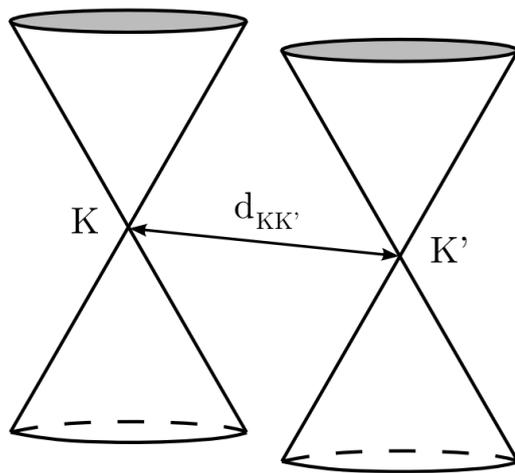
45nm

<http://www.intel.com/pressroom/kits/quickref.htm>

<http://gizmodo.com/gadgets/pcs/intel-chips-1971-to-2007-plus-a-timeline-of-the-transistors-60-years-332203.php>

Les propriétés électroniques du graphène sont quelque peu particulières et donnent lieu à des propriétés de transport intéressantes.

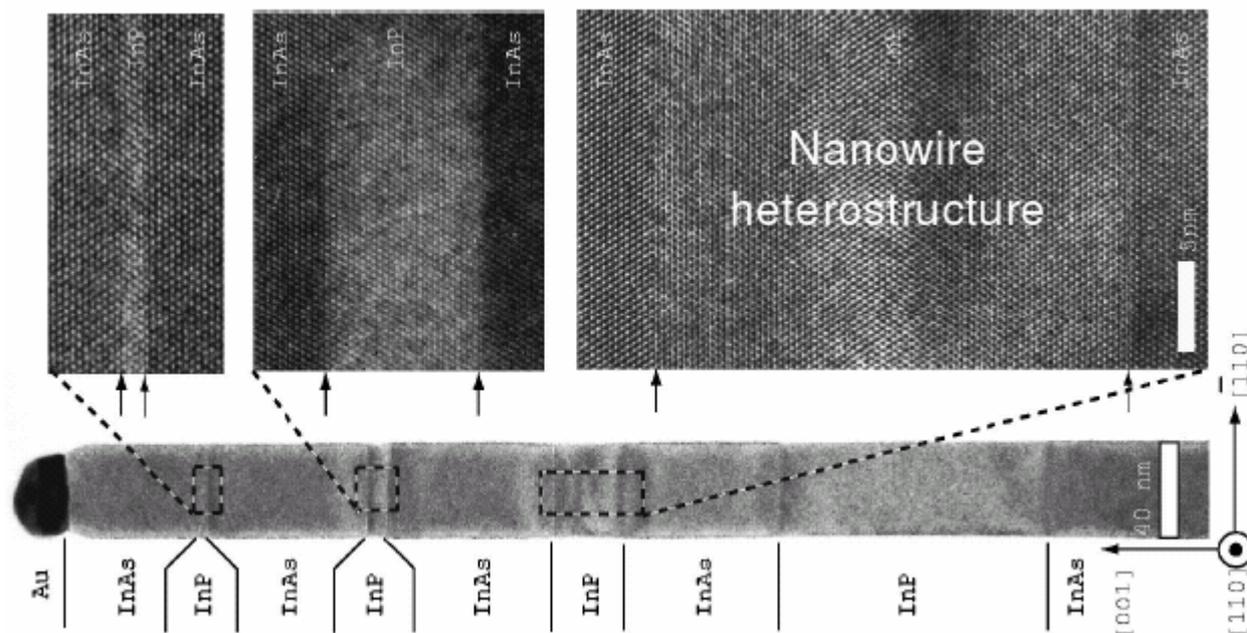
Notamment on pense que la portée du potentiel de désordre peu jouer un rôle important dans les propriétés observés expérimentalement. On fait donc la distinction entre potentiel « short range » et « long range ».



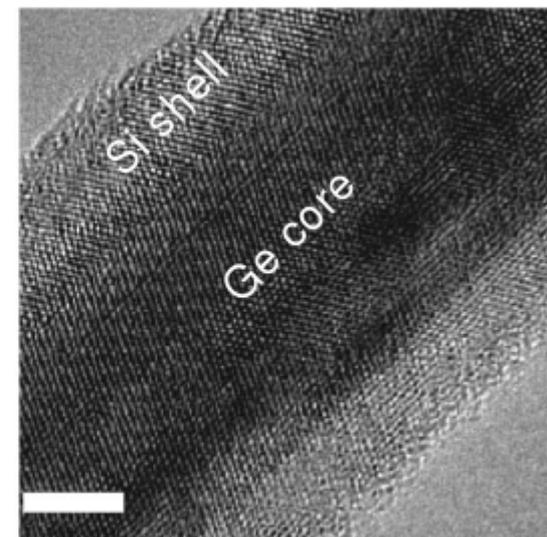
En laboratoire, une autre approche, l'approche BOTTOM-UP, permet d'effectuer la croissance de nano-objets à partir des constituants élémentaires. Parmi les méthodes de croissance de cette approche, la méthode VLS (Vapeur-Liquide-Solide) est l'une des plus utilisées pour réaliser la croissance de nanofils semiconducteurs.

