HAL
open science

MODELISATION DU TRANSPORT SOUS CONTRAINTE MECANIQUE DANS LES TRANSISTORS SUB-65 NM POUR LA MICROELECTRONIQUE CMOS

Karim Huet

To cite this version:

Karim Huet. MODELISATION DU TRANSPORT SOUS CONTRAINTE MECANIQUE DANS LES TRANSISTORS SUB-65 NM POUR LA MICROELECTRONIQUE CMOS. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université Paris Sud - Paris XI, 2008. Français. NNT : . tel-00491513

HAL Id: tel-00491513

https://theses.hal.science/tel-00491513v1

Submitted on 12 Jun 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° D'ORDRE : 9136

THÈSE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE

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

Présentée par

Karim HUET

Sujet

MODELISATION DU TRANSPORT SOUS CONTRAINTE MECANIQUE DANS LES TRANSISTORS SUB-65 NM POUR LA MICROELECTRONIQUE CMOS

Soutenue le 29 septembre 2008 devant les membres du jury :

M. Arnaud BOURNEL	Directeur de thèse
M. Emmanuel DUBOIS	Rapporteur
M. Andrea GHETTI	Examinateur
M. Denis RIDEAU	Examinateur
M. Luca VARANI	Rapporteur, Président

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier M. Luca Varani, professeur à l'université de Montpellier 2 et M. Emmanuel Dubois, directeur de recherche à l'IEMN pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ma thèse. J'associe à ces remerciements M. Andrea Ghetti, Ingénieur à Numonyx (Agrate) pour avoir accepté de participer à mon jury.

Durant cette thèse, j'ai eu le plaisir de travailler étroitement avec Denis Rideau, ingénieur à STMicroelectronics, qui a co-encadré cette thèse durant les 2 dernières années. Denis possède un savoir faire numérique exceptionnel associé à une culture scientifique poussée et a largement contribué à la qualité des résultats présentés dans cette thèse. Je le remercie grandement d'avoir partagé ses compétences avec moi, d'avoir contribué à ma connaissance des stratégies de l'industrie de la microelectronique et de m'avoir souvent soutenu avec verve, notamment lors de mon entretien à la « ST Academy ». J'espère avoir l'occasion de retravailler avec toi dans le futur.

Dans la continuité, je remercie tous ceux qui m'ont aidé à mener à bien cette thèse et ce dans les meilleures conditions possibles.

Merci d'abord à M. Jean Michel Lourtioz, directeur de l'IEF, pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire.

Je ne saurais assez remercier Philippe Dollfus, chef de l'équipe CMO, autant pour ses qualités scientifiques qu'humaines. Philippe est un grand chercheur, toujours prêt à partager son savoir et même à mettre les « mains dans le cambouis » du code lorsque cela est nécessaire, et ce avec un plaisir manifeste (alors que pour nous…). C'est grâce à lui que j'ai pu découvrir le Japon (et 2 fois de suite, merci !), pays qui m'a toujours fasciné, et je suis heureux qu'il en apprécie les charmes aujourd'hui. Merci d'avoir tant partagé, ce fut un grand honneur et un plaisir d'avoir travaillé avec toi.

Je remercie également Sylvie Galdin-Retailleau, aujourd'hui vice doyenne de l'université, mais surtout âme et cœur de cette équipe. Sa vivacité d'esprit et son dynamisme, en complément de ses qualités scientifiques et pédagogiques exceptionnelles m'ont toujours grandement impressionné, et c'est également grâce à elle que j'en suis là aujourd'hui. Merci de ne jamais laisser tomber, de toujours positiver et de redonner courage dans toutes les situations.

Sans conteste, Arnaud Bournel, directeur de thèse éclairé et éclaireur, remporte la palme d'or de ces remerciements. Je tiens à le remercier très chaleureusement (surtout que l'hiver arrive) pour son soutien permanent tout au long de ces 3 années. Son mérite est grand, d'autant plus que son empathie est telle qu'il a parfois stressé à ma place aux moments cruciaux. Merci d'avoir toujours eu à cœur de me faire rebondir lors des impondérables (mais où sont donc mes données, elles étaient bien là avant la coupure de courant ?!), d'encourager mes idées parfois non consensuelles (mais si, mais si, les résistances d'accès changent tout) et

de porter ton regard critique et éclairé sur des résultats parfois obscurs. Tout cela en cumulant de plus en plus de responsabilités administratives en tant que professeur, chapeau !

Je remercie vivement Jérôme Saint-Martin, avec qui j'ai eu grand plaisir à travailler sur la modélisation du transport. J'ai beaucoup profité de ses points de vue scientifiques et culturels sur des sujets des plus variés, allant de l'économie mondiale à l'intérêt de la modélisation, en passant par l'histoire de France. Merci de m'avoir transmis tant de savoir et de t'être montré si patient et pédagogique devant mes interrogations.

Je remercie tout particulièrement Valérie Aubry-Fortuna, sans qui nombre de résultats n'auraient pas vu le jour. Elle a eu la patience et la ténacité d'essuyer les plâtres de la stabilisation du code et de lancer de nombreux runs. Elle a également apporté son expérience dans l'interprétation des résultats. J'ai énormément appris à son contact grâce à sa rigueur et ses compétences scientifiques, et surtout ses grandes qualités humaines. Sa bonne humeur et son courage m'ont plus d'une fois permis de surmonter bien des difficultés. Merci de nous faire partager à tous ton univers et de cimenter cette équipe en nous incluant dans ta grande et belle famille.

Je remercie également Christophe Chassat, ingénieur aux multiples ressources et dont les conseils en algorithmique et en calcul numérique m'ont permis de sortir de bien des impasses. Sans son attention constante du réseau de l'équipe et son maintien du bon fonctionnement des machines, les milliers d'heures de simulation (en temps machine, s'entend !) dont on peut voir les résultats explicités dans cette thèse n'auraient pu être possibles. En dépit des catastrophes (innondations, coupures de courant, crashs de serveurs, clim déficientes et j'en passe !), merci d'avoir toujours sû rétablir le fonctionnement des machines selon les besoins grandissants de tous (eh oui, les thésards cannibalisent les processeurs !).

Merci à Françoise Meyer et à son excellent sens de l'humour et de la répartie dont j'aurais aimé profiter plus souvent. Merci également à Johann Sée, pour son aide au démarrage du développement du code. Merci à Blondine Gabillat-Carnet, Sylvie Durand et Ingrid Frey pour leur grande gentillesse et leur efficacité au travail.

Je n'oublie pas bien sûr mes compagnons de fortune, camarades thésards, stagiaires et post doc qui ont partagé avec moi cet environnement privilégié. Dans le désordre, un grand merci à Hugues Cazin d'Honinctun (j'en aurai appris des trucs sur les nanotubes !), Van Nam Do (malgré tout les fonctions de Green restent un mystère), Viet Hung Nguyen, Francesca Carosella (la prochaine fois on se parle en italien !), Fulvio Mazzamuto (bon courage pour le démarrage de thèse), Huu Nha Nguyen (encore 1 an, et tu parles français sans accent), Yann Apertet et Audrey Valentin (tu en as eu du courage de devenir maman pendant ta thèse !) et Guillaume Mottet. Une spéciale dédicace à Damien Querlioz (on se revoit en Californie, bon courage pour Stanford et ne stresse pas, je sais que tu vas assurer !), pour nos discussions dans les couloirs et pendant les trajets RER ainsi que pour son dynamisme et son esprit d'initiative qu'il a su faire partager à toute l'équipe. Merci à tous pour les discussions sur tout et rien, les

rires, le soutien pendant les décharges de stress et surtout l'ambiance chaleureuse qui a souvent régné pendant ces 3 ans.

Lors des conférences auxquelles j'ai pu participer ou encore de mes (trop rares) déplacements à Grenoble, j'ai eu le plaisir de cotoyer cette agréable faune du CEA-LETI (et al.), dont la compagnie m'a permis de surmonter le stress des oraux et de voyager dans la bonne humeur. Merci donc (et je dois en oublier, je m'en excuse d'avance) à Vincent Barral, Emilie Bernard, Cécilia Dupré, Gilles Le Carval, François Andrieu, Florent Rochette, Sebastien Martinie, Marie-Anne Jaud et Sylvain Barraud. Merci à tous de m'avoir tenu au courant des potins du bassin grenoblois ! Bon courage pour la suite…

Je remercie l'équipe de TCAD de ST Crolles, Hervé Jaouen et Clément Tavernier qui ont également encadré mes travaux. Je remercie aussi le camarade thésard Maxime Feraille (allez encore un petit effort !) pour nos nombreuses discussions téléphoniques à se prendre la tête sur le MOS et notre collaboration enrichissante.

Je remercie également Mireille Mouis, Gérard Ghibaudo et Wipa Chaisantikulwat de l'IMEP-LAHC avec qui j'ai eu le plaisir de travailler sur l'extraction de mobilité et le mystère de sa réduction dans les canaux courts. Un grand merci pour leur aide précieuse et leur judicieuces remarques sur mes travaux.

Merci aux autres collaborateurs de l'ANR MODERN, Nicolas Cavassilas, Fabienne Michelini et Jean Luc Autran du L2MP, Raphael Clerc de l'IMEP-LAHC, Davy Villanueva et Duc Phuong Nguyen (ex-NXP) et Alain Poncet de l'INL. Merci pour leurs contributions et les intéressantes discussions scientifiques que nous avons menées lors des réunions et des conférences.

Je n'oublie pas de remercier mes professeurs de NFIO (aujourd'hui IFIPS), notamment François Aguillon, René Farcy et Fabian Zomer, mais aussi Julien Venturini, mon responsable de stage à SOPRA Laser, il y a si longtemps de cela (quoique…), qui m'ont encouragé à aller vers de la recherche et à faire l'aventure de cette thèse (c'est en prenant de risques que l'on vit n'est ce pas ?!).

Merci à mes amis, qui m'ont toujours soutenu, Jerem et Pascale (on r'tourne en Inde quand vous voulez !), Morgan et Estelle (aahh les vacances en Bretagne…), Fabrice et Shinobu (prochain jour de l'an à Esternay !), Fabien et Aurore (c'est beau le cinéma !)… Merci d'avoir été là !

Merci à ma belle-famille, Yves et Annie (c'est quand même beau le Golfe, surtout Oman !), Gigi et Vincent, Alex et Eric (aaahh l'Afrique, je reviens bientôt !). Un grand merci à mes parents (rien de possible sans eux !) et ma petite sœur (désolé de vous avoir infligé un discours si peu passionnant sur la simulation des transistors) qui désespèrent de comprendre mon sujet (un jour je saurais vous l'expliquer…), mais ont fait d'énormes sacrifices et m'ont toujours donné courage… Enfin le dernier merci, celui qui a la plus grande valeur bien sûr, merci à Gael, qui a vécu toute cette aventure de très près pendant tout ce temps.

Sommaire

Remerciements 3
Sommaire 7
Publications et conférences 10
Table des figures 12
Sigles et notations 21
Logiciels utilisés 26
Introduction générale 27
Chapitre I : Intérêt de la contrainte dans les MOSFET 31
1 Petits rappels sur le transistor MOS 33
1.1 Fonctionnement 33
1.2 La mise à l'échelle et ses limites 35
1.3 Méthodes d'amélioration de la mobilité 37
1.3.1 Le matériau du canal 38
1.3.2 L'orientation cristalline 40
2 La contrainte dans le Silicium 42
2.1 Contrainte et déformation 43
2.2 Effet de la contrainte sur la symétrie du cristal 45
2.2.1 Le cristal de Silicium 46
2.2.2 Cas typiques de contrainte 48
2.3 La piézorésistivité 53
2.4 Méthodes expérimentales et performances obtenues 56
2.4.1 Contrainte uniforme 57
2.4.2 Contrainte localisée 60
3 Bilan du chapitre I et objectifs de l'étude 63
Chapitre II : Les outils de la modélisation 65
1 Calcul de structures de bandes 68
1.1 Généralités 68
1.2 La méthode k.p 69
1.2.1 Construction de l'Hamiltonien k.p 69
1.2.2 Matrice k.p 6 bandes 74
1.2.3 Matrice k.p 30 bandes 78
1.3 Prise en compte de la quantification perpendiculaire 78
1.3.1 Position du problème 78
1.3.2 Méthode de résolution 79
1.3.3 Résultat en couche d'inversion 81
2 Modélisation du transport 83
2.1 L'équation de Boltzmann 83
2.2 Méthode Monte-Carlo 85
2.3 Lien avec les modèles haut niveau : Dérive/Diffusion 86

2.3.1 Temps de relaxation ... 87
2.3.2 Equations de Dérive/Diffusion ... 87
2.3.3 Modèles de mobilité ... 88
2.3.4 Extraction de mobilité ... 90
2.4 Prise en compte des effets non stationnaires ... 96
2.4.1 Cas balistique ... 97
2.4.2 Cas quasi-balistique ... 98
3 Structure de bandes et simulateur Monte Carlo ... 100
3.1 Algorithme général ... 100
3.2 Maillage de la Zone de Brillouin ... 102
3.2.1 Type de maillage ... 102
3.2.2 Interpolation ... 103
3.3 Orientation du canal ... 104
3.4 Intégration de la Zone de Brillouin ... 104
3.5 Gestion des interactions ... 105
4 Bilan du chapitre II ... 107
Chapitre III : Transport d'électrons ... 109
1 Transport en champ constant ... 112
1.1 Structures de bandes ... 112
1.2 Mécanismes d'interaction ... 115
1.2.1 Phonons acoustiques intravallée ... 116
1.2.2 Phonons intervallées ... 116
1.2.3 Impuretés ionisées ... 118
1.2.4 Rugosité ... 120
1.2.5 Sortie de Zone de Brillouin ... 120
1.3 Vitesses moyennes ... 120
1.4 Conclusion ... 124
2 Impact des effets non stationnaires ... 126
2.1 Problématique ... 126
2.2 Dispositif étudié ... 129
2.2.1 Choix de l'architecture et conditions d'étude ... 129
2.2.2 Caractéristiques simulées ... 131
2.2.3 Mobilités apparentes ... 134
2.3 Mobilité effective ... 139
2.3.1 Modèle quasi-balistique ... 139
2.3.2 Etude du cas balistique ... 142
2.4 Mobilité de magnétorésistance ... 145
2.4.1 Modèle quasi-balistique ... 146
2.4.2 Etude du cas balistique ... 148
2.5 Conclusion ... 155
3 Conclusion et perspectives du chapitre III ... 156
Chapitre IV : Transport de trous ... 159
1 Matériau 3Dk « massif » ... 163
1.1 Structures de bandes ... 163
1.1.1 Autour de Γ ... 163
1.1.2 Intégration de la ZB ... 165
1.2 Mécanismes d'interaction ... 168

1.3 Transport 169
1.3.1 Si relaxé 169
1.3.2 Si contraint 171
1.4 Conclusion 174
2 pDG-MOSFET courts 175
2.1 Dispositif étudié 175
2.2 Dispositif non contraint 176
2.3 Contrainte biaxiale en tension 178
2.4 Contrainte uniaxiale 182
2.5 Conclusion 186
3 Trous en couche d'inversion 188
3.1 Expérience de wafer bending 188
3.2 Structure de bandes 192
3.3 Calcul de mobilité et mécanismes d'interaction 195
3.4 Résultats 197
3.4.1 Contrainte uniaxiale 197
3.4.2 Contrainte biaxiale en tension 198
3.5 Conclusion 200
4 Conclusion et perspectives du chapitre IV 201
Conclusion Générale 203
Annexes 205
Annexe 1 : Choix de l'état final 207
1 Calcul de densité d'états locale 207
2 Interpolation inverse 208
Annexe 2 : Impuretés ionisées 211
1 Du début du calcul 211
2 A la fonction d'écrantage 212
2.1 L'approximation sphérique 212
2.2 De la pertinence de celle-ci 212
3 A l'obtention de la fréquence d'interaction 213
3.1 De l'intégrale de recouvrement 213
3.2 De l'intégration sur les état finaux 214
3.3 De l'intégrale enfin discrétisée 214
4 Au passage au temps de relaxation 216
4.1 De l'intérêt de la chose 216
4.2 De la compatibilité avec MONACO 219
5 Au choix de l'état final après interaction 219
5.1 D'un choix "simple" (anisotropie de structure de bandes)… 219
5.2 … au juste choix (anisotropie de l'interaction) 220
Références Bibiographiques 223

Publications et conférences

Articles publiés dans des revues internationales avec comité de lecture

"*Monte Carlo Study of Apparent Magnetoresistance Mobility in Nanometer Scale MOSFETs*", K. Huet, D. Querlioz, W. Chaisantikulwat, J. Saint-Martin, A. Bournel, M. Mouis and P. Dollfus, Journal of Applied Physics, vol. 104(4), pp.044504-7, 2008.

"*On the Ability of the Particle Monte Carlo Technique to Include Quantum Effects in Nano-MOSFET Simulation*", D. Querlioz, J. Saint-Martin, K. Huet, A. Bournel, V. Aubry-Fortuna, C. Chassat, S. Galdin-Retailleau and P. Dollfus, IEEE Transactions on Electron Devices vol. 54(9), pp. 2232-2242, 2007.

"*Suppression of the orientation effects on bandgap in graphene nanoribbons in the presence of edge disorder*", D. Querlioz, Y. Apertet, A. Valentin, K. Huet, A. Bournel, S. Galdin-Retailleau and P. Dollfus, Applied Physics Letters vol. 92(4), pp. 042108-3, 2008.

Conférences internationales avec actes

"*Experimental and Theoretical Analysis of Hole Transport in Uniaxially Strained pMOSFETs*", K. Huet, M. Feraille, D. Rideau, R. Delamare, V. Aubry-Fortuna, M. Kasbari, S. Blayac, C. Rivero, A. Bournel, C.Tavernier, P. Dollfus and H. Jaouen, Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC), Edimbourg, Grande Bretagne, 2008.

"*Monte Carlo Study of Apparent Mobility Reduction in Nano-MOSFETs*", K. Huet, J. Saint-Martin, A. Bournel, S. Galdin-Retailleau, P. Dollfus, G. Ghibaudo and M. Mouis, Proc. of the 37th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC), vol. 1, p.382, Munich, Allemagne, 2007.

"*Full band Monte Carlo study of ballistic effects in nanometer-scaled strained P channel Double Gate MOSFETs*", K. Huet, C. Chassat, D. P. Nguyen, S. Galdin-Retailleau, A. Bournel and P. Dollfus, 15th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors (HCIS), Tokyo, Japon, 2007, Physica Status Solidi (c) vol. 5(1), pp. 43-46, 2008.

Conférences internationales sans actes

"*Study of Apparent Ballistic Magnetoresistance Mobility in Nanometer Scale MOSFETs*", K. Huet, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, P. Dollfus, Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference (ESSDERC) Fringe, Edimbourg, Grande Bretagne, 2008.

"*Monte Carlo Study of Magnetoresistance Mobility in Nanometer-Scale MOSFETs*", K. Huet, A. Bournel, P. Dollfus, W. Chaisantikulwat, M. Mouis, D. Villanueva, D-P. Nguyen, Silicon Nanoelectronics Workshop VLSI (SNW), Kyoto, Japon, 2007.

"*About the low field mobility notion in ultimate MOSFET: Source and Drain Reservoirs Induce MObility Reduction: RIMOR effect*", E.Fuchs, A. Bournel, K. Huet, Silicon Nanoelectronics Workshop VLSI (SNW), Kyoto, Japon, 2007.

Conférences nationales avec ou sans actes

"*Etude de la réduction de la mobilité dans les dispositifs double grille quasi-balistiques*", K. Huet, Actes des 10èmes Journées du Réseau Doctoral en Microélectronique (JNRDM), Villeneuve d'Ascq, vol.1, p. 120, 2007.

"*Modélisation Monte Carlo du transport dans le Silicium massif et contraint à l'aide d'une description complète de la structure de bandes*", K. Huet, Actes des 9èmes Journées du Réseau Doctoral en Microélectronique (JNRDM), Rennes, vol. 1, p.366, 2006.

"*Etude Monte Carlo de la mobilité de magnétorésistance dans les nano MOSFETs*", K. Huet, D. Querlioz, W. Chaisantikulwat, J. Saint-Martin, A. Bournel, M. Mouis, P. Dollfus, Journées thématiques sur la simulation multiphysique du GdR Nanoélectronique, Villeneuve d'Ascq, 2007.

"*Etude de la mobilité effective dans les DG MOSFET quasi-balistiques*", K. Huet, J. Saint-Martin, A. Bournel, G. Ghibaudo, P. Dollfus, M. Mouis, Journées Nationales du GdR Nanoélectronique, Grenoble, 2006.

"*Simulation Monte Carlo du transport dans Si contraint ou non via une description complète de la structure de bandes*", K. Huet, J. Vigroux, A. Bournel, S. Galdin-Retailleau, P. Dollfus, N. Cavassilas, F. Michelini, D. Villanueva, 11èmes Journées Nano-Micro Electronique et Optoélectronique (JNMO), Aussois, 2006.

Table des figures

Tableau 1 : Propriétés intrinsèques de différents matériaux de canal possibles, μ_e et μ_h : mobilités des électrons et des trous, E_{gap} : l'énergie de bande interdite, n_i : densité intrinsèque, a_0 : paramètre de maille. 38

Tableau 2 : Constantes élastiques du Silicium [Landolt-Börnstein1982] 44

Tableau 3 : Coefficients de piézorésistivité ($\times 10^{-11}$ Pa^{-1}) dans le Silicium massif [1][Smith1954], [5][Colman1968] et dans des couches d'inversion (n- ou p- MOS, substrat orienté (001)) : [2][Thompson2006b], [3][Canali1979], [4][Bradley2001], [5][Colman1968]. Les valeurs en italiques sont déduites de celles mesurées dans d'autres directions. 55

Tableau 4 : Paramètres de la matrice **k.p** 6×6 pour le Si [Rideau2006], L,M,N sont donnés en unités de $\hbar^2/(2m_0)$, les paramètres de Luttinger sont sans unités et les autres sont en eV. 76

Tableau 5 : Caractéristiques des phonons intervallée Δ-Δ considérés dans ce travail. D_{iv0} et D_{iv1} sont les potentiels de déformation ajustés pour reproduire les caractéristiques expérimentales du Si non contraint..... 117

Tableau 6 : [Huet2008c; Huet2007] Paramètres issus des simulations MC. K_{eff}^{bal} (ou K_{MR}^{bal}) est la pente de la courbe de mobilité apparente $\mu(L_{ch})$ extraite des simulations MC des DG-MOSFET à canal balistique ou issue du formalisme de Shur. ... 136

Tableau 7 : Coefficients piézorésistifs longitudinaux π_L (10^{-11} Pa^{-1}) pour les trois directions de contrainte uniaxiale, [a] [Smith1954], [b] [Matsuda1993], [c] [Thompson2006b], [d] [Thompson2006a], [e] [Gallon2004], [f] [Huet2008a; Rideau2008b] issues de ce travail. 192

Tableau 8 : Paramètres des interactions électron-phonons, issus de [Wang2006]..... 195

Figure 1 : Schéma d'un transistor MOSFET« *normally off* » conventionnel à canal N sur substrat P..... 33

Figure 2 : Caractéristiques typiques $I_D(V_{DS})$ à différents V_{GS} d'un nMOSFET. 34

Figure 3 : [Hudait2007] Energie de bande interdite en fonction du paramètre de maille de différents semiconducteurs et alliages. 38

Figure 4 : [De Jaeger2007] MOSFET à canal Ge et ses caractéristiques $I_D(V_{DS})$. 39

Figure 5 : [Moran2007] MOSFET à hétérostructure III-V (GaAs) et ses caractéristiques $I_D(V_{DS})$. 40

Figure 6 : Profil de bande de conduction d'un nMOSFET conventionnel en régime d'inversion. 41

Figure 7 : [Sheraw2005] Image TEM de dispositifs réalisés avec la technologie d'orientation hybride. 42

Figure 8 : [Guillaume2005] Composantes du tenseur des contraintes sur un élément infinitésimal de l'espace réel. 43

Figure 9 : Première zone de Brillouin du Silicium. Les axes et points de haute symétrie sont représentés. 46

Figure 10 : a) Structure de bandes du Si non contraint selon les axes de principale symétrie, b) Surfaces isoénergies dans l'espace réciproque (énergie cinétique $E_C = 3k_BT/2$) pour la 1ère bande de conduction et la 1ère bande de valence (HH). 47

Figure 11 : a) [Sun2007b] Effet d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001). Le cristal vu dans le plan (x,y) reste un carré mais devient un rectangle dans les plans (z,x) et (z,y). b) Diagramme des extrema de bandes. La contrainte hydrostatique réduit la largeur de bande interdite et la contrainte déviatrice lève les dégénérescences.....49

Figure 12 : [Sun2007b] Effet d'une contrainte uniaxiale en compression selon <110>. Le cristal vu dans les plans (x,z) et (y,z) devient un rectangle et un losange dans le plan (x,y). 50

Figure 13 : Effet de la contrainte uniaxiale en compression sur un isocontour circulaire dans le plan x,y. Un cercle devient une ellipse d'axes principaux <110> et <-110>. La courbure des bandes E(k) dans la direction <110> s'en trouve alors augmentée. 51

Figure 14 : [Ghyselen2004] Procédé de fabrication du substrat de Si directement contraint sur isolant (sSDOI ou sSOI). 57

Figure 15 : [Lee2005] Variation de mobilité de dispositifs longs contraints en tension par le substrat Si sur SiGe, a) électrons, triangles pleins : [Rim2003a], carrés vides : [Welser1994], cercles vides : [Currie2001], losanges pleins : [Takagi2003], carrés pleins : [Lee2004], b) trous, triangles pleins : compilation de [Currie2001; Lee2003; Leitz2002], carrés vides : [Rim2003a]. 58

Figure 16 : [Lee2005] Gain en mobilité des trous. Symboles pleins : couches enterrées de $Si_{1-y}Ge_y$ (*buried channel*) en compression sur $Si_{1-x}Ge_x$ (*virtual substrate*). Les procédés utilisés imposent x = y+0,3. Mesures à $N_S = 10^{13}$ cm^{-2}. Symboles vides : données Si sur $Si_{1-x}Ge_x$ de la Figure 15b pour comparaison. 58

Figure 17 : [Andrieu2005] Image TEM de nMOS et pMOS sur substrat DCOI. nMOS à canal de Si contraint sur substrat sSDOI et d'un pMOS avec une couche de SiGe supplémentaire. 59

Figure 18 : a) [Thompson2006b] e-SiGe couplé au dépôt de *Stress Liner*, b) [Thompson2004] niveaux de stress uniaxial selon <110> dans un dispositif e-SiGe. 61

Figure 19 : [Thompson2006b] Procédé *Dual Stress Liner*. 61

Figure 20 : Compilation de gains en I_{ON} obtenus pour les technologies récentes à partir de données de la littérature en fonction de la longueur de canal, a) pMOSFET : *Stress Liners* seul (ESL) : [Andrieu2007a; Chen2006; Grudowski2006; LeCam2006; Thean2006], source et drain en SiGe (e-SiGe) sans ESL : [Ang2007; Ota2006; Wang2007], e-SiGe avec ESL : [Yasutake2007; Yin2006], canal SiGe : [Liu2006], DCOI avec contrainte uniaxiale : [Liu2006; Tezuka2006], DCOI seul : [Andrieu2005], HOT = [Sheraw2005; Yang2006], b) nMOSFET : ESL seul : [Andrieu2007a; Chen2006; LeCam2006; Thean2006; Yin2006], source et drain en SiC (e-SiC) avec ESL : [Ang2006], sSDOI : [Andrieu2005], substrat SiGe avec e-SiC : [Ang2007]. 62

Figure 21 : Eléments de base de la simulation de composants. 67

Figure 22 : Comparaison des relations de dispersion de la bande de conduction du Si massif, obtenues en masse effective (en considérant la valeur usuelle pour le Si dans cette direction $m^* = 0{,}19m_0$) et **k.p** 2 bandes ($E_P = 4{,}77$ eV) autour du minimum d'une vallée Δ dans la direction transverse. 71

Figure 23 : Méthode **k.p** 6 bandes, a) bande de valence du Si non contraint autour de Γ, b) effet d'une contrainte biaxiale dans le plan (001) sur le sommet des bandes. 76

Figure 24 : Energie des bandes de valence du Si non contraint dans le plan (k_x,k_y) en $k_z = 0$ a) hh, b) lh. Les niveaux de couleur donnent les valeurs des énergies référencées par rapport au sommet de la bande de valence. 77

Figure 25 : Surfaces isoénergies des bandes de valence du Si non contraint à l'énergie thermique $E = 3k_BT/2 \approx 39$ meV a) hh, b) lh. Les coordonnées de **k** sont normalisées par rapport à $2\pi/a_0$. 77

Figure 26 : Profil de potentiel type une couche d'inversion de type P obtenu avec UTOX, a) superposé à la densité de probabilité $|\psi_n(z)|^2$ des 10 premiers niveaux confinés (unités arbitraires). Leur ordonnée à l'origine représente la position du niveau, b) superposé à la densité. La position du niveau de Fermi est représentée par les tirets. 81

Figure 27 : Energie des bandes de valence du Si non contraint confiné dans le plan (k_x,k_y) a) 1ère bande hh, b) 2e bande lh. Les barres de couleur donnent les valeurs des énergies référencées par rapport au maximum du potentiel. 82

Figure 28 : Décomposition de la trajectoire d'un porteur en vols libres séparés par des interactions supposées instantanées. 85

Figure 29 : [Takagi1994a] Mobilité effective dans des MOSFET conventionnels longs en fonction du champ effectif à T = 77 K et 300 K et pour différents dopages du substrat, a) électrons, b) trous. La direction de transport est <011> et l'orientation du substrat (100) 91

Figure 30 : Exemple d'extraction de μ_{eff} avec la méthode de Hamer à partir de simulations MC. La capacité effective de grille est extraite des simulations MC. 92

Figure 31 : Conditions de mesure de magnétorésistance d'un nMOSFET. La largeur W du transistor est grande devant sa longeur (W >> L). 93

Figure 32 : [Chaisantikulwat2006] Mesures sur dispositif FDSOI de type N à T = 290 K, a) caractéristique type de magnétorésistance avec correction des résistances d'accès, b) mobilité de magnétorésistance en fonction de la densité d'inversion, on voit que l'on peut obtenir une mesure bien en dessous du seuil V_T. 95

Figure 33 : a) [Lundstrom2000] Schéma de l'approche par la théorie des flux. Les accès sont considérés comme parfaitement absorbants. J : flux de porteurs, L : longueur du canal, T et R tels que T = (1-R) : coefficients de transmission et rétrodiffusion du canal. S_{canal} : matrice de transfert, b) [Rhew2002] application au cas du MOSFET 1D avec la bande de conduction le long du canal. 96

Figure 34 : Algorithme MONACO 3D auto-cohérent. 100

Figure 35 : Algorithme de traitement de transport d'une particule entre 2 résolutions de Poisson, r : variable aléatoire tirée au sort (loi uniforme), ΔT_{pois} : pas sur le temps, t_P : temps restant avant Poisson, t_V : temps de vol libre, t_M : temps de mouvement initial, t_S : temps de propagation dans une maille, P_{tot} : probabilité de collision totale, n : densité de porteurs, V_{maille} : volume d'une maille de l'espace réel, RK : algorithme Runge Kutta. 101

Figure 36 : [Blöchl1994] Conversion d'une maille cubique en 6 mailles tétraédriques. 103

Figure 37 : [Tanabe2007] Algorithme pour le changement d'orientation du canal, $\mathbf{v_g}(\mathbf{k})$ est la vitesse de groupe issue de la structure de bandes, **E** est le champ électrique issu de la résolution de l'équation de Poisson. 104

Figure 38 : Algorithme de réjection pour le choix de l'état final **k'** après interaction. 106

Figure 39 : Surfaces isoénergies pour des énergies cinétiques de a) 0,25 eV, b) 1,25 eV. La forme d'une vallée donnée s'écarte de l'ellipsoïde du fait d'une ouverture en bord de ZB, d'autant plus que l'on monte en énergie. 112

Figure 40 : Isocontours énergétiques de la première bande de conduction dans le plan (Γ,ΓX,ΓZ) i.e. $k_y = 0$. Les énergies sont référencées par rapport au minimum absolu de bande de conduction, a) Si relaxé, large gamme énergétique, écart entre les contours ΔE = 0,1 eV, b) Si relaxé, autour des vallées Δ_2 (grand axe selon ΓZ) et Δ_4 (grand axe selon ΓX), ΔE = 0,05 eV, c) $Si/Si_{0,7}Ge_{0,3}$, idem. ..113

Figure 41 : Si contraint sur substrat $Si_{1-x}Ge_x$, position en énergie et en vecteur d'onde (sur les axes principaux) des minima de vallée en fonction de la proportion de Ge dans le substrat. 114

Figure 42 : Densité d'états par vallée. L'origine des énergies est le bas de bande de conduction, a) comparaison du calcul **k.p** 30 bandes (somme des 2 premières bandes de conduction) vs. masse effective ($m^* = m_{DOS} = 0,32m_0$) sans et avec coefficient de non parabolicité ($\alpha = 0,5\ eV^{-1}$), b) comparaison entre Si relaxé et Si contraint en tension biaxiale ($Si/Si_{0,7}Ge_{0,3}$). Les vallées Δ_4 dans le Si contraint sont plus hautes en énergie, ce qui conduit à un peuplement préférentiel des vallées Δ_2. 115

Figure 43 : a) Vitesse de dérive en fonction du champ électrique, résultats MC *Full Band* vs. expériences [Jacoboni1983], b) effet du dopage, comparaison entre MC **k.p** 30 bandes, MC bandes analytiques et expérience [Masetti1983]. 121

Figure 44 : Répartition des électrons dans l'espace réciproque (Si non contraint) sous un champ $E_X = 50$ kV/cm. 122

Figure 45 : a) Spectres en vitesse $f(v_x)$ des vallées à masse longitudinale dans la direction du champ pour $E_X = 1$, 10 et 20 kV/cm. Traits pleins : vallée $k_x > 0$, tirets : vallée $k_x < 0$, b) Spectres en vecteur d'onde $f(k_x)$ pour $E_X = 50$ kV/cm. Les vallées ne sont plus équivalentes à fort champ du fait des sorties de ZB (queues de distribution). 123

Figure 46 : Influence d'une contrainte biaxiale sur la mobilité faible champ, variation de mobilité en fonction de la proportion de Ge dans le substrat virtuel. $\mu_{MC}(x_{Ge} = 0) = 1450\ cm^2/V/s$. 123

Figure 47 : Courant de drain de nMOSFET double grille planaire en fonction de la longueur de grille a) [Widiez2006] à faible V_{DS}, b) simulation MC à fort V_{DS}. 126

Figure 48 : [Andrieu2007b] Mesures expérimentales de mobilité effective, a) en fonction de la longueur de grille (n- et p-MOS conventionnels, SOI, contraints ou non), b) influence de poches de surdopage sur la mobilité extraite dans des pMOS conventionnels. 127

Figure 49 : Mesures expérimentales de mobilité de magnétorésistance, a) [Lusakowski2005] nMOSFET *bulk* avec poches de surdopage, b) [Chaisantikulwat2007; Chaisantikulwat2006] FDSOI n et pMOSFET, comparées aux mesures de μ_{eff} (sans correction de R_S). 127

Figure 50 : [Andrieu2007b] Symboles : Mobilités effectives $\mu_0 = \mu_{eff}$, extraites (méthode Y) en fonction de la longueur de grille dans des FD-SOI nMOSFET, trait plein : « mobilité balistique » $\mu_B = \mu_{eff}^{bal}$ d'après le formalisme de Shur, tirets : mobilité $\mu_{0,th} = \mu_{eff}$ calculée avec le modèle de Shur en utilisant différentes valeurs de libre parcours moyen. 129

Figure 51 : Structure nDG-MOSFET à canal non dopé simulée, T_{Si} = 5 nm, EOT = 1,2 nm, longueurs de canal étudiées L_{ch} = 15 à 400 nm. Le canal est orienté selon <100>. 130

Figure 52 : Extraction de μ_{MR} dans une structure DG-MOS canal long (Si relaxé, T = 300 K, T_{Si} = 5 nm, $N_{inv} = 10^{13}$ cm^{-2}). 131

Figure 53 : Caractéristiques électriques des DG-MOSFET simulés pour différentes longueurs de canal, a) $I_D(V_{DS})$ à fort V_{GS}, b) $I_D(V_{GS})$ à faible V_{DS}, utilisées pour l'extraction de mobilité effective. 132

Figure 54 : Caractéristiques électriques des DG-MOSFET à canal balistique. 132

Figure 55 : Dispositifs à canal standard, a) caractéristiques de magnétorésistance à T = 300 K pour L_{ch} = 20, 35, 50, 75, 100 et 200 nm, b) pour T = 100, 200 et 300 K, L_{ch} = 20 nm, insert : vitesse $v_x(B)$ dans la direction source-drain correspondante moyennée sur tous les porteurs dans le canal, normalisée à v(B = 0). 133

Figure 56 : Dispositifs à canal balistique, caractéristiques de magnétorésistance à T = 300 K pour L_{ch} = 20, 35, 50 et 75 nm. 134

Figure 57 : a) Effet de la température sur μ_{MR}, b) influence du dopage canal sur μ_{eff}. 135

Figure 58 : [Huet2008c; Huet2007] Mobilités extraites en fonction de L_{ch}, a) μ_{eff}, b) μ_{MR}. Les tirets sont des guides pour les yeux. 136

Figure 59 : Modèle Caughey-Thomas, Symboles : résultats MC, lignes : modèle, a) Matériau Si massif non dopé, on obtient $\beta = 1$, $v_{sat} = 1{,}05\ 10^5$ $cm.s^{-1}$, b) comparaison avec l'évolution de la mobilité effective en posant $E_{//} = V_{DS}/L_{ch}$. 137

Figure 60 : Conditions de polarisation : V_{DS} = 50 mV, V_{GS}-V_T = 0,4V, a) comparaison entre la balisticité intrinsèque, le rapport λ_{lpm}/L_{ch} et la dégradation de mobilité apparente (MR et effective), b) libre parcours moyen λ_{lpm} extrait des simulations MC. 138

Figure 61 : a) Mobilité apparente issue des dispositifs à canal balistique, comparée à la mobilité balistique définie par Shur (tirets), pentes en $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$, b) approche Mathiessen (voir texte), superposée aux résultats MC (symboles). 140

Figure 62 : Confrontation de l'approche Mathiessen (ligne) avec les données expérimentales de [Andrieu2007b] (symboles vides) et de [Cros2006] (symboles pleins), avec $\mu_{eff}^{long} = 430$ $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$ (exp.) et $K_{eff}^{bal} = 8{,}4$ $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$ (MC). 140

Figure 63 : Influence de V_{DS} sur le paramètre K_{eff}^{bal}, K_{eff}^{bal} (50mV) = 15,7 cm^2/V/s/nm. 141

Figure 64 : Vitesse d'injection en fonction de la densité d'inversion pour un DG-MOSFET balistique, comparaison entre la vitesse issue d'un calcul Schrödinger/Poisson 1D [Vasileska2006] et la vitesse thermique pour un gaz d'électrons 3Dk non dégénéré. 142

Figure 65 : Caractéristiques issues de Schred pour la géométrie DG-MOS, T_{Si} = 5 nm, a) densité d'inversion pour l'extraction de la capacité de grille C_{GS}, b) Courbes $I_D^{bal}(V_{GS})$ à V_{DS} = 50 mV pour différents R_S. 143

Figure 66 : Paramètre K_{eff}^{bal} an fonction de R_S pour 3 géométries, DG-MOSFET avec T_{Si} = 5 nm et T_{Si} = 9 nm, FDSOI MOSFET (simple grille) avec T_{Si} = 9 nm. 144

Figure 67 : DG-MOSFET canal standard en Si relaxé, courant de drain à l'état ON (fort $V_{DS} = V_{GS}$ = 0,7 V) en fonction du rapport μ_{eff}/L_{ch}, où μ_{eff} est extrait des caractéristiques à faible V_{DS} = 50 mV. 145

Figure 68 : Approche Mathiessen (ligne) pour μ_{MR} superposée aux données MC (cercles pleins). 146

Figure 69 : Confrontation de l'approche Mathiessen (lignes) avec les données expérimentales de [Lusakowski2005; Lusakowski2007] pour différentes densités d'inversion N_S, triangles : 10^{12} cm^{-2}, carrés : 2 10^{12} cm^{-2}, cercles : 5 10^{12} cm^{-2}. 147

Figure 70 : a) Approche Mathiessen avec l'introduction d'une mobilité due aux poches $\mu_P = K_P L_{ch}$, b) Paramètres μ_{MR}^{long} (données expérimentales [Lusakowski2005]) et K_P (ajustement) utilisés en fonction de la densité d'inversion. 148

Figure 71 : DG-MOSFET à canal balistique (L_{ch} = 20 nm) sous champ magnétique, grandeurs microscopiques au sommet de la barrière, issues des simulations MC, a) distribution en vitesse des porteurs injectés par la source, b) carrés : vitesse des porteurs rétrodiffusés v_R, cercles : flux de porteurs rétrodiffusés F_R, triangles : coefficient de rétrodiffusion R. Les pointillés sont des guides pour les yeux. 149

Figure 72 : Cas du transistor à canal balistique, trajectoire d'un porteur injecté dans le canal puis rétrodiffusé par le champ magnétique. 151

Figure 73 : DG-MOSFET à canal balistique (L_{ch} = 20 nm), a) bande de conduction, b) champ extrait en fonction de B. 153

Figure 74 : Distribution des porteurs injectés par la source f(v). La partie rétrodiffusée par le champ magnétique est hachurée, B = 2 T. 153

Figure 75 : DG-MOSFET à canal balistique (L_{ch} = 20 nm) sous champ magnétique, grandeurs microscopiques au sommet de la barrière, symboles : issues des simulations MC, lignes : calcul numérique (cf. texte). a) Distribution en vitesse des porteurs injectés par la source, b) carrés : vitesse des porteurs rétrodiffusés v_R, cercles : flux de porteurs rétrodiffusés F_R, triangles : coefficient de rétrodiffusion R... 154

Figure 76 : Calculs numériques vs. MC canal balistique (L_{ch} = 35 et 50 nm) 154

Figure 77 : Isocontours énergétiques pour la première bande de valence dans le plan (ΓX, ΓY), i.e. k_z = 0 pour différents cas de contrainte, a) -500 MPa uniaxiale selon <110>, b) +500 MPa uniaxiale selon <110>, c) non contraint, d) -500 MPa biaxiale, e) +500 MPa biaxiale. Les énergies sont référencées par rapport au maximum de la bande. Premier contour à E = 5 meV, écart énergétique entre les contours ΔE = 10 meV. 162

Figure 78 : Levée de dégénérescence des bandes en fonction de la contrainte. Symboles pleins : biaxiale dans le plan (001), symboles vides : uniaxiale selon <110>. 164

Figure 79 : Masses de courbure des 3 premières bandes de valence autour de Γ dans les directions <100> (a,c) et <110> (b,d), pour une contrainte biaxiale dans le plan (001) (a,b) et uniaxiale selon <110> (c,d). Losanges pleins : hh, cercles pleins : lh, cercles vides : so. 164

Figure 80 : Densité d'états par bande. L'origine des énergies est le maximum de bande de valence, a) calcul **k.p** 30 bandes (traits pleins) vs. modèle analytique de masse effective avec $m_{hh} = 0{,}87 m_0$ et $m_{lh} = 0{,}24 m_0$ (tirets), b) Si relaxé (traits pleins épais) comparé au Si sous contrainte uniaxiale selon <110> 1 GPa en compression (tirets épais), et 1 GPa en tension (traits pleins fins). 166

Figure 81 : a) Masse effective de concentration de porteurs m_{cc} en fonction de la contrainte. Symboles pleins : 1ère bande (ou hh), symboles vides : 2e bande (ou lh). Carrés : contrainte biaxiale, cercles : uniaxiale selon <110>, b) vitesse thermique dans les directions <110> (cercles) et $<1\bar{1}0>$ (carrés), relative à $v_{th}(0) = 8{,}6\ 10^4$ m/s

et énergie moyenne (losanges) en fonction d'une contrainte uniaxiale selon <110>. 168

Figure 82 : a) Vitesse de dérive en fonction du champ électrique, résultats MC vs. expériences [Canali1971; Ottaviani1975], b) Effet du dopage sur la mobilité faible champ, comparaison entre MC **k.p** 30 bandes, bandes analytiques et expérience [Landolt-Börnstein1982]. 170

Figure 83 : Mobilité effective (canal Si non contraint dopé à 7,8 10^{15} cm^{-3}), 14% de réflexions diffusives, résultats MC (ligne) superposé à l'expérience [Takagi1994a] (cercles). $E_{eff} = (N_{dep}+N_{inv}/3)/(\varepsilon_0\varepsilon_{Si})$, N_{dep} étant la charge de désertion et N_{inv} la charge d'inversion. 171

Figure 84 : a) Vitesse de dérive pour un champ électrique selon <110> pour différentes valeurs de contrainte biaxiale dans le plan (001) en compression (traits et symboles pleins) et en tension (tirets et symboles vides), trait épais sans symbole : non contraint, losanges : ±0,5 GPa ; triangles : ±1 GPa, cercles : ±2 GPa, b) variation de mobilité faible champ selon <110> (ligne) comparée à des mesures sur des MOSFET *bulk* à canal dopé [Lee2005; Leitz2001; Rim2003a] (symboles). 172

Figure 85 : Gain en vitesse stationnaire par rapport au cas non contraint en fonction du champ électrique appliqué selon <110> (barreau de Si contraint non dopé). 172

Figure 86 : a) Vitesse de dérive pour un champ électrique selon <110> pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale selon <110> en compression (traits et symboles pleins) et en tension (tirets et symboles ouverts), trait épais sans symbole : non contraint, losanges : ±0,5 GPa ; triangles : ±1 GPa, cercles : ±2 GPa, b) variation de mobilité selon <110> en fonction de la contrainte uniaxiale selon <110> et <-110> comparée à des mesures de *wafer bending* [Thompson2004; Wang2006] (symboles). 173

Figure 87 : Structure pDG-MOSFET à canal non dopé simulée, T_{Si} = 8 nm, EOT = 1,2 nm, L_G = 21 nm , L_{ch} = 19 nm. Le canal est orienté selon <100> ou <110>, V_{DD} = 0,9 V. 175

Figure 88 : pDG-MOSFET non contraint à canal orienté <110> à $V_{GS} = V_{DS} = -V_{DD}$ (état ON), a) potentiel à l'interface Si/SiO_2 sous l'un des oxydes de grille (traits) et au milieu du canal (tirets). Les régions d'*overlap* de grille sont indiquées par des tirets fins. b) Cartographie de la concentration de trous (m^{-3}, couleurs en unités logarithmiques 10^x). 176

Figure 89 : pDG-MOSFET non contraint à canal orienté <110> à $V_{GS} = V_{DS} = -V_{DD}$ (état ON), trait épais : canal standard, trait fin : canal balistique, a) vitesse moyenne des porteurs dans la direction source-drain, b) énergie cinétique moyenne. 177

Figure 90 : même résultats que la Figure 89, mais pour un canal orienté <100>. 177

Figure 91 : Contrainte biaxiale et orientation de canal : caractéristiques $I_D(|V_{GS}-V_T|)$ à fort $V_{DS} = -V_{DD}$ pour différentes valeurs de contrainte biaxiale dans le plan (001), canal orienté a) selon <100>, b) selon <110>. 178

Figure 92 : a) I_{ON} obtenu à même $|V_{GS}-V_T|$ et à $V_{DS} = -V_{DD}$ en fonction de la contrainte biaxiale, pour un canal orienté <100> (cercles) et <110> (carrés), b) délai C_GV_{DD}/I_{ON} correspondant comparé à la spécification de l'ITRS pour le nœud LOP 25 nm. 179

Figure 93 : Effet d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001) sur le courant relatif au pDG-MOSFET non contraint à même $|V_{GS}-V_T|$, comparé aux mobilités

relatives issues du calcul MC (trait épais, phonons seuls), I_{ON} obtenu à fort $V_{DS} = -V_{DD}$, cercles : canal orienté <100>, carrés : <110>.....180

Figure 94 : pDGMOSFET à $V_{DS} = -V_{DD}$ et même $|V_{GS}-V_T|$, évolution de la vitesse moyenne des porteurs dans la direction source-drain, trait épais : non contraint, trait fin : contrainte biaxiale en tension +1 GPa, tirets : +2 GPa, a) canal <100>, b) canal <110>. 181

Figure 95 : Spectres de la proportion de porteurs présents en fin de canal en fonction du nombre d'interactions subies durant la traversée du canal orienté <100> pour différentes valeurs de contrainte biaxiale.....181

Figure 96 : Caractéristiques $I_D(|V_{GS}-V_T|)$ à fort $V_{DS} = -V_{DD}$, canal orienté <110> pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale a) selon <110>, b) selon <-110>..183

Figure 97 : a) I_{ON} obtenu à même $|V_{GS}-V_T| = 0{,}48$ V, $V_{DS} = -V_{DD}$ pour un canal orienté <100> (tirets) et <110> (traits) en fonction de la contrainte uniaxiale selon <110> (carrés) et <-110> (cercles), b) délai CV_{DD}/I_{ON} correspondant comparé à la valeur donnée par l'ITRS pour la technologie *Low Operating Power* 25 nm pour les nMOSFET (tirets). 183

Figure 98 : Effet de contraintes uniaxiales selon <110> et <-110> sur le I_{ON} relatif au pDG-MOSFET à canal <110> non contraint à même $|V_{GS}-V_T| = 0{,}48$ V (tirets), a) comparé aux mobilités relatives issues du calcul MC (traits épais, phonons seuls), b) comparé à la variation de v_{th}. 184

Figure 99 : Evolution de la vitesse moyenne des porteurs le long de l'axe source-drain dans les pDG-MOSFET à canal <110> à $V_{DS} = -V_{DD}$ et $|V_{GS}-V_T| = 0{,}48$ V sous contrainte uniaxiale selon <110>. 185

Figure 100 : a) Spectres de la proportion de porteurs présents en fin de canal en fonction du nombre d'interactions subies durant la traversée du canal orienté <110> pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale, b) grandeurs L_{SC} et $\langle N_{SC}\rangle$ extraites correspondantes en fonction de la contrainte. 185

Figure 101 : Variation du courant à l'état ON avec la contrainte uniaxiale selon <110>, comparée à la variation du pseudo libre parcours moyen. 186

Figure 102 : [Rideau2008b] Montage expérimental de *wafer bending*, a) application de la contrainte uniaxiale sur une bande, b) mesure du rayon de courbure avec une caméra numérique, c) banc de caractérisation électrique. 189

Figure 103 : a) Echantillons associés aux directions de contrainte uniaxiale. Les dispositifs ont un canal orienté selon <110>, b) caractéristiques $I_D(V_{GS})$ en régime linéaire ($V_{DS} = -0{,}1$ V) pour la référence non contrainte (trait épais) et les cas extrêmes de contrainte considérés [Huet2008a; Rideau2008b]. 190

Figure 104 : [Huet2008a]Variations de mobilité extraites à $V_{GS} = -2{,}7$ V (symboles pleins) en fonction de la contrainte uniaxiale dans les directions <110> (carrés), <-110> (cercles) et <100> (triangles), comparée aux données expérimentales [Wang2006] (symboles vides) dans les directions <110> (carrés) et <-110> (cercles). Traits : modèle piézorésistif avec les coefficients π_L (10^{-11} Pa^{-1}) ajustés.....191

Figure 105 : Masses de courbures selon la direction de confinement <001> pour les 3 premières bandes de valence (calcul 3Dk, **k.p** 30 bandes), a) contrainte biaxiale en tension dans le plan (001), b) contrainte uniaxiale selon <110>.....192

Figure 106 : Bandes de valence 2Dk (couche d'inversion pMOS où $E_{eff} \approx 1$ MV/cm) sur l'axe <100> a) non contraint, b) sous contrainte biaxiale en tension (677 MPa) pour

laquelle la levée de dégénérescence induite par le confinement est exactement compensée par la contrainte. 193

Figure 107 : Structures de bandes 2Dk pour le premier niveau (type hh) calculées avec UTOX. Ecart énergétique entre les contours $\Delta E = 40$ meV, a) non contraint, b) tension uniaxiale 200 MPa selon <110>. 194

Figure 108 : Facteur de recouvrement obtenu avec UTOX pour du Si non contraint en fonction du niveau pour 2 densités d'inversion, symboles pleins $p_S = 10^{13}$ cm^{-2}, symboles vides : $p_S = 4{,}75\ 10^{12}$ cm^{-2}, carrés : états de « cœur » $F_{n,n}$, cercles : recouvrement entre les états de cœurs et le premier niveau excité correspondant $F_{n,n+6}$. 196

Figure 109 : Gaz de trous 2Dk, intégrande de la formulation de la mobilité $\mu_{xx}(\mathbf{k})$ du premier niveau quantifié (u.a.) en fonction de $(k_x,k_y)\times 2\pi/a_0$, les zone en rouge au voisinage des axes <110> et <-110> sont les lieux de forte mobilité. a) Cas non contraint, b) contrainte uniaxiale en tension selon <110> de 200 MPa. 197

Figure 110 : [Huet2008a] $\Delta\mu/\mu$ en fonction de la contrainte uniaxiale selon trois directions, a) 2Dk KG, b) 3Dk KG. Symboles vides : temps de relaxation τ constant indépendant de l'énergie, symboles pleins : τ dépendant de l'énergie. Tirets : Modèle piézorésistif (coefficients extrait des mesures de ce travail). 198

Figure 111 : [Huet2008a] Variation de mobilité en fonction de la contrainte biaxiale en tension sans le plan (001). Carrés : expérience dans des couches d'inversion avec $E_{eff} \approx 1$ MV/cm [Rim2003a], triangles: 2D KG, cercles : 3D KG, symboles vides : temps de relaxation τ constant indépendant de l'énergie, symboles pleins : τ dépendant de l'énergie. 199

Figure 112 : Intersections possibles d'une surface isoénergie avec une maille tétraédrique. 207

Figure 113 : Vecteur d'onde final sur une surface isoénergie triangulaire. 209

Figure 114 : Surface isoénergie de type quadrangle 210

Figure 115 : Fonction d'écrantage. 213

Figure 116 : Fréquences d'interaction intégrées numériquement avec les impuretés ionisées 216

Figure 117 : Terme s(**k**,**k'**) pour **k** donné et E = 10 meV en fonction de |**q**| = |**k**-**k'**|. 217

Figure 118 : Fréquence d'interaction en fonction de l'énergie avec (τ_{imp}) et sans (λ_{imp}) pondération par 1-cos(θ) (chaque point est la valeur de fréquence pour un **k** donné). 218

Figure 119 : Algorithme de réjection isotrope. 220

Figure 120 : Termes significatifs de s(**k**,**k'**) en fonction du vecteur d'onde de transition **q**.. 221

Figure 121 : Algorithme de réjection anisotrope. 222

Sigles et notations

ANR : **A**gence **N**ationale pour la **R**echerche, http://www.agence-nationale-recherche.fr
MODERN : **MO**délisation de **D**ispositifs **E**lectroniques en **R**égime **N**anométrique
PULLNANO : **PULL**ing the limits of **NANO**CMOS electronics, www.pullnano.eu

Les vecteurs, les tenseurs et les matrices sont notés en caractères gras (vecteur **k**, tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$) pour les distinguer de leurs composantes.
Directions cristallographiques : <100>, <110>, …
Plans perpendiculaires à une direction : (001), (110), ...

μ	Mobilité des porteurs ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_0	Mobilité intrinsèque au matériau ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_{eff}	Mobilité effective ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_{eff}^{bal}	Mobilité effective « balistique » apparente ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_{eff}^{long}	Mobilité effective dans un transistor long ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_L	Mobilité dans la direction longitudinale au canal ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_{MR}	Mobilité de magnétorésistance ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_{MR}^{bal}	Mobilité de magnétorésistance « balistique » apparente ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_{MR}^{long}	Mobilité de magnétorésistance dans un transistor long ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_P	Mobilité des poches de surdopage ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
μ_T	Mobilité dans la direction transverse au canal ($m^2.V^{-1}.s^{-1}$)
2Dk	Gaz de porteur à deux degrés de liberté dans l'espace réciproque
3Dk	Gaz de porteur à trois degrés de liberté dans l'espace réciproque
a_0	Paramètre de maille (m)
a_v, b et d	Potentiels de déformation de Bir et Pikus (eV)
B	Champ magnétique (T)
B_{eff}, B_{int}	Coefficient de baliticité effective et intrinsèque
CESL	*Contact Etch Stop Layer*, couche d'arrêt à la gravure des contacts
C_{GS}	Capacité grille-source ($F.m^{-1}$)
$\mathbf{C_{ij}}$	Tenseur de rigidité (Pa)
C_{ox}	Capacité d'oxyde de grille ($F.m^{-1}$)
D_{ac} ou Ξ_{eff}	Potentiel de déformation acoustique élastique (eV)
DCOI	*Dual Channel On Insulator*, transistor à canal dual sur isolant
DG	Double Grille, architecture particulière de transistor
DIBL	*Drain Induced Barrier Lowering*, effet de canal court d'abaissement de la barrière de potentiel par la tension de drain

D_{op}, D_{iv0}, D_{iv1}	Potentiels de déformation des phonons inélastiques ($eV.m^{-1}$)
DOS	*Density Of States*, densité d'états ($eV^{-1}.m^{-3}$ ou $J^{-1}.m^{-3}$)
DSL	*Dual Stress Liner*, technologie à double couche contraignante
E	Champ électrique ($V.m^{-1}$)
E(**k**)	Relation de dispersion ou structure de bandes (J ou eV)
$\mathbf{E}_{//}$	Champ électrique dans la direction parallèle à l'axe Source-Drain ($V.m^{-1}$)
E_C	Energie cinétique (J ou eV)
E_{eff}	Champ effectif dans une couche d'inversion ($V.m^{-1}$)
E_F ou φ_F	Niveau de fermi (eV)
EOT	*Equivalent Oxide Thickness*, épaisseur équivalente d'oxyde SiO_2 (m)
E_P	Energie d'interaction entre 2 bandes (J ou eV)
E_{sat}	Champ électrique de saturation de la vitesse ($V.m^{-1}$)
ESL	*Etch Stop Layer*, couche d'arrêt à la gravure
F	Force électromagnétique ($eV.m^{-1}$)
f(**r**,**k**,t), f_0, f_B	Fonction de distribution, statistique de Fermi-Dirac ou de Boltzmann
FB	*Full Band* ou exploitant un structure de bandes complète
FDSOI	*Fully Depleted Silicon On Insulator*, transistor à canal complètement déserté
F_{mn}	Intégrale de recouvrement des fonctions d'ondes
F_R	Flux de porteurs rétrodiffusés
g_d	Conductance de drain (S)
$\mathbf{G_i}$	Vecteur de base de l'espace réciproque (m^{-1})
g_m	Transconductance (S)
ħ	Constante de Planck = $6{,}62\ 10^{-34}$ J.s
HH ou hh	*Heavy Hole*, 1ère bande de valence du Silicium
HOT	Hybrid Orientation Technology, substrat à orientation hybride
I_D	Courant de Drain ($A.m^{-1}$)
I_D^{bal}	Courant de drain balistique ($A.m^{-1}$)
I_{OFF}	Courant à l'état OFF du transistor (i.e. à $V_{DS} = 0$ V, $\|V_{GS}\| = V_{DD}$) ($A.m^{-1}$)
I_{ON}	Courant à l'état ON du transistor (i.e. à $\|V_{DS}\| = \|V_{GS}\| = V_{DD}$) ($A.m^{-1}$)
ITRS	*International Technology Roadmap for Semiconductors*
J ou **j**	Densité de courant ($A.m^{-2}$)
j, j_z	Moment angulaire orbital total et composante selon z
k (k_x, k_y, k_z)	vecteur d'onde dans l'espace réciproque (m^{-1})
k.p	Méthode de calcul de structure de bandes
k_B	Constante de Boltzmann = $1{,}38\ 10^{-23}$ $J.K^{-1}$
K_{eff}^{bal}	Coefficient de réduction de mobilité effective ($m^2.V^{-1}.s^{-1}.\ nm^{-1}$)

KG	Kubo-Greenwood
K_{MR}^{bal}	Coefficient de réduction de mobilité de magnétorésistance ($m^2.V^{-1}.s^{-1}.\ nm^{-1}$)
K_P	Coefficient de réduction de mobilité due aux poches de surdopage ($m^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$)
L_{ch}	Longueur de canal (m)
L_{eff}	Longueur de canal effectivement controlée par la grille (m)
L_G	Longueur de grille (m)
LH ou lh	*Light Hole*, 2ème bande de valence du Silicium
L_{SC}	pseudo libre parcous moyen (nm)
$m_\perp$	Masse de confinement (m_0)
m*	Masse effective (m_0)
m_0	Masse de l'éléctron libre = 9,109 10^{-31} kg
MC	Monte Carlo
m_c	Masse de conduction (ou masse de courbure de bande) dans une direction donnée (m_0)
m_{cc}	Masse effective de concentration de porteurs (m_0)
m_{DOS}	Masse effective de densité d'états (m_0)
m_l	Masse de courbure de bande longitudinale à la direction de transport (m_0)
MOS	Metal Oxyde Semiconducteur
MOSFET	*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*, transistor à effet de champ
m_t	Masse de courbure de bande transverse à la direction de transport (m_0)
n(r), p(r) ou n(k),p(k)	Densité de porteurs dans l'espace réel ou réciproque
N_D, N_A	Densité d'impuretés ionisées (donneurs, accepteurs) (m^{-3})
N_{dep}	Charge de désertion (m^{-2})
N_{inv}, n_S, p_S	Charge d'inversion (m^{-2})
N_P	Fonction d'occupation des phonons
N_{SC}	Nombre moyen d'interactions subies pendant la traversée du canal
p	Opérateur quantité de mouvement
P(**k**)	Probabilité totale d'interaction
P_{diff}	Fraction de réflexions diffusives à l'interface Si/SiO_2
q	Charge algébrique du porteur = ±1,6 10^{-19} C
r (x,y,z)	Vecteur position dans l'espace réel
R_C	Coefficient de rétrodiffusion du canal
R_{ch}	Résistance intrinsèque au canal du transistor (Ω.m)
R_D	Repère dispositif
R_S ou $R_{série}$	Résistance série (Ω.m)
s	Spin

s(**k**,**k'**)	Probabilité de passage du porteur d'un état **k** à un état **k'**
SCE	*Short Channel Effects*, effets de canal court
SGOI	*Silicon Germanium On Insulator*, substrat SiGe sur isolant
$\mathbf{S_{ij}}$	Tenseur d'élasticité (Pa^{-1})
SL	*Stress Liner*, film mince contraignant
SMT	*Stress Memorisation Technology*, technologie à mémorisation de contrainte
SO ou so	*Split-Off*, 3ème bande de valence du Silicium
SOI	*Silicon On Insulator*, substrat Silicium sur isolant
SoN	*Silicon on Nothing*, technologie Silicium sur rien
sSOI	strained Silicon On Insulator, substrat Silicium contraint sur isolant
STI	*Shallow Trench Isolation*, tranchées d'isolation peu profondes
T	Temperature (K)
T, R	Coefficients de transmission et de rétrodiffusion
TCAD	*Technology Computer Aided Design*
TEM	*Transmission Electron Microscopy*, microscopie électronique à transmission
T_{ox}	Epaisseur d'oxyde de grille (m)
T_{Si}	Epaisseur de film de la couche active du transistor (m)
u_l, u_s	Vitesse du son longitudinale ou moyenne ($m.s^{-1}$)
$u_{n,k}(\mathbf{r})$	Fonction de Bloch
v	vitesse des porteurs ($m.s^{-1}$)
V_C	Volume du cristal (m^{-3})
V_{DD}	Tension d'alimentation (V)
V_{DS}	Tension Drain-Source (V)
$\mathbf{v_g}(\mathbf{k})$ ou $\mathbf{v}(\mathbf{k})$	Vitesse de groupe ($m.s^{-1}$)
V_{GD}	Tension Grille-Drain (V)
V_{GS}	Tension Grille-Source (V)
v_{inj}	Vitesse d'injection ($m.s^{-1}$)
v_R	Vitesse des porteurs rétrodiffusés ($m.s^{-1}$)
v_{sat}	Vitesse de saturation ($m.s^{-1}$)
V_T	Tension de seuil du transistor (V)
v_{th}	Vitesse thermique ($m.s^{-1}$)
W	Largeur du transistor (m)
ZB	Zone de Brillouin
ZCE	Zone de Charge d'Espace
Δ	Vallées de la bande de conduction du Silicium
Δ_0	Energie de couplage spin-orbite

ΔE_v	Levée de dégénérescende des bandes (J ou eV)
Ψ	Fonction d'onde
$\Psi^\dagger$	Fonction d'onde conjuguée
α	Coefficient de non parabolicité (eV^{-1})
β_S	Longueur d'écran (m)
$\chi(z)$	Fonction enveloppe
ε_0	Permittivité diélectrique dans le vide = 8,85 10^{-12} $F.m^{-1}$
$\boldsymbol{\varepsilon_{dev}}$	Tenseur de déformation déviateur
$\boldsymbol{\varepsilon_{hyd}}$	Tenseur de déformation hydrostatique
$\boldsymbol{\varepsilon_{ij}}$	Tenseur de déformation
ε_{SC}	Permittivité diélectrique dans le semiconducteur relativement au vide (11,7 pour le Silicium)
γ_i	Paramètres de courbures de Luttinger
$\varphi(z)$	Fonction test
λ_{aco}, λ_{opt}, λ_{iv0}, λ_{iv1}, λ_{imp}	Fréquences d'interaction (s^{-1})
λ_{lpm}	Libre parcours moyen (m)
$\boldsymbol{\pi_{ij}}$	Tenseur de piezorésistivité (Pa^{-1})
π_L	Coefficient de piezorésistance longitudinal (Pa^{-1})
π_T	Coefficient de piezorésistance transverse (Pa^{-1})
ρ	Masse volumique ($kg.m^{-3}$)
ρ_0	Résistivité électrique ($\Omega.m^{-1}$)
$\boldsymbol{\rho_{ij}}$	Tenseur de résistivité ($\Omega.m^{-1}$)
σ_0	Conductivité électrique ($S.m^{-1}$)
$\boldsymbol{\sigma_{ij}}$	Tenseur de contraintes (Pa)
τ	Temps de relaxation (s)
ω_{op}, ω_{iv}	Pulsations des phonons inélastiques optiques ou intervallées ($rad.s^{-1}$)

Logiciels utilisés

MONACO : [Huet2008b; Querlioz2007] Simulateur particulaire Monte Carlo couplé à un solveur de l'équation de Poisson 3D, 2D ou 1D développé à l'Institut d'Electronique Fondamentale, CNRS, Université Paris-Sud, Orsay, France.

UTOX : [Rideau2008a] Outil de résolution de l'équation **k.p**-Schrödinger couplé à l'équation de Poisson 1D, basé sur la méthode **k.p** à 6 ou 30 bandes, développé à STMicroelectronics, Technology Modeling, Crolles, France.

SCHRED : [Vasileska2006] Outil de résolution Schrödinger couplé à l'équation de Poisson 1D, basé sur l'approximation de la masse effective, développé à l'université d'Arizona, Tempe, USA, http://www.nanohub.org.

Introduction générale

L'industrie de la microélectronique connaît des bouleversements en cette période de troubles économiques avec la délocalisation de nombreux moyens de production vers l'Asie. Ce phénomène est en partie motivé par une volonté stratégique de se rapprocher de l'un des plus grands marchés potentiels pour les produits de haute technologie. Par ailleurs, les nouvelles stratégies mises en place pour améliorer les performances des composants deviennent de plus en plus onéreuses alors que la réduction des coûts reste une priorité.

A l'aube du XXIème siècle, la microélectronique vit une période charnière de son histoire. Les règles de dimensionnement qui, depuis plus 30 ans, ont permis la miniaturisation continue du composant de base de la microélectronique, le transistor à effet de champ MOSFET (*Metal/Oxide/Semiconductor Field Effect Transistor*), ont été progressivement mises en défaut par des effets parasites inhérents à leurs faibles dimensions. Par exemple, les faibles épaisseurs d'isolant de grille imposées par les lois d'échelle induisent l'apparition d'un courant de fuite par effet tunnel. De plus, l'ingénierie de dopage canal se heurte aux problèmes de variabilité dus au faible nombre d'impuretés effectivement présentes dans la zone active réduite des dispositifs. Aujourd'hui, l'amélioration des performances implique l'utilisation de nouveaux « *boosters* » technologiques tels que les empilements de grille évolués (métal/oxyde haute permittivité, ou *high-k*) et les contraintes mécaniques. Demain, des architectures alternatives plus complexes que le MOSFET *bulk* planaire, telles que les multigrilles (Double Grille planaire DGMOS, FinFET) et les nanofils, sont envisagées pour garantir le contrôle électrostatique de la grille sur la conduction.

Face à l'ensemble de ces défis technologiques, la modélisation est un atout majeur des industriels pour rester compétitif dans ce secteur. L'ITRS (*International Technology Roadmap for Semiconductors*) prédit dans son édition 2007 [ITRS2007] une montée en puissance de l'utilisation des outils de simulation pour guider l'évolution des technologies. Les industriels économiseraient d'ores et déjà plus de 25% sur les temps de développement, plus de 30% sur les coûts de fabrication et de caractérisation des lots et pourraient réduire de plus de 34% le nombre de voies technologiques à explorer. Ainsi, avec les avancées significatives des méthodes numériques et de la compréhension de la physique ces dernières années, les efforts de développement des outils de simulation doivent être poursuivis sans

relâche pour répondre aux besoins croissants des industriels en termes d'exploration de structures alternatives et d'optimisation des technologies.

Dans ce contexte, le projet national MODERN, initié en 2005 et coordonné par l'IEF, rassemble de nombreux grands groupes (STMicroelectronics, NXP, CEA-LETI) et partenaires académiques (CNRS, INPG, INSA Lyon) pour le développement d'outils de simulation complémentaires avec une approche multi-échelle allant du calcul *ab-initio* (pour le calcul de structures de bandes) à la modélisation compacte (circuits), en passant par la simulation Monte Carlo (transport) et les outils TCAD (*Technology Computer Aided Design* pour la simulation de procédés et de composants). En parallèle, le projet intégré européen PULLNANO, coordonné par STMicroelectronics et regroupant certains de ces partenaires et d'autres acteurs européens (FhG/IISB, IMEC…), vise à concevoir les composants pour les nœuds technologiques 32 et 22 nm.

Cette thèse, co-financée par STMicroelectronics et le CNRS *via* une bourse Docteur-Ingénieur, s'inscrit dans le cadre de ces deux projets. Ce travail est consacré à la modélisation des dispositifs pour les prochains nœuds technologiques et à l'impact de la contrainte mécanique sur les performances, à l'aide du simulateur particulaire Monte Carlo (MC) MONACO développé à l'IEF et de l'outil de calcul de structures de bandes UTOX développé à STMicroelectronics. MONACO est initialement basé sur des descriptions analytiques des structures de bandes, qui peuvent s'avérer insuffisantes pour prédire les effets de contrainte sur le transport, notamment pour la bande de valence. Dans ce contexte, les objectifs de cette thèse sont les suivants :

- Adapter MONACO à la prise en compte d'une description complète et numérique de structures de bandes pour en faire un simulateur MC dit *Full Band*, intégrant notamment l'effet de la contrainte mécanique,
- Exploiter le simulateur pour l'étude de dispositifs représentatifs des prochains nœuds technologiques,
- Comprendre les liens existants entre les propriétés intrinsèques au matériau et les performances des transistors en proposant des modèles simples.

Dans le premier chapitre de ce manuscrit, après un bref rappel sur les transistors à effet de champ, les principales stratégies mises en œuvre pour l'amélioration de leurs performances seront détaillées, avec un accent particulier sur les procédés utilisés pour induire

la contrainte mécanique dans les dispositifs. Nous en profiterons pour présenter le formalisme permettant de décrire la contrainte ainsi que son influence sur les propriétés intrinsèques du Silicium.

Le second chapitre présentera les éléments essentiels à la modélisation et à l'analyse du transport dans les transistors développés et exploités dans cette thèse. Nous décrirons les outils de calcul de structure de bandes, les modèles de transport utilisés et les paramètres importants pour la caractérisation des performances tels que la mobilité.

Le troisième chapitre est consacré au transport des électrons en gaz 3Dk (possédant 3 degrés de liberté dans l'espace réciproque). Nous commencerons par une description de la bande de conduction et de l'influence d'une contrainte biaxiale. Nous analyserons ensuite le transport stationnaire dans un barreau de Silicium infiniment long. Enfin, nous étudierons les effets non stationnaires dans les dispositifs ultra courts et des modèles de mobilité issus de l'analyse de simulations MC y seront proposés.

Le quatrième et dernier chapitre est consacré au sujet complexe du transport de trous. Dans un premier temps, nous décrirons les effets de contrainte uniaxiale et biaxiale sur la bande de valence et leurs conséquences sur le transport dans un barreau infiniment long. Dans un second temps, nous analyserons avec MONACO 3Dk le fonctionnement d'un transistor DGMOS étudié pour le nœud 22 nm de PULLNANO avec notamment l'influence de la contrainte sur les effets non stationnaires. Enfin, nous étudierons les effets de la contrainte sur la mobilité dans une structure MOS sur substrat *bulk* avec un formalisme de Kubo-Greenwood et comparerons les approches en gaz 3Dk et 2Dk à des mesures de piézorésistivité issues d'expériences de *wafer bending*.

Chapitre I :
Intérêt de la contrainte
dans les MOSFET

1 Petits rappels sur le transistor MOS

Le transistor MOSFET est aujourd'hui le composant de base de la microélectronique. Dans ce secteur, le marché mondial est fortement compétitif et en expansion constante. Les efforts massifs des industriels en Recherche et Développement visent à augmenter la productivité *via* l'augmentation de la densité d'intégration et à améliorer les performances des circuits, tout en minimisant leur consommation. Tout cela passe par la réduction agressive des dimensions caractéristiques des composants de base, ce qui permet en principe de gagner sur tous les tableaux. On peut alors augmenter la complexité et la rapidité des circuits et proposer au marché de toujours plus nombreuses applications *Hi-Tech* nouvelles à bas prix.

1.1 Fonctionnement

Le transistor est majoritairement utilisé en tant qu'interrupteur commandé. Il permet à un signal électrique de faible puissance de contrôler un signal de forte puissance. Il peut fonctionner en analogique (en tant qu'amplificateur par exemple) ou en numérique (interrupteur ON / OFF).

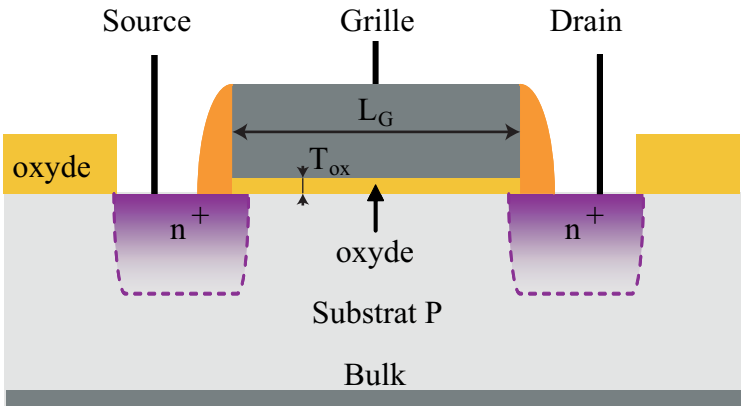

Figure 1 : Schéma d'un transistor MOSFET« *normally off* » conventionnel à canal N sur substrat P.

La géométrie d'un MOSFET conventionnel à canal N ou nMOSFET (conduction par des électrons) est schématisée sur la Figure 1. La capacité MOS est formée par l'empilement du substrat dopé P (accepteurs de charges), de l'oxyde isolant d'épaisseur T_{ox} et du contact métallique de grille de longueur L_G. Le dispositif est polarisé par 4 électrodes : Source, Drain,

Grille et Substrat (ou *bulk*). Les caissons de source et drain, fortement dopés N (donneurs) servent de réservoirs de porteurs de charges.

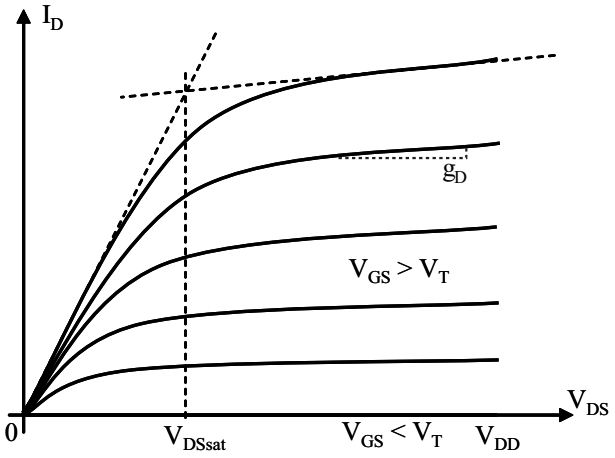

Figure 2 : Caractéristiques typiques $I_D(V_{DS})$ à différents V_{GS} d'un nMOSFET.

L'objectif d'une telle structure est de contrôler un flux de porteurs de charges entre la Source et le Drain. Quand aucune tension n'est appliquée sur les électrodes, il n'existe pas de courant de conduction entre Source et Drain. L'application d'une tension V_{GS} positive sur la grille permet en principe de créer une zone de charge d'espace (ZCE) dans la zone de substrat proche de l'oxyde en repoussant les trous. Dans ce régime où le transistor est à l'état bloqué, le courant de drain établi entre les caissons pour $V_{DS} > 0$ est essentiellement un courant de fuite par diffusion et peut s'écrire :

$$I_D = I_{D0} \exp\left(\frac{V_{GS} - V_T}{S_t} \ln 10\right)\left(1 - \exp\left(-\frac{qV_{DS}}{k_B T}\right)\right) \tag{1.1.1}$$

où S_t est la pente sous le seuil, exprimée en V/décade.

Pour V_{GS} supérieur à la tension de seuil V_T (positive pour un nMOSFET *normally off*), cette ZCE se peuple d'électrons venant des réservoirs qui forment un canal surfacique de conduction à l'interface entre le substrat et l'oxyde. C'est le régime d'inversion. L'application d'une tension de drain V_{DS} crée un champ accélérateur $\mathbf{E}_{//}$ parallèle à cette interface entre Source et Drain, ce qui met en mouvement les porteurs présents dans le canal et crée un courant de conduction I_D. A faible V_{DS} ($V_{DS} < V_{DSsat}$), la réponse des porteurs au champ accélérateur est linéaire et leur vitesse **v** s'écrit :

$$\mathbf{v} = -\mu_{eff} \mathbf{E}_{//} \tag{1.1.2}$$

où μ_{eff} est leur mobilité effective.

Dans ce régime dit ohmique ou linéaire, le courant peut s'écrire :

$$I_D = \mu_{eff} C_{ox} \frac{W}{L_G} \left(V_{DS} \left(V_{GS} - V_T \right) - \frac{V_{DS}^2}{2} \right) \tag{1.1.3}$$

où W est la largeur du canal et C_{ox} la capacité surfacique de la structure MOS.

Quand V_{DS} devient supérieur à une valeur limite V_{DSsat}, le courant ne dépend presque plus de V_{DS}. C'est le régime saturé où le courant est essentiellement contrôlé par V_{GS}. Les mécanismes de saturation dépendent du type de dispositif considéré. Par exemple, dans le cas d'une saturation par pincement en fin de canal dans un transistor long, on a $V_{DSsat} = V_{GS}-V_T$ (soit $V_{GDsat} = V_T$) et le courant peut s'écrire :

$$I_D = \mu_{eff} C_{ox} \frac{W}{L_G} \frac{\left(V_{GS} - V_T \right)^2}{2} \tag{1.1.4}$$

En réalité, le courant dépend toujours, même faiblement, de V_{DS}. Le degré de saturation est caractérisé par la conductance de drain g_D, pente de I_D par rapport à V_{DS} en régime saturé à V_{GS} donné.

En analysant ces formulations approchées, on s'aperçoit qu'en régime de conduction, le courant dépend, d'une part, de la géométrie du dispositif et, d'autre part, de la mobilité effective des porteurs. La stratégie des industriels, depuis les années 70, a été de réduire progressivement L_G pour augmenter le courant et ainsi améliorer les performances des transistors. En effet, réduire L_G rend le transistor intrinsèquement plus rapide du fait que les porteurs, ayant moins de distance à parcourir, ont un temps de transit plus court.

1.2 La mise à l'échelle et ses limites

Si on décide de réduire la longueur de grille du transistor pour augmenter le courant de drain, il faut veiller à ne pas dégrader les autres caractéristiques importantes. Il est important de bien contrôler V_T relativement à la tension d'alimentation V_{DD} et de conserver de faibles valeurs de courant à l'état bloqué I_{OFF} et de conductance de drain g_D. Des règles précises de mise à l'échelle ont été définies pour tous les paramètres géométriques et physiques. Elles visent essentiellement à sauvegarder le contrôle des porteurs dans le canal par la grille, mis en danger par la diminution agressive de L_G. Ces règles de mise à l'échelle reposent principalement sur la conservation des champs électriques dans le transistor quand L_G varie [Haensch2006].

L'évolution des transistors est encadrée par des feuilles de route mises en place par une association internationale d'industriels et de laboratoires. Ces « *roadmaps* » ITRS [ITRS2007] (*International Technology Roadmap for Semiconductors*) sont mises à jour annuellement en fonction de l'évolution des technologies et orientent les recherches. Elles tiennent compte de très nombreux paramètres électriques et technologiques et quantifient les performances attendues.

Pour les applications logiques, le paramètre essentiel caractérisant les performances est le délai intrinsèque de grille :

$$\tau = \frac{C_{gate} V_{DD}}{I_{ON}} \tag{1.1.5}$$

où V_{DD} est la tension d'alimentation, C_{gate} est la capacité totale de la grille, incluant les capacités parasites, et I_{ON} le courant à l'état passant (i.e. $V_{GS} = V_{DS} = V_{DD}$).

Pour les applications hautes performances (ou *High Performance* HP) et basse consommation (ou *Low Power* LP), les dimensions ont été très fortement réduites, plus rapidement que la tension d'alimentation à cause de problèmes de marges de bruit. En effet, il faut une tension suffisante pour pouvoir distinguer l'état ON de l'état OFF avec une marge plus grande que le bruit intrinsèque au circuit. Les champs dans les transistors ont alors tendance à augmenter, ce qui entraîne des dégradations des caractéristiques appelées effets de canal court (SCE pour *Short Channel Effects*).

Tout d'abord, la puissance dissipée supplémentaire générée par l'augmentation de I_{ON} n'est pas contrebalancée par une diminution suffisante de V_{DD}. Par conséquent, la puissance dynamique dissipée par un microprocesseur augmente avec chaque génération technologique. De plus, le courant à l'état bloqué I_{OFF} étant de nature diffusive (i.e. lié à l'augmentation du gradient de concentration de porteurs entre la source et le canal), il ne peut qu'augmenter avec la réduction de L_G, ce qui accroît la consommation statique des transistors.

Cette stratégie d'amélioration des performances par la mise à l'échelle a aujourd'hui atteint ses limites et les tendances actuelles montrent une certaine saturation de I_{ON} avec la miniaturisation des composants. En effet, les solutions mises en œuvre pour circonvenir aux effets de canal court sont le résultat de compromis complexes qui ont remis en cause la viabilité de cette stratégie.

En premier lieu, la diminution de l'épaisseur d'oxyde de grille s'est trouvée limitée par le courant tunnel de fuite par la grille pour T_{ox} trop faible. La solution actuellement mise en œuvre est d'utiliser des isolants à haute permittivité diélectrique (dits « *high-k* ») couplés à

une grille métallique. Cependant, l'utilisation d'un tel empilement de grille semble dégrader la mobilité des porteurs dans le canal [Thevenod2005] et donc le courant. De plus, un bon contrôle de grille implique un très fort champ transverse qui confine les porteurs à l'interface avec l'isolant de grille. Les interactions des porteurs avec cette interface rugueuse réduisent d'autant plus leur mobilité.

En second lieu se pose le problème des résistances d'accès au canal, qui diminuent les potentiels effectifs V_{GS} et V_{DS} et ainsi le courant. Elles deviennent de l'ordre de grandeur de la résistance du canal R_{ch} avec la réduction de L_G. Malgré les progrès technologiques sur les contacts (S/D surélevés, siliciuration [Steegen1999], dopage laser [Sarnet2005; Venturini2004]), une certaine part de ces résistances reste incompressible, notamment dans les structures triple grille de type FinFET, alors que R_{ch} ne cesse de diminuer.

Cependant, ces limitations ne sont pas totalement incontournables [Lee2006; Querlioz2006b] et peuvent être résolues par des architectures alternatives (technologies SOI, FinFETs, nanofils…) et l'utilisation de nouveaux matériaux à haute mobilité (Ge, III-V,…).

Il devient de plus en plus difficile de continuer à diminuer la longueur de grille des transistors. Une autre stratégie est d'améliorer la mobilité effective des porteurs μ_{eff} (cf. équations (1.1.4)). Les industriels ont alors réfléchi à l'optimisation de ce paramètre intrinsèque au matériau. Nous allons maintenant détailler les différentes stratégies possibles d'amélioration de la mobilité.

1.3 Méthodes d'amélioration de la mobilité

Dans l'approximation du temps de relaxation, la mobilité peut s'écrire sous la forme :

$$\mu = \frac{|q|\tau}{m^*}, m^* \propto \left[\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2}\right]^{-1}, \frac{1}{\tau} \propto \mathrm{DOS} \qquad (1.1.6)$$

où E(**k**) est la relation de dispersion des porteurs considérés, q leur charge, m* leur masse effective et τ le temps de relaxation moyen, considéré comme isotrope dans ce cas. Pour simplifier, m* est fortement lié à l'inverse des courbures de bandes et τ à la densité d'états (ou DOS pour *Density Of States*).

Il existe plusieurs façons d'améliorer la mobilité des porteurs : changer le matériau du canal de conduction, changer l'orientation cristalline (orientation du substrat et direction de conduction) ou appliquer des contraintes mécaniques. Toutes ces solutions ont pour objectifs principaux de diminuer m* *via* une amélioration des courbures de bandes dans la direction du transport et l'augmentation de τ.

1.3.1 Le matériau du canal

Le Silicium s'est initialement imposé grâce à sa passivation exceptionnellement stable par son oxyde natif, le SiO_2. Avec l'avènement des nouveaux isolants *high-k*, on peut envisager que cet avantage ne soit plus un critère déterminant.

	Si	Ge	GaAs	InP	InAs	InSb	Diamant
μ_e (cm²/V/s)	1600	3900	9200	5400	40000	77000	2200
μ_h (cm²/V/s)	430	1900	400	200	500	850	1800
E_{gap} (eV)	1,12	0,66	1,42	1,34	0,36	0,17	5,5
n_i (cm^{-3})	$1{,}45\times10^{10}$	$2{,}4\times10^{13}$	$1{,}8\times10^{6}$	$1{,}3\times10^{7}$	10^{15}	2×10^{16}	10^{-27}
a_0 (Å)	5,431	5,65	5,653	5,86	6,058	6,48	3,567

Tableau 1 : Propriétés intrinsèques de différents matériaux de canal possibles, μ_e et μ_h : mobilités des électrons et des trous, E_{gap} : l'énergie de bande interdite, n_i : densité intrinsèque, a_0 : paramètre de maille.

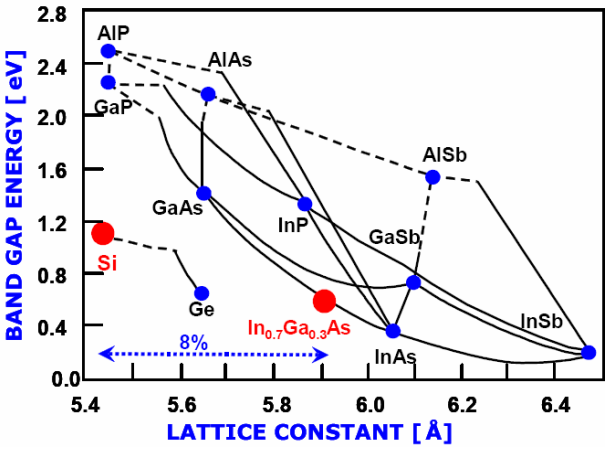

Figure 3 : [Hudait2007] Energie de bande interdite en fonction du paramètre de maille de différents semiconducteurs et alliages.

Plusieurs matériaux à haute mobilité peuvent être candidats au remplacement du Silicium dans les transistors (cf. Tableau 1). Cependant, le matériau de remplacement doit présenter plusieurs caractéristiques essentielles :

- Il doit exister un isolant stable et compatible,
- Le gain en mobilité doit concerner à la fois les électrons et les trous, ce qui désavantage par exemple le GaAs, l'InP ou l'InAs,
- L'énergie de bande interdite (ou gap) ne doit être ni trop petite (cas du Ge, de l'InAs ou de l'InSb) pour éviter les problèmes d'effet tunnel bande à bande, ni trop grande (cas du diamant) pour éviter de devoir appliquer des tensions trop élevées,

- La densité d'états doit être suffisante pour peupler le canal (quasi nulle dans le diamant, très faible dans l'InP),
- Offrir une bonne compatibilité avec les procédés d'intégration déjà bien développés sur substrat Si. Il faut notamment gérer les problèmes d'apparition de défauts dus aux forts désaccords de maille entre le Si et certains matériaux comme l'InAs ou l'InP, comme on peut le voir sur la Figure 3.

Le Germanium semble être un bon candidat. Malheureusement, il reste encore de nombreux barrages technologiques à son intégration dans les transistors courts (croissance de la couche active, dopage, isolation,…) [Le Royer2007], même si les résultats sont encourageants, comme on peut le voir sur la Figure 4 [De Jaeger2007]. De plus, son faible gap implique des fuites de courant sous le seuil par effet tunnel bande à bande.

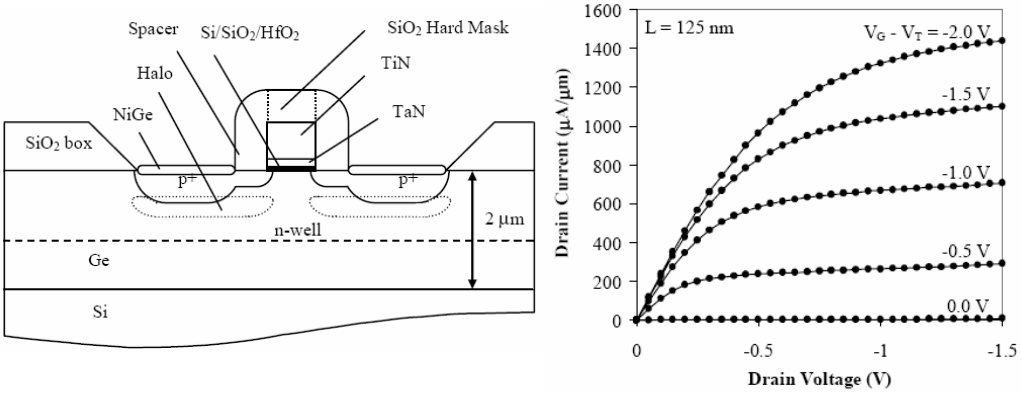

Figure 4 : [De Jaeger2007] MOSFET à canal Ge et ses caractéristiques $I_D(V_{DS})$.

Les matériaux III-V (GaAs, InGaAs, InP) sont également des candidats possibles et très étudiés [Hudait2007; Moran2007], avec des résultats encourageants comme on peut le voir sur la Figure 5. Cependant, les problèmes d'intégration restent nombreux. En effet, la différence de paramètre de maille rend leur épitaxie difficile sur substrat Si (défauts, dislocations, fissures,…) et la nature de l'alliage (e.g. InGaAs) pose des problèmes de polarité et d'interdiffusion des espèces.

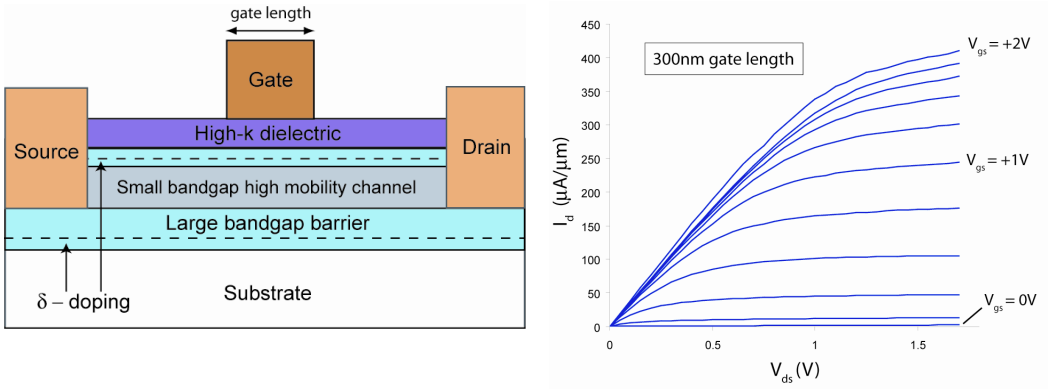

Figure 5 : [Moran2007] MOSFET à hétérostructure III-V (GaAs) et ses caractéristiques $I_D(V_{DS})$.

Nous verrons que le SiGe pourrait être un bon compromis, surtout grâce à l'amélioration du transport par la contrainte, mais il existe peu de résultats vraiment satisfaisants sur des dispositifs courts.

Enfin, les nanotubes de carbones [Bethoux2006; Cazin d'Honincthun2005] et les nanorubans de graphène [Li2008; Querlioz2008] sont des matériaux actuellement très en vogue, grâce à leurs excellentes propriétés intrinsèques, mais leur intégration est encore difficile [Ferry2007].

Finalement, même si l'introduction de matériaux alternatifs pour le canal est très étudiée, cette solution reste peu probable pour les prochains nœuds technologiques. L'ingénierie de substrat par le biais de l'orientation cristalline et de la contrainte mécanique semblent bien plus prometteuses et cette dernière est même déjà massivement exploitée en production.

1.3.2 L'orientation cristalline

Il faut distinguer ici l'orientation du substrat de la direction de conduction. Traditionnellement, le substrat est orienté (001) et la direction de conduction est selon <110>. La coupe transversale de la bande de conduction dans un nMOSFET réalisé dans ces conditions est représentée en Figure 6.

Du fait des forts champs transverses présents à l'interface oxyde/substrat en régime de fonctionnement, le potentiel vu par les porteurs de la couche d'inversion est plus ou moins triangulaire et varie très rapidement dans la direction perpendiculaire au transport (soit <001> sur la Figure 6). Les porteurs dans le canal sont alors confinés dans la direction transverse et le transport est bidimensionnel dans le plan du substrat (plan (001)).

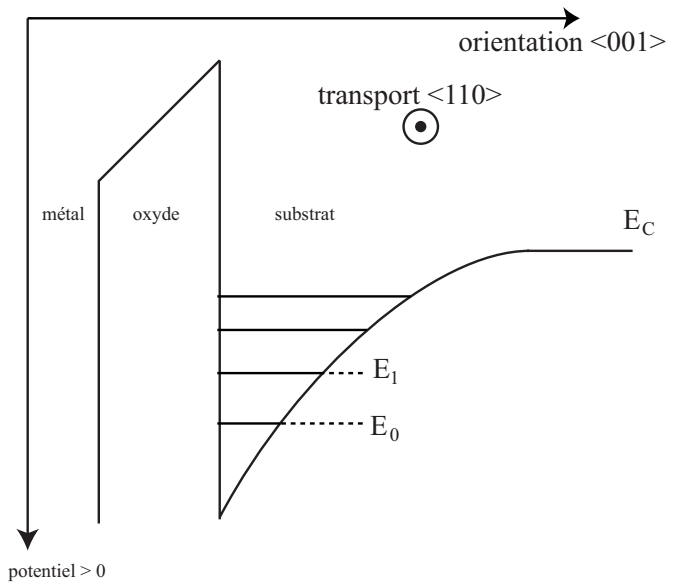

Figure 6 : Profil de bande de conduction d'un nMOSFET conventionnel en régime d'inversion.

L'influence de l'orientation cristalline sur le transport peut être qualitativement déduite des différentes valeurs de masses effectives associées : la masse de confinement $m_\perp$ dans la direction perpendiculaire à l'interface oxyde/substrat et la masse de conduction m_C dans la direction du transport. L'orientation du substrat va définir la nature et l'occupation des niveaux qui participent principalement au transport *via* la masse de confinement. Par exemple, dans le cas d'un nMOSFET, si on passe d'une orientation de substrat de type (001) à (110), le changement de $m_\perp$ va favoriser le peuplement de minimas de la bande de conduction pour lesquels m_C peut s'avérer défavorable. Pour ce qui est des trous, le problème est assez complexe comme nous le verrons plus tard, du fait de la forte anisotropie des bandes de valence dans l'espace réciproque.

On peut montrer que l'orientation (001) du substrat est la plus favorable pour les électrons, indépendamment de la direction de conduction. Pour les trous, la meilleure combinaison est (110)/<110>. Malheureusement, cette orientation de substrat est assez défavorable pour les électrons. La méthode principale pour optimiser à la fois l'orientation pour le nMOS et le pMOS est d'utiliser un substrat hybride (*Hybrid Orientation Technology*) comme illustré sur la Figure 7 [Sheraw2005; Yang2007]. Les procédés mis en œuvre sont assez complexes. Ils utilisent le soudage de substrat (ou *wafer bonding*) et l'épitaxie locale. La question se pose alors de son utilisation à grande échelle.

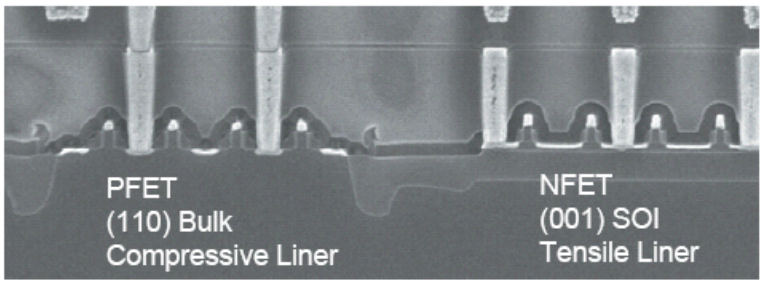

Figure 7 : [Sheraw2005] Image TEM de dispositifs réalisés avec la technologie d'orientation hybride.

Toutes ces techniques, plus ou moins complexes, plus ou moins intégrables, sont cumulables avec les méthodes d'amélioration par la contrainte, sujet principal de ce travail, auquel nous allons maintenant consacrer une section complète.

2 La contrainte dans le Silicium

On désigne par le terme contrainte une force de pression appliquée sur un volume donné et pouvant déformer la maille cristalline du matériau.

Historiquement, les premières améliorations de mobilité par la contrainte dans le Silicium massif ont été mesurées par Smith [Smith1954]. Dans les dispositifs, c'est initialement l'introduction de couches minces de SiGe épitaxiées sur Si au début des années 1990 qui a offert des possibilités supplémentaires pour l'amélioration par la contrainte [Nayak1993; Welser1992]. En effet, l'adaptation du paramètre de maille de la couche d'alliage SiGe sur un substrat de Si induit une contrainte spécifique pouvant influer favorablement sur la structure de bandes du matériau en augmentant les courbures de bandes dans la direction du transport. L'idée prometteuse d'exploiter une contrainte uniaxiale localisée dans le canal a été introduite au début des années 2000 [Ito2000; Shimizu2001] par le biais de couches d'arrêt à la gravure (ou *Contact Etch Stop Layer* CESL) à base de nitrures (SiN) ou encore par la formation de zones de Source et Drain en SiGe [Gannavaram2000].

Dans cette partie, après une présentation du formalisme tensoriel utilisé pour décrire contrainte et déformation, les effets de la contrainte sur la géométrie du cristal de Silicium seront expliqués. Nous verrons ensuite l'approche piézorésistive, souvent utilisée pour exprimer macroscopiquement la variation de mobilité en fonction de la contrainte. Enfin, les principales méthodes actuellement retenues pour contraindre le canal et les performances obtenues seront présentées.

2.1 Contrainte et déformation

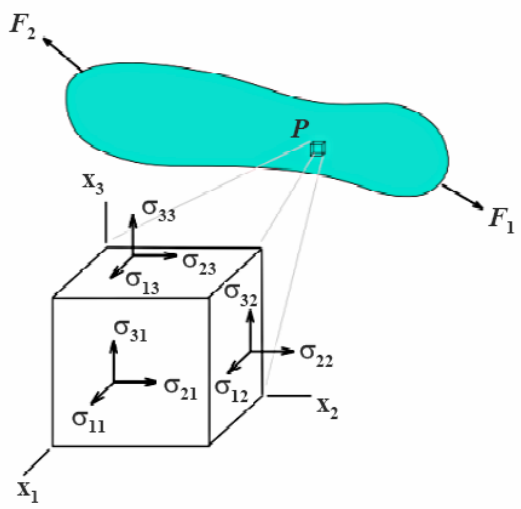

Figure 8 : [Guillaume2005] Composantes du tenseur des contraintes sur un élément infinitésimal de l'espace réel.

Comme illustré sur la Figure 8, la contrainte appliquée par unité de surface sur un élément infinitésimal de l'espace réel est décrite par un tenseur $\boldsymbol{\sigma}_{ij}$ symétrique :

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \tag{1.2.1}$$

où σ_{ij} représente la composante selon X_i de la contrainte appliquée sur la face perpendiculaire à l'axe (OX_j). Une valeur positive de σ_{ij} correspond à une contrainte en tension et une valeur négative à une contrainte en compression.

La déformation pure (i.e. induite par cette contrainte sur la maille cristalline) est représentée par le tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$ [Yu1996], lui aussi symétrique :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \tag{1.2.2}$$

avec :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{1.2.3}$$

Où le $\partial\mathbf{u}$ représente la déformation vectorielle infinitésimale du cristal due à la contrainte sur une distance infinitésimale $\partial\mathbf{x}$.

Les tenseurs de contrainte et de déformation sont liés par les matrices d'élasticité $\mathbf{S_{ij}}$ et de rigidité $\mathbf{C_{ij}}$ du matériau *via* la loi de Hooke. En écrivant les tenseurs sous forme vectorielle de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}_\mathbf{i} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ 2\sigma_{23} \\ 2\sigma_{13} \\ 2\sigma_{12} \end{pmatrix} \text{ et } \boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{i} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\,\varepsilon_{23} \\ 2\,\varepsilon_{13} \\ 2\,\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \tag{1.2.4}$$

on peut obtenir :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\,\varepsilon_{23} \\ 2\,\varepsilon_{13} \\ 2\,\varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ 2\sigma_{23} \\ 2\sigma_{13} \\ 2\sigma_{12} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ 2\sigma_{23} \\ 2\sigma_{13} \\ 2\sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\,\varepsilon_{23} \\ 2\,\varepsilon_{13} \\ 2\,\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \tag{1.2.5}$$

où les matrices $\mathbf{S_{ij}}$ et $\mathbf{C_{ij}}$ sont ici extrêmement simplifiées grâce aux symétries du Silicium et on sont liés par la relation :

$$\mathbf{S_{ij}} = \left[\mathbf{C_{ij}}\right]^{-1} \tag{1.2.6}$$

Les valeurs des coefficients utilisés sont reportées dans le Tableau 2.

Elasticités S_{ij} ($\times 10^{-13}$ Pa^{-1})			Rigidités C_{ij} ($\times 10^{9}$ Pa)		
S_{11}	S_{12}	S_{44}	C_{11}	C_{12}	C_{44}
76,8	-21,4	126	165,7	63,9	79,6

Tableau 2 : Constantes élastiques du Silicium [Landolt-Börnstein1982]

Toute déformation (et toute contrainte correspondante) peut s'exprimer comme la somme d'une composante hydrostatique (tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{hyd}}$) et de deux composantes déviatrices (tenseurs $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$ de trace nulle) [Yu1996].

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{hyd}} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} \varepsilon_{hyd} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{hyd} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{hyd} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2\varepsilon_{11} - (\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) & 0 & 0 \\ 0 & 2\varepsilon_{22} - (\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11}) & 0 \\ 0 & 0 & 2\varepsilon_{33} - (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) \end{bmatrix} \qquad (1.2.7)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & 0 & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & 0 \end{bmatrix}$$

Le tenseur déviateur total $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev}}$ est simplement la somme de $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$ et de $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$.

Le tenseur hydrostatique correspond uniquement à la dilatation du cristal sans variation de forme, la trace du tenseur étant égale à la variation relative de volume de maille cristalline V_C associée à la contrainte appliquée :

$$\frac{\delta V_C}{V_C} = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{ij}}\right) = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = \varepsilon_{hyd} \qquad (1.2.8)$$

Les tenseurs déviateurs $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$ correspondent à des déviations induites par une contrainte uniaxiale appliquée selon les axes <100> et <111> respectivement. Concrètement, $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$ correspond plutôt au changement de longueur de chacun des axes principaux <100>, <010> et <001>, alors que $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$ correspond à leur rotation. Il faut noter que seul $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$ possède des composantes non diagonales. Ces dernières correspondent à des déformations de type cisaillement dont les effets sont majeurs sur les courbures de bandes.

Une contrainte purement hydrostatique ne brise aucune symétrie du cristal et de ce fait n'implique ni levée de dégénérescence, ni modification de courbure des bandes. Elle entraîne cependant une variation des niveaux d'énergie dans leur ensemble et modifie le gap du semi-conducteur, ce qui est très utile dans une stratégie d'ingénierie de bandes [Galdin2000].

2.2 Effet de la contrainte sur la symétrie du cristal

Nous décrirons succinctement le cristal de Silicium non contraint et sa structure de bandes et nous expliquerons ensuite qualitativement l'effet de la déformation induite par la contrainte sur la symétrie du cristal et sur la structure de bandes dans des cas typiques (tension biaxiale dans le plan (001), compression uniaxiale selon la direction <110>).

2.2.1 Le cristal de Silicium

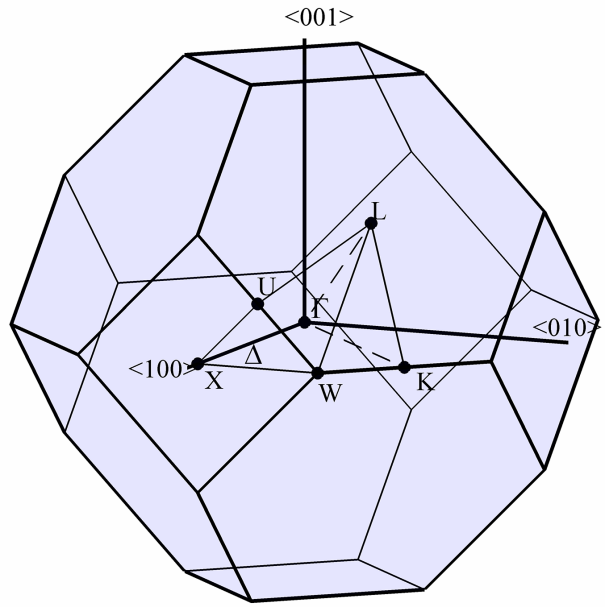

Figure 9 : Première zone de Brillouin du Silicium. Les axes et points de haute symétrie sont représentés.

Les symétries de la structure de bandes du semiconducteur sont déterminées par les symétries du cristal [Kittel1971]. Le Silicium est un semiconducteur de type diamant et sa maille cristalline présente une symétrie de type cubique face centrée, ce qui se traduit dans l'espace réciproque par une première Zone de Brillouin (ZB) de forme dodécaédrique (cf. Figure 9). Les brisures de symétrie de la maille cristalline induites par la contrainte se répercutent sur la structure de bandes par la levée de certaines dégénérescences et la modification des courbures.

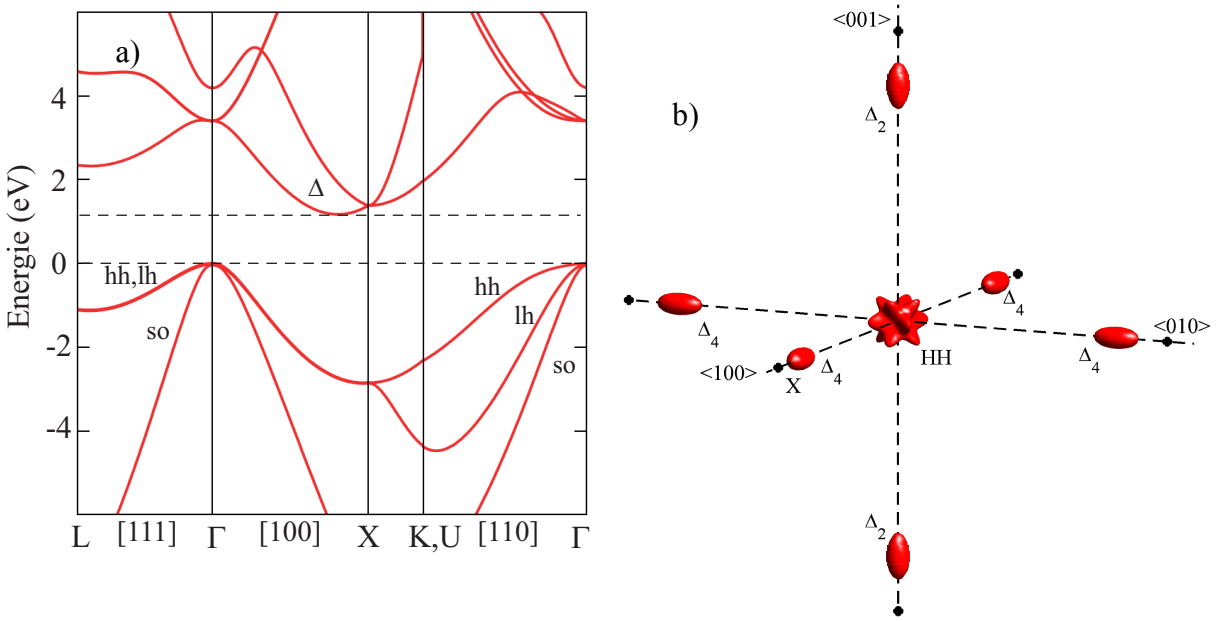

Figure 10 : a) Structure de bandes du Si non contraint selon les axes de principale symétrie, b) Surfaces isoénergies dans l'espace réciproque (énergie cinétique $E_C = 3k_BT/2$) pour la 1ère bande de conduction et la 1ère bande de valence (HH).

La Figure 10a représente la structure de bandes du Si non contraint tracée selon les axes de principale symétrie. La Figure 10b représente les surfaces isoénergies à l'énergie thermique à 300 K de la première bande de valence et de la première bande de conduction. Les deux premières bandes de valence (bandes des trous lourds ou *heavy holes* HH et des trous légers ou *light holes* LH) sont dégénérées au point Γ et la bande *split-off* (SO) est plus basse de 44 meV. Les 6 minima de la première bande de conduction sont dégénérés en énergie et situés à environ $\pm 0{,}85 \times 2\pi/a_0$ du point Γ sur les axes de haute symétrie dits Δ (<100>, <010> et <001> sur la Figure 9). Le point Γ possède toutes les symétries du cristal, alors que les axes Δ présentent uniquement la symétrie de type C_{4v}, i.e. les axes Δ sont invariants par rotation d'ordre 4. Par convention, les minima de la bande de conduction situés dans le plan (001) sont définis comme minima des vallées dites Δ_4 et ceux situés sur l'axe <001> sont définis comme minima des vallées dites Δ_2.

Pour la suite, il faut mentionner que la symétrie de la structure de bandes relativement à un extremum énergétique est la même que celle autour du point correspondant dans l'espace réciproque. De ce fait (cf. Figure 10b), autour de chacune des 6 vallées de la bande de conduction, les surfaces isoénergies sont des ellipsoïdes centrées sur l'extremum énergétique en question, leur grand axe étant situé selon l'axe de principale symétrie

correspondant. A très faible énergie, les surfaces isoénergies des bandes de valence sont des sphères centrées en Γ. Dans le cadre de raisonnements simples, la relation de dispersion autour des extrema est souvent approchée par une relation parabolique du type :

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \tag{1.2.9}$$

où m* est la masse effective des porteurs. Nous verrons au chapitre suivant qu'il existe des expressions plus complexes décrivant mieux les structures de bandes.

2.2.2 Cas typiques de contrainte

2.2.2.1 Contrainte biaxiale dans le plan (001)

Le cas de la tension biaxiale en tension dans le plan (001) (soit le plan perpendiculaire à l'axe z) permet de mettre en exergue l'influence du tenseur déviateur $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$ sur la bande de conduction. En effet, les composantes non diagonales du tenseur de déformation sont nulles (i.e. les composantes de $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$ sont nulles**)** et on a également :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \varepsilon_{22} = \left(S_{11} + S_{12}\right)\sigma_{biax} \\ \varepsilon_{33} &= S_{12}\sigma_{biax} \end{aligned} \tag{1.2.10}$$

où $\sigma_{biax} = \sigma_{11} = \sigma_{22} > 0$ et $\sigma_{33} = 0$ ainsi que les termes non diagonaux.

Le tenseur déviateur s'écrit alors :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} (\varepsilon_{11} - \varepsilon_{33}) & 0 & 0 \\ 0 & (\varepsilon_{11} - \varepsilon_{33}) & 0 \\ 0 & 0 & -2(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{33}) \end{bmatrix} = \frac{\sigma_{biax}}{3}\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & S_{11} & 0 \\ 0 & 0 & -2S_{11} \end{bmatrix} \tag{1.2.11}$$

Il est important de noter qu'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001) peut également être vue comme une contrainte uniaxiale en compression selon la direction <001> ayant une composante hydrostatique ε_{hyd} deux fois plus forte [Guillaume2005].

En regardant les composantes de $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$, on s'aperçoit que les déformations du cristal selon <100> et <010> sont équivalentes et correspondent à une élongation ($S_{11}\sigma_{biax}/3 > 0$). Par réaction, comme illustré sur la Figure 11a, la déformation selon <001> est une contraction deux fois plus grande.

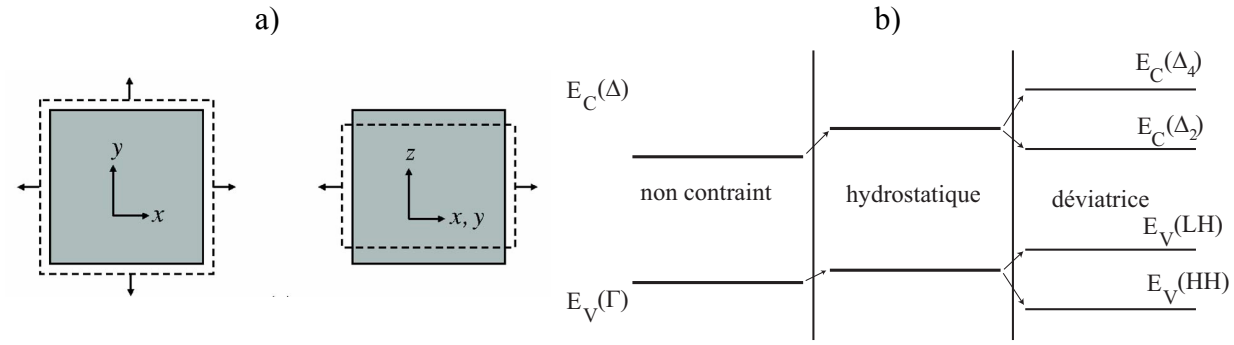

Figure 11 : a) [Sun2007b] Effet d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001). Le cristal vu dans le plan (x,y) reste un carré mais devient un rectangle dans les plans (z,x) et (z,y). b) Diagramme des extrema de bandes. La contrainte hydrostatique réduit la largeur de bande interdite et la contrainte déviatrice lève les dégénérescences.