Les nanofils présentent l'avantage de pouvoir relaxer les contraintes en tension et en dilatation selon les axes transversaux, ce qui permet par exemple la croissance d'hétérostructures à fort désaccord de maille sans dislocations.

M. T. Björk *et al.*, Appl. Phys. Lett. **80**, 1058 (2002)

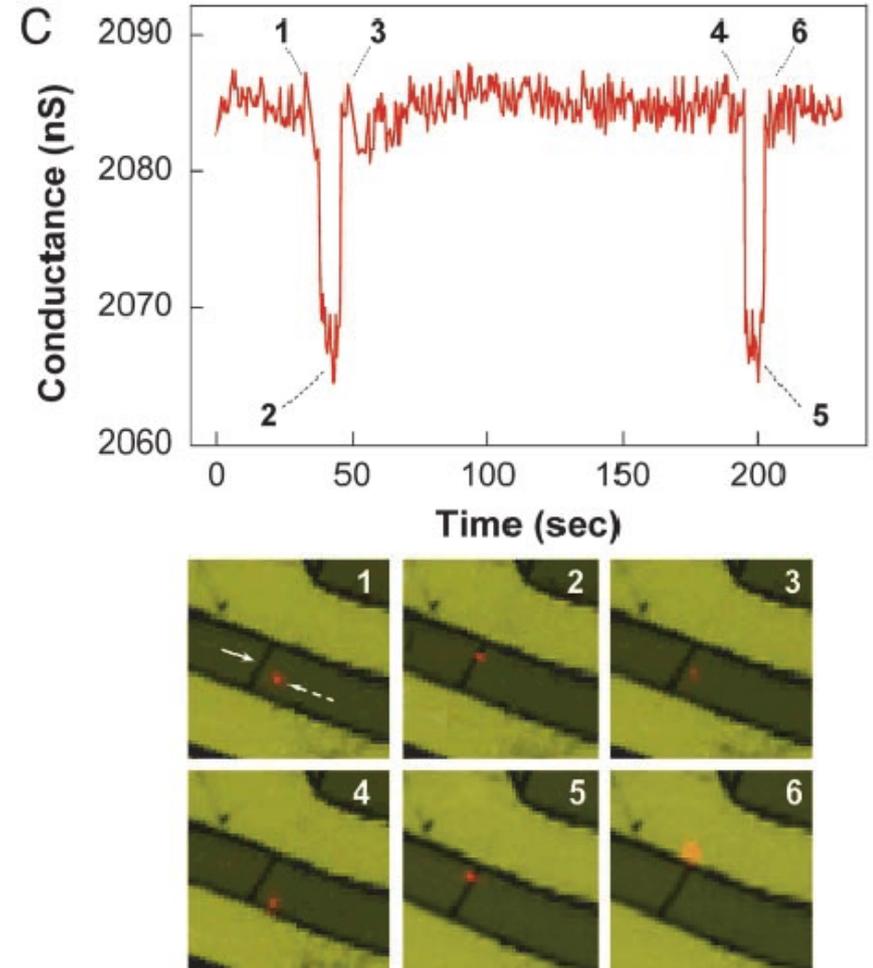
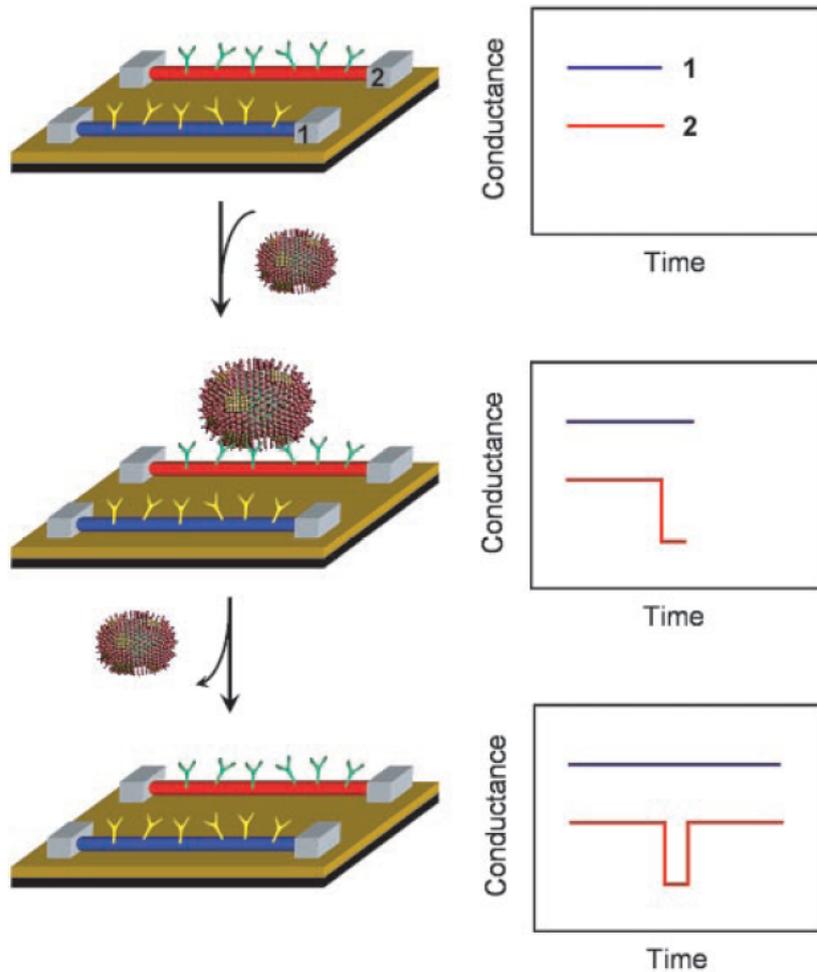