La symétrie du cristal est ainsi brisée par une contraction de l'axe <001> au profit d'une élongation des axes <100> et <010>. Cependant, l'invariance par rotation d'ordre 4 autour de l'axe z est conservée et les axes principaux gardent leurs principales propriétés de symétrie. Ainsi, les axes <100> et <010> gardent leur équivalence, alors que <001> se distingue. De ce fait, les minima énergétiques de la bande de conduction situés sur l'axe <001> (2 vallées dites Δ_2) s'éloignent de ceux des axes <100> et <010> (4 vallées dites Δ_4). La dégénérescence d'ordre 6 des minima de la bande de conduction est ainsi partiellement levée. En revanche, les symétries par rotation n'étant pas perturbées, les courbures de bandes sont peu altérées.

2.2.2.2 Contrainte uniaxiale en compression selon <110>

Dans le cas de la contrainte selon <110>, la symétrie est brisée de manière un peu différente. Les composantes non diagonales du tenseur de déformation sont alors non nulles et on a :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \varepsilon_{22} = \frac{1}{2}\left(S_{11} + S_{12}\right)\sigma_{uniax} \\ \varepsilon_{33} &= S_{12}\sigma_{uniax} \\ \varepsilon_{12} &= \frac{1}{2}S_{44}\sigma_{uniax} \end{aligned} \tag{1.2.12}$$

où $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{12} = ½\ \sigma_{uniax} < 0$ et les autres composantes du tenseur de contraintes sont nulles.

Le tenseur déviateur total $\boldsymbol{\varepsilon_{dev}} = \boldsymbol{\varepsilon_{dev[100]}} + \boldsymbol{\varepsilon_{dev[111]}}$ s'écrit alors :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev}} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} (\varepsilon_{11}-\varepsilon_{33}) & 0 & 0 \\ 0 & (\varepsilon_{11}-\varepsilon_{33}) & 0 \\ 0 & 0 & -2(\varepsilon_{11}-\varepsilon_{33}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
$$= \sigma_{\text{uniax}} \begin{bmatrix} \frac{1}{6}(S_{11}-S_{12}) & \frac{1}{2}S_{44} & 0 \\ \frac{1}{2}S_{44} & \frac{1}{6}(S_{11}-S_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}(S_{11}-S_{12}) \end{bmatrix} \quad (1.2.13)$$

Sachant que $(S_{11}-S_{12}) > 0$ (cf. Tableau 2), on peut observer sur le tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[100]}}$ une élongation de l'axe <001> au profit d'une contraction des axes <100> et <010>. Cependant, la composante non diagonale ε_{12} induit un cisaillement qui va coupler ces effets dans le plan (001) et transférer les déformations sur les axes <110> et <-110> de la maille. En effet, si on procède à une rotation de 45° du repère cristallographique afin d'avoir l'axe de la contrainte en tant qu'axe principal, on obtient le tenseur dans le repère R_D (<110>,<-110>,<001>) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev}} = \sigma_{\text{uniax}} \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\left(\frac{S_{11}-S_{12}}{3}+\frac{S_{44}}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\left(\frac{S_{11}-S_{12}}{3}-\frac{S_{44}}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}(S_{11}-S_{12}) \end{bmatrix}_{R_D} \quad (1.2.14)$$

On obtient ainsi un tenseur diagonal, traduisant une élongation de l'axe <001>, une contraction de l'axe <110> et une élongation de l'axe <-110>. On peut remarquer qu'aucune déformation n'est égale à une autre, même en valeur absolue, ce qui implique de nombreuses brisures de symétrie.

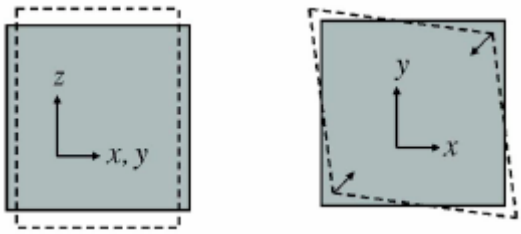

Figure 12 : [Sun2007b] Effet d'une contrainte uniaxiale en compression selon <110>. Le cristal vu dans les plans (x,z) et (y,z) devient un rectangle et un losange dans le plan (x,y).

Comme illustré sur la Figure 12, la symétrie selon z est cette fois-ci brisée du fait de $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{dev[111]}}$ et l'invariance par rotation passe d'un ordre 4 à un ordre 2. De plus, les axes x et y ne sont plus des axes de haute symétrie et le plan (x,y) est symétrique par réflexion autour des axes <110> et <-110> qui ne sont plus équivalents. De la même manière que dans le cas biaxial, cela entraîne une levée de dégénérescence des vallées Δ_2 et Δ_4. Cependant, dans ce

cas, les symétries de rotation étant fortement perturbées, les courbures de bandes sont bien plus altérées. Par exemple, comme illustré sur la Figure 13, la forme des surfaces isoénergies des bandes de valence autour du point Γ passe de sphérique à ellipsoïdale avec pour grand axe <-110>. De même, à faible énergie, les axes des ellipsoïdes de la bande de conduction se situent désormais suivant les directions <110> et <-110>.

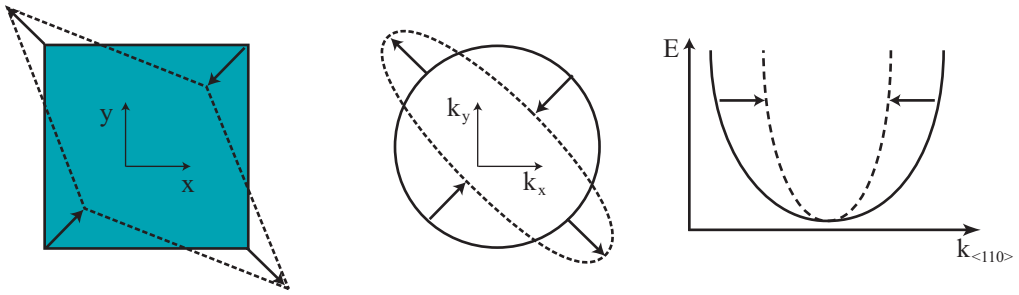

Figure 13 : Effet de la contrainte uniaxiale en compression sur un isocontour circulaire dans le plan x,y. Un cercle devient une ellipse d'axes principaux <110> et <-110>. La courbure des bandes E(k) dans la direction <110> s'en trouve alors augmentée.

Les causes de levée de dégénérescence des bandes de valence en Γ sont plus complexes et impliquent le couplage avec le spin et les bandes plus éloignées en énergie [Yu1996]. La dégénérescence des bandes HH et LH en Γ est liée au fait que ces 2 bandes ont le même moment cinétique total (j = 3/2) et la levée de dégénérescence au point Γ dépend peu du type de contrainte appliquée. En ce qui concerne les courbures, en revanche, la symétrie de rotation autour de l'axe z joue un rôle très important. En effet, les bandes de valence sont classifiées en fonction de la composante selon z du moment angulaire j_z associé au moment cinétique total j : pour HH ($j = 3/2$, $j_z = \pm 3/2$), pour LH ($j = 3/2$, $j_z = \pm 1/2$) et pour SO ($j = 1/2$, $j_z = \pm 1/2$). Les énergies des bandes selon z sont les valeurs propres de ces états de moment cinétique (j, j_z). Quand la symétrie de rotation selon z est conservée, comme dans le cas d'une contrainte biaxiale dans le plan (001) ou d'une contrainte uniaxiale selon <001>, les états (j, j_z) des différentes bandes ne sont pas couplés et les courbures de bande selon <001> ne sont pas perturbées. Quand cette symétrie est au contraire brisée, comme dans le cas de la contrainte uniaxiale selon <110>, les états (j, j_z) sont couplés par les termes non diagonaux du tenseur de déformation, ce qui revient à « mélanger » les bandes. Les courbures selon z sont alors fortement perturbées. Nous verrons plus en détail dans la partie consacrée aux outils de calcul de structures de bandes en quoi consistent les couplages et quel rôle joue la contrainte.

2.2.2.3 Influence de la quantification

Comme on l'a vu précédemment, dans une couche d'inversion, les porteurs sont confinés dans un puits de potentiel à l'interface oxyde/semi-conducteur. Les énergies E_i des différentes sous-bandes (ou niveaux) dépendent fortement de la forme du potentiel (traduite par le champ effectif E_{eff}) et de la masse de quantification $m_\perp$, i.e. la masse selon l'axe de confinement (perpendiculaire au plan de transport). Par exemple, si on considère le cas d'un puits triangulaire de champ transverse E_{eff} dans le Si massif, en faisant l'approximation des bandes paraboliques, on peut exprimer les énergies des sous-bandes en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$:

$$E_i = \left(\frac{\hbar}{2m_\perp}\right)^{1/3}\left(\frac{3\pi q E_{eff}}{2}\left(i+\frac{3}{4}\right)\right)^{2/3} \qquad (1.2.15)$$

On voit que plus $m_\perp$ est faible (forte courbure), plus les niveaux sont écartés. De plus, la vallée (ou bande) ayant la masse de confinement la plus élevée a son niveau fondamental le plus bas en énergie. Ce sont donc les propriétés de ce premier niveau (courbures dans le plan de conduction, densités d'états) qui dominent le transport.

Nous venons de voir que la contrainte pouvait grandement modifier les courbures de bandes. De ce fait, ce ne sont pas uniquement les courbures dans le plan de conduction, mais également la perturbation des courbures dans la direction de confinement qui influencent le transport.

Par exemple, pour les électrons, une contrainte biaxiale en tension induit une augmentation de l'énergie fondamentale des vallées Δ_4. De plus, étant donné que la masse de confinement des vallées Δ_4 est plus faible que celle des Δ_2, la quantification favorise les vallées Δ_2 qui doivent alors gouverner le transport. Dans ce cas, quantification et confinement entraînent les mêmes effets.

Dans le cas des trous, on a vu que la contrainte biaxiale en tension favorise la bande des trous légers (LH) de plus faible masse. Or, étant donné que la masse des trous lourds (HH) est plus élevée dans la direction de confinement, la quantification a tendance à favoriser la bande HH. Dans ce cas, contrairement aux électrons, contrainte et quantification ont des effets opposés.

Les couplages entre quantification et contrainte sont en fait bien plus complexes, notamment pour les trous, car le confinement comme la contrainte induisent des couplages non triviaux entre les bandes et les répercussions sur les courbures sont difficiles à prédire. Nous verrons que cela a son importance pour l'étude du transport dans une couche d'inversion.

2.3 La piézorésistivité

Etant donné qu'il est difficile de modéliser finement l'effet de la contrainte sur le transport, l'approche piézorésistive est très souvent utilisée. En effet, c'est une approche basée sur des mesures relativement simples de résistance, efficace pour la prédiction des facteurs d'optimisation par la contrainte pour une technologie donnée.

La piézorésistivité est définie comme la réponse électrique d'un matériau à une contrainte mécanique. La piézorésistance est ainsi définie comme la variation de résistance induite par une contrainte. Sachant que résistivité et contrainte sont des tenseurs 3×3 ayant des composantes non diagonales, on peut écrire la loi d'Ohm liant champ électrique **E**, densité de courant **j** et résistivité ρ :

$$\mathbf{E_i} = \boldsymbol{\rho}_{\mathbf{ij}}\mathbf{j_i} \tag{1.2.16}$$

Dans le Silicium non contraint, la résistivité est isotrope. C'est donc une grandeur scalaire. Cependant, la contrainte engendrant des déformations de la maille cristalline, la résistivité peut devenir anisotrope et il est important de tenir compte de toutes ses composantes. A densité de courant constante, la variation de champ électrique $\delta\mathbf{E}$ induite par la contrainte est due à la variation de résistivité $\delta\rho$, on peut alors écrire :

$$\delta\mathbf{E_i} = \delta\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{ij}}\,\mathbf{j_i} \tag{1.2.17}$$

Le tenseur de piézorésistivité lie cette variation de résistivité relativement à la résistivité du matériau non contraint avec le tenseur de contrainte appliquée de la manière suivante :

$$\frac{\delta\rho_i}{\rho_i} = \pi_{ij}\sigma_j \tag{1.2.18}$$

où π_{ij} est le tenseur de piézorésistivité et où l'on a réécrit les tenseurs de résistivité et de contrainte sous leur forme vectorielle à 6 composantes (cf. relations (1.2.4)).

De la même manière que pour les tenseurs d'élasticité et de rigidité, le nombre de coefficients de piézorésistivité peut être réduit à 3 grâce aux symétries de la maille cristalline. On a alors dans le repère cristallin :

$$\begin{pmatrix} \delta\rho_1/\rho_1 \\ \delta\rho_2/\rho_2 \\ \delta\rho_3/\rho_3 \\ \delta\rho_4/\rho_4 \\ \delta\rho_5/\rho_4 \\ \delta\rho_6/\rho_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta\rho_{11}/\rho_{11} \\ \delta\rho_{22}/\rho_{22} \\ \delta\rho_{33}/\rho_{33} \\ 2\,\delta\rho_{23}/\rho_{23} \\ 2\,\delta\rho_{13}/\rho_{13} \\ 2\,\delta\rho_{12}/\rho_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} \tag{1.2.19}$$

La résistivité peut s'exprimer en termes de mobilité des porteurs *via* la relation :

$$\rho = \left(|q|\, n\mu\right)^{-1} \tag{1.2.20}$$

où n est la densité de porteurs, q leur charge et μ leur mobilité. On peut alors exprimer la variation de mobilité des porteurs en fonction de la contrainte appliquée :

$$\frac{\delta\mu_i}{\mu_i} = -\pi_{ij}\sigma_i \tag{1.2.21}$$

où $\boldsymbol{\mu_i}$ est le tenseur de mobilité du matériau non contraint et $\boldsymbol{\delta\mu_i}$ le tenseur correspondant à sa variation sous l'effet de la contrainte, exprimé sous sa forme vectorielle à 6 composantes (cf. équation (1.2.4)).

On a vu que l'orientation du canal des dispositifs n'était généralement pas selon l'un des axes de haute symétrie du Silicium (type <100>), mais selon l'axe <110>. Le courant dans un transistor s'exprime le plus souvent dans le repère R_D du dispositif, obtenu par une rotation de 45° autour de l'axe <001>. R_D est donc défini par les axes <110>, <-110> et <001>. On peut ainsi exprimer le tenseur de piézorésistivité dans ce repère de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} \delta\mu_1/\mu_1 \\ \delta\mu_2/\mu_2 \\ \delta\mu_3/\mu_3 \\ \delta\mu_4/\mu_4 \\ \delta\mu_5/\mu_4 \\ \delta\mu_6/\mu_6 \end{pmatrix}_{R_D} = -\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left(\pi_{11}+\pi_{12}+\pi_{44}\right) & \frac{1}{2}\left(\pi_{11}+\pi_{12}-\pi_{44}\right) & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(\pi_{11}+\pi_{12}-\pi_{44}\right) & \frac{1}{2}\left(\pi_{11}+\pi_{12}+\pi_{44}\right) & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{11}-\pi_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix}_{R_D} \tag{1.2.22}$$

où les tenseurs de mobilité et de contrainte sont également exprimés dans R_D.

Ce formalisme permet de relier la variation de résistivité dans la direction du transport à la contrainte appliquée. La relation (1.2.21) devient notamment très simple quand la contrainte s'exerce suivant une direction parallèle (dite longitudinale L) ou perpendiculaire (dite transverse T) au transport :

$$\frac{\delta\mu_L}{\mu_L} = -\pi_L\sigma_L, \frac{\delta\mu_T}{\mu_T} = -\pi_T\sigma_T \tag{1.2.23}$$

On peut extraire les différents coefficients du tenseur de piézorésistivité de mesures relativement simples [Smith1954; Smith2005; Suthram2008; Suthram2007].

Quelques valeurs expérimentales des coefficients de piézorésistivité longitudinaux et transverses du Silicium sont reportées pour différentes directions de transport et de contraintes dans le Tableau 3.

Axe de transport Repère	Direction(s) du stress et/ou coefficient(s) π	électrons (n-Si massif)	électrons (nMOS)	trous (p-Si massif)	trous (pMOS)
Axe <100> Repère cristallographique <100>,<010>,<001>	<100> / π_{11} ($\times10^{-11}$ Pa^{-1})	-102,2[1]	-42,6[2] -84[3]	6,6[1,5]	9,1[2] -12,5[3] -1,0[4]
	<010>,<001> / π_{12} ($\times10^{-11}$ Pa^{-1})	53,4[1]	-20,7[2] 34[3]	-1,1[1,5]	-6,2[2] 28,0[3] 23,8[5]
	π_{44} ($\times10^{-11}$ Pa^{-1})	-13,6[1]	*-21*[2] -17[3]	138,1[1,5]	*105,5*[2] 105,0[3] *91,7*[4] 127,8[5]
Axe <110> Repère dispositif <110>,<-110>,<001>	<110> $\pi_L = ½(\pi_{11}+\pi_{12}+\pi_{44})$ ($\times10^{-11}$ Pa^{-1})	-31,2[1]	-35,5[2] -33,5[3] -42[4]	71,8[1,5]	71,7[2] 60,3[3] 50,5[4] *75,3*[5]
	<-110> $\pi_{T1} = ½(\pi_{11}+\pi_{12}-\pi_{44})$ ($\times10^{-11}$ Pa^{-1})	-17,6[1]	-14,5[2] -16,5[3] -31,6[4]	-66,3[1,5]	-33,8[2] -44,8[3] -41,2[4] -52,5[5]
	<001> $\pi_{T2} = \pi_{12}$ ($\times10^{-11}$ Pa^{-1})	53,4[1]	*-20,7*[2] 34[3]	-1,1[1,5]	*-6,2*[2] 28[3] 23,8[5]

Tableau 3 : Coefficients de piézorésistivité ($\times10^{-11}$ Pa^{-1}) dans le Silicium massif [1][Smith1954], [5][Colman1968] et dans des couches d'inversion (n- ou p- MOS, substrat orienté (001)) : [2][Thompson2006b], [3][Canali1979], [4][Bradley2001], [5][Colman1968]. Les valeurs en italiques sont déduites de celles mesurées dans d'autres directions.

On peut replacer ces coefficients dans le cadre des contraintes typiques vues précédemment.

Référons-nous d'abord aux mesures réalisées sur du Si massif. Dans le cas d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001), le stress est équivalent à une contrainte uniaxiale en compression selon <001> ($\sigma_{<001>} < 0$) et dépend du coefficient π_{12}, positif pour n-Si et négatif pour le p-Si. Cela implique une amélioration de la mobilité pour les électrons ($-\pi_{12}.\sigma_{<001>} > 0$) et une légère dégradation pour les trous ($-\pi_{12}.\sigma_{<001>} < 0$). De même, une contrainte uniaxiale en compression selon <110>, impliquant le coefficient π_L, serait quant à elle défavorable pour la mobilité des électrons ($-\pi_L.\sigma_{<110>} < 0$) et favorable pour les trous ($-\pi_L.\sigma_{<110>} > 0$).

Quant aux données reportées dans le cas de couches d'inversion (structures MOS), on peut remarquer qu'elles sont très différentes des valeurs mesurées sur le matériau massif. De plus, leur dispersion est assez grande, notamment au niveau de π_{11} et π_{12}, aussi bien dans les pMOS que dans les nMOS, et les coefficients peuvent même changer de signe. Dans les dispositifs, la sensibilité à la contrainte dépend beaucoup des technologies utilisées et des conditions électrostatiques (densité d'inversion, champ effectif) [Irie2004]. On peut enfin remarquer que, dans tous les cas, la seule contrainte avantageuse pour les deux types de porteurs semble être une contrainte uniaxiale en tension selon <-110> avec un transport suivant <110>.

La piézorésistivité est une approche macroscopique qui permet de quantifier l'effet de la contrainte mécanique sur le courant. Les coefficients mesurés expérimentalement peuvent être utilisés dans les modèles de courant des simulateurs de circuits. Malheureusement, cette approche ne permet pas d'appréhender finement l'effet de la contrainte sur le transport dans les dispositifs dans toutes conditions de fonctionnement (influence du champ effectif, de la longueur de canal, des effets non stationnaires…) et nécessite l'introduction de termes de non linéarité pour les contraintes fortes. Elle reste cependant valide pour des contraintes faibles et peut être confrontée à des approches plus physiques et plus complexes comme celles développées dans la suite de ce travail.

2.4 Méthodes expérimentales et performances obtenues

On peut séparer les méthodes d'amélioration par la contrainte en deux familles : l'ingénierie de substrat où l'on applique une contrainte de type biaxial uniforme et

l'ingénierie de procédé où la contrainte est le plus souvent non uniforme avec généralement une composante majoritaire uniaxiale.

2.4.1 Contrainte uniforme

Il faut d'abord distinguer deux types principaux de substrat : le substrat conventionnel (ou « *bulk* » en Si) et le substrat sur isolant (ou SOI pour *Silicon On Insulator*).

Dans le cas du substrat conventionnel, la contrainte est obtenue par épitaxie de matériaux de paramètres de maille différents. Le paramètre de maille du matériau de la couche épitaxiée s'adapte à celui du matériau support. Cette adaptation de paramètre de maille induit une contrainte de type biaxial dans le film mince. Un film mince de Si épitaxié sur SiGe est contraint en tension et un film mince de SiGe sur Si est contraint en compression ($a_{Si} < a_{SiGe}$). Les progrès des techniques d'épitaxie ont permis de fabriquer des films minces avec de très faibles densités de défauts compatibles avec les procédés technologiques CMOS les plus avancés [Galdin1992; Lee2005].

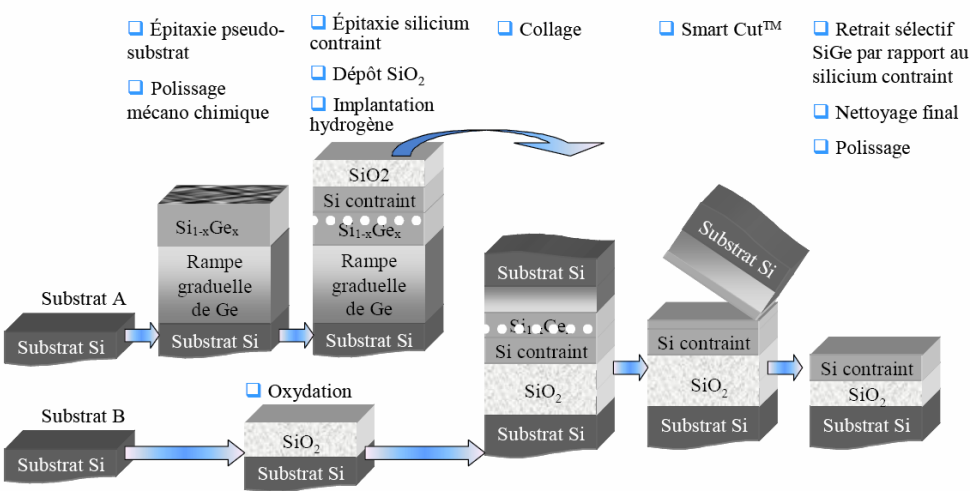

Figure 14 : [Ghyselen2004] Procédé de fabrication du substrat de Si directement contraint sur isolant (sSDOI ou sSOI).

Le substrat sur isolant est quant à lui utilisé pour des architectures alternatives au transistor conventionnel (transistors à canal déserté ou FD-SOI pour *Fully Depleted Silicon On Insulator*, multigrilles). Les substrats principaux utilisant la contrainte sont le SGOI (*SiGe On Insulator*) et le sSOI ou sSDOI (*strained Si Directly On Insulator*). Le procédé sSOI, schématisé sur la Figure 14, présente l'avantage de supprimer la couche de SiGe susceptible de parasiter le transport des électrons et de mettre à mal le contrôle de grille pour les faibles

épaisseurs de canal. Des mesures de gain en mobilité obtenues sur des films minces (> 6 nm) de Si sous contrainte biaxiale en tension sont représentées sur la Figure 15.

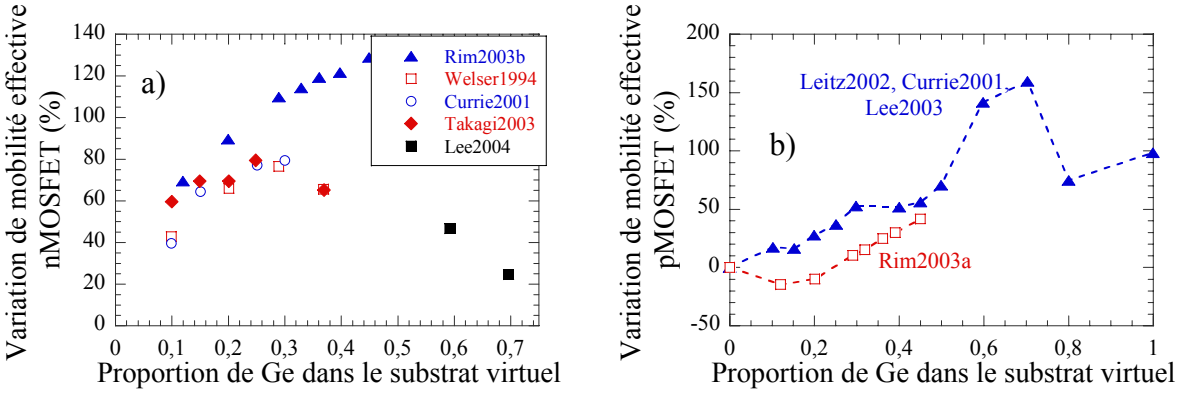

Figure 15 : [Lee2005] Variation de mobilité de dispositifs longs contraints en tension par le substrat Si sur SiGe, a) électrons, triangles pleins : [Rim2003a], carrés vides : [Welser1994], cercles vides : [Currie2001], losanges pleins : [Takagi2003], carrés pleins : [Lee2004], b) trous, triangles pleins : compilation de [Currie2001; Lee2003; Leitz2002], carrés vides : [Rim2003a].

Si on compare qualitativement ces mesures à l'approche piézorésistive, on peut voir que la dispersion des coefficients se retrouve bien sur la Figure 15 : suivant les auteurs, on peut avoir une amélioration ou une dégradation de la mobilité à faible contrainte dans le cas des trous. Il faut noter que les données de la Figure 15b servent de référence pour l'étude de l'influence de la contrainte sur la mobilité des trous dans le chapitre 4 de cette thèse.

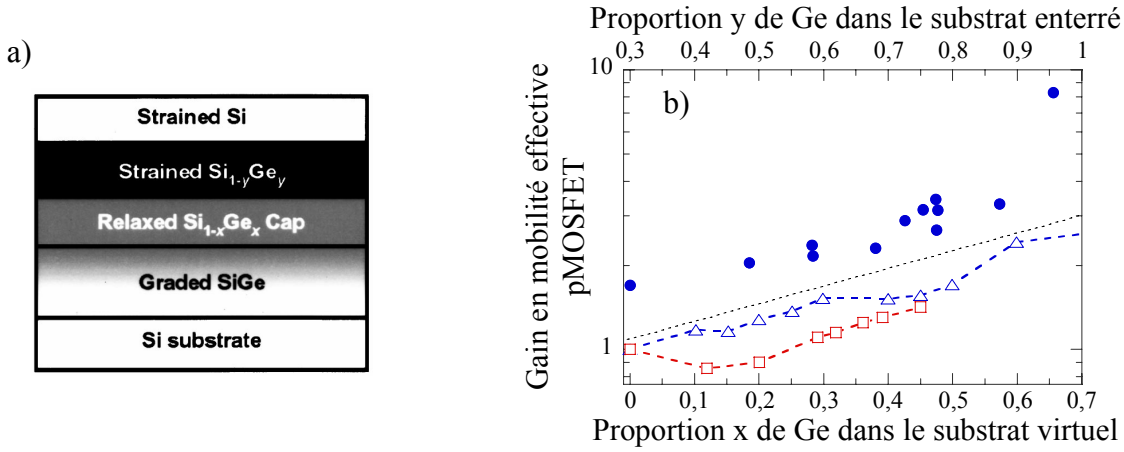

Figure 16 : [Lee2005] Gain en mobilité des trous. Symboles pleins : couches enterrées de $Si_{1-y}Ge_y$ (*buried channel*) en compression sur $Si_{1-x}Ge_x$ (*virtual substrate*). Les procédés utilisés imposent x = y+0,3. Mesures à $N_S = 10^{13}$ cm^{-2}. Symboles vides : données Si sur $Si_{1-x}Ge_x$ de la Figure 15b pour comparaison.

Afin d'améliorer le transport de trous, un canal de SiGe en compression semble plus avantageux. En effet, la mobilité est plus forte dans le SiGe (pour les électrons et les trous) et l'approche piézorésistive prévoit un gain par compression pour les trous. Ce type de structure, schématisé sur la Figure 16a, est obtenu par épitaxie de $Si_{1-y}Ge_y$ sur substrat $Si_{1-x}Ge_x$ (substrat dit virtuel) avec y > x. Une couche supplémentaire de Si (Si cap, de fait contrainte en tension et favorable à la mobilité des électrons) enterre le film de $Si_{1-y}Ge_y$ afin de pallier les problèmes d'oxydation de SiGe. Comme on peut le voir sur la Figure 16b, le gain en mobilité des trous dans les films $Si_{1-y}Ge_y$ enterrés peut dépasser 300% voire 800% pour du Ge épitaxié sur $Si_{0,3}Ge_{0,7}$.

Peu de résultats ont été publiés dans le cas de dispositifs courts à cause de la complexité des procédés utilisés. Des gains en performance en termes de courant à l'état passant I_{ON} de 25% ont été atteints pour des longueurs de canal de 100 nm [Yeo2000] (x = 0, y =0,24) et 17% [Shi2004] (x = 0, y = 0,1). Ils sont cependant plus faibles que ceux obtenus en canal long (respectivement 65% et 40%).

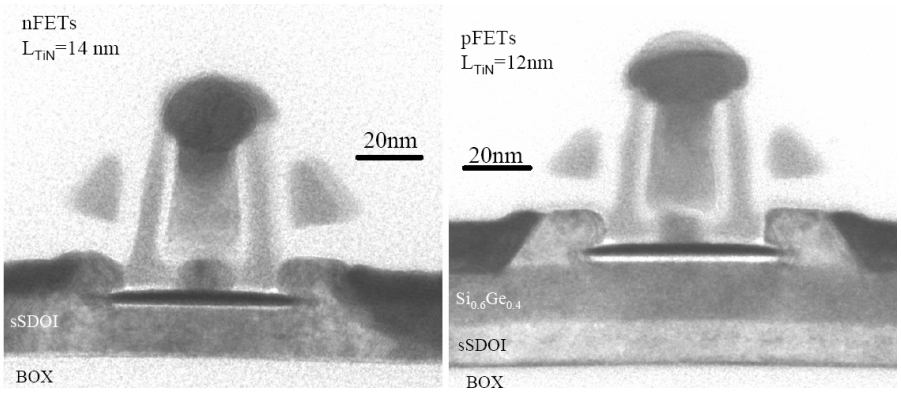

Figure 17 : [Andrieu2005] Image TEM de nMOS et pMOS sur substrat DCOI. nMOS à canal de Si contraint sur substrat sSDOI et d'un pMOS avec une couche de SiGe supplémentaire.

On peut coupler les matériaux pour obtenir un substrat avantageux pour les deux types de porteurs. Une telle technologie, nommée canal dual sur isolant (*Dual Channel On Insulator* DCOI) a été développée dans [Andrieu2005]. Elle est illustrée par les images de la Figure 17. La contrainte appliquée dans le canal est d'environ 1,5 GPa (x = 0,2, y = 0,4) et le gain en mobilité dans les canaux longs atteint plus de 100%. Dans les canaux courts, le gain en I_{ON} est, dans ce cas aussi, bien plus réduit (25% pour L_{Grille} = 75 nm et 11% pour L_{Grille} = 35 nm). Des mesures de transconductance suggèrent que les fortes dégradations des

performances peuvent être partiellement attribuées à la diminution de l'épaisseur de canal (dégradation de mobilité) et à l'augmentation des résistances série.

On peut également citer les méthodes impliquant l'adjonction d'une faible quantité de carbone [Galdin2000] qui permettent d'introduire une contrainte en tension et également de limiter la diffusion des dopants (notamment le Bore), souvent exacerbée par la contrainte.

Les performances atteintes dans les dispositifs utilisant la contrainte par le substrat sont bien inférieures à celles attendues, notamment pour les plus courts. L'hypothèse principale pour expliquer ce phénomène est la relaxation des contraintes par les étapes technologiques successives des procédés. En effet, la contrainte est appliquée dès le départ et peut être relaxée par les étapes d'implantation de dopants, de recuit et de gravure qui lui succèdent. Cependant, certaines considérations de bruit et d'effets de canal court [Andrieu2005], suggèrent que ce n'est pas la seule cause. Nous reviendrons sur ce sujet lors de notre étude du transport dans les dispositifs courts au chapitre 3.

2.4.2 Contrainte localisée

Les premiers effets de la contrainte induite par les procédés de fabrication sur le courant des transistors ont été ceux produits par les tranchées d'isolation présentes entre les transistors (*Shallow Trench Isolation* STI) [Scott1999] et la siliciuration des contacts [Steegen1999]. Ces contraintes dépendantes du dessin de masques (ou *layout*) ont d'abord été considérées comme sources de variabilités problématiques, mais il est rapidement apparu qu'elles pouvaient devenir avantageuses si l'on arrivait à bien contrôler le niveau de contrainte appliquée [Ito2000; Shimizu2001].

Une contrainte localisée s'obtient principalement par deux méthodes dont les effets sont cumulables : la formation des zones Source et Drain en SiGe pour les pMOSFET (e-SiGe [Gannavaram2000; Ghani2003]) ou $Si_{1-y}C_y$ à faible proportion de carbone pour les nMOSFET (e-SiC [Ang2005; Ang2007; Liu2007]) et le dépôt de couches contraignantes (*Stress Liners* SL généralement en nitrure de silicum SiN_x).

La formation de zones de source et drain en SiGe (ou SiC) se fait en gravant les zones d'accès et en y déposant sélectivement du SiGe dopé au Bore (ou SiC dopé à l'Arsenic). Le niveau de contrainte induit par les techniques e-SiGe et e-SiC dépend de la profondeur du matériau, ce qui risque de poser des problèmes dans le cas de transistors courts, car il faut diminuer l'épaisseur des jonctions quand on réduit la longueur de canal pour minimiser les SCE.

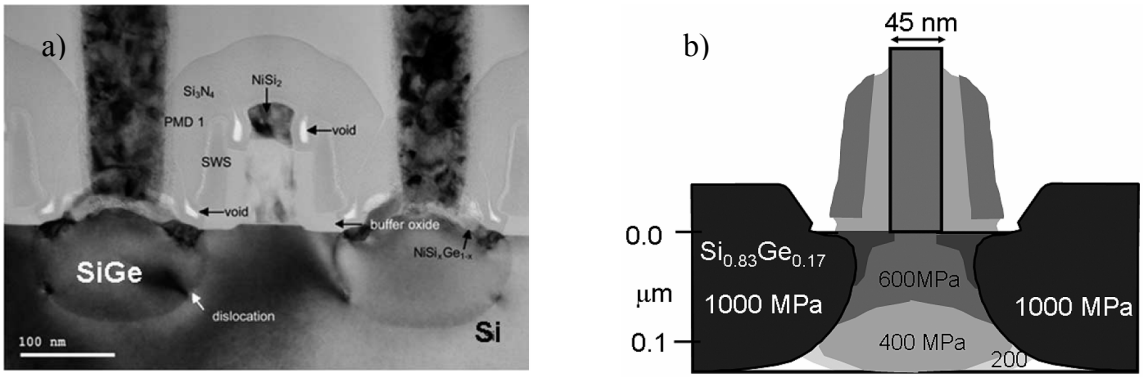

Figure 18 : a) [Thompson2006b] e-SiGe couplé au dépôt de *Stress Liner*, b) [Thompson2004] niveaux de stress uniaxial selon <110> dans un dispositif e-SiGe.

En ce qui concerne les dépôts de SL, la contrainte dépend des conditions de dépôt du matériau (température, vitesse), de la proximité avec la zone à contraindre et de l'épaisseur de couche déposée. Au départ, ces couches étaient simplement celles utilisées dans les procédés de gravure des contacts en tant que couches d'arrêt (*Contact Etch Stop Layer* CESL). Leur intérêt en tant que couches contraignantes est apparu lors du développement des technologies du nœud 90 nm [Ito2000], quand les dimensions sont devenues suffisamment faibles pour que l'effet de contrainte induit par CESL sur le canal devienne sensible. A terme, l'épaisseur de SL utilisable risque d'être limitée par la réduction des dimensions et le rapprochement des transistors, mais les technologues tentent d'en repousser les limites. Des méthodes comme la *Stress Memorisation Technique* (SMT [Chen2004]) permettent de minimiser l'épaisseur pour un effet maximum.

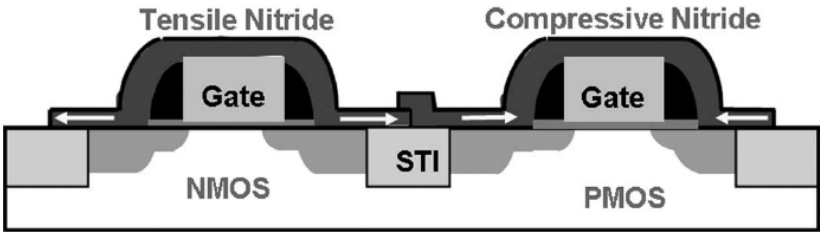

Figure 19 : [Thompson2006b] Procédé *Dual Stress Liner*.

L'utilisation de plusieurs couches, procédé schématisé sur la Figure 19 (« *Dual Stress Liner* » DSL [Thompson2006b; Yang2004; Yin2006]) permet d'appliquer localement et sur un même substrat des contraintes avantageuses, soit pour les nMOS (en tension), soit pour les pMOS (en compression).

Un avantage des techniques utilisant l'ingénierie de procédés est que, même si la contrainte appliquée dans le canal est relativement faible par rapport à l'ingénierie de substrat, le niveau de contrainte est souvent maintenu dans les canaux courts, voire augmenté. En effet, le dépôt de couches contraignantes se fait à l'étape de passivation, soit vers la fin du procédé de fabrication des composants, ce qui implique que les contraintes appliquées ne sont pas relaxées par des étapes technologiques supplémentaires contrairement aux méthodes de contrainte par le substrat.

Récemment [Liu2006], des gains records de mobilité des trous (230%) ont été obtenus dans des dispositifs sur substrat SGOI orienté (110) en compression biaxiale cumulée à de l'ingénierie de procédé (SL ou ESL) pour induire une contrainte uniaxiale supplémentaire dans la direction du transport <110>. Le gain en I_{ON} obtenu pour des dispositifs pMOS de L_{Grille} = 80 nm reste assez élevé (81%) grâce à la contrainte induite par le procédé.

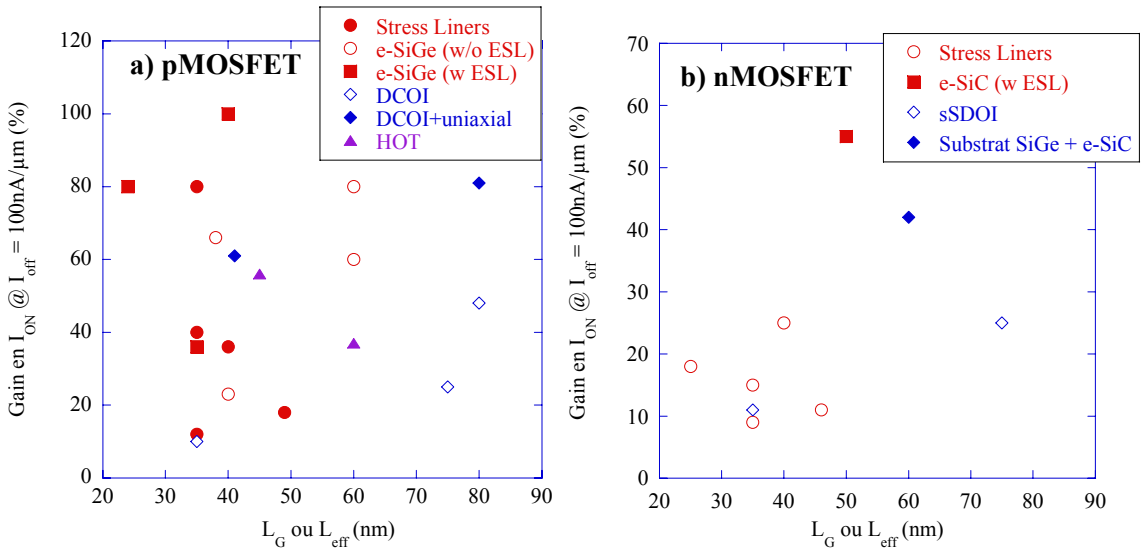

Figure 20 : Compilation de gains en I_{ON} obtenus pour les technologies récentes à partir de données de la littérature en fonction de la longueur de canal, a) pMOSFET : *Stress Liners* seul (ESL) : [Andrieu2007a; Chen2006; Grudowski2006; LeCam2006; Thean2006], source et drain en SiGe (e-SiGe) sans ESL : [Ang2007; Ota2006; Wang2007], e-SiGe avec ESL : [Yasutake2007; Yin2006], canal SiGe : [Liu2006], DCOI avec contrainte uniaxiale : [Liu2006; Tezuka2006], DCOI seul : [Andrieu2005], HOT = [Sheraw2005; Yang2006], b) nMOSFET : ESL seul : [Andrieu2007a; Chen2006; LeCam2006; Thean2006; Yin2006], source et drain en SiC (e-SiC) avec ESL : [Ang2006], sSDOI : [Andrieu2005], substrat SiGe avec e-SiC : [Ang2007].

La Figure 20 reporte quelques résultats de gains en performance (courant à l'état passant) sur des transistors utilisant des technologies des années 2005-2007. On peut remarquer que les efforts se sont surtout portés sur l'amélioration des pMOS pour lesquels on observe des gains spectaculaires. En effet, l'optimisation des technologies et l'additivité des

techniques permet d'obtenir des gains énormes en courant (jusqu'à 100% pour certains pMOS), tout en assurant l'intégrité électrostatique des dispositifs. L'industrialisation de certaines techniques risque cependant d'être difficile à cause de la pollution des bâtis (pour l'incorporation de carbone) ou l'auto échauffement dans les couches de SiGe par exemple, ou encore de la variabilité des techniques de dépôt de couches SL.

3 Bilan du chapitre I et objectifs de l'étude

Après un bref rappel sur les transistors à effet de champ, les principales stratégies mises en œuvre pour l'amélioration de leurs performances ont été détaillées : les matériaux, l'orientation cristalline et plus particulièrement la contrainte mécanique, qui est aujourd'hui une étape incontournable pour la conception des dispositifs des prochains nœuds technologiques. Nous avons détaillé le formalisme permettant de décrire la contrainte ainsi que son influence sur les propriétés intrinsèques du Si (structure de bandes). La piézorésistivité permet de décrire raisonnablement les effets macroscopiques de la contrainte sur les performances. Néanmoins, cette approche est souvent mise en défaut, notamment dans le cas des trous dans les couches d'inversion et ne permet pas de prédire quantitativement l'influence de la contrainte sur le courant à l'état ON. Enfin, nous avons présenté les principaux procédés utilisés pour induire la contrainte mécanique dans les dispositifs. Il s'avère que, à contrainte équivalente, l'amélioration des performances dans les canaux courts est souvent inférieure à celle obtenue dans les canaux longs. Afin de mieux comprendre ce type de phénomène, une analyse fine du transport dans les dispositifs contraints avec des outils adaptés est nécessaire.

Dans ce cadre, les objectifs de cette thèse sont les suivants :

- Développer des modèles de transports utilisant une description réaliste des effets de contrainte sur le Si pour la simulation de dispositifs,
- Appliquer les modèles à la simulation de dispositifs représentatifs des prochains nœuds technologiques,
- Comprendre les liens existants entre les propriétés intrinsèques au matériau et les performances des transistors.

Chapitre II :

Les outils de la modélisation

Cette partie est consacrée à la description des outils utilisés pour modéliser et analyser le transport dans les transistors étudiés. La Figure 21 schématise les éléments essentiels à toute simulation de composants et leurs interdépendances.

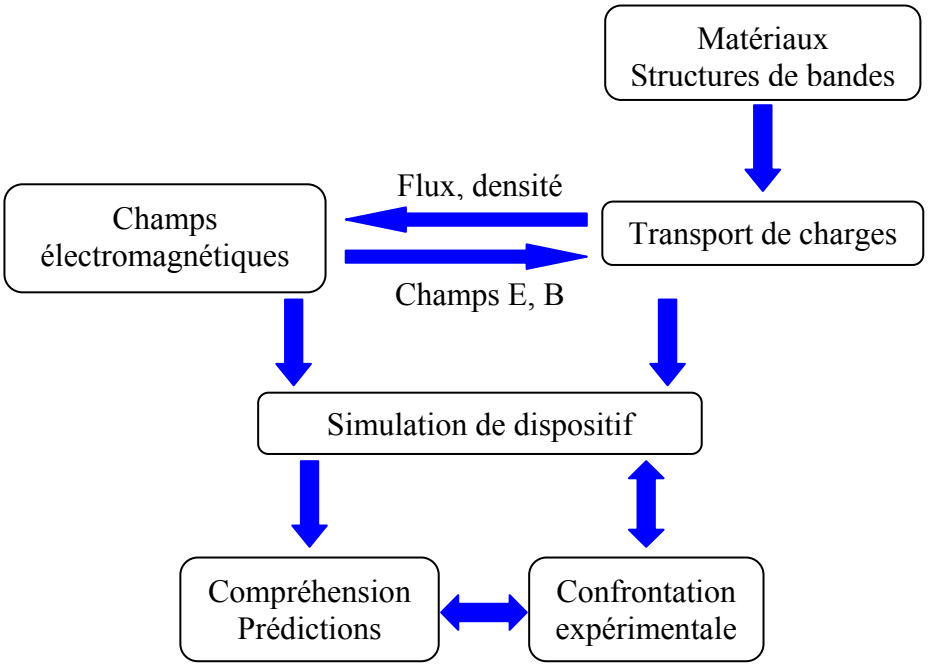

Figure 21 : Eléments de base de la simulation de composants.

La modélisation des matériaux apporte les paramètres tels que les relations de dispersion, les densités d'états ou encore les constantes physiques propres aux matériaux considérés, nécessaires pour une bonne description de l'environnement pour le transport de charges. Le calcul des champs électromagnétiques (via l'équation de Poisson pour le champ électrique dans les cas qui nous intéressent) et la simulation du transport de charges sont intrinsèquement liés et font souvent l'objet d'une résolution auto-cohérente. Afin de valider les paramètres utilisés, les simulations doivent être confrontées aux données expérimentales servant de référence (mobilité, courant). Enfin, l'analyse des résultats permet de mieux comprendre les phénomènes physiques en jeu et de prédire l'effet de paramètres choisis (contrainte, dimensionnement) sur les performances.

Dans la première partie, les méthodes de calcul de structure de bandes sont présentées, avec un accent plus prononcé sur la méthode **k.p**. Dans la seconde partie, les outils de modélisation du transport utilisés sont développés, notamment la méthode Monte Carlo et le concept de mobilité. Enfin nous détaillerons les développements réalisés pour l'adaptation de MONACO à la prise en compte d'une structure de bandes complète.

1 Calcul de structures de bandes

1.1 Généralités

Les méthodes de calcul de structure de bandes sont regroupées en deux catégories principales : *ab-initio* et semi-empiriques. Elles reposent sur la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans un potentiel périodique formé par des ions supposés fixes :

$$H\psi = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r})\right]\psi = E\psi \qquad (2.1.1)$$

où H est l'Hamiltonien du système considéré, ψ et E sont respectivement les fonctions propres (fonctions d'ondes) et les valeurs propres (énergies) du système, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ est l'opérateur quantité de mouvement et $V(\mathbf{r})$ le potentiel périodique vu par l'électron dû aux atomes du réseau cristallin. Dans le vide, les fonctions propres solutions de l'équation de Schrödinger sont des ondes planes de type $e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$. Dans le cristal, ce sont des fonctions de Bloch, produits d'ondes planes par des fonctions $u_{n,k}(\mathbf{r})$ de même périodicité que $V(\mathbf{r})$ [Kittel1971] :

$$\psi_{n,k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} u_{n,k}(\mathbf{r}) \qquad (2.1.2)$$

où n désigne un état du système, **k** le vecteur d'onde et **r** la position. Le réseau réciproque est périodique et cela permet de replier l'espace des **k**, restreignant ainsi les études à la première Zone de Brillouin (ZB), illustrée dans la partie précédente (cf. §2.2.1, Figure 9).

Les méthodes *ab-initio* permettent d'obtenir les structures de bandes à partir des premiers principes, i.e. sans utiliser de paramètres d'ajustement. On peut citer les approches Hartree-Fock ou la théorie de la fonctionnelle de la densité (*Density Functional Theory* DFT). Dans le cadre de la DFT, l'approximation locale de la densité (*Local Density Approximation* LDA) est souvent utilisée pour l'étude des propriétés élastiques et la détermination de potentiels de déformation des matériaux semi-conducteurs [Payne1992]. Le problème principal de ces méthodes est qu'elles sous-estiment systématiquement l'énergie de bande interdite. Une approche corrective, nommée « interaction écrantée dynamiquement » ou approximation GW, est souvent utilisée pour y remédier [Abinit.org; Aulbur2000; Hedin1965]. En général, ces méthodes utilisent une approche variationnelle pour calculer l'état fondamental d'un système à N-corps et nécessitent beaucoup de ressources. Elles sont

donc limitées à des situations où les symétries sont nombreuses et ne sont pas adaptées à l'étude du transport dans des systèmes grands et confinés.

Les méthodes dites semi-empiriques, quant à elles, utilisent des paramètres d'ajustement basés sur des mesures de réponse diélectrique, de bande interdite aux points de haute symétrie et de courbures de bandes (ou masses effectives) selon des axes de haute symétrie [Landolt-Börnstein1982]. L'avantage principal de ces méthodes est qu'elles ne nécessitent que la résolution de l'équation de Schrödinger à un électron. Elles sont donc beaucoup plus rapides et efficaces que les méthodes *ab-initio* et permettent d'étudier des systèmes grands et complexes. On peut citer les suivantes :

- La méthode des liaisons fortes (*Tight Binding* TB) aussi appelée combinaison linéaire d'orbitales atomiques (*Linear Combination of Atomic Orbitals* LCAO) [Sée2003],
- La méthode des pseudopotentiels empiriques (*Empirical Pseudopotentials Method* EPM) utilisant des pseudopotentiels dits locaux [Cohen1966] ou non locaux [Chelikowsky1976],
- La méthode **k.p** [Cardona1966; Fishman1988; Richard2005; Rideau2006; Rideau2008a], dont nous avons choisi d'exploiter les résultats dans ce travail et que nous allons maintenant détailler.

1.2 La méthode k.p

Dans cette partie, la méthode **k.p** utilisée pour obtenir les structures de bandes utilisées dans ce travail est décrite, suivie de la présentation des matrices **k.p** à 6 et 30 bandes qui permettent d'obtenir la relation de dispersion tridimensionnelle (3D) dans le cas de porteurs non confinés. La méthode générale utilisée pour la prise en compte du confinement (qui peut également s'appliquer à d'autres méthodes de calcul de structures de bandes) sera ensuite détaillée.

1.2.1 Construction de l'Hamiltonien k.p

1.2.1.1 Formulation sans spin-orbite

La méthode **k.p** s'apparente à un développement limité de la structure de bandes autour d'un point $\mathbf{k_0}$ de la Zone de Brillouin. Elle exploite la périodicité du réseau cristallin. L'équation de Schrödinger (2.1.1) vérifiée par les parties périodiques des fonctions de Bloch définies dans l'équation (2.1.2) est la suivante [Fishman1988; Richard2004b] :

$$H_{kp}u_{n,k}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}.\mathbf{p}\right]u_{n,k}(\mathbf{r}) = Eu_{n,k}(\mathbf{r}) \qquad (2.1.3)$$

où H_{kp} est l'Hamiltonien **k.p**. Si on suppose cette équation résolue en un point $\mathbf{k_0}$, on connaît les fonctions $u_{n,k_0}(\mathbf{r}) = u_n(\mathbf{r})$, les énergies $E_n = \langle u_n | H_{kp} | u_n \rangle$ et les termes $\langle u_{n'} | \mathbf{p} | u_n \rangle$. On peut alors projeter H_{kp} sur la base des $u_n(\mathbf{r})$:

$$\langle u_{n'} | H_{kp} | u_n \rangle = \left(E_n + \frac{\hbar^2|\mathbf{k}-\mathbf{k_0}|^2}{2m_0}\right)\delta_{n,n'} + \langle u_{n'} | \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k}-\mathbf{k_0}).\mathbf{p} | u_n \rangle \qquad (2.1.4)$$

où $\delta_{n,n'}$ est le symbole de Kronecker. Les valeurs propres de cet Hamiltonien sont les énergies $E_n(\mathbf{k})$ et ses vecteurs propres fournissent les coefficients $c_i(\mathbf{k})$ tels que :

$$u_{n,k}(\mathbf{r}) = \sum_i c_i(\mathbf{k})u_{i,k_0}(\mathbf{r}) \qquad (2.1.5)$$

La résolution des états propres de H_{kp} n'est exacte que si la base des $u_n(\mathbf{r})$ considérée est infinie, ce qui implique une taille infinie pour l'Hamiltonien. En pratique, on projette H_{kp} sur une base restreinte dont la dimension est le nombre de bandes prises en compte, qui détermine le domaine de validité du calcul. C'est le traitement des termes de couplage en **k**.**p** qui donne son nom à la méthode.

Les paramètres nécessaires au calcul sont ceux de la solution en $\mathbf{k_0}$ supposée connue, à savoir les énergies E_n et les termes de couplages $\langle u_{n'} | \mathbf{p} | u_n \rangle$. On suppose de plus que les fonctions u_n ont une parité bien déterminée par rapport aux 3 composantes de **r** (x,y,z). Le terme $\langle u_{n'} | \mathbf{p} | u_n \rangle$ est alors nul si u_n et $u_{n'}$ ont la même parité car l'opérateur **p** est impair. En particulier, les termes diagonaux sont nuls et les termes hors diagonale d'un niveau dégénéré sont nuls car toutes les fonctions u_n associées à un même niveau ont la même parité. Au final, les premiers termes non nuls dans le cadre d'un développement limité (traitement perturbatif) sont du second ordre, i.e. du type $|\langle u_{n'} | \mathbf{p} | u_n \rangle|^2$.

Les énergies en des points spécifiques de la ZB sont généralement bien connues expérimentalement, par le biais de mesures optiques. Les termes de couplage sont ajustés à partir des valeurs de courbures de bandes (masses effectives) qui peuvent être mesurées par des expériences de résonance cyclotron [Dresselhaus1955b; Dresselhaus1955a] ou issues de calculs *ab-initio* [Rideau2006]. De plus, les nombreuses symétries du cristal imposent des conditions permettant de lier certains termes, ce qui réduit le nombre de degrés de liberté et ainsi le nombre de paramètres à ajuster.

Afin d'illustrer notre propos, on se place dans le cas d'un modèle unidimensionnel à une bande. La matrice **k.p** se réduit alors à un seul élément :

$$\langle u_0 | H_{kp} | u_0 \rangle = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \tag{2.1.6}$$

On retrouve la relation de dispersion de l'électron libre (cf. Figure 22). Dans le cas où on considère le terme en **k.p** de l'équation (2.1.4) faible devant les différences d'énergies interbandes, on peut traiter l'influence d'autres bandes (n') comme une perturbation au second ordre [Fishman2008; Richard2004b; Yu1996] :

$$E_n(k) = E_{n,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \left(\frac{\hbar k}{m_0}\right)^2 \sum_{n' \neq n} \frac{\left|\langle u_n | p | u_{n'} \rangle\right|^2}{E_n - E_{n'}} \tag{2.1.7}$$

Les bandes (n') interviennent en tant que terme correctif de la projection de H_{kp}, exactement comme un développement limité au second ordre autour d'un point connu. Dans ce cas, on se ramène à l'approximation de la masse effective :

$$E_n(k) = E_{n,0} + \left(1 + \frac{2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\left|\langle u_n | p | u_{n'} \rangle\right|^2}{E_n - E_{n'}}\right) \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = E_{n,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{2.1.8}$$

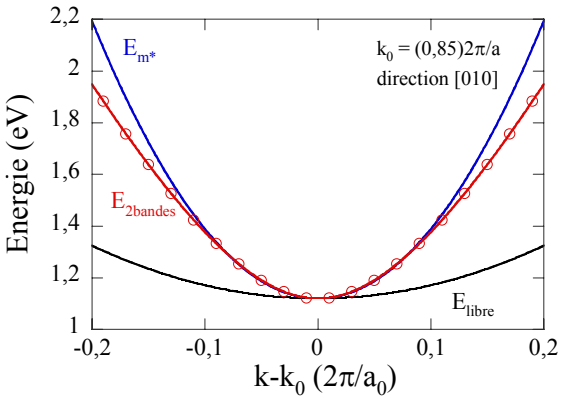

Figure 22 : Comparaison des relations de dispersion de la bande de conduction du Si massif, obtenues en masse effective (en considérant la valeur usuelle pour le Si dans cette direction $m^* = 0{,}19m_0$) et **k.p** 2 bandes ($E_P = 4{,}77$ eV) autour du minimum d'une vallée Δ dans la direction transverse.

Le résultat est représenté sur la Figure 22 autour d'un minimum de la première bande de conduction du Silicium dans une direction dite transverse.

On peut aller un peu plus loin en considérant un modèle unidimensionnel à 2 bandes (une de conduction c et une de valence v, supposées de parités opposées) de symétrie *s* (sphériques) séparées en énergie par E_g. L'Hamiltonien s'écrit alors :

$$H_{kp} = \begin{bmatrix} E_g + w^2 & Pk \\ Pk & w^2 \end{bmatrix} \text{ avec } w^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ et } P = \frac{\hbar}{m_0}\langle u_v | p | u_c \rangle \tag{2.1.9}$$

où P est réel. Si on diagonalise cette matrice, on obtient pour les valeurs propres :

$$\begin{cases} E_c(k) = \frac{1}{2}\left(E_g \left(1 + \sqrt{1 + 4\frac{E_P}{E_g^2} w^2} \right) + 2w^2 \right) \\ E_v(k) = \frac{1}{2}\left(E_g \left(1 - \sqrt{1 + 4\frac{E_P}{E_g^2} w^2} \right) + 2w^2 \right) \end{cases} \tag{2.1.10}$$

où E_P est l'énergie d'interaction entre les deux bandes $E_P = \frac{m_0}{\hbar^2} P^2 = \frac{2}{m_0} \left| \langle u_v | p | u_c \rangle \right|^2$.

Le résultat est représenté sur la Figure 22, comparé aux deux formulations précédentes. Dans ce cas, le terme en **k.p** est traité exactement et non comme une interaction. Cette formulation est assez proche de l'approximation analytique de l'énergie faisant intervenir la masse effective et un coefficient de non parabolicité, dont on voit l'influence à plus fort vecteur d'onde.

On peut également prendre en compte l'influence d'autres bandes en tant que perturbation, ce qui intervient dans le calcul de tous les termes de la projection de H_{kp} [Fishman2008] :

Pour $n \neq n'$:

$$\langle u_n | H_{kp} | u_{n'} \rangle = \langle u_n | p | u_{n'} \rangle + \sum_{\nu \notin H_{kp}} \frac{1}{2}\left(\frac{1}{E_n - E_\nu} + \frac{1}{E_{n'} - E_\nu} \right) \langle u_n | p | u_\nu \rangle \langle u_\nu | p | u_{n'} \rangle k^2 \tag{2.1.11}$$

Et pour n = n' :

$$\langle u_n | H_{kp} | u_n \rangle = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \sum_{\nu \notin H_{kp}} \left(\frac{1}{E_n - E_\nu} \right) \left| \langle u_n | p | u_\nu \rangle \right|^2 k^2 \tag{2.1.12}$$

où les bandes n et n' sont celles de l'Hamiltonien non perturbé et les bandes ν sont extérieures aux bandes prises en compte dans H_{kp} (ici autres que les bandes c et v).

Toute la force de la méthode **k.p** est de pouvoir tenir compte de l'influence de bandes non incluses dans la matrice H_{kp} par une approche perturbative.

1.2.1.2 Couplage spin-orbite

Si on veut une description plus précise de la relation de dispersion, il faut considérer plus de bandes. Cependant, alors que les bandes de la première bande de conduction du Si sont peu perturbées par le couplage spin-orbite, il faut en tenir compte pour celles de la bande de valence. En effet, sans le couplage spin-orbite, la bande de valence se divise en 3 niveaux découplés et dégénérés en $\mathbf{k} = 0$, définis par des fonctions de base notées $|X\rangle$, $|Y\rangle$ et $|Z\rangle$. Ces fonctions de base se comportent comme les orbitales atomiques p_x, p_y et p_z, mais seulement avec les symétries du cristal. L'interaction spin-orbite lève partiellement la dégénérescence et couple les niveaux, qui sont alors définis par des mélanges entre ces fonctions.

En fait, l'interaction spin-orbite vient du couplage entre le spin **s** de l'électron et le moment orbital angulaire (noté **l**). L'Hamiltonien spin-orbite s'écrit alors [Yu1996] :

$$H_{so} = \lambda \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\left(\nabla V \times \mathbf{p}\right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \qquad (2.1.13)$$

où λ est une constante quantifiant le couplage et où les composantes de $\boldsymbol{\sigma}$ sont les matrices de Pauli [Cohen-Tanoudji2000].

Les états propres de H_{so} sont fonctions du moment angulaire total $j = l + s$ et de sa composante j_z selon z. Pour $l = 1$ et $s = 1/2$, les 6 états propres que l'on note $|j, j_z\rangle$ sont assimilés aux types suivants :

$$|X\uparrow\rangle, |X\downarrow\rangle = \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle \text{ : type "trous lourds"}$$

$$|Y\uparrow\rangle, |Y\downarrow\rangle = \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \text{ : type "trous légers"}$$

$$|Z\uparrow\rangle, |Z\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \text{ : type "split-off"}$$

où une valeur positive de j_z correspond à un état de spin « up » et une valeur négative à un état de spin « down ». La levée de dégénérescence entre les états $j = 3/2$ et $j = 1/2$ quantifie le couplage spin-orbite et induit un écart entre les niveaux de $\Delta_0 = 3\lambda/2 = 44$ meV dans le Silicium. En réalité, les fonctions d'ondes ne sont préférentiellement de ce type que quand le vecteur d'onde **k** est sur l'axe parallèle au spin. Pour **k** quelconque, les fonctions d'ondes sont mélangées [Fishman1988].

L'équation (2.1.3) tenant compte de H_{so} projeté sur la base des $u_{n,k}(\mathbf{r})$ s'écrit alors :

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}+V(\mathbf{r})+\frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m_0}+\frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}.\mathbf{p}+\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\nabla V\times\mathbf{p})\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]u_{n,k}(\mathbf{r})=Eu_{n,k}(\mathbf{r}) \qquad (2.1.14)$$

Il faut préciser que cette formulation néglige le terme dépendant de **k** de la projection de H_{so} sur la base des $u_{n,k}(\mathbf{r})$ [Richard2004b; Yu1996].

La projection de H_{kp} sur la base des $u_{n,k_0}(\mathbf{r})$ nous donne enfin (autour de $\mathbf{k_0} = \mathbf{0}$):

$$\langle u_{n'}|H_{kp}|u_n\rangle=\left(E_n+\frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m_0}\right)\delta_{n,n'}+\langle u_{n'}|\frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}.\mathbf{p}|u_n\rangle+\langle u_{n'}|\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\nabla V\times\mathbf{p})\cdot\boldsymbol{\sigma}|u_n\rangle \qquad (2.1.15)$$

Dans la pratique, la prise en compte du couplage spin-orbite a pour effet de doubler le rang de H_{kp} et apporte des termes supplémentaires de couplages interbandes. Nous allons maintenant montrer quelques résultats de la méthode **k.p** 6 bandes dans le cas de la bande de valence (2×3 = 6 bandes), puis brièvement décrire l'Hamiltonien 30 bandes qui permet de décrire également la bande de conduction, soit les deux méthodes dont les résultats seront exploités dans la suite de cette thèse.

1.2.2 Matrice k.p 6 bandes

1.2.2.1 Construction

La matrice de perturbation 6×6 au second ordre avec couplage spin-orbite peut s'obtenir à partir de l'Hamiltonien 8×8 de Kane qui inclut les 6 fonctions de la bande de valence (incluant le spin), $|X\uparrow\rangle,|X\downarrow\rangle,|Y\uparrow\rangle,|Y\downarrow\rangle$ et $|Z\uparrow\rangle,|Z\downarrow\rangle$ définies précédemment et une bande de conduction de type $|S\uparrow\rangle,|S\downarrow\rangle$ [Kane1957]. L'influence des autres bandes est traitée de manière assez complexe comme une perturbation. La matrice 6×6 correspond à une projection sur la base des 6 fonctions de base de la bande de valence. La prise en compte de la contrainte se fait en y rajoutant un Hamiltonien H_{str} lié au tenseur de déformations ε. On obtient une matrice de la forme suivante sur la base $|X\uparrow\rangle,|Y\uparrow\rangle,|Z\uparrow\rangle,|X\downarrow\rangle,|Y\downarrow\rangle,|Z\downarrow\rangle$ [Hinckley1990] :

$$H_{k.p}=\begin{bmatrix}H_{k.p3} & 0_{3\times3}\\ 0_{3\times3} & H_{k.p3}\end{bmatrix}\begin{matrix}\uparrow\\ \downarrow\end{matrix}+\begin{bmatrix}H_{str3} & 0_{3\times3}\\ 0_{3\times3} & H_{str3}\end{bmatrix}\begin{matrix}\uparrow\\ \downarrow\end{matrix}+H_{so} \qquad (2.1.16)$$

où H_{kp3} s'écrit :

$$H_{kp3} = \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M\left(k_y^2 + k_z^2\right) & Nk_xk_y & Nk_xk_z \\ Nk_xk_y & Lk_y^2 + M\left(k_z^2 + k_x^2\right) & Nk_yk_z \\ Nk_xk_z & Nk_yk_z & Lk_z^2 + M\left(k_x^2 + k_y^2\right) \end{bmatrix} \begin{matrix} |X\rangle \\ |Y\rangle \\ |Z\rangle \end{matrix} \quad (2.1.17)$$

Les termes non diagonaux quantifient les couplages entre les bandes de même spin. Les paramètres L, M et N sont liés aux paramètres de courbures de Luttinger γ_1, γ_2 et γ_3 par les relations suivantes [Guillaume2005] :

$$L = -\gamma_1 - 4\gamma_2; \quad M = -\gamma_1 + 2\gamma_2; \quad N = -6\gamma_3 \quad (2.1.18)$$

L'influence de la contrainte est également traitée comme une perturbation. Du fait que les éléments du tenseur de déformation (définis au chapitre précédent) ont la même symétrie que les composantes du vecteur d'onde (par exemple $\varepsilon_{12} \equiv \varepsilon_{xy}$ a la même symétrie que k_xk_y), l'Hamiltonien de contrainte a la même forme que l'Hamiltonien **k.p**. Les coefficients sont différents et ont été étudiés par Bir et Pikus [Bir1974]. On a pour H_{st3} :

$$H_{str3} = \begin{bmatrix} l\varepsilon_{11}^2 + m\left(\varepsilon_{22}^2 + \varepsilon_{33}^2\right) & n\varepsilon_{12} & n\varepsilon_{13} \\ n\varepsilon_{12} & l\varepsilon_{22}^2 + m\left(\varepsilon_{33}^2 + \varepsilon_{11}^2\right) & n\varepsilon_{23} \\ n\varepsilon_{13} & n\varepsilon_{23} & l\varepsilon_{33}^2 + m\left(\varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2\right) \end{bmatrix} \begin{matrix} |X\rangle \\ |Y\rangle \\ |Z\rangle \end{matrix} \quad (2.1.19)$$

Les potentiels de déformation l, m et n peuvent être reliés aux potentiels usuels de Bir et Pikus a_v, b et d :

$$a_v = \frac{l + 2m}{3}, b = \frac{l - m}{3}, d = \frac{n}{\sqrt{3}} \quad (2.1.20)$$

Les termes diagonaux représentent les effets de contrainte hydrostatique (liés à $\boldsymbol{\varepsilon_{hyd}}$) et de cisaillement diagonal (liés à $\boldsymbol{\varepsilon_{dev[100]}}$) et les termes non diagonaux les effets de cisaillement hors diagonale (liés à $\boldsymbol{\varepsilon_{dev[111]}}$) dont on a parlé au chapitre 1 (§2.1, équations (1.2.7)).

Enfin l'Hamiltonien de spin-orbite s'écrit dans la même base [Hinckley1990] :

$$H_{so} = \frac{\Delta_0}{3} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} |X\uparrow\rangle \\ |Y\uparrow\rangle \\ |Z\uparrow\rangle \\ |X\downarrow\rangle \\ |Y\downarrow\rangle \\ |Z\downarrow\rangle \end{matrix} \quad (2.1.21)$$

Cet Hamiltonien couple les états de spins différents et provoque la levée de dégénérescence principale entre les états j = 3/2 et j = 1/2.

Les valeurs des paramètres utilisés dans ce travail pour le Si sont reportées dans le Tableau 4.

E_g	Δ_0	L	M	N	γ_1	γ_2	γ_3	l	m	n
1,12	0,044	-5,72	-3,64	-8,67	4,338	0,347	1,445	-2,7	4,2	-7,379

Tableau 4 : Paramètres de la matrice **k.p** 6×6 pour le Si [Rideau2006], L,M,N sont donnés en unités de $\hbar^2/(2m_0)$, les paramètres de Luttinger sont sans unités et les autres sont en eV.

1.2.2.2 Résultat pour le Si massif

La Figure 23a représente les 3 premières bandes de valence (doublement dégénérées) obtenues avec ces paramètres dans les directions <110> (k < 0) et <100> (k > 0). On peut observer la forte anisotropie des bandes et la levée de dégénérescence entre les bandes hh et lh d'une part, et la bande so d'autre part. L'effet d'une contrainte biaxiale sur la position énergétique du sommet des bandes est reporté sur la Figure 23b. On y voit bien la levée de dégénérescence des bandes hh et lh dont il a été question au chapitre précédent. On peut également observer une discontinuité purement artificielle autour de la contrainte nulle, uniquement due à la convention de notation des bandes, qui perd de son sens dès qu'une contrainte est appliquée.

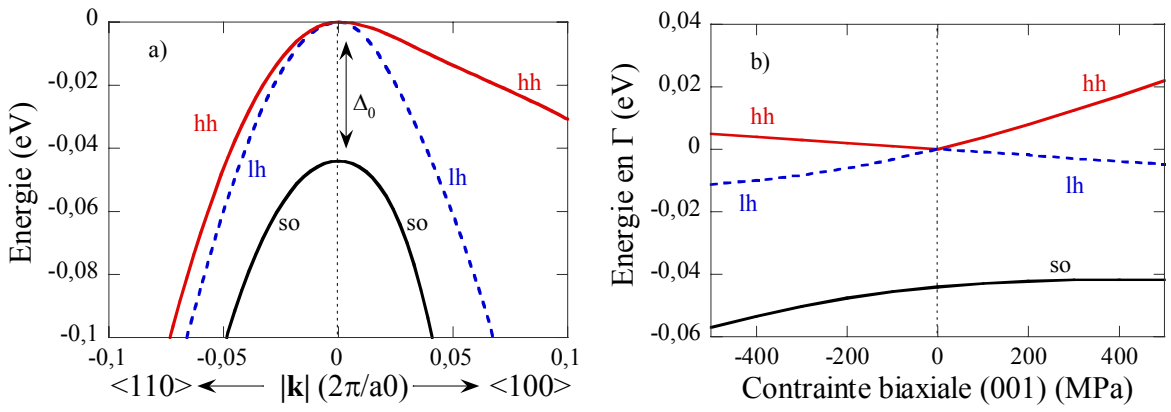

Figure 23 : Méthode **k.p** 6 bandes, a) bande de valence du Si non contraint autour de Γ, b) effet d'une contrainte biaxiale dans le plan (001) sur le sommet des bandes.

La Figure 24 représente les deux premières bandes de valence du Si non contraint dans le plan (k_x, k_y) avec $k_z = 0$. On y voit bien la forte anisotropie des relations de dispersion, notamment pour la bande hh.

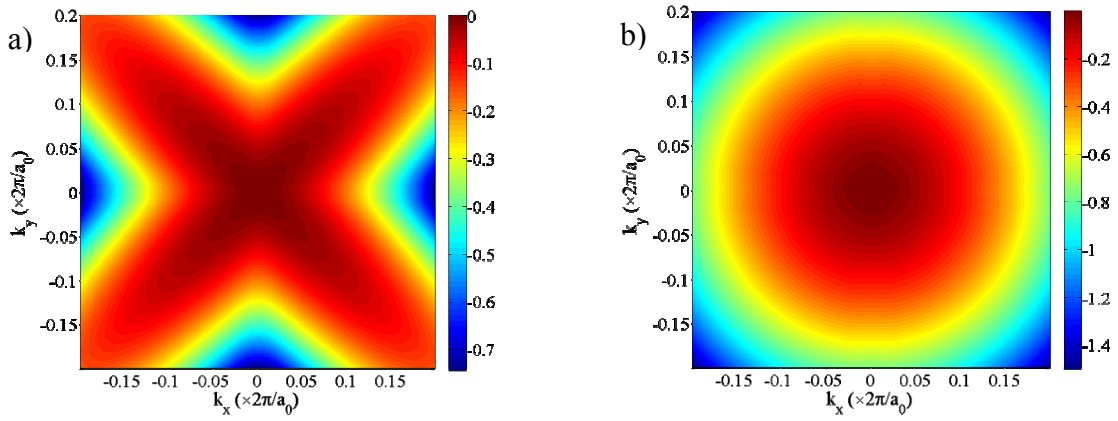

Figure 24 : Energie des bandes de valence du Si non contraint dans le plan (k_x,k_y) en $k_z = 0$ a) hh, b) lh. Les niveaux de couleur donnent les valeurs des énergies référencées par rapport au sommet de la bande de valence.

La Figure 25 représente le lieu d'énergie constante (isoénergie) égale à l'énergie thermique $3k_BT/2$ dans l'espace réciproque pour du Si non contraint. Ce type de figure donne un aperçu des lieux à forte densité d'états. La bande lh est assez isotrope (forme proche d'une sphère) alors que la bande hh est très anisotrope. On peut notamment remarquer la présence de 12 lobes dans des directions particulières de type <110>. Après le point Γ, ce sont ces lobes (ou ailes) qui sont majoritairement occupés par les porteurs. Nous verrons qu'ils jouent un rôle important car ils sont déformés par la contrainte. De plus, quand on considère le confinement, nous verrons que même les lobes situés en dehors du plan de transport (i.e. le plan $k_z = 0$) sont présents.

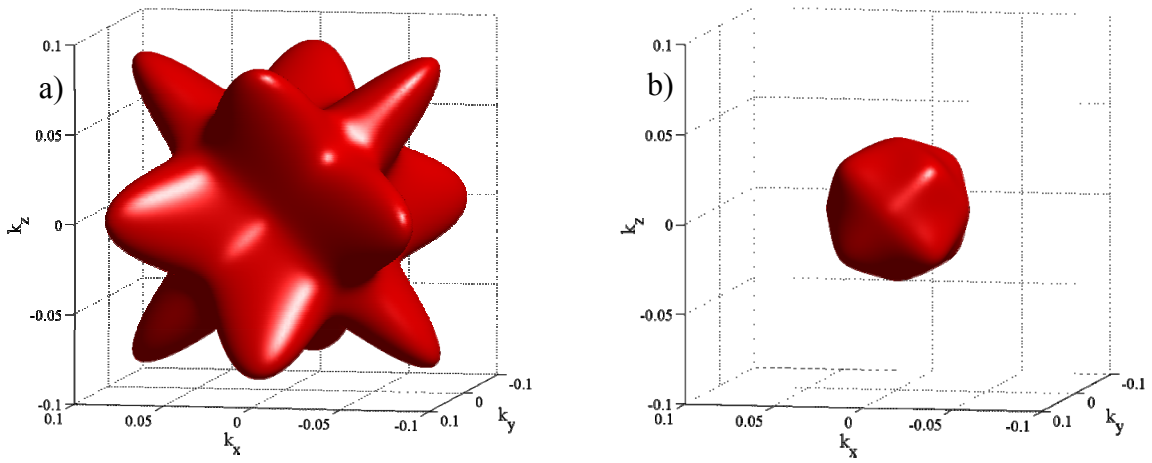

Figure 25 : Surfaces isoénergies des bandes de valence du Si non contraint à l'énergie thermique $E = 3k_BT/2 \approx 39$ meV a) hh, b) lh. Les coordonnées de **k** sont normalisées par rapport à $2\pi/a_0$.

La matrice **k.p** 6 bandes permet d'obtenir assez rapidement les bandes de valence avec une bonne précision jusqu'à quelques dizaines de meV. Une formulation analytique de cette matrice a été développée pour des calculs de mobilité [Guillaume2005; Guillaume2006]. Cependant, si on veut aller au-delà du régime de mobilité et étudier le régime fort champ ou les effets non stationnaires, il faut tenir compte de bien plus de bandes pour étendre la gamme d'énergies exploitable.

1.2.3 Matrice k.p 30 bandes

La construction de la matrice 30 bandes (en incluant le spin et la déformation) dans la méthode **k.p** a initialement été développée par Soline Richard [Richard2004b; Richard2004a; Richard2005] à partir de l'Hamiltonien 15 bandes (sans prise en compte du spin) développé par Cardona et Pollak [Cardona1966]. Les paramètres pour le Si et le Ge, notamment ceux concernant la prise en compte des effets de contrainte de cisaillement sur les bandes, ont été optimisés par Rideau *et al.* [Rideau2006]. Sauf mention explicite par la suite, c'est la matrice et les paramètres décrits dans cette dernière étude qui sont utilisés dans ce travail. Les détails peuvent être trouvés dans [Rideau2006]. Les énergies obtenues en diagonalisant cet Hamiltonien sont fiables dans une gamme de [-6 eV, +5 eV] à partir du sommet de la bande de valence [Richard2004b].

Les structures de bandes obtenues avec cette matrice et les grandeurs utiles (courbures, densités d'états, levées de dégénérescence) sont étudiées plus en détail dans les parties consacrées au transport 3Dk des chapitres 3 et 4.

1.3 Prise en compte de la quantification perpendiculaire

1.3.1 Position du problème

Du fait de la réduction des dimensions des transistors, les champs transverses dans la direction grille substrat (perpendiculaire à la direction source-drain) deviennent de plus en plus élevés à chaque génération. De plus, dans les dispositifs à substrat non conventionnel (SOI, SiGe, …), le gaz de porteurs peut être confiné dans le film mince servant de couche active. Dans ce cas, les porteurs de la couche d'inversion doivent être considérés comme un gaz de porteurs confinés possédant seulement deux degrés de liberté dans l'espace réciproque (2Dk). La structure de bandes ne peut alors plus être décrite comme un continuum. Les niveaux d'énergie accessibles aux porteurs sont quantifiés pour la composante du vecteur d'onde suivant l'axe de confinement. Pratiquement, en prenant l'exemple d'un confinement selon l'axe Oz, on réécrit l'équation de Schrödinger en remplaçant tous les termes en k_z par

l'opérateur $-i\frac{\partial}{\partial z}$. Dans l'espace réciproque, on peut approcher cela par une projection de la structure de bandes sur le plan (0,x,y) selon l'axe Oz. Ainsi, si on considère la forme des surfaces isoénergies, un ellipsoïde de grand axe Ox ou Oy en 3D devient une ellipse de même grand axe en 2D, alors qu'un ellipsoïde de grand axe Oz en 3D devient un cercle en 2D. On peut considérer d'autres axes de confinement en procédant à des rotations [Fischetti2003; Sun2007a].

1.3.2 Méthode de résolution

Il existe deux méthodes principales pour résoudre numériquement le problème du confinement 1D d'un gaz 2Dk : les différences finies et le modèle de la fonction enveloppe. La première méthode est assez simple à mettre en œuvre, mais est assez lente et numériquement lourde. En effet, elle consiste à développer l'équation de Schrödinger sur la base des Dirac δ_z. Numériquement, il faut donc résoudre, pour chaque point **k** de l'espace réciproque, une matrice de taille $N_{kp}.N_z \times N_{kp}.N_z$, où N_{kp} est le nombre de bandes de la matrice **k.p** 3D et N_z est le nombre de points de discrétisation du potentiel. Il faut choisir N_z afin que les variations de potentiel sur le pas dz soient significatives devant la précision machine, tout en étant suffisamment petites devant les écarts entre les énergies à déterminer. Même dans le cas de la matrice **k.p** 6 bandes, on parvient rapidement à des problèmes de rang supérieur à 2000 [Fischetti2003] et ce pour chaque point **k**. Dans l'objectif de faire un solveur auto-cohérent couplé à l'équation de Poisson, une telle lourdeur numérique n'est pas envisageable.

La seconde méthode exploite le fait que la forme générale des fonctions d'ondes est assez bien connue et qu'elles peuvent s'exprimer avec un nombre assez restreint de fonctions de base, dites fonctions test, souvent de type sinusoïdal. C'est cette dernière qui est exploitée dans cette thèse. Elle a été développée par Denis Rideau [Rideau2008a] pour les matrices **k.p** à 6 et 30 bandes dans un solveur 1D couplant l'équation de Schrödinger et l'équation de Poisson de façon auto-cohérente (outil UTOX).

En supposant que les parties périodiques des fonctions de Bloch sont similaires dans le puits et dans la barrière, on peut décomposer la fonction d'onde ainsi :

$$\psi_{n,k}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k_{2D}} \cdot \mathbf{r_{2D}})\chi_{n,k}(z)u_{n,k}(\mathbf{r}) \qquad (2.1.22)$$

où $\mathbf{k_{2D}}$, $\mathbf{r_{2D}}$ sont respectivement le vecteur d'onde et la position dans le plan perpendiculaire à l'axe de quantification et $\chi_{n,k}(z) = \chi(z)$ est la fonction enveloppe. L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\begin{aligned} H_{l,m}\chi(z) &= \left[\left[V(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(|\mathbf{k}|^2 - \frac{d^2}{dz^2}\right)\right]\langle u_l|u_m\rangle + \frac{\hbar|\mathbf{k}|^2}{m_0}\langle u_l|\mathbf{p}|u_m\rangle - \frac{i\hbar}{m_0}\langle u_l|p_z|u_m\rangle\frac{d}{dz}\right]\chi(z) \\ &= E\chi(z) \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

où $\mathbf{k}$ est le vecteur d'onde et $\mathbf{p}$ est l'opérateur quantité de mouvement, tous deux dans le plan (k_x,k_y), l et m sont les indices de bandes prises en compte dans la matrice initiale.

Cette équation est projetée sur une base de N fonctions test $\varphi_n(z)$ et est alors vérifiée par la fonction enveloppe qui s'écrit :

$$\chi_{n,k}(z) = \sum_{n=1,N} a_n\varphi_n(z) \text{ avec } \varphi_n(0) = \varphi_n(2L_z) = 0 \quad (2.1.24)$$

où $2L_z$ est la dimension spatiale sur laquelle s'étend la fonction enveloppe. Ces fonctions test φ_n sont choisies proches de solutions analytiques bien connues dans des cas simples, comme par exemple le puits carré de hauteur infinie [Cohen-Tanoudji2000] :

$$\varphi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}}\sin\left(\frac{\pi}{2L_z}nz\right) \quad (2.1.25)$$

Il faut alors réécrire l'Hamiltonien du système en remplaçant chaque terme de la matrice de départ par une sous-matrice de taille N dans laquelle le terme initial est développé sur la base des fonctions test. Prenons par exemple le cas de la matrice 6×6 décrite précédemment (sans tenir compte de la contrainte). Le terme $H_{11} = Lk_x^2 + M\left(k_y^2 + k_z^2\right)$ devient une sous-matrice de dimension N×N où k_z est remplacé par l'opérateur $-i\frac{\partial}{\partial z}$ et dont les termes sont développés ainsi :

$$\begin{aligned} \langle\varphi_j|H_{11}|\varphi_g\rangle &= \int_0^{2L_z}\left[\varphi_j\left(V(z) + Lk_x^2 + Mk_y^2\right)\varphi_g - \varphi_j M\frac{d^2}{dz^2}\varphi_g dz\right] \\ &= \frac{1}{L_z}\int_0^{2L_z}\left[\left(V(z) + Lk_x^2 + M\left(k_y^2 + \left(\frac{g\pi}{2L_z}\right)^2\right)\right)\sin\left(\frac{j\pi}{2L_z}z\right)\sin\left(\frac{g\pi}{2L_z}z\right)dz\right] \end{aligned} \quad (2.1.26)$$

où j et g sont les indices des fonctions test allant de 1 à N. On développe ensuite les autres termes de H_{kp} de manière similaire et la résolution de la matrice de dimension $N_{kp}.N\times N_{kp}.N$ résultante donne les solutions de l'équation de Schrödinger en tenant compte du confinement.

Typiquement, le nombre de fonctions test nécessaire à l'obtention des premiers niveaux quantifiés avec une bonne précision est assez réduit (inférieur à 100). On peut utiliser d'autres types de fonctions test, telles que des ondes planes par exemple [Hou2001].

La méthode de la fonction enveloppe présente l'avantage d'être rapide et peu gourmande en mémoire mais a cependant quelques inconvénients :

- Si on veut utiliser les fonctions d'ondes dans l'espace réel (pour obtenir la densité en fonction de z par exemple), il faut les redévelopper sur la base des Dirac.
- Dans le cas où le potentiel présente de fortes discontinuités, il faut malgré tout prendre garde au maillage de l'espace réel utilisé pour les intégrales afin d'éviter les problèmes dus à l'échantillonnage.
- La méthode **k.p** présentant des divergences aux valeurs élevées de vecteur d'onde (i.e. hors de la première Zone de Brillouin), des solutions aberrantes apparaissent parfois après diagonalisation de la matrice. Pour les éviter, il existe des méthodes permettant de restreindre l'espace des **k** projetés sur le plan de confinement à la première Zone de Brillouin [Foreman1997; Godfrey1996].

1.3.3 Résultat en couche d'inversion

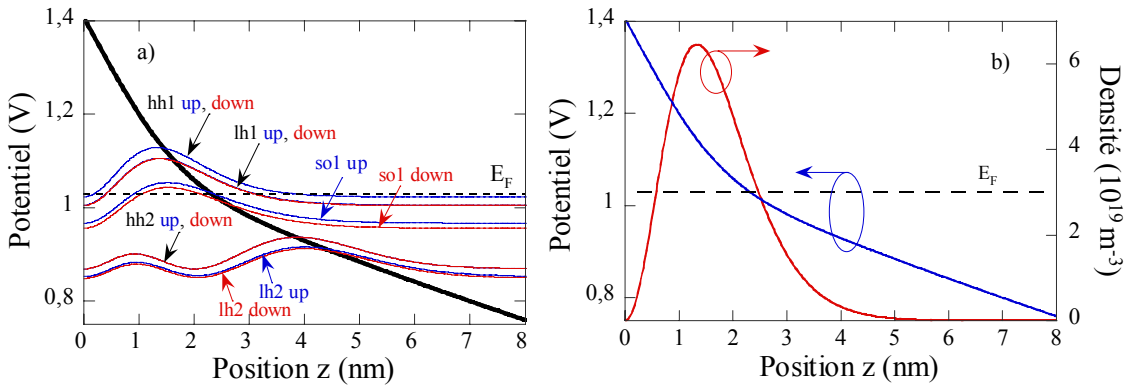

Figure 26 : Profil de potentiel type une couche d'inversion de type P obtenu avec UTOX, a) superposé à la densité de probabilité $|\psi_n(z)|^2$ des 10 premiers niveaux confinés (unités arbitraires). Leur ordonnée à l'origine représente la position du niveau, b) superposé à la densité. La position du niveau de Fermi est représentée par les tirets.

La Figure 26 représente un profil de potentiel type d'une couche d'inversion de type P dans un transistor MOS long, obtenue à l'aide d'une résolution auto-cohérente des équations 1D de Schrödinger et de Poisson (UTOX). Les densités de probabilité $|\psi_n(z)|^2$ des 10 premiers niveaux sont représentées en unités arbitraires. Elles se comportent comme des combinaisons

de fonctions sinusoïdales. De plus, la forme du puits n'étant pas symétrique, la dégénérescence de spin (états *up* et *down*) de certains niveaux est levée [Bychkov1984] (en fait ici seuls les niveaux hh1 et hh2 sont vraiment dégénérés en spin), ce qui n'était pas le cas dans le calcul 3Dk.

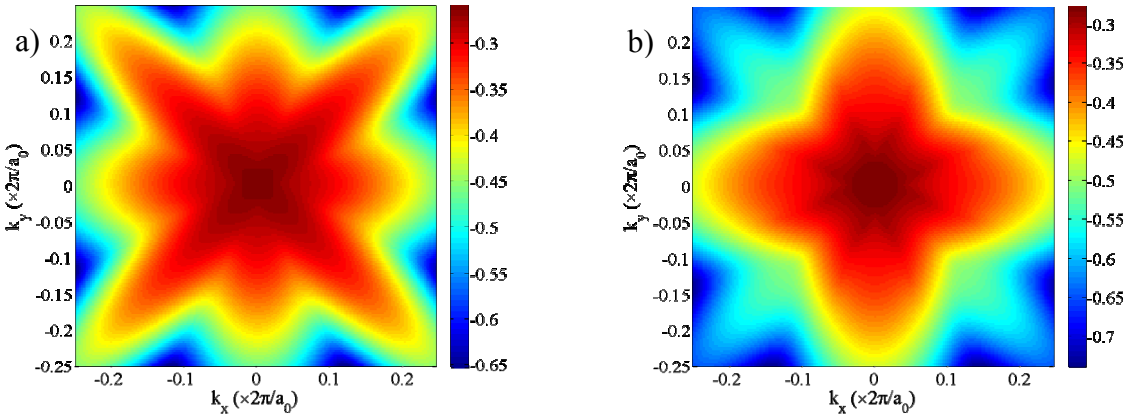

Figure 27 : Energie des bandes de valence du Si non contraint confiné dans le plan (k_x,k_y) a) 1ère bande hh, b) 2e bande lh. Les barres de couleur donnent les valeurs des énergies référencées par rapport au maximum du potentiel.

La Figure 27 montre les relations de dispersion dans le plan de transport pour les deux premières bandes de valence du système confiné par le puits de potentiel représenté sur la Figure 26. On peut les comparer à celles de la Figure 24 et de la Figure 25. La 1ère bande ressemble bien à une projection de la bande hh 3Dk dont on peut apercevoir la projection de 8 lobes : les 4 présents initialement dans le plan $k_z = 0$ ainsi que 4 autres, fruits de la projection des lobes visibles dans les directions <011>, <101> et leurs symétriques sur le plan de confinement. La bande lh montre le même type de caractéristiques, si ce n'est que les lobes apparaissent à des énergies plus élevées et qu'elle est plutôt isotrope autour de Γ.

Dans cette partie nous avons décrit les outils de calcul de structures de bandes qui sont exploités dans les chapitres 3 et 4 de cette thèse. Nous allons maintenant présenter les différents formalismes utilisés pour modéliser le transport, et nous finirons ce chapitre par le détail des algorithmes développés pour prendre en compte une structure de bandes complète et numérique dans un simulateur MC.

2 Modélisation du transport

2.1 L'équation de Boltzmann

Dans l'approche semi-classique, l'étude du transport des porteurs de charge se fait à travers l'évolution de leur fonction de distribution. La fonction de distribution, notée f(**r**,**k**,t), représente la probabilité d'avoir à un instant t un porteur à la position **r** avec un vecteur d'onde **k**. A l'équilibre thermodynamique, elle se résume à une fonction de Fermi-Dirac. La fonction de distribution suffit à la détermination de toutes les grandeurs liées au transport (densité n, vitesse v, énergie E, densité de courant J,…). On a par exemple en 3 dimensions :

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r},t) &= \langle n \rangle = \frac{1}{V}\int f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\mathrm{DOS}(\mathbf{k})d^3k, \quad \text{où V est le volume de normalisation} \\ J(\mathbf{r},t) &= \langle J \rangle = \frac{1}{V}\int J(\mathbf{k})\, f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\mathrm{DOS}(\mathbf{k})d^3k \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

où DOS(**k**) est la densité d'états dans l'espace des **k** ($V/(4\pi^3)$ en 3D). Hors équilibre, l'évolution de f(**r**,**k**,t) est régie par l'équation de Boltzmann, obtenue en faisant un bilan de variation temporelle selon toutes ses dimensions :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar}\cdot\nabla_{\mathbf{k}} f = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} + G(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \tag{2.2.2}$$

où $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ est la vitesse, E(**k**) étant la relation de dispersion,

$\mathbf{F} = \hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt}$ est la force extérieure appliquée,

G(**r**,**k**,t) est le taux net de génération / recombinaison par unité de temps,

$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll}$ est l'intégrale de collision qui décrit la variation de f due aux interactions entre les porteurs et le milieu de propagation.

L'une des difficultés majeures pour la résolution de l'équation de Boltzmann est la détermination de l'intégrale de collision. A un instant t, pour un porteur à la position **r**, il s'agit de déterminer les probabilités d'interaction avec le milieu qui font passer d'un état **k** à un état **k'** et réciproquement.

On peut écrire l'intégrale de collision ainsi :

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = \int \left(s(\mathbf{k'},\mathbf{k}) f(\mathbf{k'}) - s(\mathbf{k},\mathbf{k'}) f(\mathbf{k}) \right) d\mathbf{k'} \tag{2.2.3}$$

où s(**k**,**k'**) représente la densité de probabilité de passage par unité de temps d'un état **k** à un état **k'**,

f(**k**) représente la fonction de distribution en **k** (probabilité d'occupation d'un état **k**).

Les termes s(**k**,**k'**) sont très souvent déterminés par la règle d'or de Fermi [Cohen-Tanoudji2000] :

$$\begin{aligned} & s(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M(\mathbf{k},\mathbf{k}') \right|^2 .DOS(\mathbf{k}').\delta(E_{final} - E') \\ & \text{avec } M(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \langle \mathbf{k}' | H_p | \mathbf{k} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r},\mathbf{k}').H_p.\Psi(\mathbf{r},\mathbf{k}) d\mathbf{r} \end{aligned} \tag{2.2.4}$$

E_{final} est l'énergie après interaction, DOS(**k'**) est la densité d'états **k'**, Ψ(**r**,**k**) est la fonction d'onde du porteur et H_p est l'Hamiltonien de perturbation qui caractérise l'interaction (par exemple couplage életron-phonon, électron-impureté ionisée, …). La probabilité totale P(**k**) pour un porteur de subir une interaction quand il est dans l'état initial **k** peut alors s'écrire :

$$P(\mathbf{k}) = \int s(\mathbf{k},\mathbf{k}') d\mathbf{k}' \tag{2.2.5}$$

Il faut cependant garder à l'esprit que cette approche semi-classique du transport néglige l'aspect ondulatoire des électrons, qui n'est considéré que pour la relation de dispersion et le calcul de l'intégrale de collision. En effet, la propagation des porteurs obéit ici aux lois de Newton pour une particule classique parfaitement localisée dans le temps et l'espace. De ce fait, cette approche n'est valide que si les dimensions caractéristiques des dispositifs étudiés sont grandes devant la longueur d'onde des électrons (quelques nanomètres dans le Si à 300 K) et la longueur de relaxation de phase de la fonction d'onde, i.e. que la cohérence spatiale et temporelle des porteurs est négligeable. Sinon, il est nécessaire de prendre en compte les phénomènes dus à la cohérence comme l'effet tunnel, les réflexions quantiques ou encore les interférences entre porteurs. Cela nécessite d'utiliser un formalisme plus rigoureux, mieux adapté au traitement des systèmes cohérents, comme les fonctions de Green [Datta2000; Do2007a; Do2007b; Venugopal2003] ou de Wigner [Querlioz2006a; Querlioz2006b; Querlioz2007; Shifren2003; Wigner1932]. Dans le cadre d'études de transistor MOS peu épais, on peut également traiter la quantification perpendiculaire avec une approche dite *mode-space* où l'on traite la direction de confinement (perpendiculaire à la direction source-drain) de manière quantique et la direction de transport de manière semi-classique [Saint-Martin2005; Venugopal2002] ou avec le formalisme de Wigner

[Querlioz2006a]. On peut aussi utiliser des « corrections quantiques » au traitement semi-classique [Ferry2000; Jaud2006a; Jaud2006b; Winstead2003], qui sont également utilisées pour la simulation de nanofils [Ghetti2007].

Nous allons maintenant détailler certaines méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann semi-classique.

2.2 Méthode Monte-Carlo

L'une des méthodes utilisées pour résoudre l'équation de Boltzmann dans des conditions fortement hors équilibre consiste à faire des « simulations expérimentales » en traitant un grand nombre de cas possibles (dans notre cas des particules), dont les caractéristiques sont choisies aléatoirement et dont les propriétés évoluent temporellement en obéissant aux lois physiques que l'on veut modéliser (ici l'équation de Boltzmann). La fonction de distribution peut ainsi être reconstituée statistiquement au bout d'un certain temps de simulation.

Dans un simulateur Monte Carlo, on simule la trajectoire d'un grand nombre de particules indépendantes, comme indiqué sur la Figure 28. Les trajectoires sont constituées de vols libres, séparés par des phénomènes d'interaction avec le milieu (ou collision) supposés instantanés, qui modifient brutalement l'état du porteur (vecteur d'onde, vitesse et énergie). On résout ainsi exactement l'équation de Boltzmann pour un système restreint à une particule.

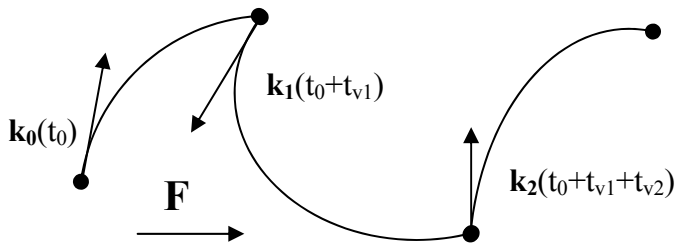

Figure 28 : Décomposition de la trajectoire d'un porteur en vols libres séparés par des interactions supposées instantanées.

Les particules se propagent pendant les vols libres en obéissant aux lois de Newton :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \quad \text{(influence de la force électromagnétique)} \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad \text{(influence de la structure de bandes)} \end{aligned} \tag{2.2.6}$$

Les temps de vol libre t_{vi} sont tirés au sort aléatoirement selon des lois de probabilité issues d'une modélisation physique des matériaux et des interactions entre les porteurs et leur environnement : les fréquences d'interaction, souvent calculées à l'aide de la règle d'or de Fermi (cf. équations (2.2.4) et (2.2.5)).

Toute interaction est caractérisée par sa probabilité et son effet sur l'état du porteur considéré. L'algorithme de Monte Carlo consiste à tirer au sort :

- La durée des vols libres successifs,
- La nature de l'interaction subie (avec un taux d'interaction),
- L'effet de l'interaction sélectionnée (intrinsèquement lié à sa nature).

Un grand nombre de particules sont simulées ainsi et les caractéristiques micro- et macroscopiques telles que l'énergie, la vitesse, la densité ou le courant sont déterminées par le mouvement d'ensemble. Les ingrédients essentiels à une bonne représentation de la physique sont la relation de dispersion E(**k**) et la modélisation des interactions (nature, probabilité, effet). Comme on l'a vu précédemment, la structure de bandes est déjà le résultat de l'interaction entre les porteurs de charge et le potentiel cristallin. De ce fait, les probabilités d'interaction sont intrinsèquement liées à la structure de bandes du matériau.

Dans le cadre de dispositifs quantiques (diodes tunnel résonantes) ou de transistors aux dimensions très réduites ($L_G < 10$ nm), la méthode Monte Carlo peut également être utilisée pour résoudre l'équation de Wigner, équivalent ondulatoire de l'équation de Boltzmann, moyennant des adaptations complexes et ingénieuses [Querlioz2006a; Querlioz2007].

Enfin, pour les calculs auto-cohérents, l'algorithme Monte Carlo est couplé à l'équation de Poisson résolue sur un maillage de l'espace réel [Brisset1994].

Si la méthode MC permet de résoudre exactement l'équation de Boltzmann de manière statistique, elle est en revanche numériquement lourde en termes de mémoire et de temps de calcul. C'est pourquoi des approches utilisant des modèles plus simples moyennant certaines approximations sont également utilisées pour la simulation de composants.

2.3 Lien avec les modèles haut niveau : Dérive/Diffusion

L'équation de Boltzmann est une équation intégro-différentielle difficile à résoudre et cela nécessite des ressources informatiques assez grandes quand il s'agit d'étudier des dispositifs à plus d'une direction dans l'espace réel. C'est pourquoi des approches simplifiées ont été développées, fondées sur des approximations de certains termes de l'équation de

Boltzmann. Ces modèles sont dits de haut niveau par comparaison aux approches plus proches de la physique à l'œuvre dans les composants, dites de bas niveau. Ils permettent de concevoir les composants et d'optimiser leurs paramètres avec plus de souplesse que les méthodes plus exactes mais numériquement lourdes (comme la méthode MC). Généralement, les paramètres des modèles de haut niveau sont ajustés sur des données expérimentales et sur les résultats de modèles plus rigoureux dans des cas simples.

2.3.1 Temps de relaxation

L'idée de l'approche dérive/diffusion est de simplifier le terme le plus problématique de l'équation de Boltzmann, à savoir l'intégrale de collision :

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = -\frac{f - f_{eq}}{\tau} \tag{2.2.7}$$

où τ est le temps de relaxation moyen et f_{eq} est la fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique. En régime stationnaire, dans le cas d'un matériau uniformément dopé, à température constante et en négligeant les processus de génération/recombinaison, l'équation de Boltzmann se simplifie sous la forme :

$$\frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \frac{f - f_{eq}}{\tau} = 0 \tag{2.2.8}$$

Sous faible champ, les porteurs se trouvent a priori toujours dans un état proche de l'équilibre. Les fonctions de distribution solutions de (2.2.8) ont alors une forme proche de $f(\mathbf{k}) = f_{eq}(\mathbf{k}-\mathbf{k_0})$ où $\mathbf{k_0}$ est le vecteur d'onde moyen, non nul du fait de la présence d'un champ. Dans le cadre de l'approximation parabolique de la relation de dispersion (masse effective m*), ces fonctions sont des « maxwelliennes » (ou gaussiennes) déplacées, dont la largeur peut éventuellement augmenter avec la température du gaz de porteurs. Dans l'approximation « faible champ », la vitesse moyenne des porteurs varie alors linéairement avec le champ électrique appliqué, proportionnellement à la mobilité effective $\mu_{eff} = |q|\tau/m^*$ définie au chapitre 1. C'est le terme de dérive.

2.3.2 Equations de Dérive/Diffusion

En couplant l'équation (2.2.8) aux équations de continuité, de diffusion et à l'équation de Poisson, on obtient les équations linéaires de base du modèle de dérive/diffusion pour les électrons et les trous :

$$\begin{aligned}
&\mathbf{J_n}(\mathbf{r},t) = |q| D_n \nabla n(\mathbf{r},t) + |q| n(\mathbf{r},t) \mu_n \mathbf{E} && \text{(diffusion et conduction d'électrons)}\\
&\mathbf{J_p}(\mathbf{r},t) = -|q| D_p \nabla p(\mathbf{r},t) + |q| p(\mathbf{r},t) \mu_p \mathbf{E} && \text{(diffusion et conduction de trous)}\\
&\frac{\partial n}{\partial t} = G_n(\mathbf{r},t) + \frac{1}{|q|} \nabla \mathbf{J_n}(\mathbf{r},t) && \text{(conservation des électrons)}\\
&\frac{\partial p}{\partial t} = G_p(\mathbf{r},t) - \frac{1}{|q|} \nabla \mathbf{J_p}(\mathbf{r},t) && \text{(conservation des trous)}\\
&\nabla(\varepsilon_{sc} \mathbf{E}) = |q| \left(p(\mathbf{r},t) - n(\mathbf{r},t) + N_D + N_A \right) && \text{(Poisson)}\\
&D_n = \frac{k_B T}{|q|} \mu_n, D_p = \frac{k_B T}{|q|} \mu_p && \text{(relations d'Einstein)}
\end{aligned} \tag{2.2.9}$$

Les indices n et p représentent respectivement les électrons et les trous. n(**r**,t) et p(**r**,t) sont les densités de porteurs, **J** est la densité de courant de porteurs, D le coefficient de diffusion, μ la mobilité effective, |q| la charge élémentaire, N_D et N_A les dopages respectifs en ions donneurs et accepteurs d'électrons. $G_n(\mathbf{r},t)$ et $G_p(\mathbf{r},t)$ dépendent des modèles de génération/recombinaison utilisés suivant le régime de conduction et les matériaux considérés.

Les équations de dérive/diffusion sont utilisées dans la plupart des simulateurs commerciaux de type TCAD (*Technology Computer Aided Design*). Elles permettent d'obtenir rapidement les densités de courant et les concentrations de porteurs. On peut remarquer que la mobilité des porteurs joue un rôle central dans ces équations. La détermination et la modélisation de ce paramètre doivent donc faire l'objet d'un soin particulier. Ainsi, nous allons maintenant détailler les différentes manières de l'appréhender.

2.3.3 Modèles de mobilité

2.3.3.1 Calcul Kubo-Greenwood

Considérons l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation (dépendant du vecteur d'onde). A l'état stationnaire, dans un milieu homogène (température et dopage) d'après les équations (2.2.1) et (2.2.8), on obtient pour le courant :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = q\langle n\, v\rangle = q\int n(\mathbf{k})\mathbf{v}(\mathbf{k})\left(f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})\right) d^3\mathbf{k} \tag{2.2.10}$$

où q est la charge des porteurs considérés (signée), n leur densité et f_0 est leur fonction de distribution à l'équilibre (Fermi-Dirac ou Boltzmann selon les approximations). Or, à faible champ, on peut considérer qu'on s'éloigne peu de l'équilibre, on obtient alors :

$$\nabla_{\mathbf{k}} f \approx \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \tag{2.2.11}$$

où E(**k**) est l'énergie des porteurs (issue de la structure de bandes, tout comme **v**(**k**)) D'après (2.2.8), on a :

$$f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) = \frac{\partial f_0}{\partial E}\tau(\mathbf{k})\mathbf{F}\cdot\mathbf{v}(\mathbf{k}) \tag{2.2.12}$$

On obtient pour la densité de courant :

$$\mathbf{J} = q\mathbf{F}\cdot\int n(\mathbf{k})\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E}\tau(\mathbf{k})\mathbf{v}(\mathbf{k})\times\mathbf{v}(\mathbf{k})d^3\mathbf{k} \tag{2.2.13}$$

Si l'on exprime le courant en fonction de la mobilité –soit $\mathbf{J} = q^2\langle n\rangle\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}$, où **E = F**/q est le champ électrique et **μ** est le tenseur de mobilité (de dimension 3×3 en 3D) – on obtient la formulation de Kubo-Greenwood :

$$\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E} = \frac{\mathbf{J}}{q^2\langle n\rangle} = \frac{\int n(\mathbf{k})\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E}\tau(\mathbf{k})\mathbf{v}(\mathbf{k})\times\mathbf{v}(\mathbf{k})d^3\mathbf{k}}{\int n(\mathbf{k})f_0(\mathbf{k})d^3\mathbf{k}}\cdot\mathbf{E} \tag{2.2.14}$$

Cette formulation, ici exprimée pour un gaz 3Dk est adaptable au gaz bidimensionnel (confiné). Le temps de relaxation total est généralement obtenu *via* la loi de Mathiessen, qui permet de tenir compte de l'influence de chaque phénomène i (interactions avec les phonons, impuretés, etc…) en sommant les probabilités d'événements considérés indépendants les uns des autres :

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \tag{2.2.15}$$

On peut ainsi retrouver l'expression bien connue $\mu = |q|<\tau>/m^*$ en faisant l'approximation de la masse effective (bandes paraboliques isotropes) et l'approximation de Boltzmann pour la fonction de distribution.

Le formalisme Kubo-Greenwood ne permet de calculer la mobilité que dans des conditions restreintes aux très faibles champs. Ainsi, afin d'étendre le domaine de validité de la mobilité, de nombreux modèles empiriques ont été développés.

2.3.3.2 Modèles empiriques

Afin de modéliser le transport et la saturation de la vitesse aux forts champs parallèles (i.e. dans la direction du canal), on peut utiliser des modèles de mobilité dépendant du champ local $\mu(\mathbf{E}_{//})$, comme par exemple la formulation suivante [Caughey1967] :

$$\mu\left(\mathbf{E}_{//}\right)=\frac{\mu_0}{\left[1+\left(\frac{\left|\mathbf{E}_{//}\right|}{E_{sat}}\right)^{\beta}\right]^{1/\beta}},\ E_{sat}=\frac{v_{sat}}{\mu_0} \tag{2.2.16}$$

où μ_0 est la mobilité faible champ, E_{sat} est le champ de saturation de la vitesse lié à la vitesse de saturation v_{sat} à fort champ mesurable expérimentalement ($v_{sat} \approx 10^5$ m/s dans le Silicium non dopé à 300 K [Landolt-Börnstein1982]) et β est un paramètre d'ajustement lié au dopage ($\beta \approx 0{,}5$ à 2 dans le Silicium). Dans le cadre de couches interfaciales de conduction dans une capacité MOS, il existe également des modèles de mobilité dépendant du champ transverse $\mathbf{E}_{\perp}$ ayant la même forme mais avec d'autres paramètres empiriques pour prendre en compte l'influence de la rugosité d'interface [Lombardi1988].

En général, la mobilité est obtenue par la loi de Mathiessen comme pour les temps de relaxation (équation (2.2.15)) :

$$\frac{1}{\mu}=\sum_i \frac{1}{\mu_i} \tag{2.2.17}$$

Ainsi, le développement de modèles de mobilité précis devient de plus en plus important du fait de l'utilisation de technologies nouvelles et de matériaux alternatifs. Cependant, pour l'étude du transport en régime fortement hors équilibre, où les fonctions de distribution ne sont plus du tout de forme gaussienne, ce type d'approche devient trop approximatif car il néglige les effets non stationnaires. Il existe pourtant des modèles « mimant » les effets non stationnaires (survitesse) qui permettent de continuer à utiliser les équations de dérive/diffusion en intervenant notamment sur l'expression de v_{sat} [Houlet1999; Kampen2008].

Afin d'être représentatifs des technologies avancées, les paramètres des modèles empiriques de mobilité sont ajustés sur de nombreuses données expérimentales. Ainsi, nous allons maintenant nous intéresser aux méthodes expérimentales d'extraction de mobilité.

2.3.4 Extraction de mobilité

2.3.4.1 Mobilité effective

La mobilité effective μ_{eff} est extraite des caractéristiques électriques des transistors en régime ohmique (ou linéaire), i.e. à faible tension de drain. Dans les transistors longs, l'extraction se fait le plus souvent par une mesure couplée de courant et de capacité (méthode communément appelée « split C-V »). Elle permet d'extraire la densité d'inversion N_{inv} pour toute polarisation de grille V_{GS}. μ_{eff} est alors obtenue par la relation :

$$\mu_{eff} = \frac{L_{eff}}{W} \frac{I_D}{qN_{inv}V_{DS}} \tag{2.2.18}$$

où W est la largeur du dispositif et L_{eff} la longueur effective du canal, i.e. la longueur de canal effectivement contrôlée par la grille. La mobilité extraite de cette manière suit une loi universelle quand elle est tracée en fonction du champ effectif E_{eff} qui s'écrit (sur substrat massif) :

$$E_{eff} = \frac{N_{dep} + \eta N_{inv}}{\varepsilon_0 \varepsilon_{sc}} \tag{2.2.19}$$

où N_{dep} est la charge de désertion et η un paramètre valant 1/2 pour les électrons et 1/3 pour les trous (empirique) dans du Silicium [Ando1982]. Les charges de désertion et d'inversion sont obtenues en intégrant respectivement les capacités grille-canal et grille-substrat sur le canal. Elles dépendent donc également de L_{eff}. Les mesures de mobilités effectives qui font généralement référence dans du Si non contraint [Takagi1994a; Takagi1994b] sont reproduites sur la Figure 29.

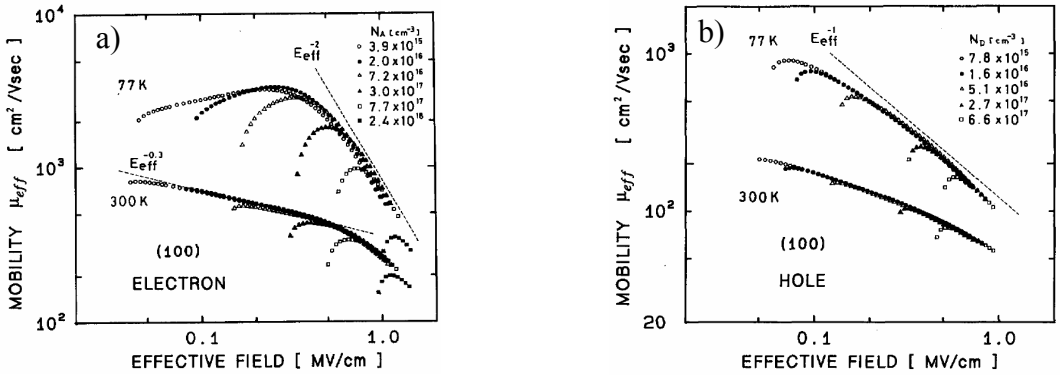

Figure 29 : [Takagi1994a] Mobilité effective dans des MOSFET conventionnels longs en fonction du champ effectif à T = 77 K et 300 K et pour différents dopages du substrat, a) électrons, b) trous. La direction de transport est <011> et l'orientation du substrat (100)

Les mesures effectuées ainsi sont faussées à faible tension de grille (proche et sous le seuil), probablement à cause des capacités parasites qui deviennent dominantes devant la capacité d'inversion. Dans le cas des transistors longs, L_{eff} est souvent assimilée à la longueur de grille. Toutefois, la détermination de la longueur effective de canal devient problématique dans le cas de dispositifs courts, ce qui entraîne de fortes incertitudes sur la mobilité effective. Une méthode précise d'extraction de L_{eff} dans les transistors courts, fondée sur le split C-V, a été mise au point pour extraire L_{eff} indépendamment de la mobilité et réciproquement

[Romanjek2004]. Elle donne des résultats fiables à 10% environ pour les fortes densités d'inversion (20% pour $N_{inv} = 10^{12}$ cm^{-2}) [Andrieu2005]. Cependant, du fait qu'elle nécessite une référence de transistor canal long, elle n'est pas valide pour des technologies non optimisées ou très avancées, pour lesquelles l'épaisseur d'oxyde varie avec la longueur de grille.

D'autres méthodes d'extraction de μ_{eff} à partir des caractéristiques I_D-V_{GS} à faible V_{DS} sont également utilisées. On peut citer entre autres (par ordre de complexité) les méthodes de Hamer [Hamer1986], de « Shift & ratio » [Rim2002; Taur1992], de Mc Larthy [McLarty1995] et de la fonction Y [Ghibaudo1988].