W. Lu *et al.*, PNAS. **102**, 10046 (2005)

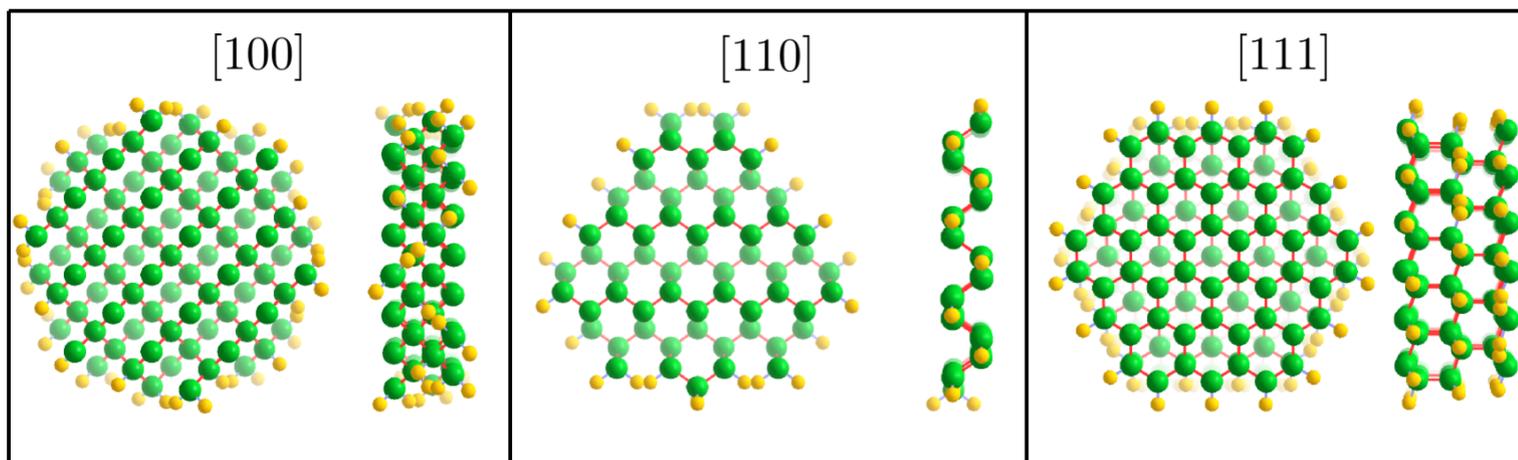


Les nanofils, en plus d'être de bons candidats pour les futures briques de base de la nanoélectronique, peuvent également servir dans d'autres applications. En effet leur rapport surface/volume très élevé en fait d'excellents systèmes pour la réalisation de détecteurs ultra-sensibles.

F. Patolsky, G. Zheng, O. Hayden, M. Lakadamyali, X. Zhuang and C. M. Lieber, Electrical detection of single viruses, PNAS **101**, 14017 (2004)



Le silicium massif possède une structure électronique anisotrope, ce qui implique que la structure électronique des nanofils dépend fortement de leur orientation cristalline. Les masses effectives des électrons et trous sont elles aussi très variables en fonction de l'orientation.



e^-	Masse effective	$0.30 m_0$	$0.13 m_0$	$0.96 m_0$
	Dégénérescence	$4 (\Gamma)$	$2 (\Gamma)$	$6 (\pm 0.2 \pi / l_{cell})$
h^+	Masse effective	$0.97 m_0$	$0.18 m_0$	$0.16 m_0$
	Dégénérescence	$2 (\Gamma)$	$1 (\Gamma)$	$1 (\Gamma)$