La méthode de Hamer repose sur la formulation suivante du courant :

$$I_D = \frac{W}{L_{eff}} C_{GS} \mu_{eff} \frac{(V_{GS} - V_T)}{1 + \theta_1 (V_{GS} - V_T)} V_{DS} \tag{2.2.20}$$

où C_{GS} est la capacité effective de grille. Les grandeurs à ajuster sont θ_1 et μ_{eff}. θ_1 traduit essentiellement l'influence des résistances série. On peut approximativement déduire la résistance série à partir de μ_{eff} et de θ_1 :

$$R_{série} \approx \frac{L_{eff}}{C_{GS} \mu_{eff} W} \theta_1 \tag{2.2.21}$$

Cette méthode est simple et efficace, mais la mobilité extraite de cette manière est assez dépendante des paramètres initiaux (C_{GS}, L_{eff}) et de la plage de mesure considérée.

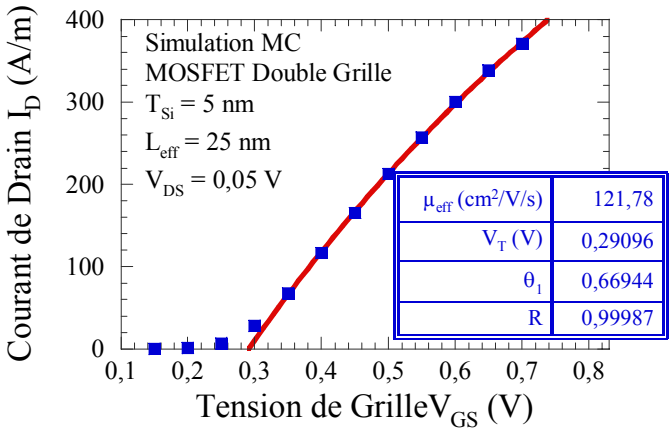

Figure 30 : Exemple d'extraction de μ_{eff} avec la méthode de Hamer à partir de simulations MC. La capacité effective de grille est extraite des simulations MC.

La méthode de la fonction Y est également fondée sur cette approche et donne des résultats comparables à celle de Hamer, notamment pour les fortes densités d'inversion. Elle permet de s'affranchir de l'effet de la résistance série en utilisant une mesure de transconductance g_m.

Les inconvénients majeurs des méthodes d'extraction de mobilité effective sont les suivantes :

- Leur limitation au régime au dessus du seuil,
- La nécessité de connaître la longueur effective du canal, assez difficile à déterminer avec précision dans les transistors courts.

C'est pourquoi une autre grandeur ne souffrant pas de ces limitations est de plus en plus utilisée pour caractériser les performances des dispositifs courts : la mobilité de magnétorésistance.

2.3.4.2 Mobilité de magnétorésistance

La mesure de magnétorésistance est fondée sur la réponse électrique du dispositif étudié à un champ magnétique uniforme dans la direction transverse au plan de transport [Meziani2004]. Les conditions types de la mesure sont schématisées sur la Figure 31.

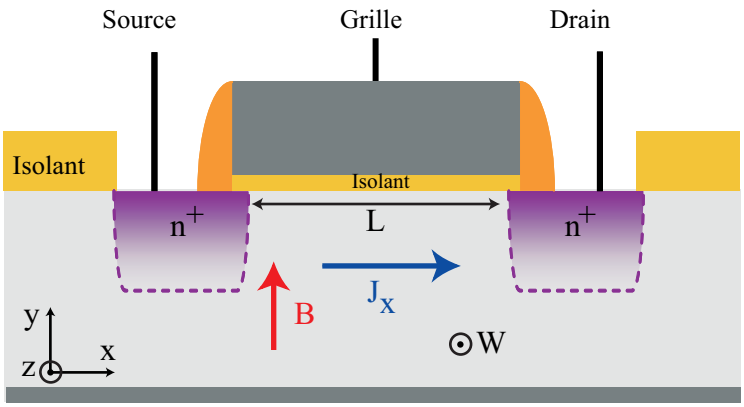

Figure 31 : Conditions de mesure de magnétorésistance d'un nMOSFET. La largeur W du transistor est grande devant sa longeur (W >> L).

Afin de bien mesurer une magnétorésistance, il faut court-circuiter la tension de Hall qui s'établit dans la direction perpendiculaire au plan défini par l'induction magnétique **B** et le flux de courant **J** (i.e. la direction z perpendiculaire au plan (x,y) ici). Cela implique d'annuler le champ électrique dans cette direction en considérant une largeur W du transistor grande devant sa longueur L, ce qui est le cas dans les transistors en technologie planaire.

Considérons l'équation de conservation du moment dans l'approximation du temps de relaxation en tenant compte du champ magnétique appliqué :

$$m^* \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = q\,\mathbf{E} + q\,\mathbf{v}(t) \times \mathbf{B} - \frac{m^*}{\langle \tau \rangle}\mathbf{v}(t) \tag{2.2.22}$$

A l'état stationnaire ($d\mathbf{v}/dt = 0$), sous faible champ E_X, avec $E_Y = 0$ (car W>>L) et sous faible $B = B_Y$, on obtient [Ashcroft1976; Meziani2004] :

$$v_x = \frac{\frac{q\langle \tau \rangle}{m^*} E_X}{1 + \left(\frac{q}{m^*}\right)^2 \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle} B_Y^2} \tag{2.2.23}$$

On définit alors la mobilité de magnétorésistance :

$$\mu_{MR} = \frac{|q|}{m^*}\sqrt{\frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle}} \tag{2.2.24}$$

On obtient pour le courant :

$$J_X = qnv_x = \frac{\sigma_0 E_X}{1 + \mu_{MR}^2 B_Y^2} \tag{2.2.25}$$

où $\sigma_0 = |q|n\mu_{eff}$ est la conductivité du dispositif, inversement proportionnelle à sa résistivité ρ_0 en régime ohmique (faible V_{DS}). Ainsi, l'influence du champ magnétique peut être interprétée comme une variation de résistivité du dispositif, relativement simple à mesurer quelle que soit la densité d'inversion. La magnétorésistance du transistor est définie comme la variation ΔR_{ch} de résistance du canal en fonction du champ magnétique ($R_{ch0} = R_{ch}(B_Y = 0)$) :

$$\frac{\Delta R_{ch}(B_Y)}{R_{ch0}} = \frac{R_{ch}(B_Y) - R_{ch0}}{R_{ch0}} = -\frac{\Delta J(B_Y)}{J_0} = \mu_{MR}^2 B_Y^2 \tag{2.2.26}$$

Il faut rappeler que cette mesure, tout comme celle de la mobilité effective, reste limitée au régime linéaire de variation de résistance, i.e. $\mu_{MR}^2 B^2 << 1$, soit typiquement pour des champs inférieurs à quelques Teslas dans le Silicium.

On voit que la magnétorésistance s'obtient par une mesure différentielle du courant à différents champs magnétiques, sans besoin de la connaissance de la densité d'inversion ou de la longueur effective de canal comme dans le cas de la mobilité effective. La Figure 32 représente un exemple d'extraction de magnétorésistance dans un dispositif de type FDSOI, ainsi qu'un exemple de magnétorésistance relative mesurée à différentes densités d'inversion [Chaisantikulwat2006].

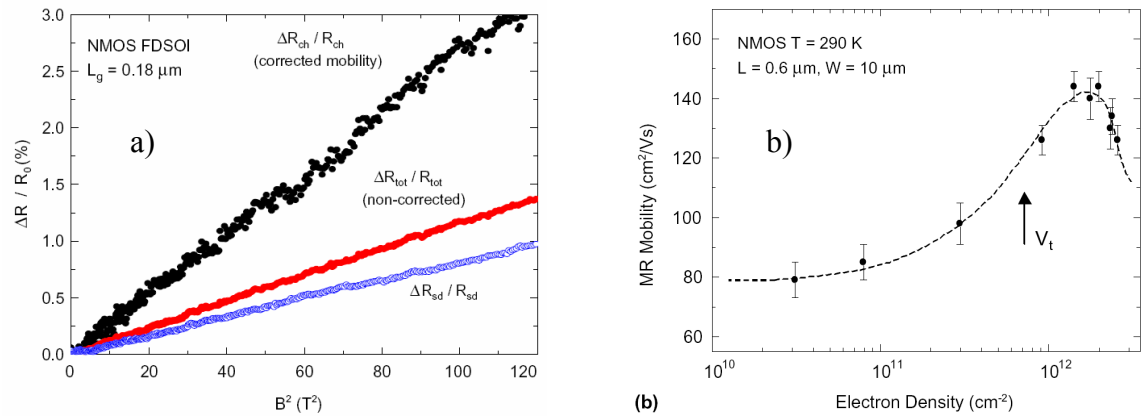

Figure 32 : [Chaisantikulwat2006] Mesures sur dispositif FDSOI de type N à T = 290 K, a) caractéristique type de magnétorésistance avec correction des résistances d'accès, b) mobilité de magnétorésistance en fonction de la densité d'inversion, on voit que l'on peut obtenir une mesure bien en dessous du seuil V_T.

Cependant, il ne faut pas négliger l'influence des résistances d'accès au canal qui peuvent perturber la mesure, notamment dans les dispositifs sur SOI à film ultra-mince. En effet, la variation de résistance mesurée est celle de la totalité du dispositif, accès inclus. Quand la résistance du canal est dominante sur le courant comme dans le cas de dispositifs sur substrat massif, les accès ont peu d'importance. En revanche, dans les transistors peu épais de type FDSOI ou double grille planaire, la résistance du canal est intrinsèquement faible et les résistances série sont loin d'être négligeables. Afin de s'affranchir de la contribution des accès à la mesure, une méthode de mesure différentielle utilisant 2 transistors de dimensions comparables a été développée [Chaisantikulwat2006] (cf. Figure 32a).

Toutes ces approches reposent essentiellement sur des hypothèses de transport purement stationnaires. Du fait des dimensions très réduites des transistors, le transport dans les dispositifs devient fortement non stationnaire. La vitesse des porteurs dans le canal peut dépasser la vitesse de saturation dans le matériau car le temps de transit devient faible devant le temps de relaxation de la vitesse. Le cas extrême où les porteurs ne subissent aucune interaction est le régime balistique. Le régime de transport situé entre le purement stationnaire (dérive/diffusion) et le balistique est appelé quasi-balistique. Ainsi, nous allons maintenant aborder les modèles utilisés pour décrire ces régimes de transport.

2.4 Prise en compte des effets non stationnaires

Quand les dimensions caractéristiques des dispositifs deviennent de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen (environ 15 nm dans le Si non dopé), le transport est dans le régime mésoscopique (conservation de la cohérence de phase) et peut être décrit par la théorie des flux [Datta1995; Lundstrom2000]. Cette approche permet de calculer le courant en considérant les flux injectés par les contacts (réservoirs) et les coefficients de transmission / rétrodiffusion intrinsèques au dispositif, comme illustré sur la Figure 33a. Le courant est défini par le flux net :

$$I_D = qWJ_{net} = qW\left(TJ^+(x_{max}) - T'J^-(L)\right) \qquad (2.2.27)$$

où T = (1-R) et T' = (1-R') sont les coefficients de transmission définis sur la Figure 33a.

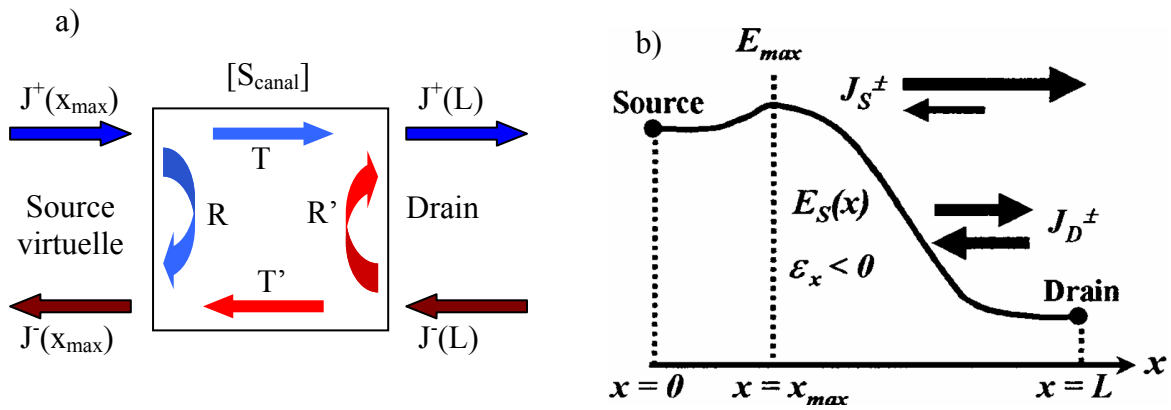

Figure 33 : a) [Lundstrom2000] Schéma de l'approche par la théorie des flux. Les accès sont considérés comme parfaitement absorbants. J : flux de porteurs, L : longueur du canal, T et R tels que T = (1-R) : coefficients de transmission et rétrodiffusion du canal. S_{canal} : matrice de transfert, b) [Rhew2002] application au cas du MOSFET 1D avec la bande de conduction le long du canal.

Afin d'illustrer cette approche, on se place dans le cas du nMOSFET unidimensionnel en considérant une statistique de Boltzmann (pour un gaz d'électrons non dégénéré). On voit sur la Figure 33b un profil de bande de conduction typique dans la direction Source / Drain quand V_{DS} et V_{GS} sont strictement positifs. Le flux de porteurs est décomposé en deux composantes, l'une à vitesse positive (J^+), l'autre à vitesse négative (J^-). La position (x_{max}, E_{max}) représente le sommet de la barrière, dont la hauteur relativement au potentiel de source (hauteur de barrière) définit la distribution de porteurs injectés de la source au canal. En effet, seuls les porteurs ayant une énergie supérieure à celle du sommet de la barrière sont

injectés. La source virtuelle est ainsi définie comme la zone allant du contact au sommet de la barrière (position x_{max}). La densité de porteurs n_S au sommet de la barrière peut s'écrire :

$$n_S = n_S^+ + n_S^- = n_S^+\left(1+\frac{n_S^-}{n_S^+}\right) \tag{2.2.28}$$

2.4.1 Cas balistique

Dans le cas non dégénéré et dans l'approximation de la masse effective, la fonction de distribution à l'équilibre thermique est de type gaussien (ou maxwellien). En considérant uniquement la proportion des porteurs à vitesse positive pour obtenir le flux de porteurs injectés dans le cas balistique, la vitesse moyenne s'écrit :

$$v^+(x_{max}) = \frac{\int_0^\infty vf(v)dv}{\int_0^\infty f(v)dv} = \sqrt{\frac{2k_BT}{\pi m^*}} = v_{th} \tag{2.2.29}$$

On a la même expression pour les porteurs injectés par le drain $v^-(L) = v_{th}$.

Dans le cas balistique, le flux injecté par la source est accéléré par le champ alors que celui injecté par le drain est ralenti et rétrodiffusé par la barrière. En résolvant l'équation de Boltzmann balistique [Saint-Martin2005], on obtient T = 1 et T' s'écrit :

$$T' = \frac{n_S^-}{n_S^+} = e^{-\Delta E_c/k_BT} = e^{-qV_{DS}/k_BT} \tag{2.2.30}$$

Les flux positifs et négatifs s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} TJ^+(x_{max}) &= J_{bal}^+ = n_S^+ v_{th} \\ T'J^-(L) &= J_{bal}^- = n_S^- v_{th} \end{aligned} \tag{2.2.31}$$

En faisant maintenant l'approximation qu'au dessus de la tension de seuil V_T, la charge d'inversion est parfaitement contrôlée par la grille (i.e. $qn_S = C_{GS}(V_{GS}-V_T)$ indépendante de V_{DS}), on obtient pour le courant balistique [Lundstrom2002b] :

$$I_D^{bal} = qW\left(J_{bal}^+ - J_{bal}^-\right) = WC_{GS}\left(V_{GS}-V_T\right)v_{th}\frac{1-e^{-qV_{DS}/k_BT}}{1+e^{-qV_{DS}/k_BT}} \tag{2.2.32}$$

On observe notamment que le courant ne dépend plus de la longueur de canal, contrairement au cas diffusif. En effet, l'énergie cinétique finale des porteurs ne dépend pas du champ parallèle dans le canal. Elle n'est plus fixée que par la différence de potentiel entre le sommet de la barrière et le drain (hauteur de barrière) car il n'y aucun phénomène diffusif.

De ce fait, la vitesse finale et le courant sont logiquement indépendants de la distance parcourue.

Dans les cas limites de faible et fort V_{DS}, on obtient les formulations approchées :

$$V_{DS} \ll k_B T \text{ (ohmique)}, \qquad I_D^{bal} = WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right) v_{th} \left(\frac{q}{k_B T}\frac{V_{DS}}{2}\right)$$
$$V_{DS} \gg k_B T \text{ (source de courant)}, \qquad I_D^{bal} = WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right) v_{th} \qquad (2.2.33)$$

2.4.2 Cas quasi-balistique

La solution obtenue dans le cas balistique est issue de la résolution exacte de l'équation de Boltzmann balistique. Pour tenir compte simplement de la rétrodiffusion dans le canal, on définit un nouveau paramètre, le coefficient de rétrodiffusion du canal R_C. C'est la fraction de porteurs injectés par la source qui sont rétrodiffusés uniquement par le canal. Dans ce formalisme approché, la contribution du drain n'est pas prise en compte dans R_C.

En considérant également que le coefficient de transmission intrinsèque de la source au drain est le même que du drain à la source, la densité de porteurs s'écrit de la manière suivante [Lundstrom2002b] :

$$n_S = \frac{J_{bal}^+}{v_{th}} + R_C \frac{J_{bal}^+}{v_{th}} + \left(1 - R_C\right)\frac{J_{bal}^-}{v_{th}} = \left(1 + R_C\right)\frac{J_{bal}^+}{v_{th}} + \left(1 - R_C\right)\frac{J_{bal}^-}{v_{th}} = n_S^+ + n_S^- \qquad (2.2.34)$$

où l'on a sommé la contribution injectée par la source, celle rétrodiffusée par le canal et celle injectée par le drain qui a pu remonter la barrière.

De la même manière que dans le cas balistique, on obtient alors pour le courant :

$$I_D = qW\left(J^+ - J^-\right) = WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right) v_{th} \left(\frac{1 - R_C}{1 + R_C}\right) \frac{1 - e^{-qV_{DS}/k_B T}}{1 + \left(\frac{1 - R_C}{1 + R_C}\right) e^{-qV_{DS}/k_B T}} \qquad (2.2.35)$$

A fort V_{DS}, la contribution injectée par le drain est négligeable car la barrière entre le drain et le canal est grande devant l'énergie thermique. En revanche, à faible V_{DS}, elle est de l'ordre de la contribution de la source. On obtient les approximations suivantes au premier ordre en développant les termes exponentiels dans les cas limites :

$$V_{DS} \ll k_B T, \quad I_D = WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right) v_{th} \left(1 - R_C\right)\left(\frac{q}{k_B T}\frac{V_{DS}}{2}\right)$$
$$V_{DS} \gg k_B T, \quad I_D = WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right)\left(\frac{1 - R_C}{1 + R_C}\right) v_{th} \qquad (2.2.36)$$

La solution obtenue dans ce cas est essentiellement une adaptation du cas balistique au cas quasi-balistique. Il faut bien garder à l'esprit que la modélisation de la rétrodiffusion dans ce formalisme n'est qu'une approche simplifiée. De manière plus générale, on définit une vitesse d'injection liée à v_{th} pour écrire le courant :

$$\begin{aligned} I_D &= WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right)v_{inj} \\ v_{inj} &= B_{eff}v_{th} \end{aligned} \tag{2.2.37}$$

où B_{eff} est le coefficient de balisticité effective, qui s'écrit également :

$$B_{eff} = \frac{I_D}{I_D^{bal}} \tag{2.2.38}$$

La dépendance du courant à la longueur de canal se trouve contenue dans le coefficient de rétrodiffusion du canal R_C. Ce dernier dépend d'un libre parcours moyen λ_{lpm} et d'une longueur effective du canal L_{eff} par une relation du type [Datta1995; Lundstrom2000] :

$$R_C = \frac{1}{1 + \lambda_{lpm}/L_{eff}} \tag{2.2.39}$$

Le libre parcours moyen correspond à un temps de relaxation moyen dans le dispositif et la longueur effective à une distance au-delà de laquelle les porteurs ne peuvent plus être rétrodiffusés vers la source. λ_{lpm} et L_{eff} sont des paramètres élégants, mais difficiles à quantifier, notamment dans les dispositifs courts. Ils semblent liés et dépendent beaucoup des conditions de polarisation [Clerc2006; Fuchs2005] et ont fait l'objet de beaucoup d'études. Certains auteurs [Lundstrom2002a] ont suggéré d'estimer L_{eff} par la longueur nécessaire à la bande de conduction pour s'abaisser d'une valeur de k_BT/q après le sommet de la barrière (la « *kT layer* »), ce qui suggère que seul le début du canal est important. Des études par simulation Monte Carlo [Riolino2006; Saint-Martin2004b] et fonctions de Green [Svizhenko2003] ont cependant montré l'importance de la prise en compte les rétrodiffusions dans tout le canal pour modéliser correctement le transport quasi-balistique.

Les effets non stationnaires sont dominants dans les transistors étudiés pour les prochains nœuds technologiques. Or, la simulation MC est l'outil idéal pour étudier le transport quasi-balistique du fait qu'elle permet de résoudre exactement l'équation de Boltzmann et permet un suivi des porteurs de charges grâce à son aspect particulaire. Afin de coupler ces atouts à une modélisation rigoureuse des matériaux, nous avons adapté MONACO pour la prise en compte d'une structure de bandes complète. Nous allons maintenant en présenter les détails.

3 Structure de bandes et simulateur Monte Carlo

Dans cette partie, nous abordons la mise en œuvre de la méthode Monte Carlo couplée à l'équation de Poisson dans le simulateur MONACO, développé au sein de l'IEF. La prise en compte d'une structure de bandes complète implique une tabulation de la relation de dispersion qui a mené à des modifications de l'algorithme initial. Les principaux aspects à étudier pour passer des bandes analytiques à des bandes tabulées sont le maillage, l'intégration de ZB (calcul de densité d'états) et enfin la gestion des interactions. Il faut préciser que les nouveaux développements alourdissent le simulateur qui est aujourd'hui plus gourmand en espace mémoire (2 GB nécessaires au lieu de 100 MB) et plus lent (facteur 20 sur les temps de simulation). Néanmoins, certains algorithmes peuvent encore être optimisés, notamment la propagation des porteurs et la gestion de la réflexion spéculaire aux interfaces.

3.1 Algorithme général

L'algorithme général de MONACO est présenté sur la Figure 34.

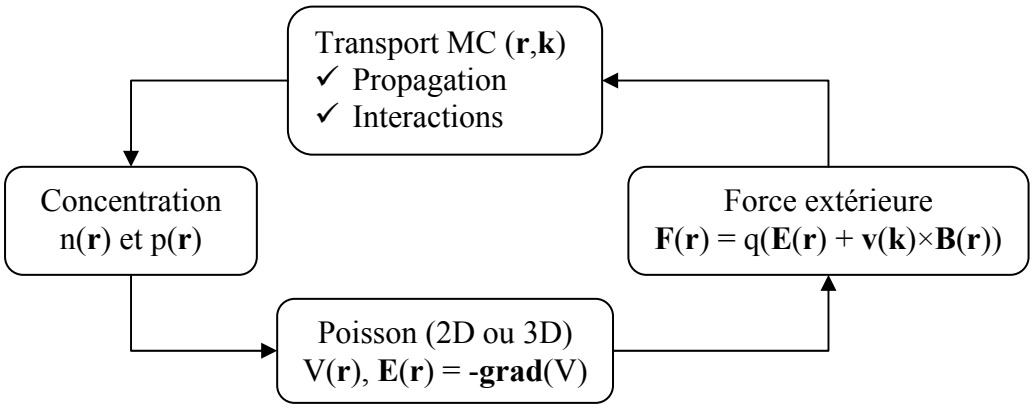

Figure 34 : Algorithme MONACO 3D auto-cohérent.

L'auto-cohérence entre le transport des porteurs et le potentiel électrostatique est assurée par une résolution numérique régulière de l'équation de Poisson. Le pas de temps et le maillage de l'espace réel pour cette résolution sont choisis respectivement inférieurs au temps de relaxation diélectrique et à la longueur de Debye [Brisset1994]. Le potentiel est fixé aux électrodes (condition de Dirichlet). La condition de neutralité électrique est assurée aux mailles adjacentes aux contacts ohmiques en assurant une densité de porteurs majoritaires constante et égale à la densité d'impuretés ionisées. Le nombre de particules injectées dans ces mailles à chaque pas de temps est calculé pour pallier tout défaut de densité de porteurs, et

leur vitesse est tirée au sort sur une distribution maxwellienne pondérée par la vitesse (contacts à l'équilibre thermodynamique).

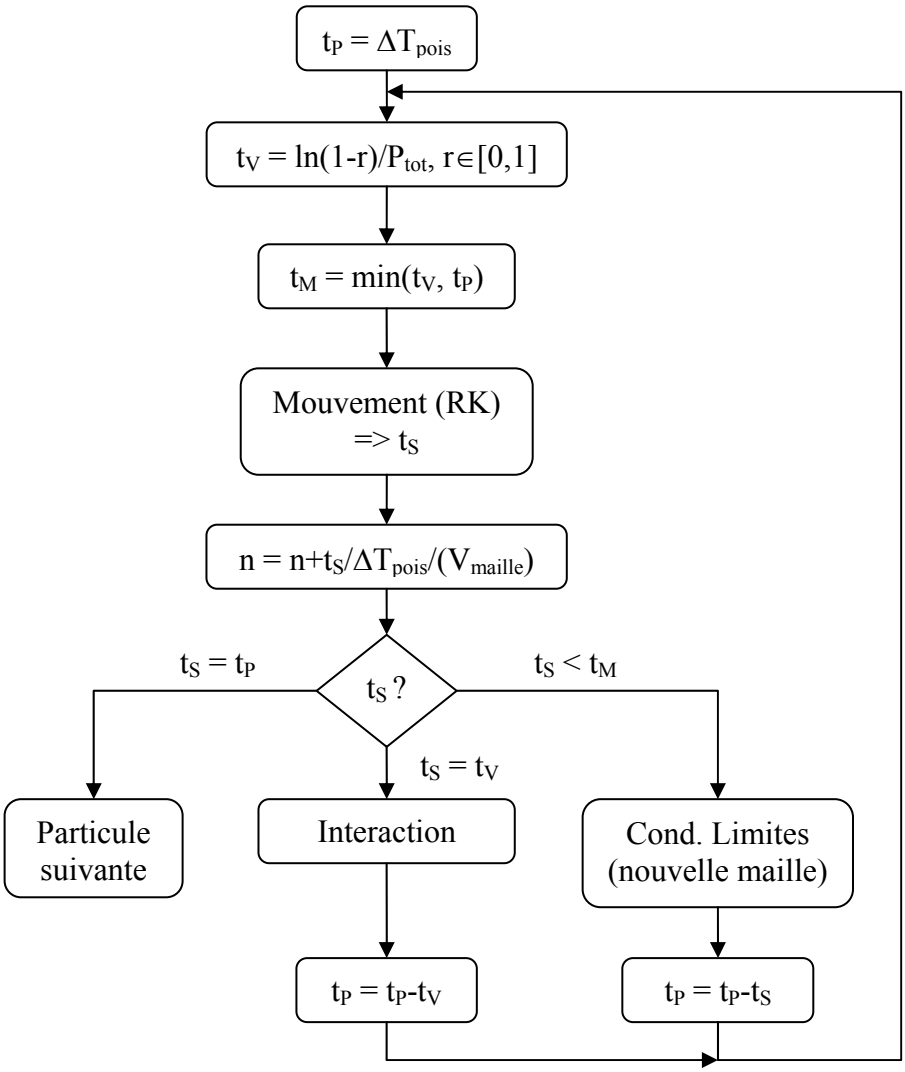

Figure 35 : Algorithme de traitement de transport d'une particule entre 2 résolutions de Poisson, r : variable aléatoire tirée au sort (loi uniforme), ΔT_{pois} : pas sur le temps, t_P : temps restant avant Poisson, t_V : temps de vol libre, t_M : temps de mouvement initial, t_S : temps de propagation dans une maille, P_{tot} : probabilité de collision totale, n : densité de porteurs, V_{maille} : volume d'une maille de l'espace réel, RK : algorithme Runge Kutta.

Concernant le traitement de la propagation des porteurs, il existe plusieurs méthodes pour traiter les équations de Newton. On peut citer l'approche des temps de sortie de maille (TSM) [Bufler2003; Jungemann2003] ou encore l'intégration numérique Runge Kutta (RK) [Fischetti1991; Fischetti1988]. La version initiale de MONACO utilise l'algorithme TSM. Dans le cas de structures de bandes tabulées, nous avons choisi l'intégration numérique RK pour des raisons de précision numérique, ce qui a entraîné des modifications relativement

conséquentes du code. L'algorithme général du transport de chaque porteur entre deux résolutions de l'équation de Poisson est représenté sur la Figure 35. On y retrouve l'algorithme MC décrit précédemment, où chaque porteur subit une succession de vols libres interrompus par des interactions. Le calcul de la densité de porteurs se fait au fur et à mesure du mouvement des particules. La contribution de chaque porteur à la concentration de la maille est pondérée par le temps passé dans cette maille. Enfin, le temps de sortie de maille t_S est déterminé lors de l'étape de mouvement par une détection de la rencontre d'un bord de maille, contrairement à l'algorithme TSM, où t_S est obtenu assez rapidement en inversant la relation **r**(t) par le biais d'approximations sur **v**(t).

3.2 Maillage de la Zone de Brillouin

Nous avons choisi de mailler la ZB sur son premier octant dans le cas non contraint et le cas de la contrainte biaxiale, ce qui limite les transformations géométriques à des symétries par rapport aux plans principaux. Dans les autres cas de contrainte, la fraction de ZB considérée est soit la moitié (pour les contraintes uniaxiales selon <110> par exemple) soit la totalité (contrainte quelconque). Les énergies et les vitesses dans les trois directions de l'espace sont tabulées en chaque nœud du maillage.

3.2.1 Type de maillage

Le premier type de maillage, utilisé par Fischetti et Laux [Fischetti1988], était de type cubique. Connaissant le vecteur d'onde **k**, l'énergie associée dans une bande donnée est déterminée en extrapolant quadratiquement autour des 8 points E(**k**) de la maille cubique incluant le point voulu. Cette méthode nécessite de tabuler les dérivées successives de E(**k**), ce qui occupe une grande quantité d'espace mémoire.

Nous avons choisi d'utiliser le maillage tétraédrique, parfaitement adapté à la forme de la ZB des cristaux de type diamant, et qui n'utilise qu'une interpolation linéaire. Si le résultat obtenu est moins précis à taille de maille égale, la très grande simplicité des calculs impliqués pour la détermination d'autres paramètres (vitesse de groupe, densité d'états, …) et sa très grande souplesse d'utilisation l'ont rendu très attractif [Blöchl1994; Brisset1994; Bufler2003; Jungemann1999; Jungemann2003].

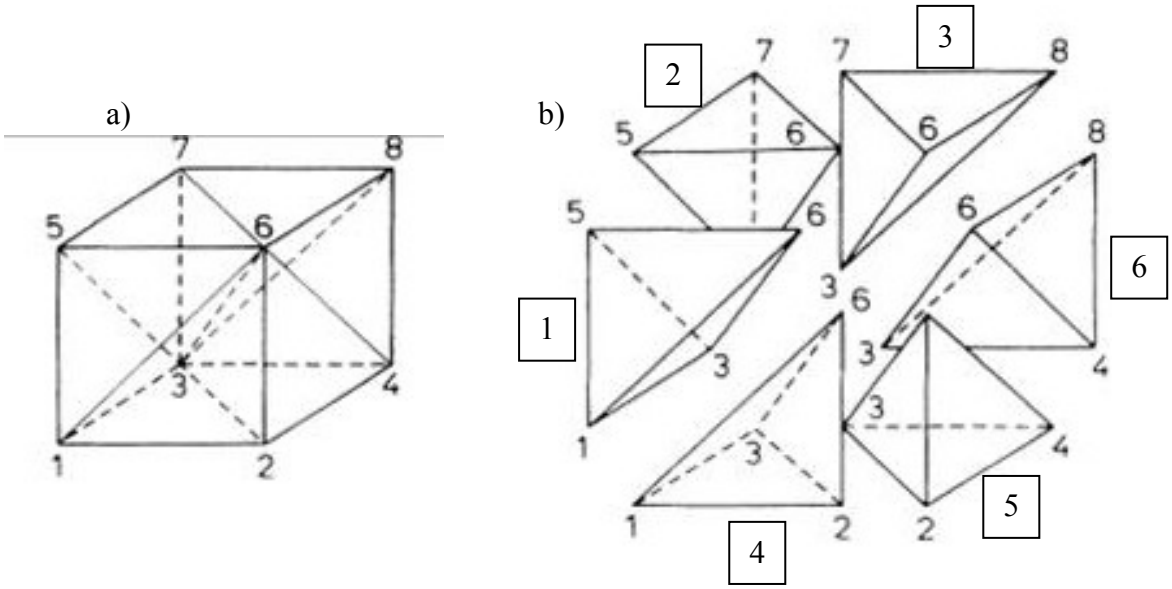

Figure 36 : [Blöchl1994] Conversion d'une maille cubique en 6 mailles tétraédriques.

Chacune des mailles cubiques (ou pavés) est décomposée en 6 tétraèdres numérotés comme il est indiqué dans la Figure 36. Chaque cube est référencé en fonction des coordonnées du vecteur d'onde générateur (point 1 sur la Figure 36), ce qui permet de retrouver aisément la maille cubique contenant un vecteur d'onde particulier lors des opérations d'interpolation.

3.2.2 Interpolation

L'énergie est déterminée linéairement à partir des sommets de maille (E_i, $\mathbf{k_i}$) [Lehmann1972] :

$$\begin{aligned} &E(\mathbf{k}) = E_0 + \mathbf{b}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k_0}) \\ &\text{avec } \mathbf{b} = \sum_{i=0}^{3}(E_i - E_0)\mathbf{r_i} = \nabla_k E(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{2.3.1}$$

où $\mathbf{r_i}$ est le vecteur réciproque des $\mathbf{k_i}$, soit par exemple $\mathbf{r_1} = (\mathbf{k_2}-\mathbf{k_0})\times(\mathbf{k_3}-\mathbf{k_0})/V$ et $V = \det\left[(\mathbf{k_1}-\mathbf{k_0}),(\mathbf{k_2}-\mathbf{k_0}),(\mathbf{k_3}-\mathbf{k_0})\right]$ est 6 fois le volume du tétraèdre considéré (soit un cube).

Afin de limiter les problèmes de discrétisation, la vitesse est interpolée de la même manière à partir des vitesses stockées en chaque nœud. La méthode d'interpolation inverse $\mathbf{k}(E)$, utilisée lors de la gestion des interactions (choix de l'état final) est plus complexe et est décrite en annexe. Le choix du vecteur d'onde dans une maille tétraédrique donnée se fait notamment sur une surface isoénergie approchée par un plan.

Notons que cette approche est aisément adaptable au cas d'un transport 2Dk (par exemple quand on prend en compte la quantification perpendiculaire). Il suffit de remplacer les tétraèdres par des triangles et les surfaces par des contours.

3.3 Orientation du canal

Les transistors MOS sont généralement fabriqués sur des substrats orientés (001) pour une orientation du canal selon <110>. Cependant, la vitesse en chaque nœud du maillage étant précalculée dans le repère cristallographique, il est nécessaire d'effectuer des opérations de rotation des champs et de la vitesse si l'on veut correctement tenir compte de l'orientation du canal pour la simulation de dispositifs. En effet, afin de reproduire les équations (2.2.6), il faut passer le champ électrique de l'espace réel à l'espace réciproque et faire l'opération inverse pour la vitesse de groupe (cf. Figure 37).

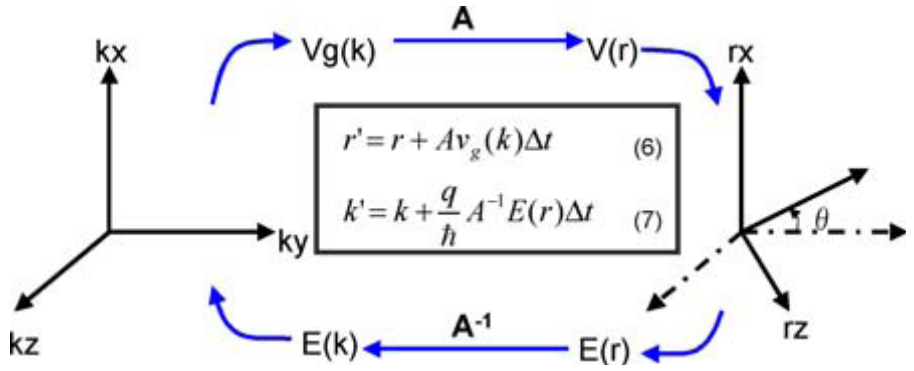

Figure 37 : [Tanabe2007] Algorithme pour le changement d'orientation du canal, $\mathbf{v_g(k)}$ est la vitesse de groupe issue de la structure de bandes, **E** est le champ électrique issu de la résolution de l'équation de Poisson.

Si on définit l'axe ΓX comme étant l'axe (001), et que l'on considère une rotation d'angle θ = π/4, la matrice de passage de l'espace réciproque à l'espace réel s'écrit :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \qquad (2.3.2)$$

3.4 Intégration de la Zone de Brillouin

Comme on l'a vu précédemment, les probabilités de collision utilisées pour la méthode MC sont déterminées par la règle d'or de Fermi. Cette dernière fait intervenir la

densité d'états en **k,** DOS(**k**). Elle est définie comme étant le nombre d'états électroniques dans un volume élémentaire de l'espace des **k**, constant du fait que les états **k** sont uniformément répartis dans l'espace réciproque. Or, de nombreux phénomènes d'interaction sont souvent considérés comme isotropes [Aubry-Fortuna2005; Jungemann2003]. Leur probabilité de survenir ne dépend alors que de l'énergie et non pas directement du vecteur d'onde. Nous verrons que le choix du vecteur d'onde final correspondant n'est quant à lui pas isotrope, mais dépend fortement des courbures de bandes (i.e. la densité d'états locale).

Ainsi, la probabilité de transition due à un phénomène isotrope est généralement proportionnelle à la densité d'états en énergie, DOS(E). Dans le cas général, cette dernière n'est pas une constante, car on compte maintenant le nombre d'états d'énergie, qui sont loin d'être uniformément répartis dans l'espace réciproque. Lehmann et Taut [Lehmann1972] ont développé une méthode simple et efficace pour intégrer la ZB avec un maillage tétraédrique. Cela consiste à évaluer la DOS dans chaque maille élémentaire traversée par une surface isoénergie (DOS locale [Jungemann1999]) et de la sommer sur toutes les mailles concernées. On obtient alors pour une maille donnée :

$$\mathrm{DOS}_{\mathrm{maille}}(\mathrm{E}) = \int_{\mathrm{V}_{\mathrm{maille}}} \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{k}}{4\pi^3}\delta(\mathrm{E}-\mathrm{E}(\mathbf{k})) = \frac{\mathrm{S}}{\nabla_{\mathrm{k}}\mathrm{E}(\mathbf{k})} = \mathrm{S}.|\mathbf{b}|^{-1} \qquad (2.3.3)$$

où $\mathbf{b} = \nabla_{\mathbf{k}}\mathrm{E}(\mathbf{k})$ a été défini dans la formule d'interpolation linéaire (2.3.1) et S est l'aire de l'intersection entre la surface isoénergie et la maille considérée. Cette approche est également transposable au cas du transport 2D.

3.5 Gestion des interactions

Dans le cadre d'interactions considérées comme isotropes, l'énergie E' après interaction est définie par sa nature : élastique E' = E ou inélastique E' = E ± ΔE, E étant l'énergie avant interaction et ΔE l'énergie échangée lors du phénomène diffusant. Toutefois, il faut tenir compte de l'anisotropie de la structure de bandes pour le choix de l'état final. Cela peut être fait en tirant au sort le vecteur d'onde final **k'** aléatoirement sur une surface isoénergie E', en tenant compte de la densité d'états propre à chaque maille (locale). La probabilité P_i de tirer au sort une maille i contenant E' s'écrit alors :

$$\mathrm{P}_{\mathrm{i}} = \frac{\mathrm{DOS}_{\mathrm{i}}(\mathrm{E}')}{\sum_{\mathrm{j}} \mathrm{DOS}_{\mathrm{j}}(\mathrm{E}')} \qquad (2.3.4)$$

La somme sur j couvre toute les mailles contenant l'énergie E'.

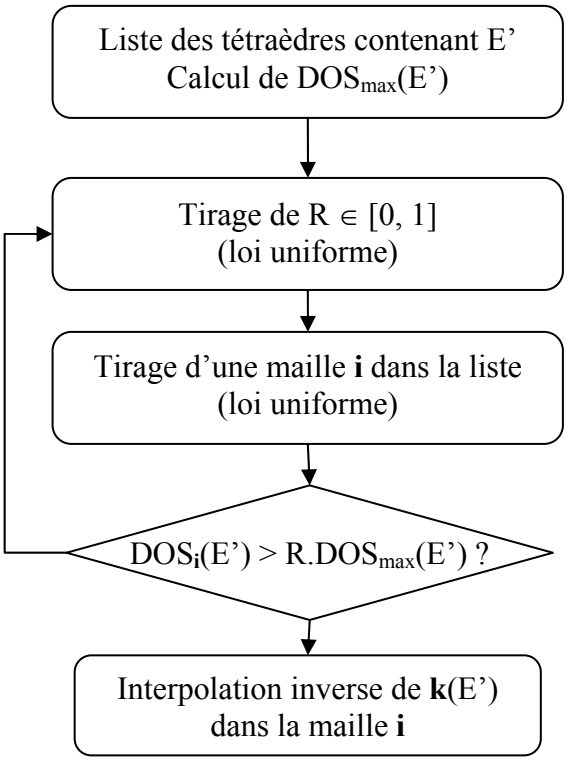

Figure 38 : Algorithme de réjection pour le choix de l'état final **k'** après interaction.

On utilise une méthode de réjection, développée par Jungemann *et al.* [Jungemann1999] et décrite sur la Figure 38. Elle permet d'éviter le calcul de la somme sur toutes les mailles à chaque fois. Cela nécessite de prétabuler les valeurs de DOS locale maximales et de stocker des listes de tétraèdres contenant les énergies d'une plage donnée. Le calcul de $DOS_{max}(E')$ est fait préalablement à la simulation, en même temps que le calcul des fréquences d'interaction et selon la même tabulation en énergie (pas $\delta E = 1$ meV). Les listes de tétraèdres sont faites pour des plages de 5 meV. Une fois la maille choisie (après une dizaine d'itérations en moyenne), les coordonnées finales de **k'** sont calculées en inversant la formule d'interpolation. Le nombre moyen d'itérations de cet algorithme dépend surtout du rapport entre la DOS locale maximale et la DOS totale à E' et très peu du nombre de mailles considérées. Cela ouvre la possibilité de procéder à des raffinements locaux du maillage sans pour autant augmenter le temps global de la simulation.

Le cas des interactions anisotropes, i.e. dont l'état final dépend du vecteur d'onde **k'**, est plus lourd à traiter. Le cas particulier de l'interaction avec les impuretés ionisées est détaillé en annexe. Il faut préciser que, même dans ce cas, le calcul des densités d'états locales est nécessaire pour le calcul de la fréquence d'interaction et le choix de l'état final.

4 Bilan du chapitre II

Ce second chapitre était dédié à la présentation des éléments essentiels à la modélisation et l'analyse du transport dans les transistors étudiés dans ce travail.

Dans un premier temps, nous avons détaillé les outils de calcul de structure de bandes du Silicium, avec un accent particulier sur la méthode **k.p** choisie pour modéliser les propriétés des matériaux contraints dans cette thèse. Nous avons ensuite présenté les méthodes de résolution de l'Hamiltonien **k.p** incluant l'interaction spin-orbite. Enfin, nous avons explicité la méthode de prise en compte du confinement perpendiculaire dans les couches d'inversion dans le cadre du formalisme **k.p** qui sera essentiellement exploitée dans le dernier chapitre.

Dans un second temps, nous avons présenté les équations fondamentales régissant le transport d'un gaz de porteurs libres dans le formalisme de Boltzmann et des méthodes classiquement utilisées pour les résoudre. Nous avons d'abord décrit la méthode Monte Carlo, modélisant rigoureusement le transport avec un minimum d'approximations mais numériquement lourde. Nous avons ensuite introduit les équations régissant le transport purement stationnaire utilisé par les outils TCAD de simulation de transistor. Nous avons mis l'accent sur l'importance de la mobilité dans ces approches et décrit les différentes méthodes pour son extraction et sa modélisation. Enfin, nous avons développé le formalisme des régimes de transport balistique et quasi-balistique qui est utilisé pour la modélisation des dispositifs ultra courts.

Dans un troisième et dernier temps, nous avons décrit les algorithmes du simulateur Monte Carlo *Full Band* MONACO mis en place au cours de cette thèse. Nous avons abordé les problématiques liées à la tabulation des structures de bandes (maillage, intégration). Nous avons également détaillé les méthodes choisies pour gérer la géométrie particulière de la Zone de Brillouin du Si et traiter la propagation des porteurs dans l'espace réel, ainsi que les interactions.

La détermination expérimentale fiable de la mobilité ainsi que sa modélisation rigoureuse est une problématique grandissante dans le monde de la microélectronique. En effet, non seulement ce paramètre sert de facteur de mérite pour caractériser les performances des transistors, mais il se situe également au cœur de la plupart des modèles utilisés dans les outils TCAD dédiés à l'optimisation des composants des prochains nœuds technologiques. Ainsi, la compréhension des phénomènes régissant la mobilité ainsi que son lien avec les performances des transistors est le fil conducteur de cette étude.

Chapitre III :

Transport d’électrons

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons exclusivement au transport en bande de conduction en exploitant les outils détaillés dans les chapitres précédents. Le transport des électrons est une des spécialités de l'IEF qui a déjà travaillé sur une grande variété de dispositifs à canal N.

Nous commencerons par une étude de la structure de bande de conduction du Si non contraint et sous une contrainte biaxiale en tension. Nous développerons ensuite les calculs et les méthodes utilisés pour traiter les différents mécanismes d'interaction avec une structure de bandes complète. Nous étudierons ensuite le transport dans un barreau de Si infiniment long en liaison avec l'analyse de la structure de bandes. Nous en profiterons pour comparer l'approche analytique de la masse effective avec coefficient de non parabolicité à l'approche *Full Band* dans des cas spécifiques. Enfin, nous étudierons en détail l'impact des effets non stationnaires sur le transport de charges dans les dispositifs ultra-courts à travers une étude critique des méthodes d'extraction de mobilité effective et de magnétorésistance.

1 Transport en champ constant

1.1 Structures de bandes

Dans cette partie nous nous intéresserons à la bande de conduction, calculée par la méthode **k.p** à 30 bandes [Rideau2006]. La Figure 39 représente des surfaces isoénergies de la première bande de conduction dans le cas du Si non contraint pour des énergies cinétiques de 0,25 eV et 1,25 eV. On voit que leur forme s'écarte progressivement de l'ellipsoïde. Chaque vallée semble s'ouvrir quand le vecteur d'onde atteint le bord de ZB, ce qui traduit les conditions de continuité et de symétrie par translation. A haute énergie, l'approximation des vallées ellipsoïdales ne traduit plus correctement la forme des surfaces isoénergies. On peut également discerner l'apparition des vallées L dans la direction <111>. Ces dernières sont, quant à elles, bien décrites par des ellipsoïdes dont les minima énergétiques sont aux points L.

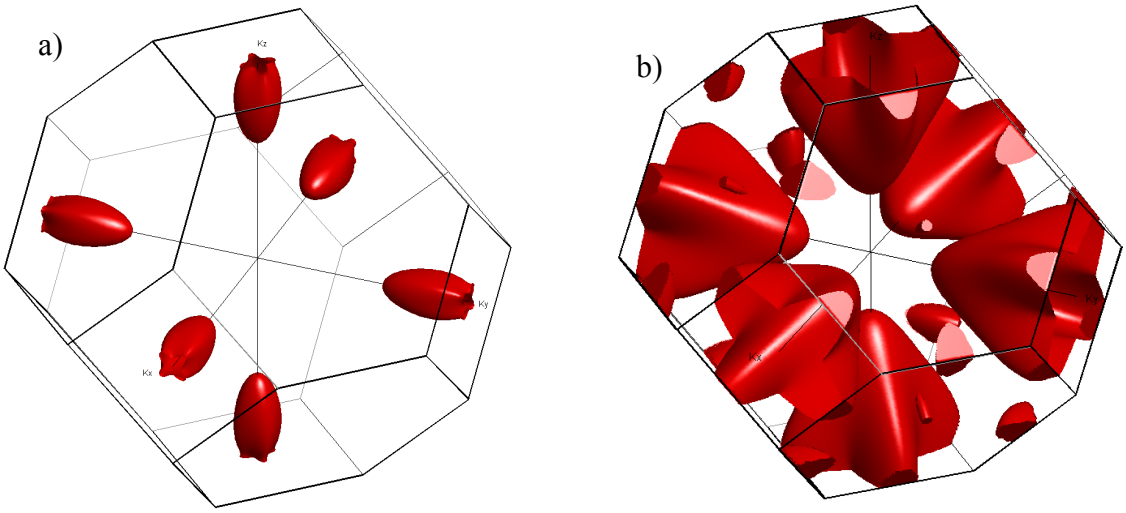

Figure 39 : Surfaces isoénergies pour des énergies cinétiques de a) 0,25 eV, b) 1,25 eV. La forme d'une vallée donnée s'écarte de l'ellipsoïde du fait d'une ouverture en bord de ZB, d'autant plus que l'on monte en énergie.

L'évolution de la forme des vallées de la première bande de conduction est bien visible sur les isocontours représentés en Figure 40a dans le plan $k_y = 0$. On y discerne les vallées Δ dans les directions ΓX et ΓZ.

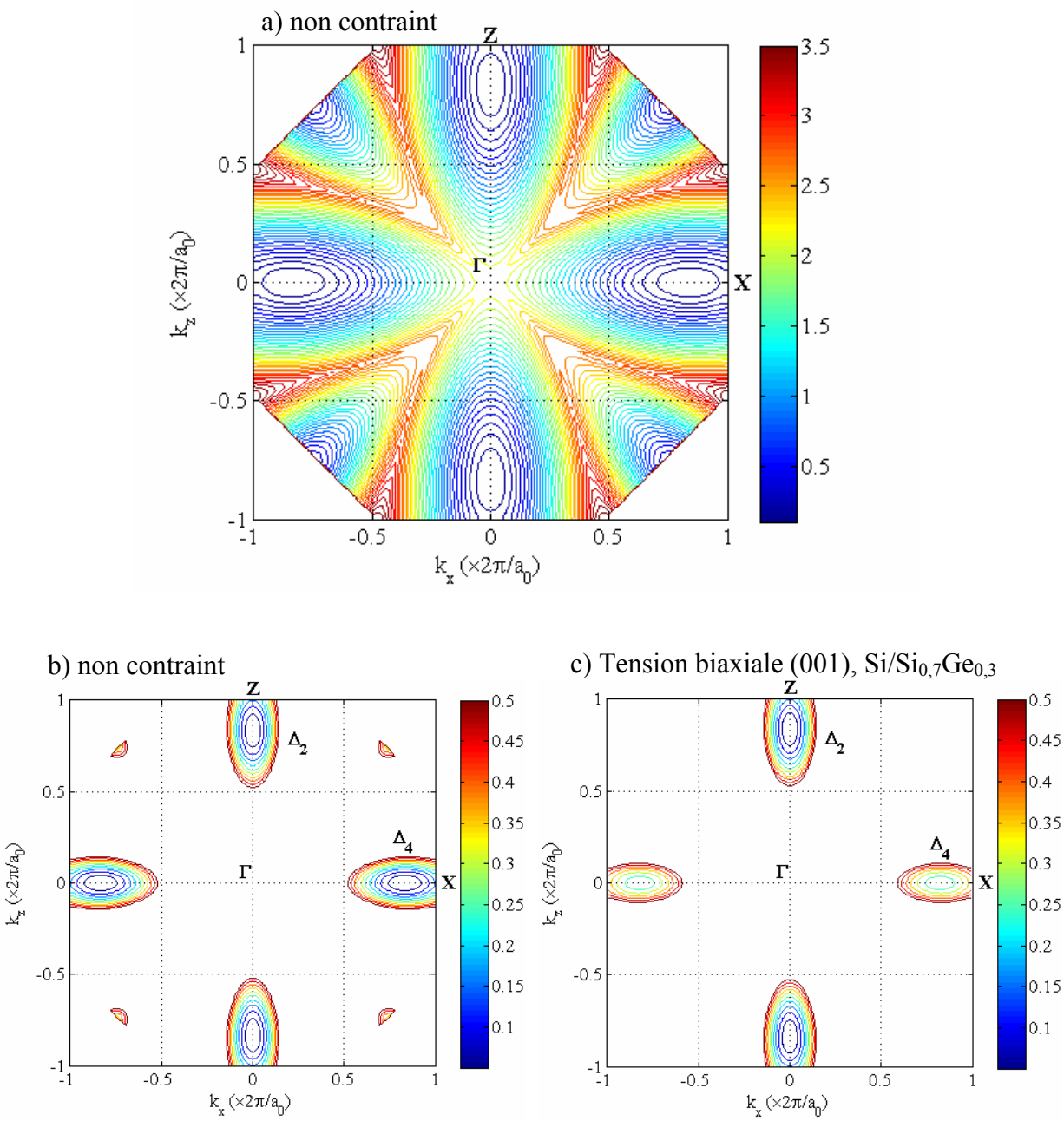

Figure 40 : Isocontours énergétiques de la première bande de conduction dans le plan (Γ,ΓX,ΓZ) i.e. $k_y = 0$. Les énergies sont référencées par rapport au minimum absolu de bande de conduction, a) Si relaxé, large gamme énergétique, écart entre les contours $\Delta E = 0{,}1$ eV, b) Si relaxé, autour des vallées Δ_2 (grand axe selon ΓZ) et Δ_4 (grand axe selon ΓX), $\Delta E = 0{,}05$ eV, c) $Si/Si_{0,7}Ge_{0,3}$, idem.

On peut voir qu'une contrainte biaxiale en tension ne change que fort peu la forme de la structure de bandes autour des minima des vallées Δ (Figure 40c) quand on la compare au cas relaxé (Figure 40b).

Comme il est montré sur la Figure 41, la contrainte lève la dégénérescence entre les vallées Δ_2 (direction ΓZ) et Δ_4 (direction ΓX) et décale la position des minima des vallées (en vecteur d'onde et en énergie). Les vallées Δ_2 se rapprochent légèrement du bord de ZB et s'abaissent en énergie alors que les Δ_4 se rapprochent du centre en montant en énergie.

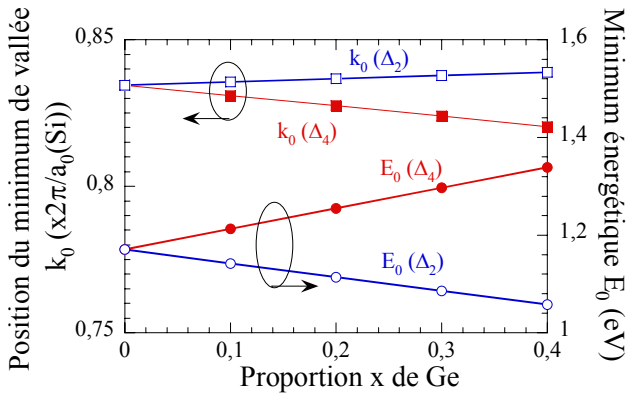

Figure 41 : Si contraint sur substrat $Si_{1-x}Ge_x$, position en énergie et en vecteur d'onde (sur les axes principaux) des minima de vallée en fonction de la proportion de Ge dans le substrat.

Il est assez bien connu que l'amélioration du transport électronique dans le cas de la contrainte biaxiale en tension est essentiellement due à ces levées de dégénérescence des vallées [Aubry-Fortuna2005; Galdin1992] et au peuplement préférentiel de celles ayant une plus faible masse dans la direction <100>. La Figure 42a représente la densité d'états par vallée obtenue en intégrant la relation de dispersion (issue du calcul **k.p**) des deux premières bandes de conduction dans le cas du Si relaxé, comparée aux approches analytiques (masse effective parabolique ou non). Si l'approche purement parabolique donne un résultat largement sous-estimé à haute énergie, une densité d'états proche du calcul **k.p** 30 bandes peut être obtenue en y incluant un coefficient de non parabolicité (ici $\alpha = 0{,}5\ eV^{-1}$), notamment pour les énergies cinétiques inférieures à 0,125 eV (pour lesquelles les surfaces isoénergies sont proches d'ellipsoïdes). Le décrochement présent autour de 1,1 eV correspond à l'apparition des vallées L.

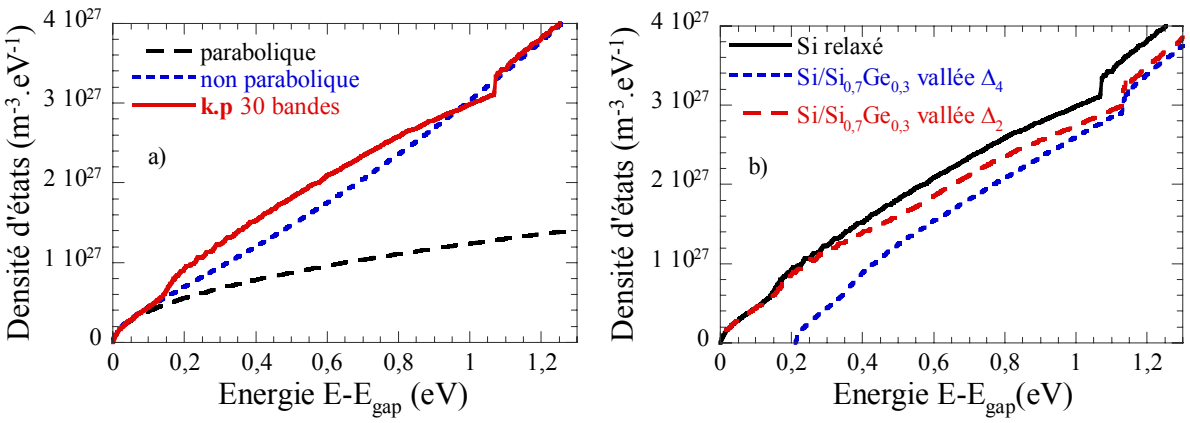

Figure 42 : Densité d'états par vallée. L'origine des énergies est le bas de bande de conduction, a) comparaison du calcul **k.p** 30 bandes (somme des 2 premières bandes de conduction) vs. masse effective ($m^* = m_{DOS} = 0{,}32m_0$) sans et avec coefficient de non parabolicité ($\alpha = 0{,}5\ eV^{-1}$), b) comparaison entre Si relaxé et Si contraint en tension biaxiale ($Si/Si_{0,7}Ge_{0,3}$). Les vallées Δ_4 dans le Si contraint sont plus hautes en énergie, ce qui conduit à un peuplement préférentiel des vallées Δ_2.

La Figure 42b montre l'effet de la contrainte biaxiale (équivalente à celle d'une couche de Si sur $Si_{0,7}Ge_{0,3}$) sur la densité d'états. En premier lieu, on peut observer l'effet de la levée de dégénérescence des vallées, qui décale en énergie l'apparition des états des vallées Δ_4. En second lieu, on peut remarquer que la densité d'états est peu modifiée par la contrainte par rapport au cas non contraint pour des énergies inférieures à 0,4 eV environ. Pour les énergies plus élevées, la DOS (à même énergie cinétique) des vallées Δ_4 croît plus vite que celle des vallées Δ_2. Au-delà de 1 eV, les DOS des deux types de vallées se rejoignent, ce qui les rend équivalentes. A très fort champ électrique, on peut donc s'attendre à ce que le gain induit par la contrainte soit diminué par rapport au régime faible champ.

Dans le cadre d'interactions considérées comme isotropes, nous avons vu que les fréquences d'interaction sont proportionnelles à la densité d'états. Nous abordons maintenant les interactions considérées dans ce travail et la formulation de leur probabilité.

1.2 Mécanismes d'interaction

Les interactions considérées pour les électrons sont les impuretés ionisées, les phonons (intra- et intervallées) ainsi que la rugosité d'interface, cette dernière n'étant considérée que dans le cas de la simulation de dispositifs. Les fréquences d'interaction sont obtenues à partir de la règle d'or de Fermi. La densité d'états s'écrit :

$$\mathrm{DOS}(E'(\mathbf{k}')) = \int_{V_c} \frac{d^3k}{4\pi^3} \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \tag{3.1.1}$$

où V_c est le volume du cristal dans l'espace réciproque et E(**k**) est l'énergie associée au vecteur d'onde **k**.

Le découpage de la ZB en vallées est fait arbitrairement en considérant la distance de chaque nœud du maillage au minima des vallées [Jungemann2003]. Seules les deux premières bandes de conduction sont considérées dans ce travail.

1.2.1 Phonons acoustiques intravallée

L'interaction électron-phonon acoustique intravallée est traitée dans le cadre du couplage par potentiel de déformation [Jacoboni1989]. On considère l'interaction intravallée comme élastique (E'(**k'**) = E(**k**)) et isotrope. La densité de probabilité et la fréquence d'interaction s'écrivent alors [Dollfus1999] :

$$\begin{aligned} s_{aco}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \frac{q^2 k_B T}{4\pi^2 \hbar \rho} \left(\frac{D_{ac}}{u_S} \right)^2 \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \\ \lambda_{aco}(E(\mathbf{k})) &= \frac{\pi q^2 k_B T}{\hbar \rho} \left(\frac{D_{ac}}{u_S} \right)^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

où D_{ac} est le potentiel de déformation pour les phonons acoustiques, u_S la vitesse moyenne du son dans le matériau (6607 $m.s^{-1}$ dans le Si), ρ la masse volumique du cristal. L'effet principal de cette interaction est de redistribuer la vitesse des porteurs.

1.2.2 Phonons intervallées

Deux types de processus permettent le transfert d'un électron entre deux vallées Δ : en assimilant la direction d'une vallée à celle de son axe longitudinal, les processus f et g désignent respectivement les transferts entre vallées perpendiculaires et parallèles. Dans ces deux cas, le transfert se fait par des phonons conduisant à l'extérieur de la Zone de Brillouin dans laquelle l'électron revient par addition d'un vecteur du réseau réciproque. Ces processus sont dits "Umklapp". Des règles de sélection imposent que les transferts se restreignant à l'élément de matrice de couplage électron-phonon à l'ordre 0 en **k** ne sont possibles qu'avec les phonons de forte énergie et que les transferts par des phonons de plus faible énergie doivent être traités en utilisant l'élément de matrice à l'ordre 1 en **k** [Dollfus1999]. Les phonons considérés ainsi que leur ordre sont reportés dans le Tableau 5.

	processus g			processus f		
Mode	LO	LA	TA	TO	LA	TA
Energie (meV)	63,2	18,8	11,4	59,1	46,3	21,3
Ordre	0	1	1	0	0	1
D_{iv0} (10^8eV.cm^{-1}) ou D_{iv1} (eV)	3,4	3,0	3,0	3,4	3,4	3,0

Tableau 5 : Caractéristiques des phonons intervallée Δ-Δ considérés dans ce travail. D_{iv0} et D_{iv1} sont les potentiels de déformation ajustés pour reproduire les caractéristiques expérimentales du Si non contraint.

1.2.2.1 Intervallées d'ordre 0

A l'ordre 0, on considère toujours l'interaction comme isotrope, mais on ne peut négliger l'énergie d'échange $\pm\hbar\omega_{iv}$ due à l'absorption ou à l'émission du phonon. La probabilité dépend de la fonction d'occupation des phonons $N_P = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{iv}}{k_B T}\right)-1\right)^{-1}$, du nombre de vallées d'arrivée possibles Z_{iv} et de la différence en énergie entre les vallées initiales et finales ΔE_{iv}.

On a alors (i =1 pour une absorption et i =-1 pour une émission) :

$$\begin{aligned} E' &= E + \Delta E_{iv} + i\hbar\omega_{iv} \\ s_{iv0}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \frac{Z_{iv}\hbar D_{iv0}^2}{8\pi^2\rho\hbar\omega_{iv}}\left[N_p + \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right]\delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \\ \lambda_{iv0}(E(\mathbf{k})) &= \frac{\pi Z_{iv}\hbar D_{iv0}^2}{2\rho\hbar\omega_{iv}}\left[N_p + \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right]\int\frac{d^3k}{4\pi^3}\delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \end{aligned} \tag{3.1.3}$$

où D_{iv0} est le potentiel de déformation du mode de vibration considéré à l'ordre 0.

1.2.2.2 Intervallées d'ordre 1

En ce qui concerne l'ordre 1, la densité de probabilité s'écrit de la même manière que pour l'ordre 0 (avec D_{iv1} potentiel de déformation du mode de vibration du réseau considéré à l'ordre 1) :

$$s_{iv1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{Z_{iv}\hbar D_{iv1}^2 \left|\mathbf{k_p}\right|^2}{8\pi^2\rho\hbar\omega_{iv}}\left[N_p + \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right]\delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \tag{3.1.4}$$

On peut observer la présence d'un terme en $|\mathbf{k_p}|^2$ ($\mathbf{k_p} = \mathbf{k'}-\mathbf{k}$) qui rend le calcul dépendant des coordonnées angulaires du vecteur d'onde final de l'électron (caractère

anisotrope). Ce cas se traite bien dans le cadre d'une approximation isotrope avec une structure de bandes analytique.

Dans le cas *Full Band*, il faut intégrer numériquement sur tous les états finaux possibles [Hjelm2002] ou bien utiliser une méthode de réjection [Hjelm2002; Jungemann1999]. Dans le premier cas, cela amène à introduire une nouvelle tabulation des fréquences d'interaction en fonction de **k**, ce qui n'est pas immédiat dans MONACO où les tabulations sont toutes faites en fonction de l'énergie. Dans le second cas, le temps de calcul lors de la simulation en est fortement augmenté.

Une autre méthode donnant des résultats cohérents, utilisée par Nilsson *et al.* [Nilsson1999], consiste à utiliser le résultat de l'approximation analytique (avec coefficient de non parabolicité) puis à pondérer la fréquence d'interaction obtenue par le rapport entre les densités d'états *Full Band* et analytique. Cela peut s'intégrer facilement dans MONACO et n'augmente en rien le temps de calcul ni la place mémoire.

La DOS analytique $DOS^{AN}(E)$ se déduit de la relation de dispersion :

$$E(1+\alpha.E) = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m_{DOS}} \qquad (3.1.5)$$

$$\text{avec } m_{DOS} = m_0 m_t^{2/3} m_l^{1/3} \text{ (approximation isotrope)}$$

On obtient alors en intégrant sur les coordonnées angulaires de **k'** :

$$DOS^{AN}(E') = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{q m_{DOS}}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (1+2\alpha E')\sqrt{E'(1+\alpha E')} \qquad (3.1.6)$$

On a ainsi comme fréquence d'interaction finale pour les processus à l'ordre 1 :

$$\lambda_{iv_1}^{FB}(E) = \frac{DOS^{FB}(E')}{DOS^{AN}(E')}.\lambda_{iv_1}^{AN}(E)$$

$$\text{où } \lambda_{iv_1}^{AN}(E) = \frac{\sqrt{2}q^{5/2}}{\pi}\frac{Z_{iv} m_{DOS}^{5/2}.D_{iv1}}{\hbar^4 \rho \hbar \omega_{iv}}\left(N_p + \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right) \qquad (3.1.7)$$

$$\times(1+2\alpha E')\sqrt{E'(1+\alpha E')}\left[E'(1+\alpha E') + E(1+\alpha E)\right]$$

1.2.3 Impuretés ionisées

Dans le cadre de l'approximation de Born, l'interaction avec les impuretés ionisées est traitée à travers un potentiel de Coulomb écranté [Barraud2001; Cohen-Tanoudji2000] :

$$V_0(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{sc}}\frac{\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|}{L}\right)}{|\mathbf{r}|} \qquad (3.1.8)$$

où **r** est la position spatiale du porteur, e la charge élémentaire, L la longueur d'écrantage et Z l'état de charge de l'impureté ionisée. Pour prendre en compte l'écrantage des impuretés dû aux porteurs de charges, on utilise la fonction diélectrique de Lindhard :

$$\varepsilon(\mathbf{q},0)=\frac{1}{|\mathbf{q}|^2}\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}|\mathbf{q}|^2+\beta_s^2F(\xi,0)\right) \tag{3.1.9}$$

où **q** = **k'-k** est le vecteur d'onde échangé pendant le processus d'interaction, β_s est la longueur d'écran (Debye) :

$$\beta_s^2=\frac{n_S e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_{sc}k_B T} \tag{3.1.10}$$

n_S est la densité de porteurs et F(ξ,0) la fonction d'écrantage dépendant de la forme de la vallée. Pour une vallée sphérique (approximation isotrope de la fonction diélectrique [Galdin1992]) :

$$F(\xi,0)=\frac{\sqrt{\pi}}{2i\xi}\exp(-\xi^2)\mathrm{erf}(i\xi) \qquad \text{avec} \qquad \xi^2(|\mathbf{q}|)=\frac{\hbar^2|\mathbf{q}|^2}{8m_{DOS}k_B T} \tag{3.1.11}$$

où m_{DOS} est la masse effective de densité d'états pour la vallée considérée et erf est la fonction d'erreur.

Si on veut considérer une vallée de type ellipsoïdale, la formulation de la fonction diélectrique de Lindhard est plus complexe [Aldrich1977]. $\beta^2(\mathbf{q}) = \beta_s^2F(\xi)$ est approchée par trois polynômes (faibles, moyens et forts ξ) et tabulée [Barraud2001]. En considérant le processus d'interaction comme intravallée et élastique, on obtient :

$$s_{imp}(\mathbf{k},\mathbf{k'})=\frac{N_{imp}e^2}{4\pi^2\hbar\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}\right)^2}.\frac{1}{\left[|\mathbf{q}|^2+\beta_s^2.F(\xi,0)\right]^2}.\delta(E(\mathbf{k'})-E(\mathbf{k})) \tag{3.1.12}$$

On voit que cette interaction est très anisotrope. Il est possible de la traiter rigoureusement (cf. annexe), mais cela demande beaucoup de ressources en mémoire et en temps de calcul. De plus, elle n'est dominante qu'aux faibles énergies cinétiques. Ainsi, on traite généralement cette interaction en considérant une approximation analytique de la structure de bandes (masse effective avec coefficient de non parabolicité [Jungemann2003]). La fréquence d'interaction s'écrit alors [Aubry-Fortuna2005] :

$$\lambda_{imp}(\mathbf{k})=\frac{Z^2e^4N_{imp}}{\sqrt{2}\pi\hbar^4\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}\right)^2}m_{DOS}^{3/2}(1+2\alpha E')\sqrt{E'(1+\alpha E')}\int_{-1}^{1}\frac{d(\cos\theta)}{\left[|\mathbf{q}|^2+\beta_s^2.F(\xi,0)\right]^2} \tag{3.1.13}$$

où θ est l'angle formé entre **k'** et **k**. On traite également cette interaction comme isotrope dans l'approximation du temps de relaxation [Kosina1997; Kosina1998] en pondérant par (1-cos(θ)) l'intégrale de la relation (3.1.13).

Enfin, cette fréquence est tabulée en fonction de la densité de porteurs n_S (qui peut être différente de la densité d'impuretés, notamment dans un canal de MOSFET) et nous ne considérons cette interaction que pour les porteurs de la première bande de conduction.

1.2.4 Rugosité

La rugosité à l'interface isolant/semi-conducteur des structures MOS est traitée en considérant un pourcentage de réflexions diffusives P_{diff} de 14% dans la plupart des structures étudiées. Dans le cas des MOSFET *bulk*, P_{diff} est choisi dépendant du champ effectif [Aubry-Fortuna2005] afin de reproduire les données expérimentales de [Takagi1994a]. Le traitement de la réflexion spéculaire est effectué par conservation de l'énergie et du $\mathbf{k}_{//}$ (composante du vecteur d'onde dans plan parallèle à l'interface). Le vecteur d'onde après réflexion est choisi en parcourant les mailles de la structure de bandes à $\mathbf{k}_{//}$ constant jusqu'à ce que l'on trouve une valeur de $\mathbf{k}_{\perp}$ (composante selon l'axe perpendiculaire à l'interface) satisfaisant la conservation de l'énergie (algorithme de bisection).

1.2.5 Sortie de Zone de Brillouin

Les électrons occupent essentiellement les vallées Δ qui sont assez proches du bord de la première Zone de Brillouin. Dès que l'énergie cinétique d'un porteur dépasse environ 120 meV sous l'action d'un champ électrique, il peut sortir de la première ZB. Ce cas est géré en détectant la sortie de ZB et le vecteur $\mathbf{G_i}$ du réseau réciproque concerné (parmi 14) par la condition de définition de la première ZB [Kittel1971] :

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{G_i} > \frac{1}{2}\left|\mathbf{G_i}\right|^2 \qquad (3.1.14)$$

où **k** est le vecteur d'onde du porteur. Les vecteurs du réseau réciproque sont obtenus à partir du réseau de Bravais déformé par la contrainte. Une fois la sortie détectée et le vecteur $\mathbf{G_i}$ déterminé, on applique la translation adéquate au vecteur d'onde et on attribue une nouvelle vallée au porteur en fonction de sa nouvelle position.

1.3 Vitesses moyennes

Les potentiels de déformation (cf. Tableau 5) sont choisis de manière à reproduire les courbes expérimentales de vitesse de dérive en fonction du champ électrique appliqué dans du

Si massif non dopé, à différentes températures (77 K et 300 K) et pour différentes orientations cristallographiques (<100> et <111>) [Jacoboni1983]. Le potentiel de déformation de l'interaction avec les phonons acoustiques intravallée D_{ac} est d'abord ajusté sur les mesures à 77 K car c'est le phénomène dominant à basse température. Les potentiels de déformation des phonons intervallées D_{iv0} et D_{iv1} sont ajustés afin de reproduire l'anisotropie et l'apparition de la saturation à fort champ. On peut voir sur la Figure 43a que les caractéristiques de vitesse de dérive en fonction du champ ainsi obtenues sont en assez bon accord avec les mesures. Du fait de l'absence de données expérimentales, les mêmes potentiels de déformations sont utilisés pour les matériaux contraints.

Pour ce qui est de l'interaction avec les impuretés ionisées, on compare les résultats de mobilité faible champ à 300 K en fonction du dopage N_D aux données expérimentales [Masetti1983] sur la Figure 43b. Le comportement de $\mu(N_D)$ obtenu, également superposé aux résultats issus de simulations MC utilisant une relation de dispersion analytique, est bien reproduit pour des concentrations d'impuretés ionisées inférieures à 10^{20} cm^{-3}.

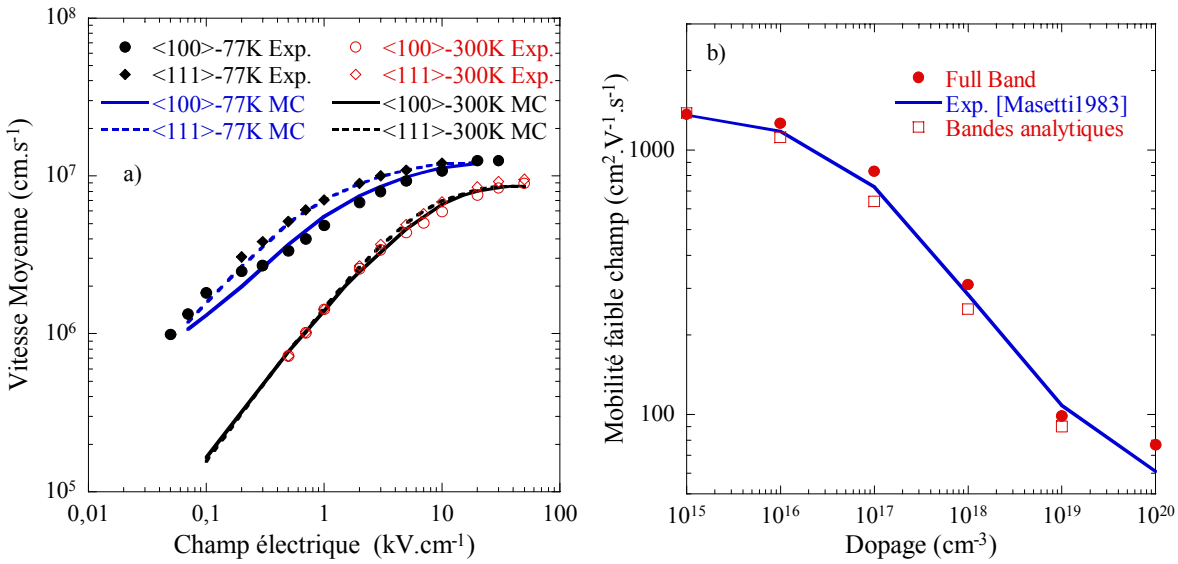

Figure 43 : a) Vitesse de dérive en fonction du champ électrique, résultats MC *Full Band* vs. expériences [Jacoboni1983], b) effet du dopage, comparaison entre MC **k.p** 30 bandes, MC bandes analytiques et expérience [Masetti1983].

L'approche analytique de la structure de bandes permet de reproduire les données expérimentales aussi bien que l'approche *Full Band* dans le cas du Si relaxé, et ce avec un jeu de potentiels de déformation très proche (8% d'écart sur D_{ac}).

La Figure 44 montre la répartition des électrons dans la première ZB sous un champ électrique de 50 kV/cm, suffisamment élevé pour que les porteurs atteignent la vitesse de

saturation. On peut observer que même à de tels champs, les électrons occupent essentiellement le bas des vallées Δ.

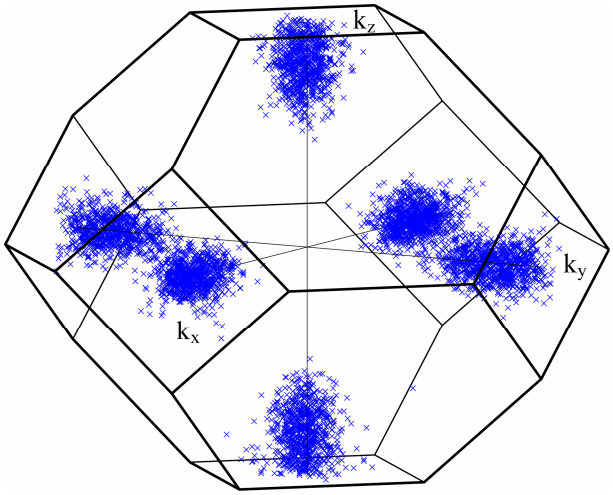

Figure 44 : Répartition des électrons dans l'espace réciproque (Si non contraint) sous un champ E_X = 50 kV/cm.

La Figure 45 montre les spectres en vitesse (i.e. les fonctions de distribution $f(v_x)$) et en vecteur d'onde (i.e. $f(k_x)$) dans les vallées ayant une masse longitudinale dans la direction du champ E_X. Pour les faibles champs électriques, $f(v_x)$ est une gaussienne légèrement décalée par rapport à l'origine. Les deux vallées à masse longitudinale dans la direction du champ (ici celles dont le minimum est sur l'axe ΓX) sont bien équivalentes. Pour les plus forts champs, les spectres sont plus larges, décalés et dissymétriques. De plus, les spectres ne se superposent plus pour les fortes vitesses (queues de distributions) et les vallées ne sont plus équivalentes. En effet, sous l'effet du champ E_X, les porteurs ayant acquis une énergie suffisante vont sortir de la ZB par le plan perpendiculaire à l'axe ΓX (dans notre cas) et vont aller occuper la vallée « équivalente » symétrique. Cet effet est plus visible sur les spectres $f(k_x)$ où le bord de ZB est bien matérialisé par une discontinuité en $k_x = \pm 2\pi/a_0$.

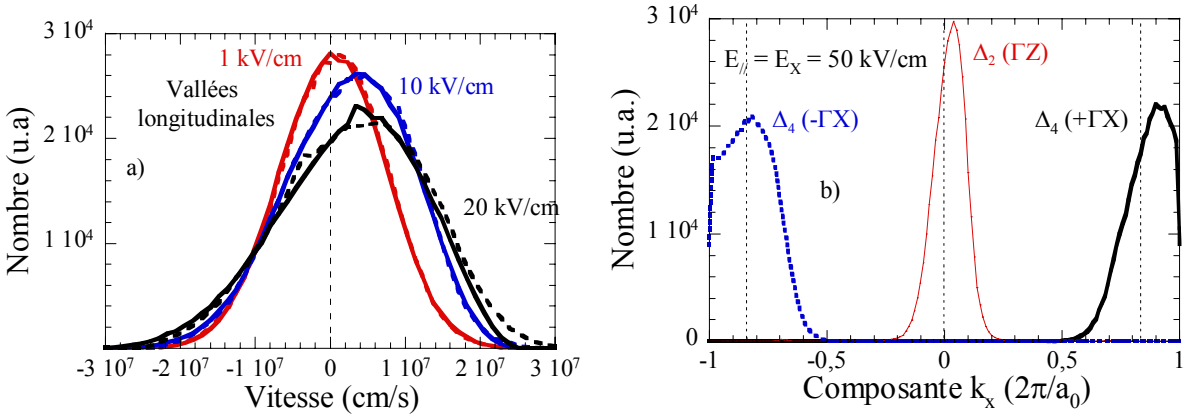

Figure 45 : a) Spectres en vitesse $f(v_x)$ des vallées à masse longitudinale dans la direction du champ pour $E_X = 1$, 10 et 20 kV/cm. Traits pleins : vallée $k_x > 0$, tirets : vallée $k_x < 0$, b) Spectres en vecteur d'onde $f(k_x)$ pour $E_X = 50$ kV/cm. Les vallées ne sont plus équivalentes à fort champ du fait des sorties de ZB (queues de distribution).

Néanmoins, si on somme les spectres des vallées symétriques, les distributions en vitesse et en énergie sont très proches de celles obtenues en considérant une relation de dispersion analytique pour les vallées (masse effective avec coefficient de non parabolicité).

La Figure 46 montre l'effet d'une contrainte biaxiale en tension sur la mobilité extraite dans un barreau infiniment long à faible champ électrique ($E_{//} < 1$ kV/cm) dans la direction <100>, sans prise en compte de la rugosité d'interface. L'approche *Full Band* est comparée à l'approche analytique et aux valeurs expérimentales extraites à partir du courant mesuré en régime linéaire (faible V_{DS}) dans des MOSFET *bulk* à faible champ effectif [Currie2001; Rim2003b; Rim2002; Sugii2002].

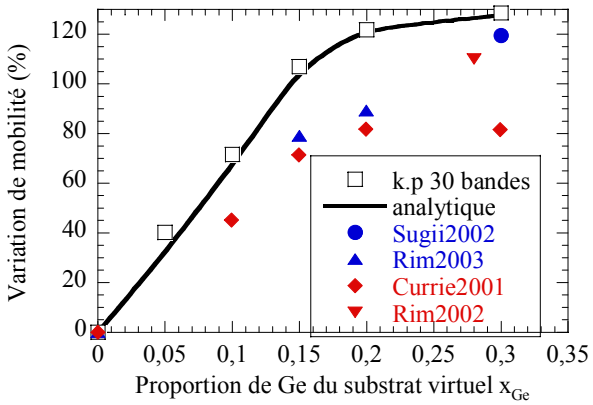

Figure 46 : Influence d'une contrainte biaxiale sur la mobilité faible champ, variation de mobilité en fonction de la proportion de Ge dans le substrat virtuel. $\mu_{MC}(x_{Ge} = 0) = 1450$ cm²/V/s.

On peut observer l'apparition d'une saturation de l'amélioration de la mobilité pour $x_{Ge} > 0{,}2$. L'écart aux valeurs expérimentales, ainsi que la forte dispersion des mesures, peuvent s'expliquer par l'influence de la qualité des interfaces [Aubry-Fortuna2005; Bonno2008; Sugii2002; Sugii1999; Takimoto1959]. En effet, une mauvaise qualité des interfaces Si/SiO_2 et $Si/Si_{1-x}Ge_x$ peut dégrader fortement les propriétés de transport, ce qui peut amoindrir le gain en mobilité dû à la contrainte. Les meilleurs résultats ont été obtenus lorsque ces interfaces ont été bien optimisées (en utilisant un procédé de polissage mécanique et chimique [Sugii2002]) et sont bien reproduits par les simulations. Enfin, on peut encore observer la très bonne adéquation entre les approches *Full Band* et analytique pour la structure de bandes.

Néanmoins, il faut préciser que l'amélioration de la mobilité avec la contrainte biaxiale fait encore l'objet de beaucoup d'études, car la théorie ne semble pas pouvoir expliquer toutes les données expérimentales [Andrieu2005; Fischetti2002].

1.4 Conclusion

Nous avons étudié le transport dans un matériau uniforme et infini dans l'espace réel et validé les algorithmes développés. L'influence d'une contrainte biaxiale en tension sur la mobilité est correctement décrite par MONACO aussi bien dans sa version *Full Band* que dans le cas d'une relation de dispersion analytique pour des champs relativement faibles. Aux champs élevés, la forme de la structure de bandes devient nettement différente de l'expression analytique [Bufler2003]. Néanmoins, on peut parfois s'émerveiller du bon accord entre les deux approches, alors que la forme des structures de bandes semble si peu similaire au premier abord. Cela peut encourager les développements d'approches analytiques de l'influence de la contrainte sur les paramètres de la relation de dispersion, comme la masse effective et le coefficient de non parabolicité [Ungersboeck2007].

La prise en compte d'une contrainte quelconque n'est pas encore intégrée dans le MONACO pour le transport des électrons car elle nécessite de prendre en compte l'ensemble de la ZB, ce qui est assez rédhibitoire, notamment en termes d'espace mémoire. En effet, dans le cas d'une contrainte biaxiale, il suffit de considérer un seul octant de la ZB, les autres étant obtenus avec des symétries simples. En revanche, dans le cas d'une contrainte quelconque, les symétries sont brisées et les axes principaux ne sont plus orientés aussi simplement. Afin de prendre en compte correctement l'influence d'une contrainte quelconque sur le transport des électrons, il faut considérer un maillage non uniforme comme décrit dans [Feraille2006;

Jungemann2003; Nilsson1999], ce qui nécessite d'adapter les algorithmes à un pas non constant. Ce sera l'objet des prochains développements de MONACO. Nous verrons au chapitre suivant que le cas du transport de trous est différent et qu'il est possible d'étudier les cas de contrainte uniaxiale car tout se passe essentiellement autour du point Γ, et que l'on peut limiter le maillage à la moitié de la ZB.

Nous allons maintenant étudier l'impact des effets non stationnaires sur le transport lectronique dans des dispositifs courts, en considérant une relation de dispersion analytique (masses effectives transverse et longitudinale, coefficient de non parabolicité). Cette approximation est en effet suffisante pour décrire le transport dans les conditions étudiées dans cette partie (des caractéristiques $I_D(V_{GS})$ similaires ont été obtenues avec les versions de MONACO initiale et *Full Band*). Certains développements du code pour le passage au simulateur *Full Band* sont utilisés. Notamment, le nouvel algorithme de propagation dans l'espace réel mentionné au chapitre 2 (§3.1) permet de prendre en compte l'influence du champ magnétique (pour l'étude de la mobilité de magnétorésistance) ce qui n'était pas le cas dans la version initiale.

2 Impact des effets non stationnaires

2.1 Problématique

Dans le cadre de l'étude des transistors MOS, le concept de mobilité, issu d'une analyse du transport stationnaire où les phénomènes de collision limitent la vitesse des porteurs, est très largement utilisé comme facteur de mérite et dans les modèles analytiques utilisés pour prévoir les performances des dispositifs. Avec la diminution des dimensions des transistors, le nombre d'interactions dans le canal de conduction se réduit. Même si l'impact des collisions reste loin d'être négligeable [Huet2007; Lusakowski2007; Palestri2005; Saint-Martin2004b; Svizhenko2003], le transport balistique devient de plus en plus important quand les dimensions tendent à devenir nanométriques. Dans les dispositifs ultra courts, on peut remettre en question la validité du concept de mobilité. Cependant, bien que ce concept soit discutable, on continue d'utiliser ce paramètre extrait comme facteur de mérite des composants. C'est pourquoi nous allons examiner cette notion en détail pour les MOSFET de faible longueur de grille.

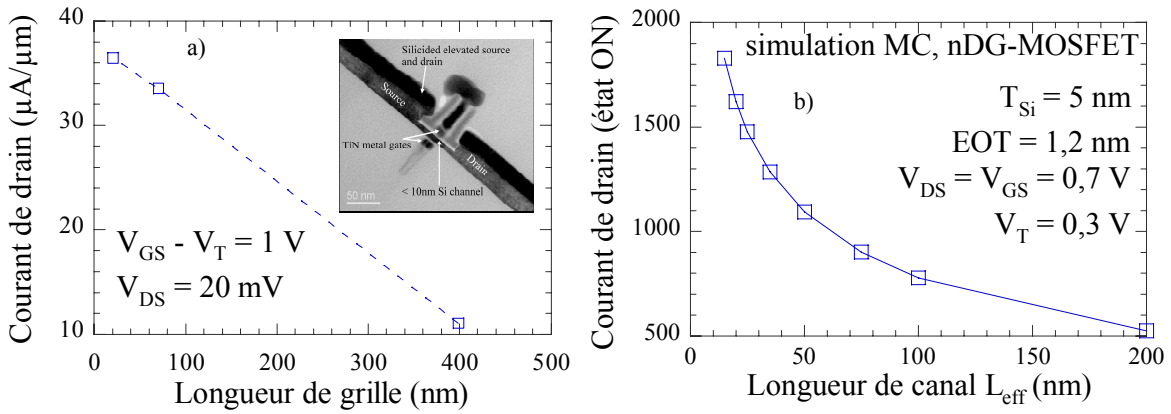

Figure 47 : Courant de drain de nMOSFET double grille planaire en fonction de la longueur de grille a) [Widiez2006] à faible V_{DS}, b) simulation MC à fort V_{DS}.

De nombreuses expériences [Andrieu2007b; Chaisantikulwat2006; Cros2006] ont mis en évidence de manière quantitative une forte diminution de la mobilité extraite de caractéristiques électriques à longueur de canal de transistor décroissante, alors que le courant de drain est amélioré. En effet, on peut voir sur la Figure 47 que les courants mesurés et ceux obtenus par simulation MC augmentent lorsque la longueur des transistors diminue et qu'en parallèle les mobilités effectives extraites diminuent (cf. Figure 48). Cette dégradation de

mobilité pourrait être le fait d'une erreur sur la détermination de la longueur effective, nécessaire à l'extraction de mobilité effective [Andrieu2005]. Cependant, des mesures de mobilité de magnétorésistance (cf. Figure 49), extraites indépendamment de la longueur de canal, montrent des tendances similaires [Chaisantikulwat2006; Lusakowski2005; Lusakowski2007; Meziani2004].

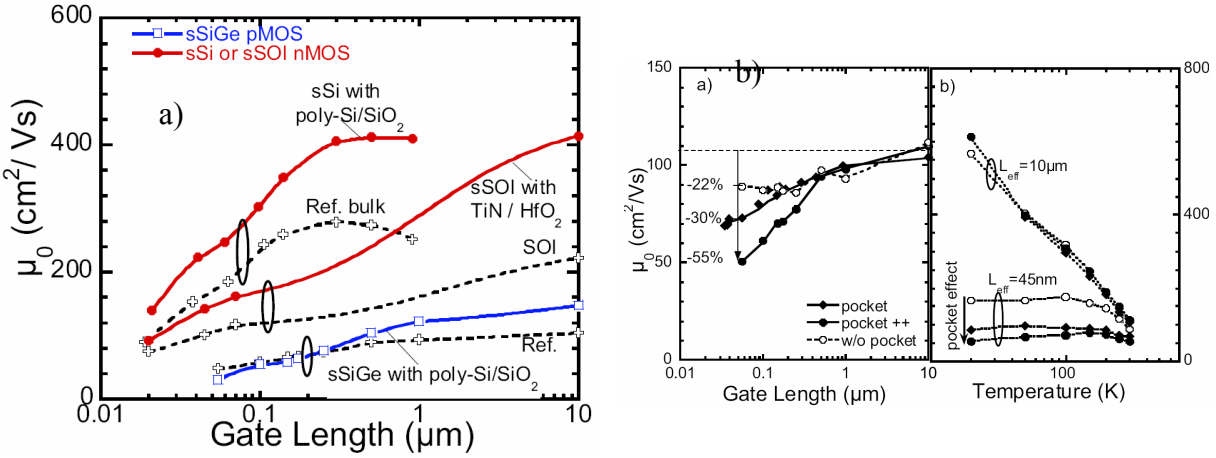

Figure 48 : [Andrieu2007b] Mesures expérimentales de mobilité effective, a) en fonction de la longueur de grille (n- et p-MOS conventionnels, SOI, contraints ou non), b) influence de poches de surdopage sur la mobilité extraite dans des pMOS conventionnels.

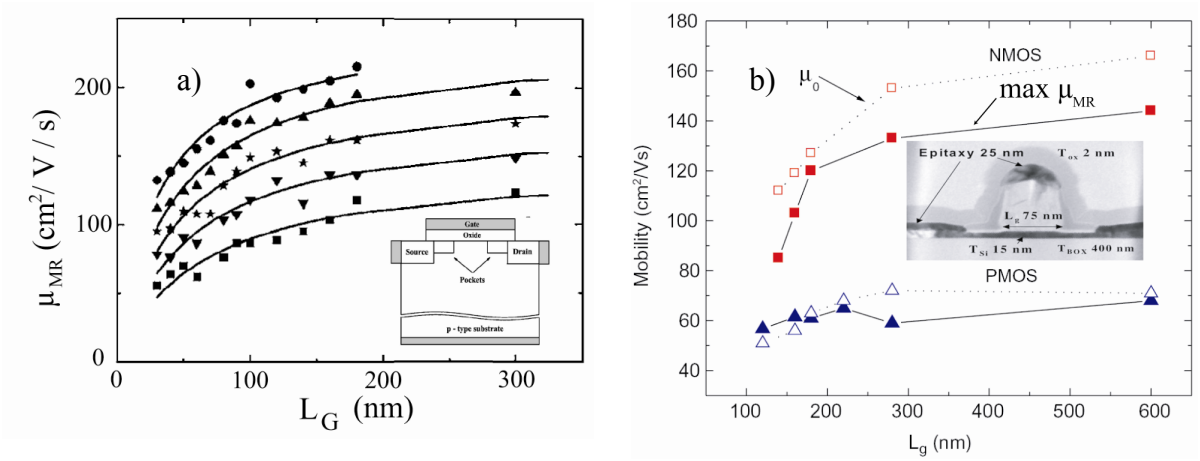

Figure 49 : Mesures expérimentales de mobilité de magnétorésistance, a) [Lusakowski2005] nMOSFET *bulk* avec poches de surdopage, b) [Chaisantikulwat2007; Chaisantikulwat2006] FDSOI n et pMOSFET, comparées aux mesures de μ_{eff} (sans correction de R_S).

De nombreux effets pourraient impliquer une réduction de la mobilité lors de la diminution des dimensions des composants, comme les poches de surdopage utilisées pour

contrer les SCE, l'effet de charges distantes dans le cas des oxydes high-k (*Remote Coulomb Scattering* RCS), ou encore les défauts (chargés ou neutres) induits par les procédés d'implantation [Chaisantikulwat2006; Cros2006; Dupré2007; Lusakowski2005; Lusakowski2007; Meziani2004; Widiez2006]. Cependant, la dégradation de mobilité reste présente même sans poches de surdopage (cf. Figure 48b), et les modélisations de l'effet du RCS et des défauts sur la mobilité ne donnent pas de résultats suffisamment cohérents avec les données expérimentales, notamment concernant la densité de défauts ou de charges à prendre en compte [Cros2006].

Une limitation plus fondamentale, liée aux effets non stationnaires, a été formulée par Shur [Shur2002], qui a introduit la notion de « mobilité balistique » μ_{eff}^{bal} proportionnelle à la longueur de canal L_{ch} dans l'expression de la mobilité effective. Cette approche fait le lien entre les modèles analytiques usuels, basés sur une mobilité stationnaire (μ_{eff}^{long}, proportionnel au libre parcours moyen λ_{lpm}), et la physique du transport balistique. La mobilité apparente s'obtient alors par une loi de Mathiessen :

$$\frac{1}{\mu_{eff}} = \frac{1}{\mu_{eff}^{long}} + \frac{1}{\mu_{eff}^{bal}} \tag{3.2.1}$$

où $\mu_{eff}^{long} = \frac{2|q|\lambda_{lpm}}{\pi m^* v_{th}}, \mu_{eff}^{bal} = \frac{2|q|L_{ch}}{\pi m^* v_{th}}, v_{th} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m^*}}$.

En utilisant cette approche sur des mesures de mobilité de magnétorésistance, Lusakowski *et al.* [Lusakowski2007] ont observé que la réduction de mobilité peut être due aux effets balistiques. Cependant, avec les équations proposées par Shur, elle ne permet pas de décrire quantitativement l'expérience avec des paramètres réalistes (notamment le libre parcours moyen), comme on peut le voir sur la Figure 50. De plus, aucun formalisme de ce type n'existe pour le cas de la mobilité de magnétorésistance. Une étude systématique de l'extraction de mobilité en fonction de la longueur de canal basée sur des simulations MC non auto-cohérentes [Zilli2007] (imposant un champ électrique parallèle constant et uniforme dans le canal) a mis en évidence l'importance du transport balistique et suggère qu'il peut exister une erreur systématique dans l'interprétation des grandeurs extraites.

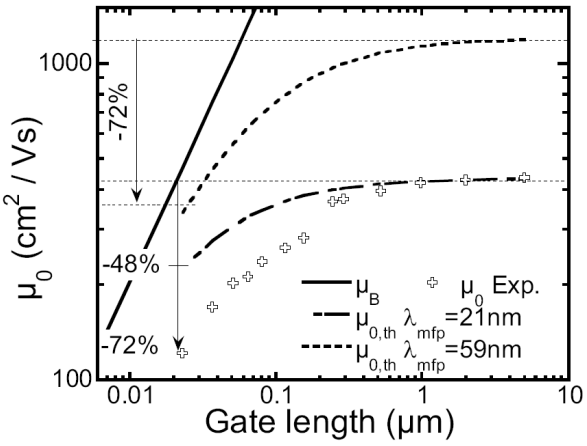

Figure 50 : [Andrieu2007b] Symboles : Mobilités effectives $\mu_0 = \mu_{eff}$, extraites (méthode Y) en fonction de la longueur de grille dans des FD-SOI nMOSFET, trait plein : « mobilité balistique » $\mu_B = \mu_{eff}^{bal}$ d'après le formalisme de Shur, tirets : mobilité $\mu_{0,th} = \mu_{eff}$ calculée avec le modèle de Shur en utilisant différentes valeurs de libre parcours moyen.

Dans cette partie, nous étudierons par simulation MC l'extraction de la mobilité effective μ_{eff} par la méthode de Hamer [Hamer1986] décrite au chapitre 2 (§2.3.4.1) et de la mobilité de magnétorésistance μ_{MR} dans des composants ultimes. En effet, comme tous les paramètres sont maîtrisés (notamment les phénomènes de diffusion et les profils de dopage des accès), ce type d'étude permet d'éclaircir l'influence du transport quasi-balistique sur la mobilité extraite.

2.2 Dispositif étudié

2.2.1 Choix de l'architecture et conditions d'étude

L'architecture Double Grille (DG-MOS) est l'une des alternatives au MOSFET *bulk* planaire les plus étudiées, notamment dans les projets PULLNANO et MODERN. Elle présente l'avantage de permettre un bon contrôle des SCE, avec une épaisseur équivalente d'oxyde (EOT) raisonnable, à condition que le rapport entre longueur de canal et l'épaisseur de film (L_{ch}/T_{Si}) soit bien déterminé [Colinge2007; Saint-Martin2005; Saint-Martin2006]. De plus, le canal est généralement non dopé dans une telle architecture, ce qui favorise le transport non stationnaire. Enfin, d'un point de vue pratique, c'est une structure simple à simuler comparativement au MOSFET *bulk*, qui permet d'analyser le transport sans ambiguïté liée au dopage canal.

Ainsi, les dispositifs simulés sont des transistors MOS double grille (DG-MOSFET), décrits sur la Figure 51. La longueur de canal L_{ch} des transistors étudiés varie de 15 à 400 nm avec une épaisseur de canal T_{Si} de 5 nm et une épaisseur d'oxyde (ou épaisseur équivalente

d'oxyde) de 1,2 nm. Le recouvrement (*overlap*) de grille total sur les caissons source et drain est de 10 nm. Deux séries de dispositifs ont été considérées : l'une avec des phénomènes d'interaction habituels dans le canal (canal standard), une autre, de même géométrie, mais à canal balistique, i.e. où les interactions sont artificiellement supprimées. Le canal est non dopé (sauf mention autre), ce qui favorise le transport balistique. La température est de 300 K (sauf mention différente). Dans le cadre des extractions de μ_{eff}, un DG-MOSFET à canal contraint a également été simulé (contrainte biaxiale en tension équivalente à celle d'une couche de Si épitaxiée sur $Si_{0,7}Ge_{0,3}$).

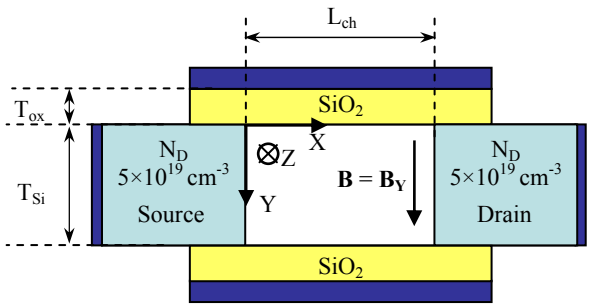

Figure 51 : Structure nDG-MOSFET à canal non dopé simulée, T_{Si} = 5 nm, EOT = 1,2 nm, longueurs de canal étudiées L_{ch} = 15 à 400 nm. Le canal est orienté selon <100>.

Les simulations MC auto-cohérentes sont menées avec MONACO. Les dispositifs sont supposés de largeur W (direction Z) très grande devant les autres dimensions. Pour des raisons d'efficacité, la structure de bande de conduction est décrite analytiquement (6 vallées ellipsoïdales avec coefficient de non parabolicité) et les effets de quantification perpendiculaire à la direction de transport ne sont pas pris en compte. Cela se justifie par des comparaisons avec la version multi sous-bandes de MONACO [Querlioz2007], qui montrent peu de différences en ce qui concerne les effets balistiques et les caractéristiques électriques pour l'épaisseur de film étudiée ici.

Afin d'avoir des valeurs de référence, la mobilité dite canal long a été déterminée pour une structure double grille. Les mobilités μ_{eff}^{long} et μ_{MR}^{long} sont obtenues par des simulations MC non auto-cohérentes, dites canal long, dans lesquelles le champ perpendiculaire est fixé (en résolvant l'équation de Poisson 1D) et le champ parallèle imposé [Aubry-Fortuna2005]. Ainsi, le canal est supposé infini dans la direction source-drain. La mobilité effective canal long μ_{eff}^{long} est obtenue en prenant simplement la pente de la vitesse des porteurs en fonction d'un faible champ parallèle appliqué dans la structure double grille supposée infiniment longue. La mobilité de magnétorésistance canal long μ_{MR}^{long} est quant à elle obtenue en

extrayant directement la résistivité de la variation de vitesse des porteurs en fonction du champ magnétique appliqué [Donetti2007a; Donetti2007b] à faible champ électrique donné (cf. Figure 52).

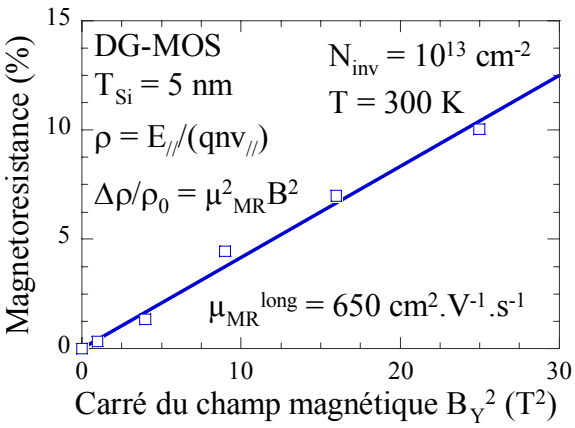

Figure 52 : Extraction de μ_{MR} dans une structure DG-MOS canal long (Si relaxé, T = 300 K, T_{Si} = 5 nm, $N_{inv} = 10^{13}$ cm^{-2}).

Il faut préciser que, notamment dans le cas des dispositifs à canal balistique, le paramètre homogène à une mobilité extrait des caractéristiques simulées n'est pas une mobilité au sens traditionnel du terme. En effet, la mobilité n'est physiquement définie que dans un régime purement diffusif. Etant donné que le transport est fortement non stationnaire dans les structures étudiées ici [Huet2007; Saint-Martin2005; Saint-Martin2004b], nous allons considérer la mobilité extraite des caractéristiques comme une mobilité apparente. Enfin, en ce qui concerne l'extraction des mobilités effectives, nous utiliserons la méthode de Hamer [Hamer1986] pour l'exploitation des résultats Monte Carlo. En effet, cette méthode ne nécessite pas de dériver le courant (par exemple pour obtenir g_m comme dans la méthode Y). Elle est ainsi bien adaptée à l'analyse de caractéristiques $I_D(V_{GS})$ avec relativement peu de points.

2.2.2 Caractéristiques simulées

2.2.2.1 Courant – Tension

Les caractéristiques $I_D(V_{GS})$ à faible V_{DS} (50 mV) et $I_D(V_{DS})$ à fort V_{GS} (0,7 V) obtenues pour les dispositifs à canal standard non contraints sont représentées sur la Figure 53. Les caractéristiques concernant les dispositifs équivalents à canal balistique sont reportés sur la Figure 54.

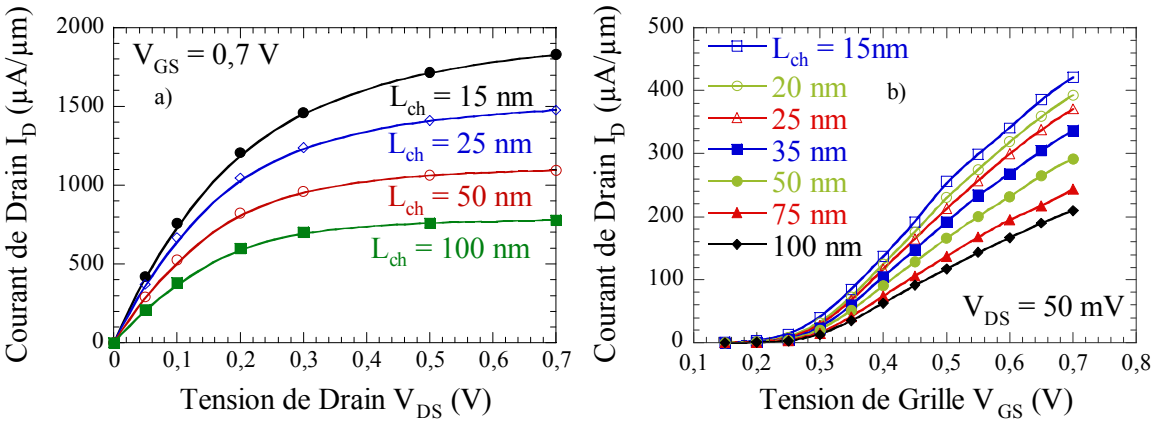

Figure 53 : Caractéristiques électriques des DG-MOSFET simulés pour différentes longueurs de canal, a) $I_D(V_{DS})$ à fort V_{GS}, b) $I_D(V_{GS})$ à faible V_{DS}, utilisées pour l'extraction de mobilité effective.

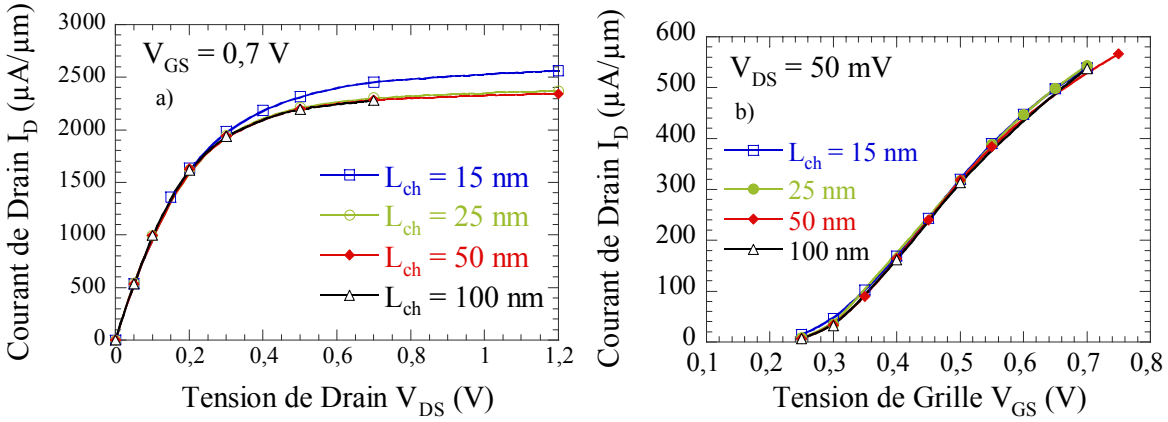

Figure 54 : Caractéristiques électriques des DG-MOSFET à canal balistique.

La réduction de la longueur de canal a très peu d'effet sur les caractéristiques électriques des dispositifs balistiques, sauf pour L_{ch} = 15 nm où on peut observer un léger effet de DIBL (*Drain Induced Barrier Lowering*) à fort V_{DS}. Dans le cadre d'une extraction de mobilité par la méthode de Hamer, ce comportement est cohérent avec la notion d'une mobilité balistique apparente μ_{eff}^{bal} variant linéairement avec la longueur de canal. Quand les interactions dans le canal sont incluses, la réduction de L_{ch} entraîne une augmentation régulière du courant de drain à polarisation donnée. Cette amélioration n'est pas due à une diminution de la tension de seuil V_T. En effet, les V_T extraits ne varient que dans une faible plage allant de 0,289 V à 0,295 V. Le comportement de V_T avec la longueur de canal est similaire dans les autres dispositifs (à canal standard ou balistique). Enfin, nous avons extrait la résistance série à partir de la chute de potentiel dans les régions de source et drain divisée par le courant à fort V_{DS} = 0,7 V. La résistance obtenue est faible et vaut environ

$R_S = 25\ \Omega.\mu m$ pour toutes les structures étudiées. Elle est de plus cohérente avec celles issues de l'ajustement des paramètres de la méthode de Hamer (équations du chapitre 2, §2.3.4.1).

2.2.2.2 Magnétorésistance

La magnétorésistance est extraite dans les dispositifs non contraints à partir des caractéristiques $I_D(V_{DS})$ en régime ohmique ($V_{DS} \leq 50$ mV) à V_{GS}-$V_T = 0{,}4$ V. La densité d'inversion issue des simulations MC dans ces conditions est à peu près constante et égale à $N_S = 10^{13}$ cm^{-2}. Les caractéristiques de magnétorésistance relative $\Delta R_{ch}(B)/R_{ch0}$, où $R_{ch0} = R_{ch}(B = 0)$, obtenues pour les dispositifs à canal standard, sont représentées sur la Figure 55a. Les caractéristiques concernant les dispositifs équivalents à canal balistique sont reportés sur la Figure 56. La Figure 55b montre les caractéristiques obtenues à T = 100, 200 et 300 K pour les dispositifs à canal standard.

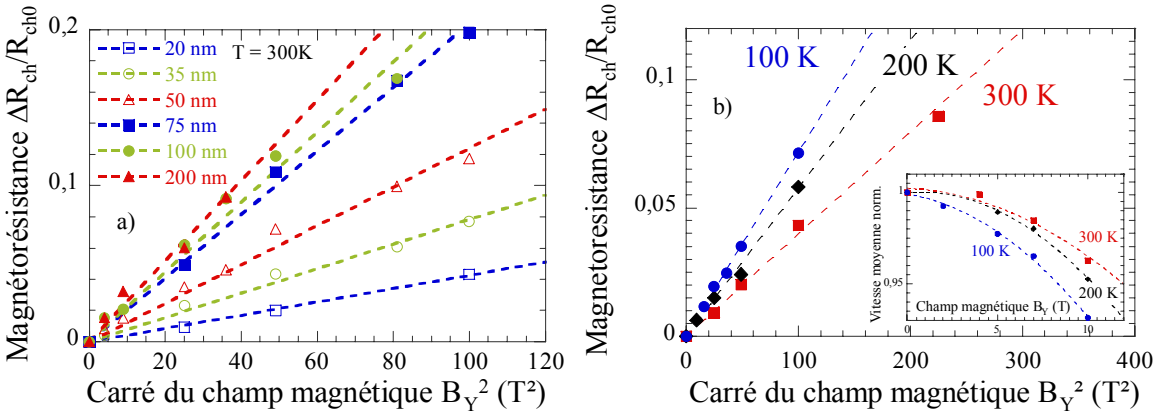

Figure 55 : Dispositifs à canal standard, a) caractéristiques de magnétorésistance à T = 300 K pour L_{ch} = 20, 35, 50, 75, 100 et 200 nm, b) pour T = 100, 200 et 300 K, L_{ch} = 20 nm, insert : vitesse $v_x(B)$ dans la direction source-drain correspondante moyennée sur tous les porteurs dans le canal, normalisée à v(B = 0).

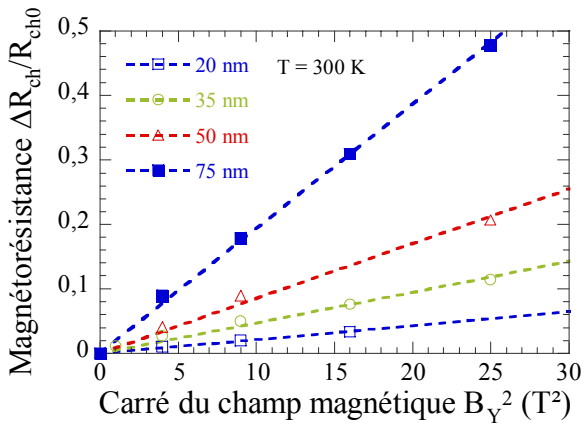

Figure 56 : Dispositifs à canal balistique, caractéristiques de magnétorésistance à T = 300 K pour L_{ch} = 20, 35, 50 et 75 nm.

En accord avec les calculs menés au chapitre précédent, la magnétorésistance extraite est proportionnelle à B_Y^2 dans tous les cas de figure. On peut alors en déduire la mobilité de magnétorésistance correspondante en prenant la racine carrée de la pente de la caractéristique. Ce comportement est cohérent avec celui de la vitesse v_x dans la direction source-drain moyennée dans le canal en fonction du champ magnétique (insert de la Figure 55b), qui décroît quadratiquement en B_Y, ce qui est également en accord avec les équations détaillées dans le chapitre 2 (§2.3.4.2). En effet, dans le cas purement diffusif, on a :

$$\frac{\Delta R_{ch}(B_Y)}{R_{ch0}} = -\frac{\Delta J(B_Y)}{J_0} = \frac{v(B=0)}{v(B)} - 1 = \mu_{MR}^2 B_Y^2 \qquad (3.2.2)$$

Il est cependant assez surprenant qu'un tel comportement soit également observé dans le cas du canal balistique, alors que le transport est fortement non stationnaire. La magnétorésistance extraite dans ce cas est même bien plus élevée que dans le cas du canal standard (environ un ordre de grandeur).

2.2.3 Mobilités apparentes

2.2.3.1 Mobilités extraites

L'influence de la température sur μ_{MR} et celle du dopage canal sur μ_{eff} sont représentées sur la Figure 57. Les valeurs relatives sont comparées à des mesures expérimentales sur des dispositifs de géométrie proche, à savoir [Chaisantikulwat2006] pour μ_{MR} et [Cros2006] pour μ_{eff}.

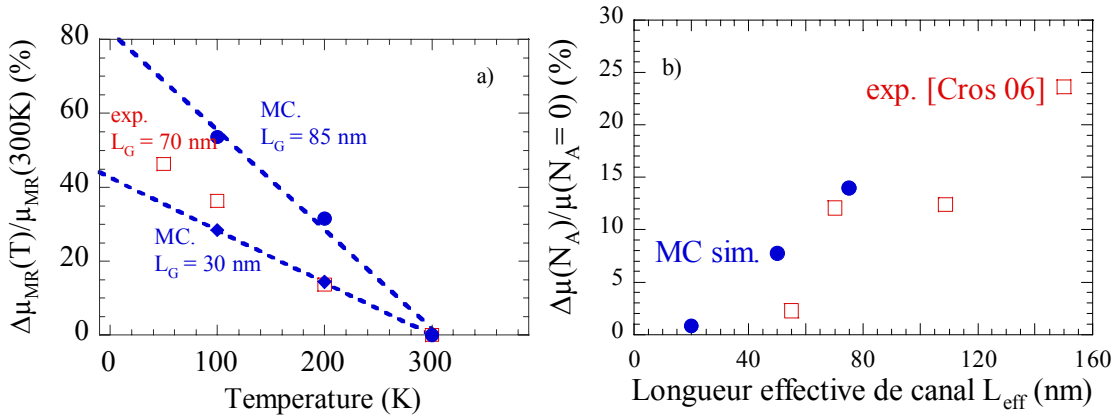

Figure 57 : a) Effet de la température sur μ_{MR}, b) influence du dopage canal sur μ_{eff}.

On observe que les tendances expérimentales sont bien reproduites par les simulations MC. Du fait de la diminution de la fréquence de l'interaction électron-phonon à basse température, la mobilité extraite croît quand la température diminue (Figure 57a). Afin de caractériser l'effet du dopage du canal, nous avons calculé la variation de mobilité effective extraite à dopage non nul ($N_A = 10^{17}$ et 10^{18} cm^{-3}) relativement à celle du dispositif correspondant à canal non dopé. Cette variation est représentée sur la Figure 57b en fonction de la longueur de canal. On s'aperçoit que l'influence du dopage sur la mobilité extraite a tendance à s'annuler pour les faibles longueurs, en accord avec les tendances expérimentales [Cros2006]. En effet, les électrons sont plus énergétiques car ils sont sous l'effet d'un champ parallèle plus fort dans les dispositifs courts. Or, l'interaction avec les impuretés ionisées décroît avec l'énergie des porteurs. Ainsi, l'interaction avec les impuretés dans le canal devient moins fréquente dans les canaux courts. De plus, comme décrit par la suite, le transport étant de plus en plus non stationnaire lorsque L_G diminue, l'influence des interactions se réduit de manière générale.

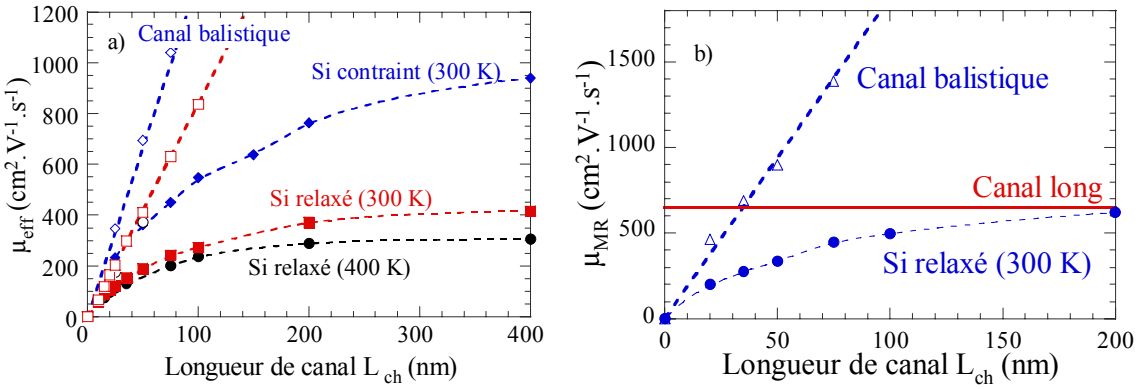

Figure 58 : [Huet2008c; Huet2007] Mobilités extraites en fonction de L_{ch}, a) μ_{eff}, b) μ_{MR}. Les tirets sont des guides pour les yeux.

Les mobilités extraites en fonction de la longueur de canal sont représentées sur la Figure 58 (canal non dopé). On observe bien une diminution de la mobilité apparente quand L_{ch} diminue, et ce sans qu'il y ait eu besoin de prendre en compte de phénomène de diffusion supplémentaire lié aux canaux courts (comme par exemple la présence de défauts). On observe également une amélioration de la mobilité dans le cas contraint, due à la levée de dégénérescence entre les vallées Δ_2 et Δ_4 (peuplement préférentiel des vallées de faible masse longitudinale et diminution des interactions par les phonons intervallées [Aubry-Fortuna2005]), même si cette amélioration semble s'effacer quand L_{ch} diminue.

Dispositif	μ_{eff} Si relaxé T = 300 K	μ_{eff} Si relaxé T = 400 K	μ_{eff} Si contraint T = 300 K	μ_{MR} Si relaxé T = 300 K
Mobilité canal long (cm^2.V^{-1}.s^{-1})	510	355	1000	650
K_{eff}^{bal} ou K_{MR}^{bal} (cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1})	8,4	7,2	13,2	19,5
K_{eff}^{bal} issu de Shur (cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1})	20	17,3	23,9	–

Tableau 6 : [Huet2008c; Huet2007] Paramètres issus des simulations MC. K_{eff}^{bal} (ou K_{MR}^{bal}) est la pente de la courbe de mobilité apparente $\mu(L_{ch})$ extraite des simulations MC des DG-MOSFET à canal balistique ou issue du formalisme de Shur.

En ce qui concerne la mobilité apparente extraite des dispositifs à canal balistique, elle semble être proportionnelle à la longueur de canal, comme prédit par le modèle de Shur (pentes reportées dans le Tableau 6).

2.2.3.2 Limites de l'approche stationnaire

Sachant que le champ électrique parallèle au transport augmente quand on réduit la longueur de canal et que l'on a vu au chapitre 2 que la mobilité diminue à fort champ, on peut se demander dans quelle mesure cet effet purement stationnaire influe sur la mobilité effective extraite des caractéristiques.

Afin de quantifier l'influence des effets stationnaires sur la mobilité extraite dans les dispositifs à canal standard, on utilise une expression de la mobilité corrigée par le champ dans le canal (modèle Caughey-Thomas), vue au chapitre 2 :

$$\mu(E_{//}) = \frac{\mu_{long}}{\left[1+\left(\frac{\mu_{long}}{v_{sat}}E_{//}\right)^{\beta}\right]^{1/\beta}} \qquad (3.2.3)$$

Les paramètres v_{sat} et β sont ajustés sur les simulations MC champ constant dans du Si massif comme montré sur la Figure 59a et on obtient les valeurs attendues pour du Si relaxé non dopé ($v_{sat} \approx 1{,}05\ 10^5$ cm/s, $\beta \approx 1$). En ce qui concerne la mobilité dans les dispositifs, on choisit comme mobilité canal long celle obtenue dans une structure DGMOS longue (cf. Tableau 6) et on choisit comme champ parallèle moyen dans le canal $E_{//} = V_{DS}/L_{ch}$.

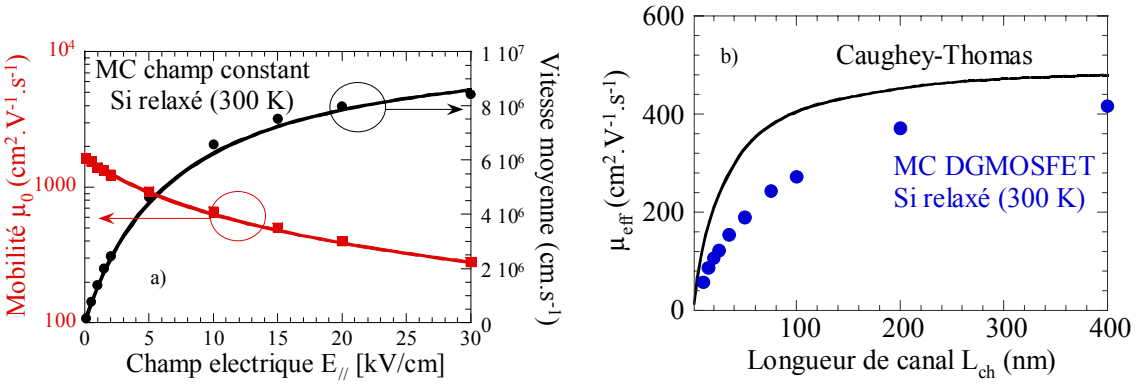

Figure 59 : Modèle Caughey-Thomas, Symboles : résultats MC, lignes : modèle, a) Matériau Si massif non dopé, on obtient $\beta = 1$, $v_{sat} = 1{,}05\ 10^5$ cm.s^{-1}, b) comparaison avec l'évolution de la mobilité effective en posant $E_{//} = V_{DS}/L_{ch}$.

Comme on peut le voir sur la Figure 59b, l'effet de saturation de la mobilité par le champ induit bien une réduction de la mobilité effective aux faibles L_{ch}, mais cette approche ne décrit pas quantitativement la dégradation observée. En effet, il faudrait une vitesse de saturation deux fois plus faible pour reproduire les données MC.

Etant donné qu'aucun phénomène de diffusion supplémentaire lié à L_{ch} n'est considéré dans nos simulations et que les effets de champ n'offrent pas une explication satisfaisante, nous allons voir que la dégradation observée dans nos simulations peut en revanche s'expliquer par l'influence des effets non stationnaires qui deviennent prépondérants dans les dispositifs courts.

2.2.3.3 Mise en évidence du régime de transport

Afin de mettre en évidence le régime de transport non stationnaire, nous avons extrait certaines grandeurs microscopiques des simulations MC pour chaque L_{ch} : le libre parcours moyen λ_{lpm} (cf. Figure 60a) et la balisticité intrinsèque B_{int} (cf. Figure 60b). Pour calculer le libre parcours moyen, on cumule la distance couverte par chaque porteur simulé durant sa traversée du canal. En divisant cette distance par le nombre d'interactions qu'il a subi, on obtient le libre parcours de ce porteur. A la fin de la simulation, le libre parcours moyen λ_{lpm} est obtenu en prenant la moyenne des libres parcours de tous les porteurs simulés. La balisticité intrinsèque B_{int} est la proportion des porteurs injectés par la source qui sont balistiques, i.e. n'ayant subi aucune interaction lors de leur traversée du canal [Huet2008c; Saint-Martin2005].

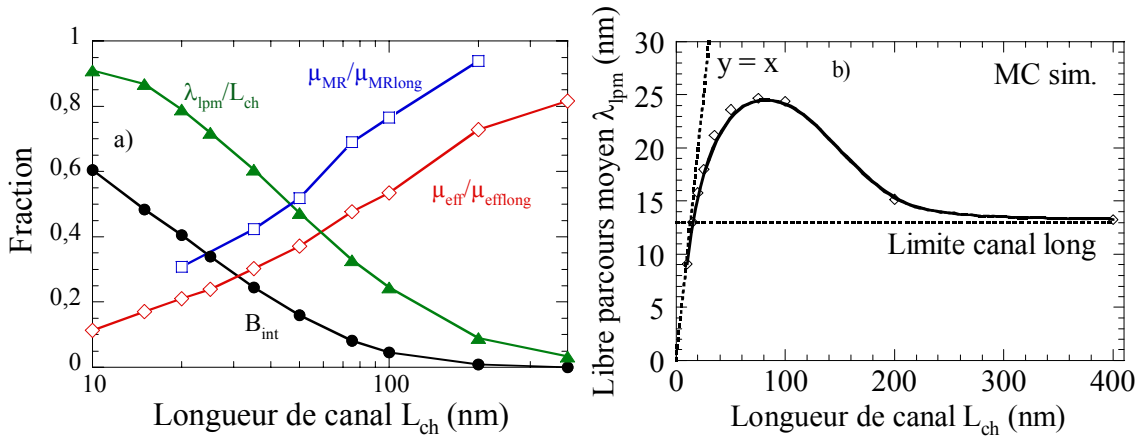

Figure 60 : Conditions de polarisation : V_{DS} = 50 mV, V_{GS}-V_T = 0,4V, a) comparaison entre la balisticité intrinsèque, le rapport λ_{lpm}/L_{ch} et la dégradation de mobilité apparente (MR et effective), b) libre parcours moyen λ_{lpm} extrait des simulations MC.

La Figure 60a représente le rapport des mobilités apparentes sur leur équivalent canal long en fonction de L_{ch}, comparé au rapport du libre parcours moyen sur la longueur de canal λ_{lpm}/L_{ch} et à B_{int}. La réduction de mobilité apparente est significative même aux longueurs de canal pour lesquelles la proportion de porteurs balistiques est très faible. Elle semble en

revanche plus fortement corrélée au rapport λ_{lpm}/L_{ch}. Le libre parcours moyen, quant à lui, est loin d'être indépendant de L_{ch}. Pour L_{ch} grand, λ_{lpm} tend vers la valeur obtenue dans une structure canal long et le transport est stationnaire. Quand L_{ch} diminue, le nombre moyen de collisions diminue et on est alors dans le régime quasi-balistique, ce qui entraîne une augmentation de λ_{lpm}. Enfin, pour L_{ch} très petit (< 20 nm), λ_{lpm} est limité par la longueur de canal, ce qui est typique d'un transport balistique. Ce comportement est représentatif de la transition entre les régimes stationnaire et balistique en passant par la phase quasi-balistique. Dans ce cadre, on peut remettre en question le fait d'utiliser les formulations issues des hypothèses de transport purement stationnaire pour l'extraction de mobilité et la modélisation du courant.

Nous allons maintenant montrer comment les effets non stationnaires peuvent être pris en compte pour interpréter et modéliser la mobilité apparente, d'abord dans le cas de la mobilité effective, puis dans le cas de la mobilité de magnétorésistance.

2.3 Mobilité effective

2.3.1 Modèle quasi-balistique

Nous avons vu précédemment que l'approche développée par Shur prédit une variation linéaire du paramètre de mobilité balistique μ_{eff}^{bal} avec L_{ch}, que nous réécrivons ici :

$$\mu_{eff}^{bal} = K_{eff}^{bal} L_{ch} \tag{3.2.4}$$

Or, la mobilité apparente des dispositifs à canal balistique est effectivement proportionnelle à L_{ch}, comme illustré sur la Figure 61a. La pente K_{eff}^{bal} extraite des simulations MC (cf. Tableau 6) est en revanche différente de celle issue de la théorie de Shur. En effet, en utilisant la formulation de μ_{eff}^{bal} de l'équation (3.2.1) avec une masse effective $m^* = 0{,}26\ m_0$ ($0{,}19\ m_0$ dans le cas contraint), on obtient une valeur de K_{eff}^{bal} de $20\ cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$ (23,9 dans le cas contraint), bien supérieure à la valeur extraite des simulations MC de $8{,}4\ cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$ (13,2 dans le cas contraint).

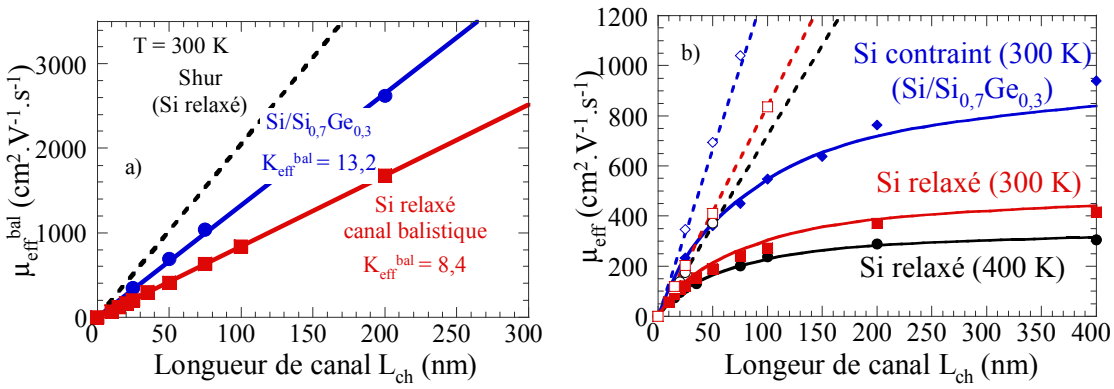

Figure 61 : a) Mobilité apparente issue des dispositifs à canal balistique, comparée à la mobilité balistique définie par Shur (tirets), pentes en $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$, b) approche Mathiessen (voir texte), superposée aux résultats MC (symboles).

En utilisant les valeurs de K_{eff}^{bal} extraites des simulations MC et en substituant (3.2.4) dans l'équation (3.2.1), la variation de $\mu_{eff}(L_{ch})$ obtenue, reproduite en traits pleins sur la Figure 61b, est en excellent accord avec le comportement de la mobilité apparente des dispositifs à canal standard étudiés. Cette approche est confrontée à des données expérimentales sur la Figure 62. Les mobilités effectives expérimentales ont été extraites par la méthode Y sur des MOSFET FD-SOI du CEA-LETI [Andrieu2007b] avec $T_{Si} \approx 14$ nm et sur des DG-MOSFET de STMicroelectronics de même épaisseur [Cros2006] (en fait des MOSFET à grille enrobante de grande largeur W, fabriqués avec une technologie *Silicon on Nothing* SoN [Harrison2003]).

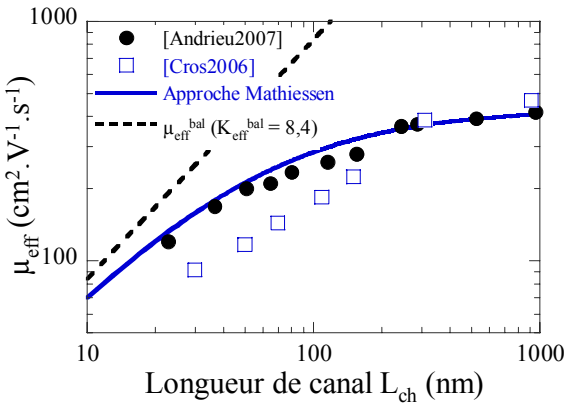

Figure 62 : Confrontation de l'approche Mathiessen (ligne) avec les données expérimentales de [Andrieu2007b] (symboles vides) et de [Cros2006] (symboles pleins), avec $\mu_{eff}^{long} = 430$ $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$ (exp.) et $K_{eff}^{bal} = 8{,}4$ $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$ (MC).

L'accord avec [Andrieu2007b] est excellent, mais le modèle semble surestimer la mobilité apparente de [Cros2006]. Néanmoins, sachant qu'aucune correction par le champ n'est considérée dans ce modèle, le bon accord observé entre l'approche Mathiessen et les mesures indique bien que la dégradation de mobilité peut effectivement être en grande partie expliquée par l'influence des effets non stationnaires sur les méthodes d'extraction de mobilité.

Cependant, la signification du paramètre K_{eff}^{bal} reste peu claire et il reste à expliquer l'écart entre la valeur extraite des simulations MC et la valeur théorique. Une certaine différence peut être attribuée à la valeur relativement élevée de V_{DS} considérée dans nos simulations (pour limiter le bruit particulaire), qui est loin d'être négligeable devant l'énergie thermique. La linéarisation de l'équation du courant vue au chapitre précédent induit ainsi une erreur systématique. On peut quantifier cette erreur assez simplement si on identifie l'équation de Hamer en posant $K_{eff}^{bal} = \mu_{eff}^{bal}/L_{ch}$ et sans résistance série ($\theta_1 = 0$) avec l'équation du courant balistique décrite au chapitre 2 (§2.4) :

$$\begin{aligned} I_D^{bal} &= WC_{GS}\left(V_{GS}-V_T\right)v_{th}\frac{1-e^{-qV_{DS}/k_BT}}{1+e^{-qV_{DS}/k_BT}} \\ I_D^{Hamer} &= WC_{GS}K_{eff}^{bal}\left(V_{GS}-V_T\right)V_{DS} \\ \Rightarrow K_{eff}^{bal} &\equiv \frac{v_{th}}{V_{DS}}\frac{1-e^{-qV_{DS}/k_BT}}{1+e^{-qV_{DS}/k_BT}} \end{aligned} \tag{3.2.5}$$

Comme on peut le voir sur la Figure 63, la valeur obtenue lorsque V_{DS} tend vers 0 est bien égale à la valeur déduite du formalisme de Shur, mais celle à $V_{DS} = 50\,mV$ (15,7 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$) reste près de deux fois supérieure à celle extraite des simulations MC (8,4 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$).

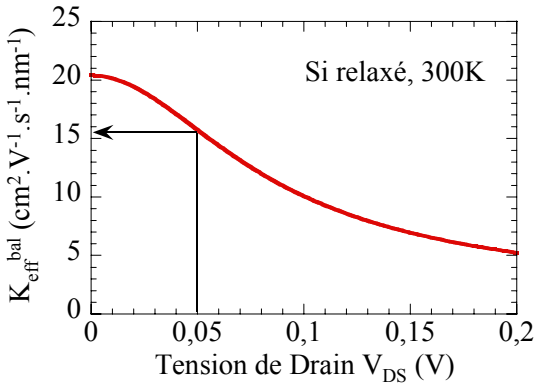

Figure 63 : Influence de V_{DS} sur le paramètre K_{eff}^{bal}, K_{eff}^{bal} (50mV) = 15,7 $cm^2/V/s/nm$.

Afin de mieux comprendre cet écart, nous allons étudier le cas particulier du transistor à canal balistique et l'influence de la résistance série sur l'extraction du paramètre de mobilité balistique.

2.3.2 Etude du cas balistique

Dans cette étude, nous avons utilisé le formalisme développé dans [Lundstrom2002b; Natori2003] en exploitant l'outil de calcul Schred [nanohub.org; Vasileska2006]. La densité d'inversion est déterminée en résolvant de manière auto-cohérente l'équation de Schrödinger 1D couplée à l'équation de Poisson 1D, en considérant une statistique de Fermi-Dirac et dans le cas d'un gaz 2Dk multi sous-bandes. Le courant est alors déterminé numériquement en utilisant le formalisme de Landauer, appliqué au cas dégénéré [Natori2003; Saint-Martin2005] :

$$I_D^{bal} = q \sum_{\text{vallées}} \sum_{\text{niveaux}} \int \left[v^+ D^+(E) f(\varphi_{FS}, E)\left(1 - f(\varphi_{FD}, E)\right) - v^- D^-(E) f(\varphi_{FD}, E)\left(1 - f(\varphi_{FS}, E)\right) \right] T(E) dE \quad (3.2.6)$$

Avec :

E : énergie des porteurs,

v^+, v^- : vitesse de groupe dans la source et le drain respectivement,

$D^+(E)$, $D^-(E)$: densité d'états 2Dk dans la source et le drain respectivement,

φ_{FS}, φ_{FD} : niveau de Fermi dans la source et le drain respectivement,

$f(\varphi_F,E)$ = fonction de Fermi-Dirac,

T(E) = coefficient de transmission d'un porteur injecté dans le canal à l'énergie E, unitaire dans le cas balistique (pas de rétrodiffusion dans le canal).

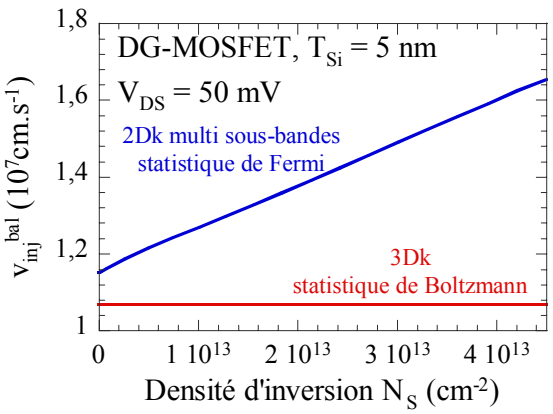

Figure 64 : Vitesse d'injection en fonction de la densité d'inversion pour un DG-MOSFET balistique, comparaison entre la vitesse issue d'un calcul Schrödinger/Poisson 1D [Vasileska2006] et la vitesse thermique pour un gaz d'électrons 3Dk non dégénéré.

Ce calcul permet également de déterminer la vitesse d'injection des porteurs v_{inj}^{bal} au sommet de la barrière, représentée sur la Figure 64 en fonction de la densité d'inversion. Dans le cadre des hypothèses considérées pour les simulations MC (pas de confinement, gaz d'électrons non dégénéré), v_{inj}^{bal} est indépendante de la densité d'inversion et égale à la vitesse thermique v_{th}. En revanche, dans le cas confiné, en tenant compte de la dégénérescence du gaz d'électrons, la vitesse d'injection augmente avec la densité d'inversion [Natori1994] et est même supérieure à la vitesse de saturation des électrons dans Si. Dans le cas des simulations MC ($N_S = 10^{13}$ cm^{-2}, $T_{Si} = 5$ nm), l'écart à la vitesse thermique est de 18% environ. Cependant, nous allons voir que cet écart est suffisamment faible pour ne pas perturber l'extraction de mobilité.

Le courant est initialement déterminé pour $R_S = 0$ à différentes polarisations (V_{GS}, V_{DS}). La valeur corrigée par R_S de $I_D^{bal}(V_{GS},V_{DS})$ est ensuite obtenue en interpolant le courant pour les valeurs corrigées des tensions de polarisation $V'_{DS} = V_{DS} - 2R_S I_D^{bal}(V'_{GS}, V'_{DS})$ et $V'_{GS} = V_{GS} - R_S I_D^{bal}(V'_{GS}, V'_{DS})$. Les résultats obtenus dans le cas du DG-MOSFET avec $T_{Si} = 5$ nm à faible $V_{DS} = 50$ mV sont reportés sur la Figure 65. Il faut préciser que V_{GS} a également été corrigé pour prendre en compte le décalage de tension de seuil dû aux effets quantiques.

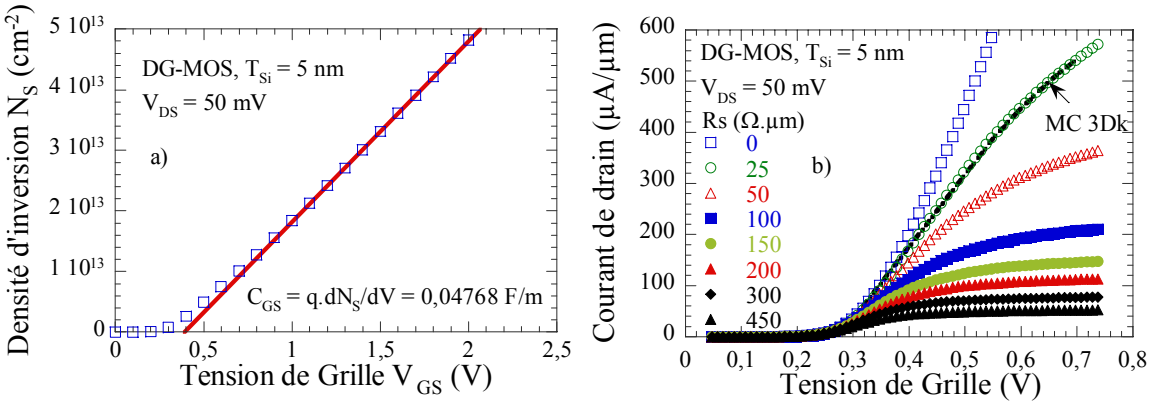

Figure 65 : Caractéristiques issues de Schred pour la géométrie DG-MOS, $T_{Si} = 5$ nm, a) densité d'inversion pour l'extraction de la capacité de grille C_{GS}, b) Courbes $I_D^{bal}(V_{GS})$ à $V_{DS} = 50$ mV pour différents R_S.

La caractéristique $I_D(V_{GS})$ obtenue pour $R_S = 25$ Ω.µm est très proche de celle obtenue avec MONACO pour le même dispositif à canal balistique (tirets), ce qui est cohérent avec notre approche précédente (même R_S extraite des potentiels issus des simulations MC). L'effet de R_S sur les caractéristiques est bien celui attendu, à savoir une chute de courant aux

forts V_{GS} par rapport au cas $R_S = 0$. Les valeurs de K_{eff}^{bal} extraites en utilisant la méthode de Hamer sont représentées en fonction de R_S sur la Figure 66 pour différentes géométries.

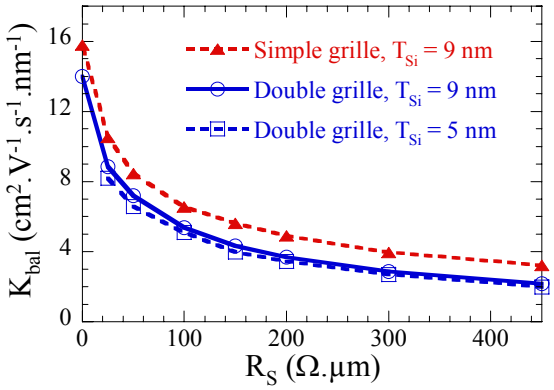

Figure 66 : Paramètre K_{eff}^{bal} an fonction de R_S pour 3 géométries, DG-MOSFET avec T_{Si} = 5 nm et T_{Si} = 9 nm, FDSOI MOSFET (simple grille) avec T_{Si} = 9 nm.

K_{eff}^{bal} est assez fortement dépendant de la résistance série et semble diminuer moins vite pour les fortes valeurs de R_S. En revanche, la valeur de K_{eff}^{bal} semble assez peu dépendante de la géométrie du dispositif concerné, ce qui explique le bon accord de l'approche Mathiessen avec les données expérimentales. La valeur de K_{eff}^{bal} dans les conditions du DG-MOSFET étudié par simulation MC (T_{Si} = 5 nm, R_S = 25 Ω.µm) est de 8,2 cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}, ce qui est très proche de celle extraite de la courbe $\mu_{eff}^{bal}(L_{ch})$ des simulations MC. Cela montre que l'influence de la dégénérescence sur la vitesse d'injection change peu la valeur de la mobilité apparente extraite.

Cette étude nous montre que l'extraction de mobilité utilisant des formulations du courant fondées sur des hypothèses stationnaires dans des dispositifs balistiques ne permet pas de s'affranchir correctement de l'effet des résistances série. De plus, elle confirme qu'il est indispensable de tenir compte de l'influence des effets non stationnaires pour interpréter la mobilité apparente extraite des caractéristiques $I_D(V_{GS})$. Cela est possible en utilisant une approche Mathiessen incluant un terme de mobilité balistique proportionnel à la longueur de canal, dont la pente doit être déterminée en tenant compte de l'influence de la résistance série. On peut imaginer faire des abaques de K_{eff}^{bal} en fonction de R_S à partir de calculs de courant balistique pour différentes géométries comme ceux menés ici.

Comme nous avons montré que la mobilité extraite des caractéristiques électriques n'a plus le sens habituel du terme qu'on lui donne en régime purement diffusif, nous allons

maintenant présenter l'intérêt de cette mobilité apparente présente pour la modélisation du courant dans les transistors.

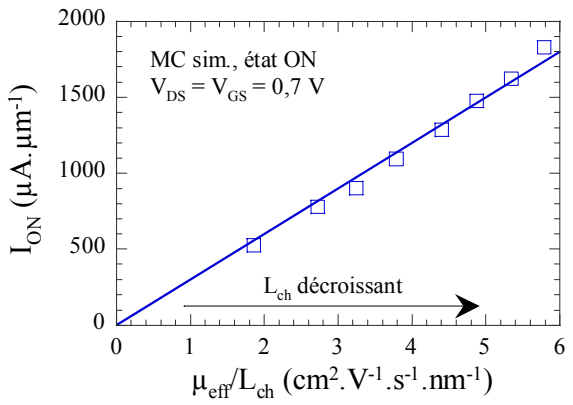

Figure 67 : DG-MOSFET canal standard en Si relaxé, courant de drain à l'état ON (fort $V_{DS} = V_{GS} = 0,7$ V) en fonction du rapport μ_{eff}/L_{ch}, où μ_{eff} est extrait des caractéristiques à faible $V_{DS} = 50$ mV.

La Figure 67 montre le courant à l'état ON du transistor (régime saturé, à fort $V_{DS} = V_{GS} = 0,7$ V) en fonction du rapport entre la mobilité apparente extraite à faible $V_{DS} = 50$ mV (régime ohmique) et L_{ch}. On voit que I_{ON} et μ_{eff} sont très fortement corrélés. Ainsi, la mobilité effective extraite en régime linéaire permet de prédire les performances des dispositifs à l'état ON. Cette corrélation implique que la mobilité effective a beau n'être qu'une mobilité apparente, elle reste un facteur de mérite pertinent pour les performances des transistors courts.

Le comportement de la mobilité effective avec la longueur de canal ayant été éclairci, nous allons maintenant nous intéresser à la mobilité de magnétorésistance, dont le comportement est similaire.

2.4 Mobilité de magnétorésistance

La mobilité de magnétorésistance a été récemment étudiée théoriquement dans les dispositifs ultimes, mais essentiellement avec des simulations MC non auto-cohérentes, i.e. en considérant un champ électrique parallèle constant et uniforme dans le canal [Donetti2007a; Donetti2007b; Lusakowski2007; Zilli2007]. Ces travaux ont permis d'étudier l'influence de la densité d'inversion, de la température et de l'épaisseur de film. Ici, nous considérons des simulations auto-cohérentes où le transport de charges influence l'électrostatique et réciproquement. Nous allons voir que cet aspect est important, notamment dans le cas des

dispositifs à canal balistique. La prise en compte d'un champ magnétique uniforme avec ce simulateur a été validée [Huet2008c] en simulant une résistance de Hall où le rapport de la mobilité Hall extraite sur la mobilité faible champ est très proche des données expérimentales de [Landolt-Börnstein1982].

2.4.1 Modèle quasi-balistique

Nous avons pu voir que le comportement de μ_{MR} est qualitativement le même que celui de μ_{eff}. En particulier, la mobilité apparente extraite des dispositifs à canal balistique est proportionnelle à L_{ch}. Comme dans le cas de la mobilité effective, on peut alors écrire :

$$\mu_{MR}^{bal} = K_{MR}^{bal} L_{ch} \tag{3.2.7}$$

La pente K_{MR}^{bal} extraite des simulations MC de dispositifs à canal balistique est de 19,5 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$. En utilisant cette valeur dans l'équation (3.2.7) et en substituant μ_{eff}^{bal} dans l'approche Mathiessen (3.2.1) vue précédemment, on obtient une expression pour la mobilité apparente de magnétorésistance dans les dispositifs à canal standard :

$$\mu_{MR} = \frac{\mu_{MR}^{long}}{1 + \frac{\mu_{MR}^{long}}{K_{MR}^{bal} L_{ch}}} \tag{3.2.8}$$

Comme on peut le voir sur la Figure 68, l'accord entre cette approche et les données MC est excellent, ce qui démontre l'importance des effets non stationnaires, même dans le cas de l'extraction de μ_{MR}.

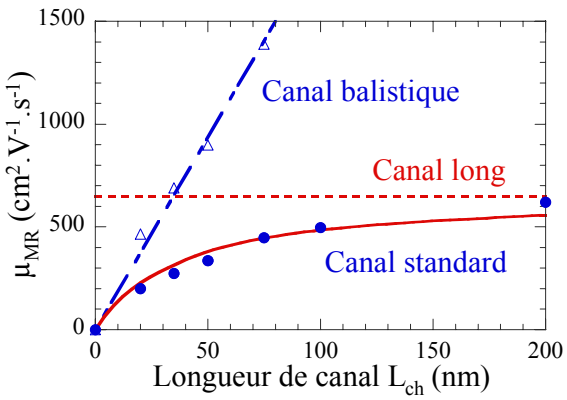

Figure 68 : Approche Mathiessen (ligne) pour μ_{MR} superposée aux données MC (cercles pleins).

Avant d'étudier plus avant le paramètre K_{MR}^{bal} en s'intéressant de plus près au cas du dispositif à canal balistique, nous allons confronter cette approche à l'expérience. Il existe peu

de données expérimentales fiables sur des dispositifs ultimes en fonction de la longueur de canal, incluant notamment une correction de l'extraction par les résistances série [Chaisantikulwat2006]. Sur la Figure 69, l'approche Mathiessen est confrontée aux mesures réalisées dans des transistors *bulk* ayant un canal dopé et des poches de surdopage [Lusakowski2005; Lusakowski2007], déjà présentées précédemment (§2.1, Figure 49).

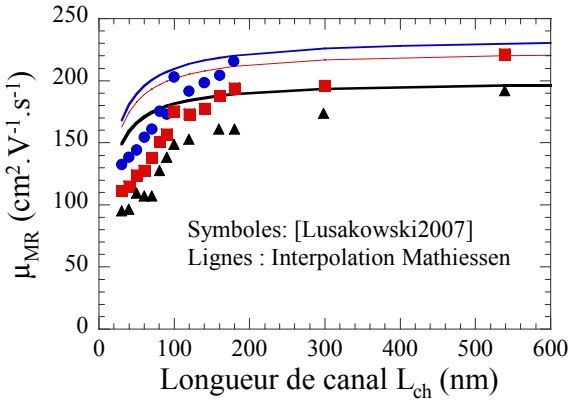

Figure 69 : Confrontation de l'approche Mathiessen (lignes) avec les données expérimentales de [Lusakowski2005; Lusakowski2007] pour différentes densités d'inversion N_S, triangles : 10^{12} cm^{-2}, carrés : 2 10^{12} cm^{-2}, cercles : 5 10^{12} cm^{-2}.

Dans les transistors *bulk*, il est bien connu que les poches de surdopage induisent une dégradation de mobilité aux faibles longueurs de canal [Andrieu2005; Lusakowski2005]. Cependant, nous n'avons pas considéré l'existence de telles poches dans nos simulations. De ce fait, l'accord entre les mesures et le modèle ne peut qu'être qualitatif, mais montre la part de la dégradation de mobilité pouvant être attribuée aux effets balistiques. Il est suggéré dans [Lusakowski2005] que l'influence des poches sur la mobilité pourrait être prise en compte de la même manière que les effets balistiques, en introduisant une mobilité due aux poches μ_P proportionnelle à L_{ch} ($\mu_P = K_P L_{ch}$) dans la loi de Mathiessen. Ainsi la formulation (3.2.8) devient :

$$\mu_{MR} = \frac{1}{\frac{1}{\mu_{MR}^{long}} + \frac{1}{K_{MR}^{bal} L_{ch}} + \frac{1}{K_P L_{ch}}} \qquad (3.2.9)$$

La Figure 70a montre les résultats obtenus en utilisant la valeur de K_{MR}^{bal} issue des simulations MC précédentes, les valeurs expérimentales de μ_{MR}^{long} données dans [Lusakowski2005] et en ajustant la pente K_P pour 3 densités d'inversion.

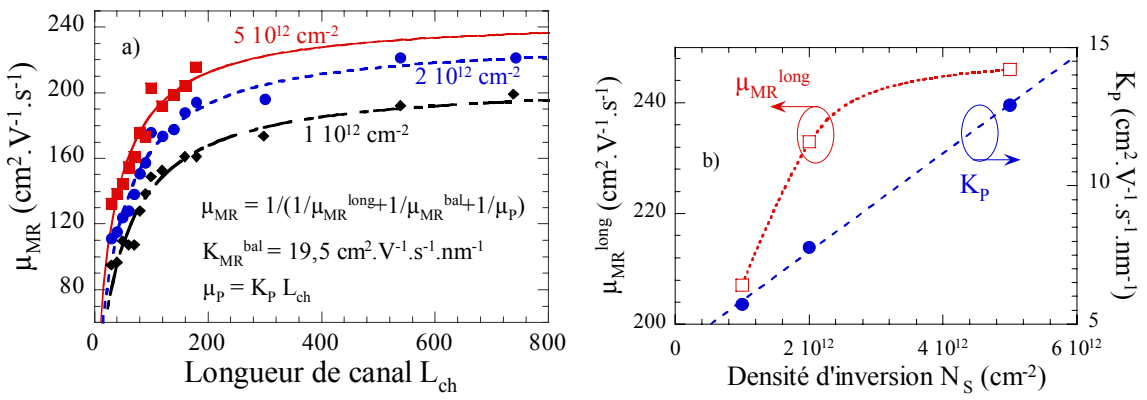

Figure 70 : a) Approche Mathiessen avec l'introduction d'une mobilité due aux poches $\mu_P = K_P L_{ch}$, b) Paramètres μ_{MR}^{long} (données expérimentales [Lusakowski2005]) et K_P (ajustement) utilisés en fonction de la densité d'inversion.

On peut observer sur la Figure 70a que l'ajustement de K_P permet un très bon accord entre le modèle et les données expérimentales. Si l'on ne peut juger la validité de cette approche quantitativement du fait de la différence entre les dispositifs simulés et les expériences, on peut néanmoins commenter le comportement du paramètre K_P avec la densité d'inversion N_S (Figure 70b). Il faut garder à l'esprit que plus la pente K_P est faible, plus l'effet des poches sur la dégradation de μ_{MR} est important. Sachant cela, on peut remarquer que l'influence des poches sur la mobilité est donc d'autant plus faible que la densité d'inversion est forte. Ce comportement peut s'expliquer par l'effet d'écrantage des impuretés par le gaz de porteurs qui augmente avec N_S, ce qui diminue l'influence des dopants présents dans les poches sur la mobilité extraite. On peut également noter que l'effet des poches est du même ordre de grandeur que les effets balistiques pour les fortes densités d'inversion (même pentes) et qu'il domine le transport aux faibles N_S.

Afin de mieux comprendre le comportement de μ_{MR} et la proportionnalité entre la mobilité apparente extraite des simulations des dispositifs à canal balistiques et la longueur de canal, nous allons maintenant étudier de plus près le cas du transistor à canal balistique.

2.4.2 Etude du cas balistique

Nous avons vu au paragraphe précédent qu'une mobilité de magnétorésistance apparente pouvait être extraite des caractéristiques de magnétorésistance des DG-MOSFET à canal balistique. Cela peut paraître surprenant dans la mesure où le transport est purement balistique et qu'aucun phénomène de collision ne vient perturber le transport de charges.

2.4.2.1 Méthode des flux

Afin de mieux comprendre la physique du transport balistique sous l'effet d'un champ magnétique, nous allons nous placer dans le cadre de la méthode des flux, vue au chapitre 2 (§2.4). Nous allons notamment nous intéresser aux flux de porteurs rétrodiffusés. En effet, en l'absence de champ magnétique et dans un canal balistique, le coefficient de transmission est égal à 1 et le flux de porteurs rétrodiffusés est alors nul. La Figure 71 montre les grandeurs microscopiques issues des simulations MC pour le dispositif balistique avec L_{ch} = 20 nm.

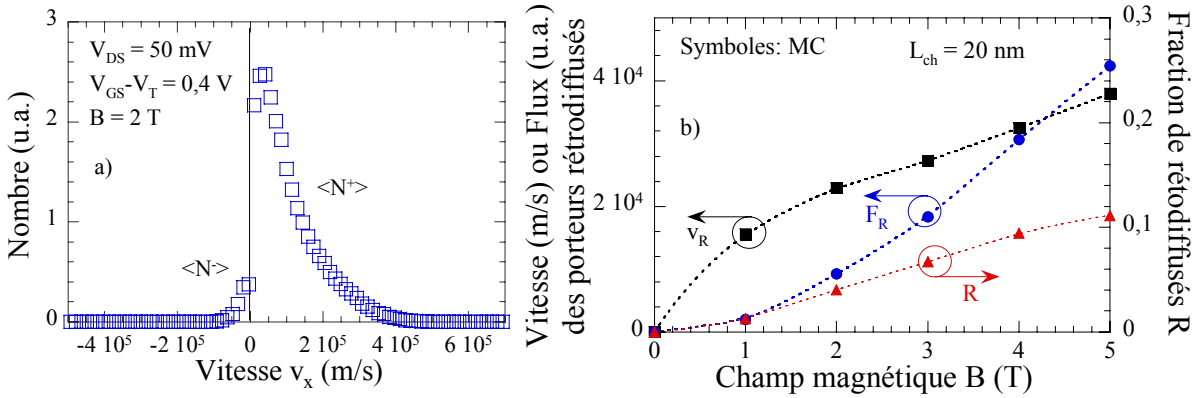

Figure 71 : DG-MOSFET à canal balistique (L_{ch} = 20 nm) sous champ magnétique, grandeurs microscopiques au sommet de la barrière, issues des simulations MC, a) distribution en vitesse des porteurs injectés par la source, b) carrés : vitesse des porteurs rétrodiffusés v_R, cercles : flux de porteurs rétrodiffusés F_R, triangles : coefficient de rétrodiffusion R. Les pointillés sont des guides pour les yeux.

On peut observer sur le spectre en vitesse $f(v_x)$ de la Figure 71a que lorsqu'on applique un champ magnétique (ici B = 3 T), il y a une proportion non négligeable de porteurs à vitesse négative au sommet de la barrière, alors qu'ils sont absents quand B = 0. Ils correspondent au flux rétrodiffusé par le champ magnétique dans le canal. On peut également remarquer que les distributions à $v_x > 0$ et à $v_x < 0$ ressemblent à des hémi-maxwelliennes. On peut calculer la fraction de porteurs rétrodiffusés par le champ magnétique $R = N^-/N_{tot}$, N^- étant le nombre de particules à vitesse négative au sommet de la barrière et N_{tot} le nombre total de particules au sommet de la barrière (i.e. le nombre total de porteurs initialement injectés par la source dans le canal). La vitesse moyenne des porteurs rétrodiffusés se calcule également à partir de ce type de spectre :

$$v_R = \frac{\sum_{v<0} v\, f(v)}{\sum_{v<0} f(v)} = \frac{F_R}{N^-} \qquad (3.2.10)$$

où F_R est le flux de porteurs rétrodiffusés. Ces trois grandeurs (R, v_R, F_R) permettent de caractériser la population de porteurs rétrodiffusés et sont représentées sur la Figure 71b en fonction du champ magnétique. On peut remarquer que, tout comme le courant de drain, le flux rétrodiffusé semble proportionnel à B^2.

Afin de quantifier l'influence du champ magnétique appliqué, nous allons utiliser la méthode des flux. Nous avons vu au chapitre 2 (§2.4) que le courant à faible V_{DS} pour un transistor à canal balistique s'écrit dans le cas d'un gaz d'électrons non dégénéré :

$$I_D^{bal} = WC_{GS}\left(V_{GS} - V_T\right)v_{th}\left(\frac{q}{k_B T}\frac{V_{DS}}{2}\right) \tag{3.2.11}$$

Cette approche ne tient pas compte des porteurs rétrodiffusés par le champ. Cependant, nous avons vu que le champ magnétique induit une déviation suffisamment forte des trajectoires pour que des porteurs soient rétrodiffusés vers la source (spectre f(v) de la Figure 71a). Afin de prendre en compte ce phénomène, on définit un coefficient de rétrodiffusion R dépendant du champ magnétique :

$$I_D(B) = \left(1 - R(B)\right)I_D^{bal} \tag{3.2.12}$$

Cela revient à définir une vitesse d'injection v_{inj} remplaçant v_{th} dans l'équation (3.2.11) :

$$v_{inj} = \left(1 - R(B)\right)v_{th} \tag{3.2.13}$$

En identifiant cette expression du courant avec celle issue des hypothèses de transport purement stationnaire (chapitre 2, §2.3.4.2), utilisée pour l'extraction de mobilité, on obtient :

$$\mu_{MR}^2 B^2 \equiv R(B) \tag{3.2.14}$$

Cela montre que, dans les dispositifs à canal balistique, la magnétorésistance extraite correspond exactement à la rétrodiffusion due au champ magnétique.

Pour déterminer la fraction de porteurs rétrodiffusés, étudions la trajectoire des porteurs balistiques sous l'influence de B. En résolvant les équations différentielles du mouvement dépendant du temps, on obtient l'expression suivante pour la trajectoire des porteurs injectés par la source dans le canal dans la direction source-drain :

$$x(t) = \frac{v_x(0)}{\omega_c}\sin\left(\omega_c t\right) + \frac{v_z(0)}{\omega_c}\cos\left(\omega_c t\right) - \frac{E_x}{B\omega_c}\cos\left(\omega_c t\right) \tag{3.2.15}$$

où $\omega_c = qB/m^*$, E_x est le champ électrique parallèle, $v_x(0)$ est la vitesse initiale selon x, $v_z(0)$ la vitesse initiale selon z (dans la direction de la largeur W).

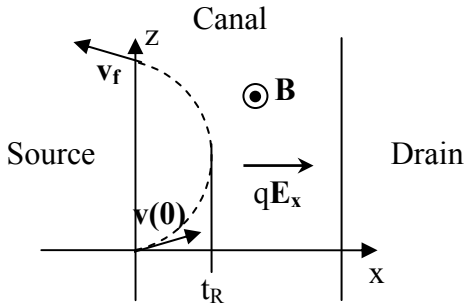

Figure 72 : Cas du transistor à canal balistique, trajectoire d'un porteur injecté dans le canal puis rétrodiffusé par le champ magnétique.

Comme on peut le voir sur la Figure 72, la condition pour qu'un porteur injecté dans le canal ($v_x(0) > 0$) soit rétrodiffusé est que sa vitesse dans la direction source-drain s'annule avant d'atteindre le drain (que l'on suppose parfaitement absorbant) :

$$\frac{dx}{dt}(t_R) = 0, x(t_R) < L_{ch} \tag{3.2.16}$$

où t_R est le moment où la vitesse s'annule.

2.4.2.2 Résolution analytique approchée

On peut résoudre ce problème analytiquement en faisant les approximations suivantes :

- $v_z(0) = 0$ pour tous les porteurs injectés par la source,
- $E_x \approx 0$.

On obtient alors comme condition sur la distribution de porteurs rétrodiffusés :

$$v_x(0) < v_{lim} \approx \omega_c L_{ch} \tag{3.2.17}$$

En considérant une distribution initiale hémi-maxwellienne à l'équilibre thermique et en linéarisant pour les faibles champs magnétiques, on peut calculer la vitesse d'injection :

$$v_{inj} = \frac{\int_0^\infty vf(v)dv - \int_0^{v_{lim}} vf(v)dv}{\int_0^\infty f(v)dv} = v_{th} \exp\left(-\frac{\omega_c^2 L_{ch}^2}{\pi v_{th}^2}\right) \approx v_{th}\left(1 - \frac{\omega_c^2 L_{ch}^2}{\pi v_{th}^2}\right) \tag{3.2.18}$$

soit $R(B) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{q}{m^* v_{th}}\right)^2 B^2 L_{ch}^2$.

On voit que R(B) est proportionnel à B^2. En identifiant avec le cas diffusif via l'équation (3.2.14), on obtient pour la mobilité apparente de magnétorésistance dans le cas balistique :

$$\mu_{MR}^{bal} = \frac{q}{\sqrt{\pi} m v_{th}} L_{ch} = K_{MR}^{bal} L_{ch} \tag{3.2.19}$$

Cette approche très approximative (car on a supposé $E_x = 0$ et $v_z(0) = 0$) donne cependant un résultat étonnamment proche des tendances observées dans les structures simulées. Le flux rétrodiffusé est proportionnel à B^2, ce qui permet l'extraction d'un paramètre homogène à une mobilité et la mobilité apparente ainsi obtenue est proportionnelle à la longueur de canal. Cependant, la valeur de K_{MR}^{bal} calculée ainsi est fortement surestimée par rapport à celle extraite des simulations MC (36 vs. 19,5 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}.nm^{-1}$). De plus, les hypothèses considérées ne sont pas justifiables dans les dispositifs étudiés, notamment le fait de négliger l'influence de la distribution initiale selon z.

2.4.2.3 Résolution numérique exacte

Par conséquent, il faut reprendre le calcul en résolvant numériquement les équations (3.2.15) et (3.2.16). Afin d'être le plus exact possible, nous allons considérer les profils de potentiels issus des simulations MC pour les résoudre.

La Figure 73a représente la bande de conduction d'un canal de DG-MOSFET (L_{ch} = 20 nm) sous un champ B = 3 T. On peut remarquer que la longueur effective L_{eff} sur laquelle le porteur peut réellement être rétrodiffusé est inférieure à la distance entre les caissons de source et de drain. En effet, une fois que les porteurs sont dans la zone du canal proche du drain, le champ électrique est trop fort pour qu'ils puissent être rétrodiffusés par le champ magnétique. Pour résoudre les équations (3.2.15) et (3.2.16), nous allons donc utiliser comme longueur de canal la distance sur laquelle le champ électrique est relativement faible et constant. La Figure 73b montre le champ électrique extrait en fonction du champ magnétique.

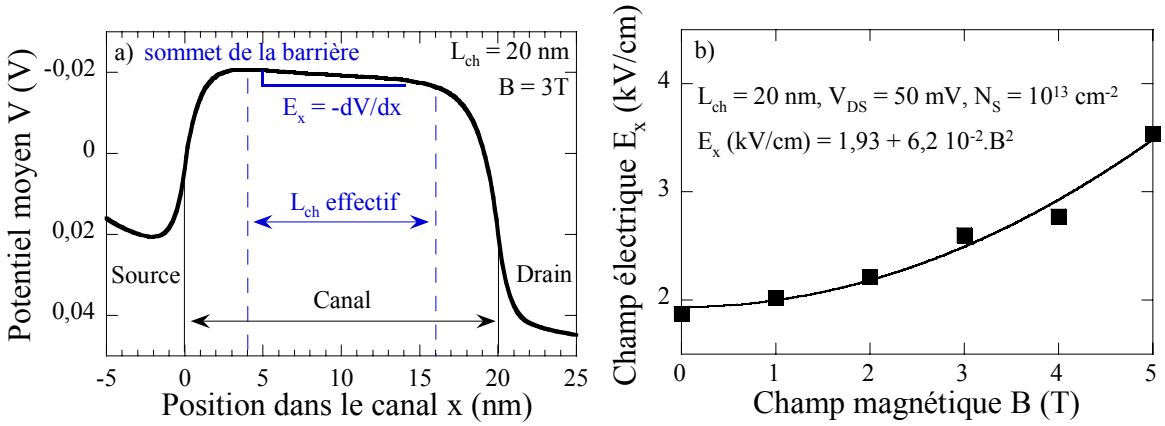

Figure 73 : DG-MOSFET à canal balistique (L_{ch} = 20 nm), a) bande de conduction, b) champ extrait en fonction de B.

Une fois les grandeurs E_x et L_{eff} extraites, on peut calculer N^-, v_R et F_R en considérant les distributions initiales et finales comme hémi-maxwelliennes. La Figure 74 représente la distribution $f(v_x,v_z)$ initiale et la zone hachurée représente la partie obéissant à la condition définie en (3.2.16), correspondant aux porteurs rétrodiffusés, ici dans le cas d'un champ B = 2 T.

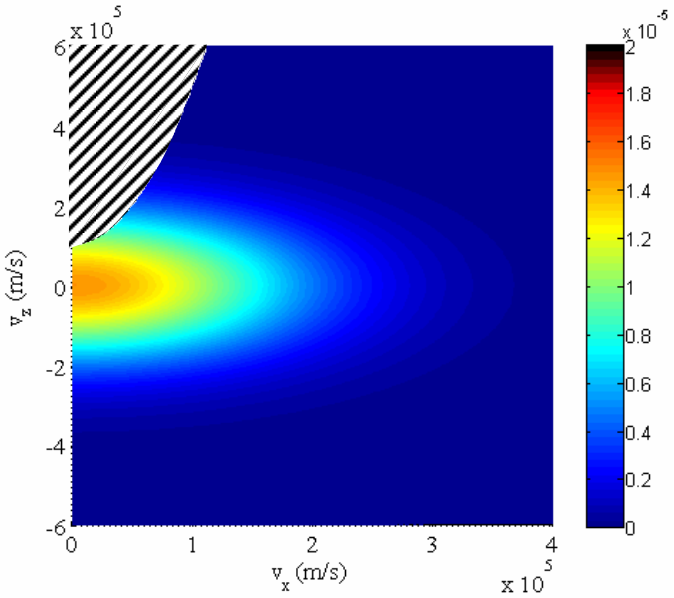

Figure 74 : Distribution des porteurs injectés par la source f(v). La partie rétrodiffusée par le champ magnétique est hachurée, B = 2 T.

On peut remarquer qu'une très grande partie des porteurs rétrodiffusés ont une vitesse $v_z(0)$ non nulle. De plus, l'influence du champ électrique est visible du fait que les porteurs de vitesse faible ne sont pas rétrodiffusés. Les résultats des calculs numériques, superposés aux

données issues des simulations MC sont représentés sur la Figure 75 pour L_{ch} = 20 nm et la Figure 76 pour L_{ch} = 35 et 50 nm.

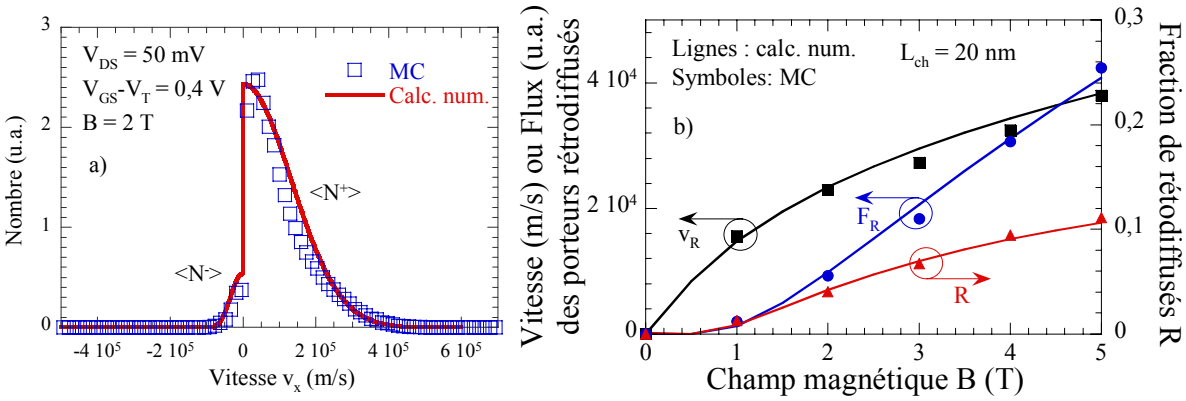

Figure 75 : DG-MOSFET à canal balistique (L_{ch} = 20 nm) sous champ magnétique, grandeurs microscopiques au sommet de la barrière, symboles : issues des simulations MC, lignes : calcul numérique (cf. texte). a) Distribution en vitesse des porteurs injectés par la source, b) carrés : vitesse des porteurs rétrodiffusés v_R, cercles : flux de porteurs rétrodiffusés F_R, triangles : coefficient de rétrodiffusion R.

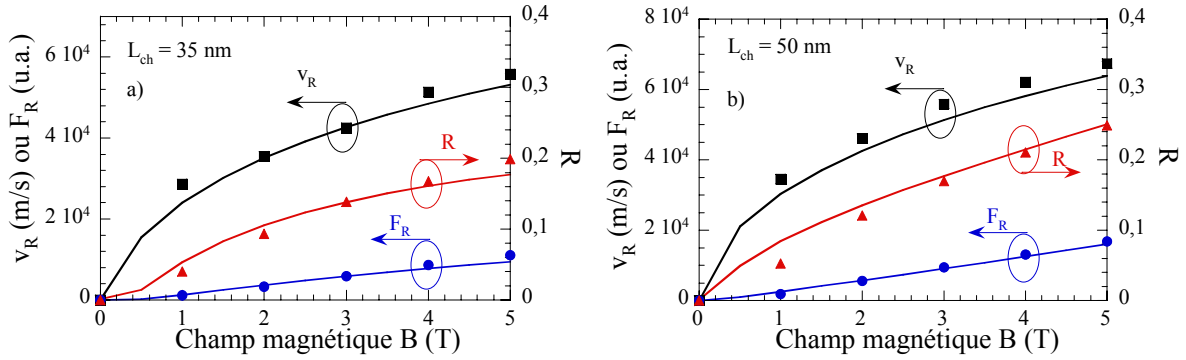

Figure 76 : Calculs numériques vs. MC canal balistique (L_{ch} = 35 et 50 nm)

L'accord entre les résultats des calculs numériques et des simulations est excellent dans tous les cas. On peut remarquer que la vitesse des porteurs rétrodiffusés ainsi que le coefficient de rétrodiffusion augmentent bien avec L_{ch}, ce qui est cohérent avec le comportement de $\mu_{MR}^{bal}(L_{ch})$. Ainsi, alors qu'une approche analytique simplifiée donne qualitativement les bonnes tendances en fonction de B et de L_{ch}, un calcul auto-cohérent est indispensable pour décrire quantitativement la physique du transport de charges sous l'influence d'un champ magnétique.

2.5 Conclusion

Nous avons ici mis en évidence l'importance de la prise en compte des effets balistiques quand il s'agit d'interpréter les mobilités extraites dans des transistors ultra courts. Nous avons étudié le comportement des mobilités apparentes extraites dans le cas des transistors balistiques. Nous avons également introduit les effets balistiques dans la définition de la mobilité apparente via une loi de Mathiessen, ce qui nous a permis de reproduire les résultats des simulations MC avec un excellent accord.

On peut maintenant comparer le cas de la mobilité effective et celui de la mobilité de magnétorésistance. Si on compare les valeurs des pentes de mobilité balistique, on remarque qu'elles diffèrent d'un rapport $K_{MR}^{bal}/K_{eff}^{bal} \approx 2{,}2$, alors que les mobilités obtenues dans les canaux longs diffèrent peu ($\mu_{MR}^{long}/\mu_{eff}^{long} \approx 1{,}2$). Cela met en évidence la différence intrinsèque qui existe entre les deux types de mobilité apparente en régime balistique. μ_{MR} est moins influencée par les effets balistiques que μ_{eff} (pente $K_{MR}^{bal} > K_{eff}^{bal}$). Dans le cas de la mobilité effective, il est connu que le coefficient de rétrodiffusion est uniquement dû aux collisions dans le canal [Lundstrom2000]. En revanche, dans le cas de la mobilité de magnétorésistance, non seulement les collisions induisent de la rétrodiffusion, mais elles limitent également la rétrodiffusion induite par le champ magnétique. En effet, plaçons-nous dans l'hypothétique cas d'un canal balistique infiniment long. Dans ces conditions, au vu de la condition de rétrodiffusion par B, tous les porteurs injectés finiraient par être rétrodiffusés et il n'y aurait aucun courant d'établi entre la source et le drain. Dans le cas plus réaliste du régime quasi-balistique, les collisions dans le canal induisent une redistribution aléatoire de la vitesse et un champ électrique parallèle limitant l'influence du champ magnétique.

En conclusion, nous avons montré que la dégradation de mobilité apparente observée dans les transistors ultimes peut au moins partiellement s'expliquer par les effets non stationnaires. En effet, les méthodes d'extraction s'appuient sur des hypothèses de transport purement stationnaire, ce qui est incohérent avec le régime de transport quasi-balistique régissant effectivement le courant, même si les collisions jouent encore un rôle important. Néanmoins, nous avons montré que la mobilité apparente peut être utilisée pour quantifier les performances des dispositifs ultimes, moyennant une prise en compte rigoureuse des effets non stationnaires.

3 Conclusion et perspectives du chapitre III

Ce troisième chapitre était consacré à l'étude du transport des électrons, avec un accent particulier sur la détermination et la définition de la mobilité dans les dispositifs ultra courts.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés au transport dans un barreau de matériau supposé infiniment long. Nous avons décrit les caractéristiques principales de la bande de conduction calculée avec la méthode **k.p** 30 bandes dans le cas du Si non contraint et nous avons étudié l'effet d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001). Nous avons ensuite précisé les développements du simulateur MC *Full Band* mis en place pour la gestion des interactions tenant compte d'une structure de bandes complète, également exploités pour le transport de trous dans le chapitre 4. Les paramètres du simulateur ont été validés par des comparaisons à des mesures de référence et les variations de mobilité expérimentales avec la contrainte biaxiale sont bien reproduites. Dans les cas étudiés ici, l'approche de la masse effective avec coefficient de non parabolicité reproduit bien les principales caractéristiques de la bande de conduction. Elle est suffisante pour une bonne description du transport des électrons.

Ainsi, étant donné le fort coût numérique de la prise en compte de la structure de bandes complète, l'étude systématique de l'extraction de mobilité en fonction de la longueur de canal a été réalisée avec l'approche analytique des bandes. Néanmoins certains développements propres au *Full Band* ont été exploités dans le cadre de la mobilité de magnétorésistance.

Dans un second temps, à l'aide d'une étude systématique, nous avons quantifié l'impact des effets non stationnaires sur les méthodes d'extraction de mobilité effective μ_{eff} et de magnétorésistance μ_{MR}. De plus, nous avons mis en évidence les différences intrinsèques entre μ_{eff} et μ_{MR} en régime balistique. Nous avons également proposé des interprétations physiques du comportement des mobilités extraites en fonction de la longueur des dispositifs. Enfin, nous avons proposé des modèles de mobilité simples et exploitables pour la simulation des transistors des prochains nœuds technologiques.

Par ailleurs, nous avons vu au chapitre 1 que le canal des transistors est traditionnellement orienté selon l'axe <110>. Or, quand on applique une contrainte uniaxiale dans cette direction particulière, un terme de cisaillement apparaît et provoque des variations spectaculaires de la masse effective [Rideau2006; Rideau2008a]. En outre, des expériences de

wafer bending ont mis en évidence l'effet de telles contraintes sur la mobilité des électrons [Irie2004; Rideau2008b]. Or, le simulateur MC *Full Band* ne permet pas en l'état de prendre en compte les contraintes de cisaillement. Les perspectives de ce travail sont d'étendre les capacités de MONACO à l'étude de contraintes quelconques pour le transport des électrons, en adaptant les algorithmes à un maillage non uniforme de l'espace réciproque [Ghetti2007]. Enfin, il serait intéressant de comparer les résultats de mobilité 3Dk à des calculs 2Dk tenant compte du confinement perpendiculaire. On peut s'attendre à ce qu'il n'y ait pas de différence entre les deux approches, car, dans le cas de la bande de conduction, les couplages entre les bandes à l'origine des perturbations des courbures sont essentiellement induits par la contrainte et dans une moindre mesure par la quantification.

Nous allons maintenant étudier le transport en bande de valence dans le même cadre. Contrairement au cas des électrons, nous allons voir qu'il est indispensable de prendre en compte une structure de bandes complète dans les simulations, même dans le cas non contraint.

Chapitre IV :

Transport de trous

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser exclusivement au transport de trous. Sa modélisation est connue pour être complexe, alors que le pMOSFET est le composant à améliorer en priorité pour optimiser les performances des circuits CMOS.

Nous commencerons par une étude détaillée de la structure de bande de valence 3Dk et des effets de contraintes biaxiales et uniaxiales sur des grandeurs caractéristiques telles que les courbures et les densités d'états. Nous étudierons ensuite un barreau de Si massif de longueur infinie avec le simulateur MC *Full Band*, où les répercussions des modifications des bandes par la contrainte sur le transport seront mises en évidence. Puis, nous nous intéresserons au transport dans des pDG-MOSFET ultra courts avec notamment une discussion sur l'impact de la contrainte sur les effets non stationnaires. Enfin, nous aborderons la mobilité faible champ dans les couches d'inversion en fonction de la contrainte, avec une comparaison de calculs 3Dk et 2Dk à des expériences de *wafer bending*.

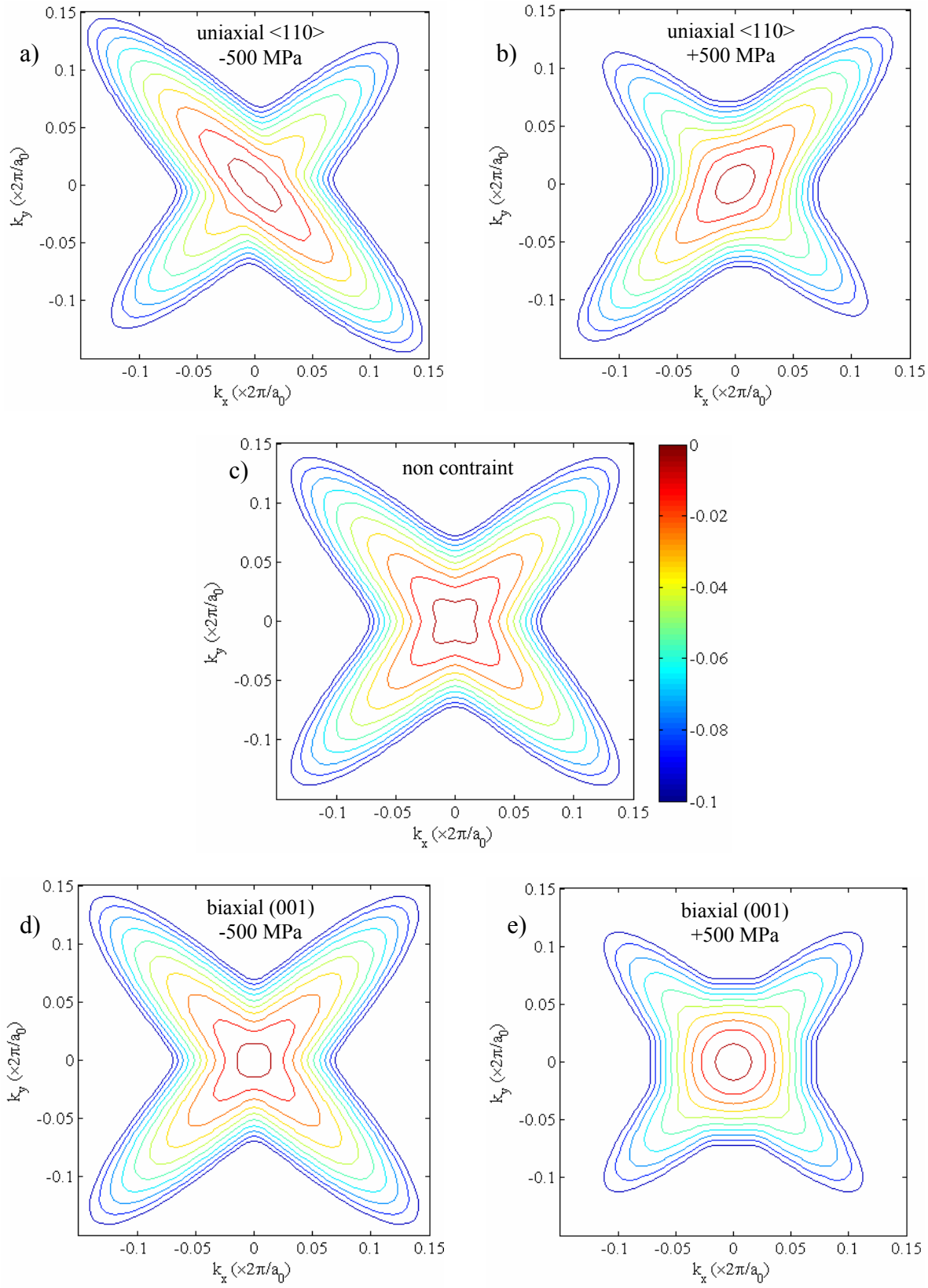

Figure 77 : Isocontours énergétiques pour la première bande de valence dans le plan (ΓX, ΓY), i.e. $k_z = 0$ pour différents cas de contrainte, a) -500 MPa uniaxiale selon <110>, b) +500 MPa uniaxiale selon <110>, c) non contraint, d) -500 MPa biaxiale, e) +500 MPa biaxiale. Les énergies sont référencées par rapport au maximum de la bande. Premier contour à E = 5 meV, écart énergétique entre les contours ΔE = 10 meV.

1 Matériau 3Dk « massif »

1.1 Structures de bandes

1.1.1 Autour de Γ

Nous avons déjà vu au chapitre 2 (§1.2.2.2) la forme des surfaces isoénergies et des isocontours pour le cas non contraint. La Figure 77 montre l'effet de différentes contraintes sur la forme des isocontours de la première bande de valence (dite de trous lourds dans le cas non contraint) dans le plan (ΓX, ΓY), i.e. $k_z = 0$. Le cas d'une compression biaxiale est peu documenté expérimentalement car très complexe à réaliser. Il est essentiellement étudié dans ce chapitre pour des raisons de comparaison avec les autres cas.

Dans le cas d'une contrainte uniaxiale selon l'axe <110> (Figure 77a et b), on peut observer que l'isocontour à très basse énergie (ici 5 meV) devient une ellipse comme nous l'avions décrit dans le chapitre 1 (§2.2.2.2). Dans le cas d'une compression, le petit axe (faible masse, favorable au transport) est dans la direction <110>, alors que dans le cas d'une tension, c'est plutôt dans la direction <-110> qu'il se situe, et ce avec une forme plus circulaire (et de plus forte masse). Cette déformation se répercute dans une moindre mesure sur les « ailes » dont les contours se resserrent ou s'écartent dans ces mêmes directions.

Si maintenant on s'intéresse au cas de la contrainte biaxiale dans le plan (001) (Figure 77d et e), on voit que l'isocontour à faible énergie devient assez circulaire, ce qui implique une tendance à rendre les propriétés de transport moins anisotropes que dans le cas non contraint. Dans les deux cas (compression et tension), les masses sont plus faibles que pour le Si non contraint. Ce fait, ajouté à la levée de dégénérescence des bandes hh et lh, ne peut qu'améliorer les propriétés de transport à faible champ. Nous verrons que cela n'est qualitativement pas toujours cohérent avec les tendances expérimentales et qu'il est indispensable de prendre en compte le confinement des porteurs dans le cas d'une contrainte biaxiale, notamment dans les couches d'inversion.

La Figure 78 montre la levée de dégénérescence des bandes hh et lh en fonction de la contrainte. Les cas de contraintes appliquées en compression uniaxiale et en tension biaxiale semblent les plus avantageux, alors que les cas réciproques entraînent une saturation de l'écartement des bandes quand l'intensité de la contrainte augmente.

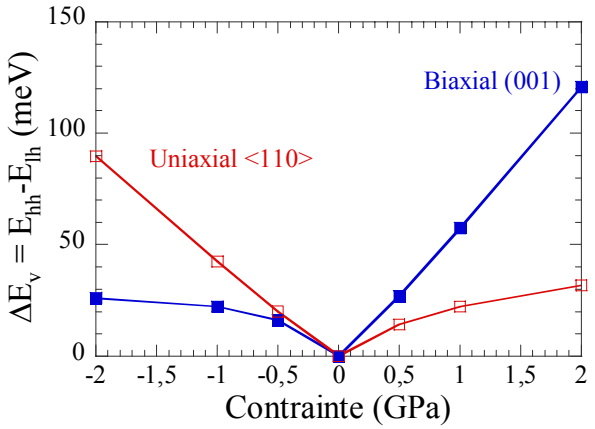

Figure 78 : Levée de dégénérescence des bandes en fonction de la contrainte. Symboles pleins : biaxiale dans le plan (001), symboles vides : uniaxiale selon <110>.

La Figure 79 représente les masses de courbures m_c des 3 premières bandes de valence, extraites dans des directions privilégiées (<100> et <110>) autour de Γ en fonction de la contrainte appliquée.

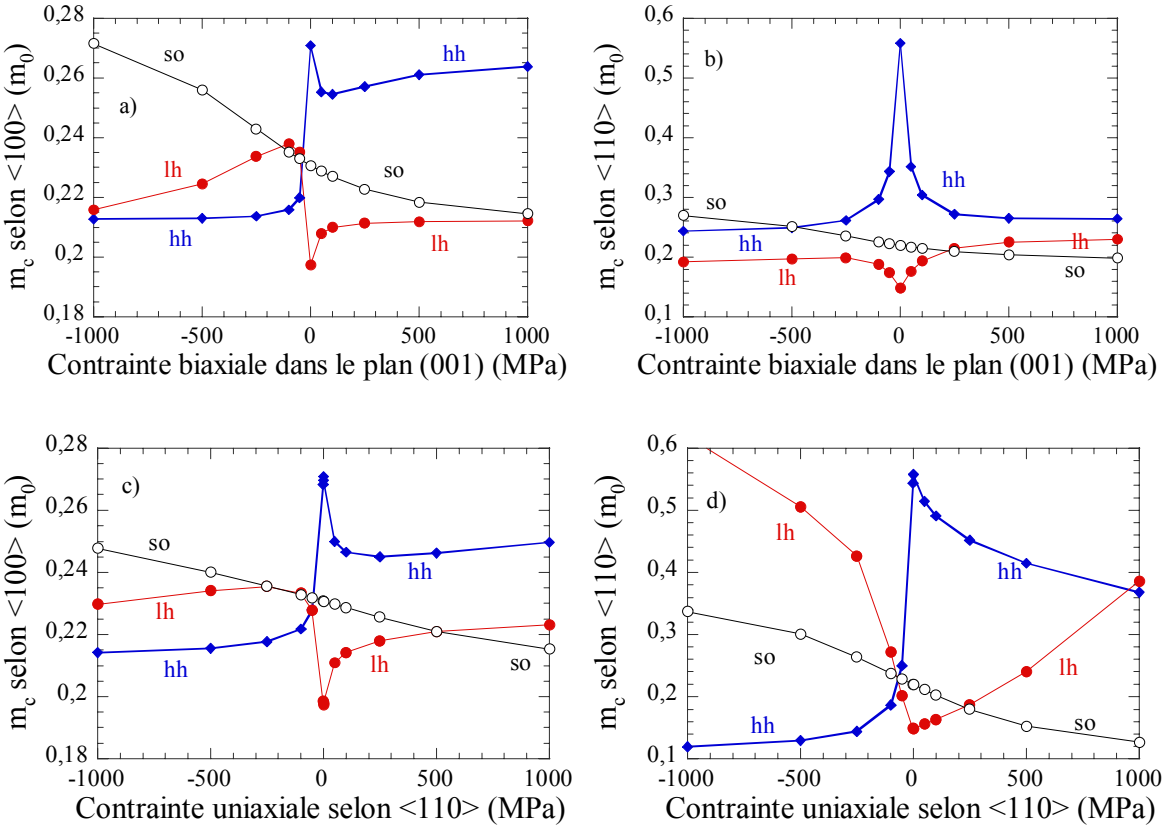

Figure 79 : Masses de courbure des 3 premières bandes de valence autour de Γ dans les directions <100> (a,c) et <110> (b,d), pour une contrainte biaxiale dans le plan (001) (a,b) et uniaxiale selon <110> (c,d). Losanges pleins : hh, cercles pleins : lh, cercles vides : so.

Dans tous les cas, la bande so (cercles vides) reste assez isotrope et sa masse varie de manière continue : elle diminue pour une contrainte en tension et augmente pour une compression. En revanche, les bandes hh et lh (nommées ainsi par convention, hh étant la plus haute) sont plutôt anisotropes et leur comportement est assez discontinu. De manière générale, dès qu'une contrainte est appliquée, les masses de la bande hh diminuent et celles de lh augmentent, toutes deux de manière assez brutale. Sans contrainte appliquée, la masse des trous « lourds » est plus élevée dans la direction <110> (0,56 m_0), ce qui rend l'orientation <100> (0,28 m_0) plus avantageuse pour le transport.

Une contrainte biaxiale (Figure 79ab) rend la bande hh plutôt isotrope dans le plan (ΓX, ΓY) avec une masse autour de 0,25 m_0 dans les deux directions de transport. De plus, les courbures de la bande lh varient relativement peu. Il semblerait que la contrainte en tension soit le cas le plus favorable (grand écart énergétique entre les bandes et courbures très diminuées dans toutes les directions).

Dans le cas de la contrainte uniaxiale selon <110> (Figure 79cd), le comportement est assez différent. Les bandes restent assez anisotropes et les variations des courbures de la bande lh, notamment dans la direction <110>, sont plus significatives. La compression est le cas le plus avantageux pour le transport car elle diminue énormément la masse de la bande hh dans la direction <110> (0,12 m_0 pour -1 GPa). Cependant, elle augmente tout autant celle de la bande lh (0,62 m_0). Du fait de la forte levée de dégénérescence dans ce cas (≈ 45 meV), l'effet global reste plutôt bénéfique pour le transport à faible champ, car la bande lh est alors peu occupée.

L'influence de la contrainte sur les courbures de bandes et les levées de dégénérescence permet de prédire qualitativement l'évolution des propriétés de transport, mais peut être assez trompeuse car elle reste limitée aux très faibles énergies cinétiques. Aussi, nous allons maintenant nous intéresser à des grandeurs intégrées sur la ZB, qui rendent un peu mieux compte de l'ensemble de la relation de dispersion et de l'occupation des bandes à l'équilibre thermodynamique.

1.1.2 Intégration de la ZB

La Figure 80a représente la densité d'états par bande obtenue en intégrant la relation de dispersion issue du calcul **k.p**, comparée à l'approche analytique (masse effective parabolique). On voit bien que cette dernière sous-estime grandement la DOS, même aux faibles énergies. La Figure 80b montre l'effet d'une contrainte uniaxiale de ±1 GPa selon l'axe <110> sur la DOS. En premier lieu, la levée de dégénérescence des bandes décale

l'apparition de la bande lh. En second lieu, l'allure de la DOS à faible énergie est très sensiblement modifiée par ce type de contrainte. En effet, elle est fortement réduite jusqu'à quelques k_BT et son comportement s'éloigne d'une variation en $E^{1/2}$. Aux plus fortes énergies, les courbes se rejoignent ce qui, comme dans le cas des électrons, laisse penser que le gain en vitesse à fort champ est réduit.

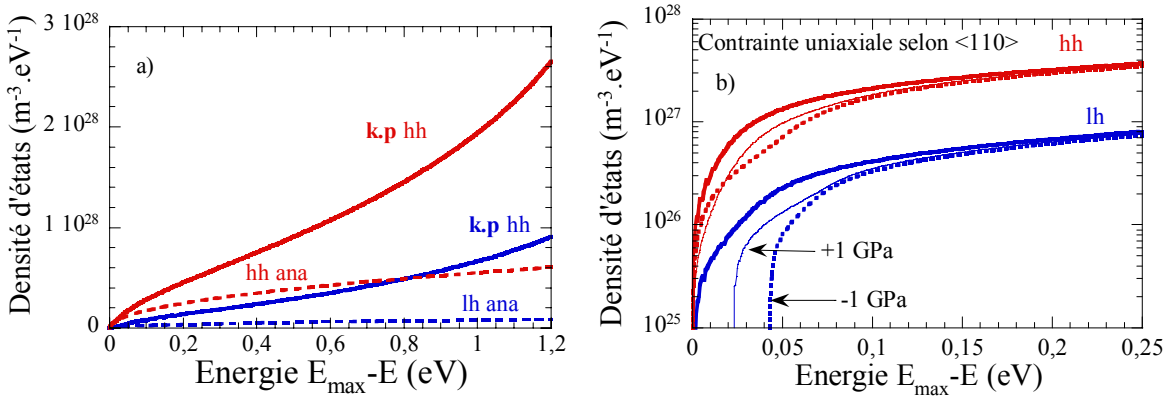

Figure 80 : Densité d'états par bande. L'origine des énergies est le maximum de bande de valence, a) calcul **k.p** 30 bandes (traits pleins) vs. modèle analytique de masse effective avec $m_{hh} = 0{,}87m_0$ et $m_{lh} = 0{,}24m_0$ (tirets), b) Si relaxé (traits pleins épais) comparé au Si sous contrainte uniaxiale selon <110> 1 GPa en compression (tirets épais), et 1 GPa en tension (traits pleins fins).

Afin de mieux voir l'effet de la contrainte sur les paramètres de transport, nous avons calculé la masse effective de concentration de porteurs m_{cc} (Figure 81a) et la vitesse thermique v_{th} dans les directions de transport <110> et $<1\bar{1}0>$ à T = 300 K (Figure 81b). m_{cc} traduit la masse de densité d'états en considérant l'occupation des bandes à l'énergie thermique et s'obtient par la relation suivante pour une bande donnée [Guillaume2005] :

$$m_{cc}(T) = \frac{2}{\sqrt{\pi}\left(k_B T\right)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\infty} m_{DOS}^{\frac{3}{2}}(E)\sqrt{E}\, f_B(E)dE \qquad (3.2.20)$$

où E est l'énergie cinétique (positive) référencée par rapport à l'extremum de la bande, $f_B(E)$ la fonction distribution de Boltzmann et m_{DOS} est la masse de densité d'états :

$$m_{DOS}(E) = \hbar^2 \left(\frac{2\pi^2 DOS(E)}{\sqrt{E}} \right)^{\frac{2}{3}} \qquad (3.2.21)$$

Cette approche permet d'obtenir une grandeur isotrope traduisant l'effet de la contrainte sur l'ensemble des courbures dans toutes les directions. m_{cc} est ainsi très liée au comportement de la densité d'états.

La vitesse thermique s'exprime de la manière suivante :

$$v_{th} = \frac{\sum_{bandes} \int \left| \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{n} \right| f_B(\mathbf{k}) d^3k}{\sum_{bandes} \int f_B(\mathbf{k}) d^3k} \tag{3.2.22}$$

où **n** est le vecteur normé dans la direction considérée, **v**(**k**) est la vitesse de groupe déduite de la relation de dispersion calculée, $f_B(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{-|E(\mathbf{k})|}{k_B T}\right)$ est la fonction de distribution de Boltzmann et E(**k**) est l'énergie de la bande considérée, référencée cette fois ci par rapport au maximum de la 1ère bande de valence, ce qui permet de traduire correctement l'effet de la levée de dégénérescence des bandes sur l'occupation thermique. Le comportement de v_{th}, très lié à la direction considérée, traduit l'influence de la contrainte sur les propriétés intrinsèques de transport à l'équilibre (i.e. sur les masses de conduction) dans une direction donnée pour toute la structure de bandes, ce qui permet de généraliser l'étude faite sur la masse extraite autour de Γ vue plus haut. Nous avons également calculé l'énergie moyenne des porteurs <E> pour une distribution de Boltzmann (Figure 81b) de la même manière que v_{th} :

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{bandes} \int E(\mathbf{k}) f_B(\mathbf{k}) d^3k}{\sum_{bandes} \int f_B(\mathbf{k}) d^3k} \tag{3.2.23}$$

On peut voir sur la Figure 81b que <E> est supérieure à la valeur habituelle de $3k_BT/2 \approx 38{,}8$ meV à $T = 300$ K, obtenue avec des bandes paraboliques. De plus, elle augmente avec la contrainte, ce qui quantifie l'influence de la déformation de la structure de bandes par la contrainte sur l'occupation des états d'énergie.

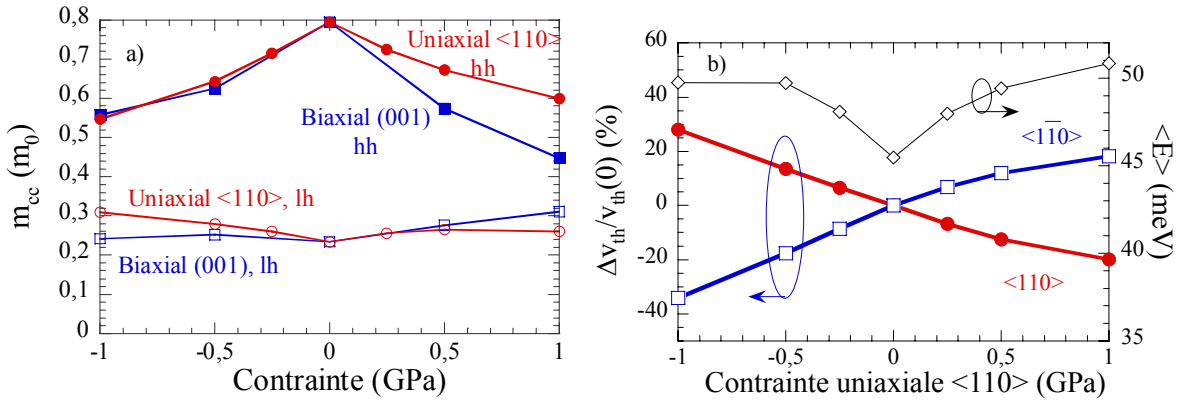

Figure 81 : a) Masse effective de concentration de porteurs m_{cc} en fonction de la contrainte. Symboles pleins : 1ère bande (ou hh), symboles vides : 2e bande (ou lh). Carrés : contrainte biaxiale, cercles : uniaxiale selon <110>, b) vitesse thermique dans les directions <110> (cercles) et $<1\bar{1}0>$ (carrés), relative à $v_{th}(0) = 8{,}6\ 10^4$ m/s et énergie moyenne (losanges) en fonction d'une contrainte uniaxiale selon <110>.

Si on regarde le comportement de m_{cc} (Figure 81a), on s'aperçoit que la masse de la bande hh est toujours améliorée par la contrainte, alors que celle de la bande lh est dégradée, mais varie assez peu. Dans le cas de la bande hh, cela traduit l'augmentation isotrope des courbures de bandes que l'on a pu discerner sur les isocontours de la Figure 77. En ce qui concerne l'effet sur les interactions (dans le cas de mécanismes isotropes), cela signifie que la contrainte diminue globalement les fréquences de transition (car elles sont proportionnelles à la densité d'états), ce qui contribue à améliorer le transport. Néanmoins, le comportement de la vitesse thermique montre que l'amélioration peut ne pas être isotrope dans certains cas. Par exemple, une contrainte uniaxiale en compression va diminuer la vitesse dans la direction <110>, mais l'augmenter dans la direction $<1\bar{1}0>$. Il faut noter que v_{th} est très peu influencée par une contrainte biaxiale ($|\Delta v_{th}/v_{th}(0)| < 4$ %, non montré) quelle que soit la direction considérée. Cela implique que les courbures dans des directions spécifiques soient très peu modifiées pour une contrainte biaxiale dès lors que l'on considère l'ensemble des états d'énergie occupés à l'équilibre thermique. Dans ce cadre, les effets de la contrainte biaxiale sur le transport sont essentiellement liés aux grandeurs isotropes (densité d'états, interactions).

1.2 Mécanismes d'interaction

Les interactions considérées pour les trous sont les mêmes que précédemment pour les électrons, à savoir les phonons, les impuretés ionisées et la rugosité.

Les phonons acoustiques inter- et intrabandes de faible vecteur d'onde sont considérés comme élastiques (E'(**k'**) = E(**k**)) et leur fréquence de transition s'obtient de la même manière que pour les électrons :

$$\begin{aligned} s_{aco}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \frac{q^2 k_B T}{4\pi^2 \hbar \rho}\left(\frac{D_{ac}}{u_S}\right)^2 \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \\ \lambda_{aco}(E(\mathbf{k})) &= \frac{\pi q^2 k_B T}{\hbar \rho}\left(\frac{D_{ac}}{u_S}\right)^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \end{aligned} \tag{3.2.24}$$

En réalité, l'approximation élastique pour les phonons acoustiques peut fausser les résultats, notamment à basse température, et il faudrait tenir compte de la relation de dispersion des phonons [Fischer1999; Fischer2000; Fischetti1988], ce qui est assez lourd à gérer. Il est possible de résoudre ce problème en utilisant un phonon acoustique inélastique moyen [Bufler2003; Bufler2001]. Nous avons récemment commencé à travailler dans ce sens, mais les résultats présentés ici ne considèrent que des phonons acoustiques élastiques.

Le seul phonon inélastique considéré est un phonon longitudinal optique (LO) non polaire dont la relation de dispersion est approchée par une constante d'énergie $\hbar\omega_{op} = 63,2 \text{ meV}$. La fréquence de transition s'obtient de la même manière que celle des phonons intervallées pour les électrons :

$$\begin{aligned} E' &= E + \Delta E_{ib} + i\hbar\omega_{op} \\ s_{op}(\mathbf{k},\mathbf{k'}) &= \frac{\hbar D_{op}^2}{8\pi^2 \rho \hbar \omega_{op}}\left[N_p + \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right] \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \\ \lambda_{op}(E(\mathbf{k})) &= \frac{\pi \hbar D_{op}^2}{2\rho \hbar \omega_{op}}\left[N_p + \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right] \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \end{aligned} \tag{3.2.25}$$

où i = 1 pour une absorption et i = -1 pour une émission, ΔE_{ib} est l'écart énergétique entre les bandes. Les potentiels de déformations utilisés dans ce travail sont D_{ac} = 5,1 eV/cm et D_{op} = 7,1 eV.

Les impuretés ionisées ainsi que la rugosité et la sortie de ZB sont traitées de la même manière que pour les électrons.

1.3 Transport

1.3.1 Si relaxé

De la même manière que pour les électrons, les potentiels de déformation sont ajustés pour reproduire les courbes expérimentales de vitesse de dérive en fonction du champ

électrique appliqué dans du Si massif non dopé à différentes températures (77 K [Canali1971] et 300 K [Ottaviani1975]) et pour différentes directions cristallographiques (<100>, <111> et <110>). On peut voir sur la Figure 82a que les simulations MC donnent des résultats en bon accord avec l'expérience. En l'absence de données expérimentales, les mêmes potentiels de déformation sont utilisés pour les matériaux contraints. On peut remarquer qu'à 300 K, la vitesse est plus élevée pour un champ appliqué dans la direction <100> que pour la direction <110>, ce qui laisser présager de meilleures performances des dispositifs orientés <100> pour un transport en régime stationnaire. Cet effet, uniquement dû à l'anisotropie de la bande de valence, est impossible à reproduire avec l'approche de la masse effective.

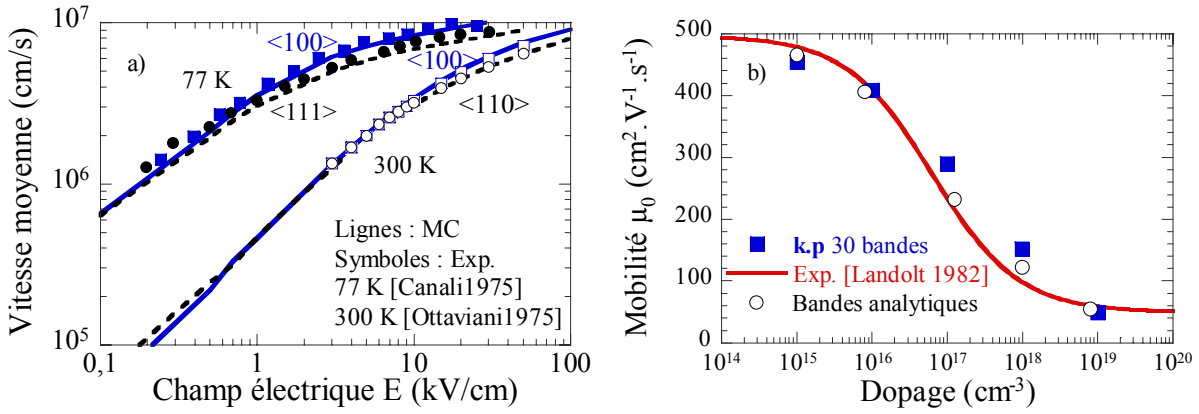

Figure 82 : a) Vitesse de dérive en fonction du champ électrique, résultats MC vs. expériences [Canali1971; Ottaviani1975], b) Effet du dopage sur la mobilité faible champ, comparaison entre MC **k.p** 30 bandes, bandes analytiques et expérience [Landolt-Börnstein1982].

L'effet du dopage sur la mobilité faible champ calculé avec le simulateur *Full Band* est reporté sur la Figure 82b, comparé à l'expérience [Masetti1983] et aux résultats obtenus avec des bandes analytiques. Le comportement expérimental n'est pas parfaitement reproduit, notamment pour les dopages situés entre 10^{17} et 10^{18} cm^{-3}. Ce problème bien connu peut être résolu par une approche heuristique [Jungemann2003] en pondérant la fréquence d'interaction avec les impuretés ionisées par un coefficient empirique dépendant de la concentration de dopants, ou bien en traitant l'interaction de manière plus rigoureuse [Fischetti1988]. Dans le cadre de ce travail, nous n'étudions que des dispositifs à canal non dopé et aux accès dopés à $N_A > 10^{19}$ cm^{-3}. Nous avons donc choisi de ne pas modifier le traitement de cette interaction. Concernant le traitement de la rugosité, nous avons utilisé un coefficient de réflexion diffusive à l'interface égal à 14 % comme pour les électrons. La Figure 83 montre la mobilité

effective obtenue à faible dopage dans une structure à canal long, qui est en bon accord avec les données expérimentales [Takagi1994a].

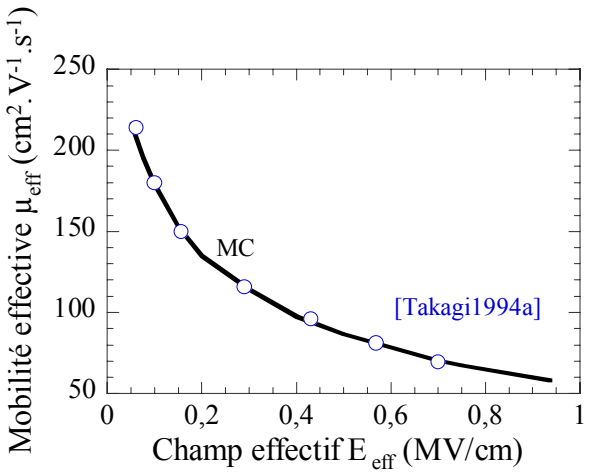

Figure 83 : Mobilité effective (canal Si non contraint dopé à 7,8 10^{15} cm^{-3}), 14% de réflexions diffusives, résultats MC (ligne) superposé à l'expérience [Takagi1994a] (cercles). $E_{eff} = (N_{dep}+N_{inv}/3)/(\varepsilon_0\varepsilon_{Si})$, N_{dep} étant la charge de désertion et N_{inv} la charge d'inversion.

1.3.2 Si contraint

Nous allons maintenant étudier l'influence de la contrainte sur les caractéristiques de transport dans un barreau de Si non dopé infiniment long. La Figure 84 montre les résultats MC obtenus dans le cas d'une contrainte biaxiale pour un champ électrique dans la direction <110>. Il faut préciser que la variation de mobilité avec la contrainte (Figure 84b) est la même dans le cas d'un champ appliqué selon <100>.

Dans le cas de la contrainte biaxiale, la vitesse à faible champ (Figure 84a) et la mobilité (Figure 84b) sont améliorées dans tous les cas, ce qui traduit la diminution des masses et des interactions interbandes. La tension, qui peut être obtenue par épitaxie de Si sur SiGe, induit la meilleure amélioration, ce qui s'explique essentiellement par une levée de dégénérescence plus forte et donc moins d'interactions interbandes. Le gain disparaît à plus fort champ (Figure 85) comme dans le cas des électrons étudié au chapitre précédent.

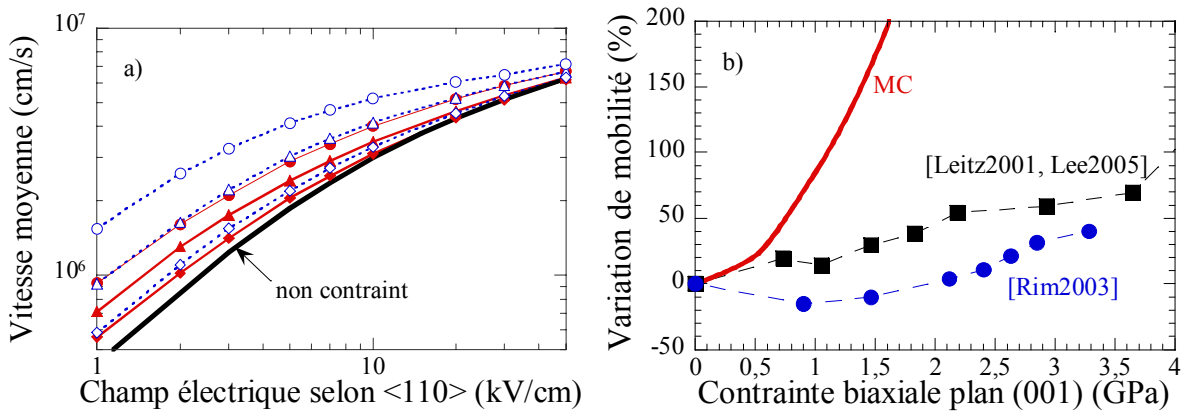

Figure 84 : a) Vitesse de dérive pour un champ électrique selon <110> pour différentes valeurs de contrainte biaxiale dans le plan (001) en compression (traits et symboles pleins) et en tension (tirets et symboles vides), trait épais sans symbole : non contraint, losanges : ±0,5 GPa ; triangles : ±1 GPa, cercles : ±2 GPa, b) variation de mobilité faible champ selon <110> (ligne) comparée à des mesures sur des MOSFET *bulk* à canal dopé [Lee2005; Leitz2001; Rim2003a] (symboles).

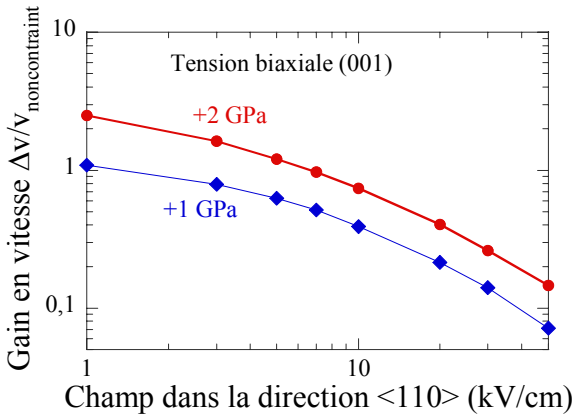

Figure 85 : Gain en vitesse stationnaire par rapport au cas non contraint en fonction du champ électrique appliqué selon <110> (barreau de Si contraint non dopé).

Le gain en mobilité calculé (Figure 84b) est surestimé par rapport aux mesures sur MOSFET *bulk*. En effet, dans le cas d'une structure de bandes 3Dk, une contrainte biaxiale en tension ne peut qu'améliorer la mobilité faible champ dans le cadre de ce qui a été montré au paragraphe précédent (masses, interactions), si on considère que la rugosité ne change pas avec la contrainte appliquée. Cependant, les mesures montrent que la variation dépend du champ effectif [Lee2005] et qu'il peut y avoir une dégradation, même pour des valeurs de contrainte relativement élevées [Rim2003a]. De plus, le caractère universel de la mobilité effective semble fortement dépendre des conditions d'étude (orientation, contrainte) [Irie2004]. Nous verrons à la fin de ce chapitre que pour comprendre ces phénomènes et

reproduire correctement les tendances expérimentales, il faut prendre en compte la quantification pour le calcul de la mobilité faible champ dans certains cas de contrainte.

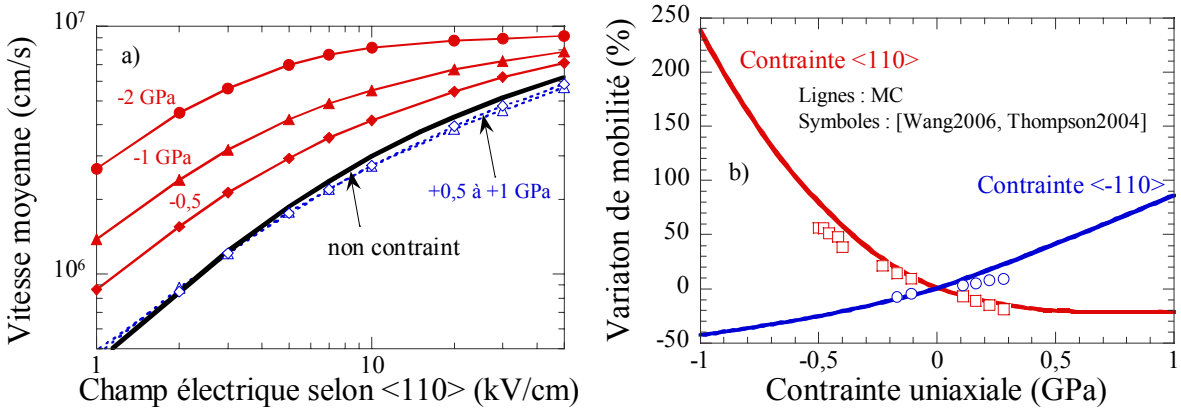

Figure 86 : a) Vitesse de dérive pour un champ électrique selon <110> pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale selon <110> en compression (traits et symboles pleins) et en tension (tirets et symboles ouverts), trait épais sans symbole : non contraint, losanges : ±0,5 GPa ; triangles : ±1 GPa, cercles : ±2 GPa, b) variation de mobilité selon <110> en fonction de la contrainte uniaxiale selon <110> et <-110> comparée à des mesures de *wafer bending* [Thompson2004; Wang2006] (symboles).

La Figure 86a montre la vitesse de dérive en fonction du champ selon <110> dans le cas de la contrainte uniaxiale selon <110>. La vitesse à faible champ n'est améliorée que pour la compression, alors que la tension induit une légère dégradation. Ce comportement est plus visible sur la mobilité (Figure 86b). La dégradation dans le cas de la tension s'explique qualitativement par le fait que la levée de dégénérescence est assez faible (cf. Figure 78), du même ordre de grandeur que l'énergie thermique, ce qui limite beaucoup le gain induit par la diminution des interactions interbandes. De plus, nous avons vu que la masse de conduction des trous lourds décroît assez peu, alors que celle des trous légers augmente significativement (Figure 79d). Aux forts champs, la variation de vitesse avec la contrainte diminue et tend à s'annuler quand les porteurs atteignent la vitesse de saturation, comme dans les cas précédents. Cette saturation de la vitesse est fixée par l'énergie du phonon optique polaire permettant la relaxation énergétique des porteurs à fort champ. Les variations de mobilité calculées en fonction de contraintes uniaxiales selon <110> et <-110> sont en assez bon accord avec les tendances expérimentales (mesures de *wafer bending* [Thompson2004; Wang2006]).

Enfin, il faut préciser que nous avons également calculé les mobilités avec le formalisme Kubo-Greenwood (KG, formulation au chapitre 2, §2.3.3.1) en exploitant les structures de bandes décrites ici et les temps de relaxation issus des probabilités d'interaction

décrites plus haut. Les résultats sont en excellent accord avec les résultats MC *Full Band* à faible champ ($|\mathbf{E}_{//}| < 1$ kV/cm), et ce pour un temps de calcul très réduit (facteur 30). Dans le cadre restreint des études sur la mobilité faible champ, nous utiliserons donc ce formalisme préférentiellement aux simulations MC.

Nous verrons cependant que dans le cas d'une contrainte uniaxiale selon <100>, l'approche en gaz de trous 3Dk est à nouveau insuffisante pour la détermination de la mobilité dans les couches d'inversion et qu'il faut prendre en compte le confinement des porteurs.

1.4 Conclusion

Dans le cadre des structures de bandes de valence 3Dk, l'anisotropie des bandes se répercute directement sur les propriétés de transport. La vitesse de dérive est plus élevée pour des champs électriques dans la direction <100>. La contrainte lève la dégénérescence des bandes en Γ et a un fort impact sur les courbures et les densités d'états. Les répercussions sur le transport dans un barreau de Si massif sont le fruit d'une compétition entre la réduction des interactions interbandes et la perturbation des masses liées aux courbures, notamment à faible champ. A plus fort champ, l'effet de la contrainte est réduit du fait d'un phénomène de saturation de la vitesse dû à l'interaction trou-phonon optique non polaire. Les contraintes uniaxiales selon <110> et <-110> ont un impact plus prononcé sur le transport dans les directions parallèles et perpendiculaires à l'axe selon laquelle elle est appliquée. Les tendances expérimentales sont bien reproduites par les simulations MC dans ces directions et une compression selon <110> est la plus avantageuse pour le transport. L'effet d'une contrainte biaxiale en tension ne favorise pas de direction de transport particulière et l'orientation <100> reste la plus avantageuse.

Nous avons vu que les tendances expérimentales dans les couches d'inversion à faible champ n'étaient pas systématiquement bien reproduites par le calcul 3Dk, notamment dans le cas d'une contrainte biaxiale. Néanmoins, dans le cadre de l'étude de dispositifs courts à l'état ON (i.e. forte tension de drain) où le transport est plutôt non stationnaire, l'énergie cinétique moyenne des porteurs est assez élevée (plusieurs centaines de meV). Dans ce cadre, les effets de quantification peuvent être négligés [Wang2006]. Nous allons maintenant étudier l'influence de la contrainte sur le comportement de dispositifs courts en considérant un gaz de trous 3Dk.

2 pDG-MOSFET courts

2.1 Dispositif étudié

Comme dans le chapitre précédent, nous allons préférentiellement étudier l'architecture DG-MOSFET à canal non dopé qui, correctement dimensionnée, permet un bon contrôle électrostatique et favorise le transport non stationnaire. De plus, c'est une structure simple à simuler qui permet d'analyser les effets de la contrainte sur le transport sans ambiguïté liée au dopage canal.

Ainsi, les dispositifs simulés sont des pDG-MOSFET dimensionnés dans le cadre du Projet Intégré européen PULLNANO et décrits sur la Figure 87. La longueur de grille L_G est de 21 nm avec une épaisseur T_{Si} de 8 nm et une épaisseur d'oxyde T_{ox} de 1,2 nm. Le recouvrement (*overlap*) de grille total sur les caissons de source et drain est de 2 nm (1 nm de chaque côté, ce qui donne une longueur effective de canal L_{ch} de 19 nm). Les accès sont dopés à $N_A = 10^{20}$ cm^{-3}. L'étude est restreinte à un *wafer* (001) et nous avons étudié deux orientations de canal, à savoir <100> et <110>. Les contraintes considérées sont soit biaxiales en tension dans le plan (001), soit uniaxiales selon l'axe <110> ou <-110>.

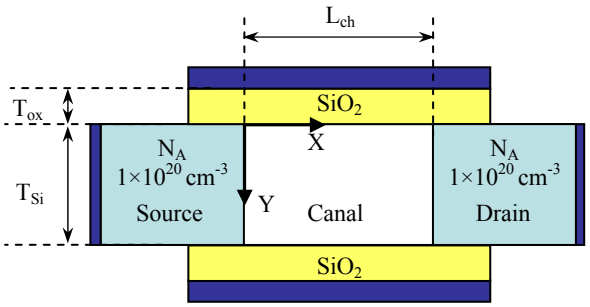

Figure 87 : Structure pDG-MOSFET à canal non dopé simulée, T_{Si} = 8 nm, EOT = 1,2 nm, L_G = 21 nm , L_{ch} = 19 nm. Le canal est orienté selon <100> ou <110>, V_{DD} = 0,9 V.

Les simulations auto-cohérentes sont menées avec la version *Full Band* de MONACO et les structures de bandes considérées sont celles calculées avec la méthode **k.p** 30 bandes [Rideau2006] décrites au début de ce chapitre. Dans cette étude, nous allons principalement nous intéresser au transport à l'état ON du transistor, i.e. à $V_{GS} = V_{DS} = -V_{DD} = -0{,}9$ V. Dans le cas contraint, il peut y avoir un léger décalage de la tension de seuil V_T. L'état ON est dans ce cas considéré à même $|V_{GS}-V_T|$ que l'état ON du dispositif non contraint.

2.2 Dispositif non contraint

La Figure 88a montre l'allure du potentiel dans le dispositif non contraint à canal orienté selon <110>. On peut observer une région proche du drain où le champ est très fort (≈ 1 MV/cm) comparativement au début du canal (où les champs sont assez élevés, i.e. supérieurs à 100 kV/cm). On peut également noter que la barrière est quasi-nulle à l'interface Si/SiO_2 (trait plein) et qu'elle reste assez basse au milieu du canal (tirets).

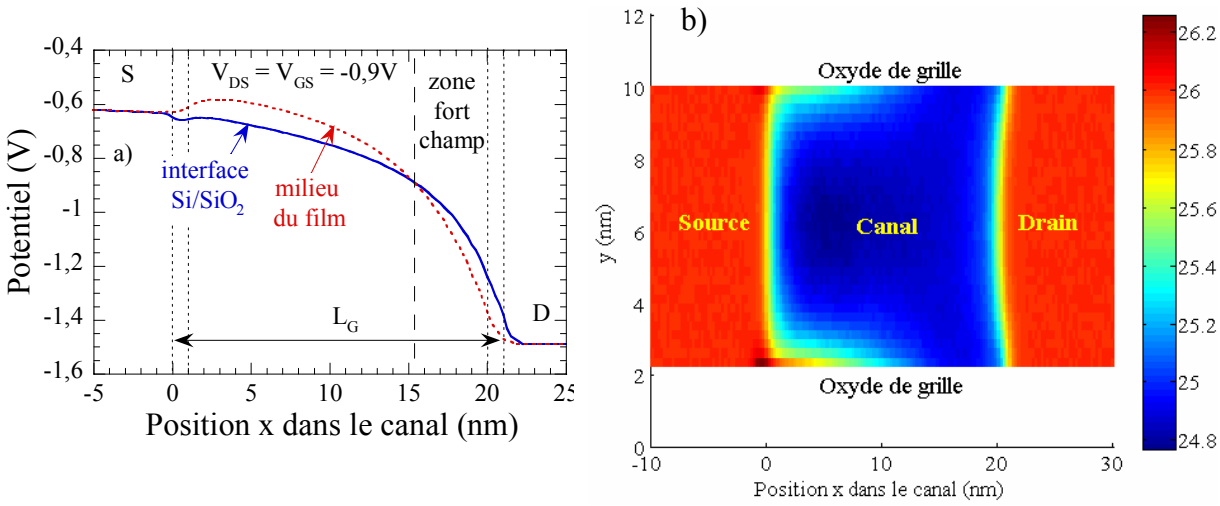

Figure 88 : pDG-MOSFET non contraint à canal orienté <110> à $V_{GS} = V_{DS} = -V_{DD}$ (état ON), a) potentiel à l'interface Si/SiO_2 sous l'un des oxydes de grille (traits) et au milieu du canal (tirets). Les régions d'*overlap* de grille sont indiquées par des tirets fins. b) Cartographie de la concentration de trous (m^{-3}, couleurs en unités logarithmiques 10^x).

La Figure 88b représente la cartographie de la concentration des trous à l'état ON. On peut observer que les porteurs sont majoritairement situés près de l'interface Si/SiO_2 et que la région du canal au milieu du film n'est pas peuplée. De plus, on peut discerner une région de désertion près du drain qui s'apparente à un phénomène de pincement du canal. Cela se répercute sur les comportements de la vitesse et de l'énergie cinétique des porteurs, représentés en traits épais sur la Figure 89 pour le canal orienté <110> et sur la Figure 90 pour le canal orienté <100> (grandeurs moyennées sur l'épaisseur de canal en pondérant par la concentration). Pour les deux directions, l'évolution « lente » de la vitesse et de l'énergie en début de canal montrent que les porteurs sont plutôt dans un régime de quasi-mobilité, alors que dans la région de fort champ, le régime de transport est non stationnaire. En effet, la vitesse moyenne des trous dépasse celle de saturation (phénomène de survitesse) et les porteurs atteignent des énergies cinétiques élevées avant de relaxer dans le caisson de drain.

Si maintenant on compare les résultats dans les deux directions de transport, on s'aperçoit que l'orientation <100> semble la plus favorable car la vitesse est plus élevée que pour <110> sur toute la longueur du canal, avec un comportement de l'énergie cinétique similaire. Néanmoins, la hauteur des pics de survitesse reste faible si on fait la comparaison avec des transistors à canal N similaires. En effet, la hauteur du pic de survitesse dans des nDG-MOSFET de longueur de canal 50 nm (dans des conditions de polarisation proches) dépasse 2 10^7 cm/s [Saint-Martin2005], alors qu'elle est ici au mieux de 1,5 10^7 cm/s (canal <100>).

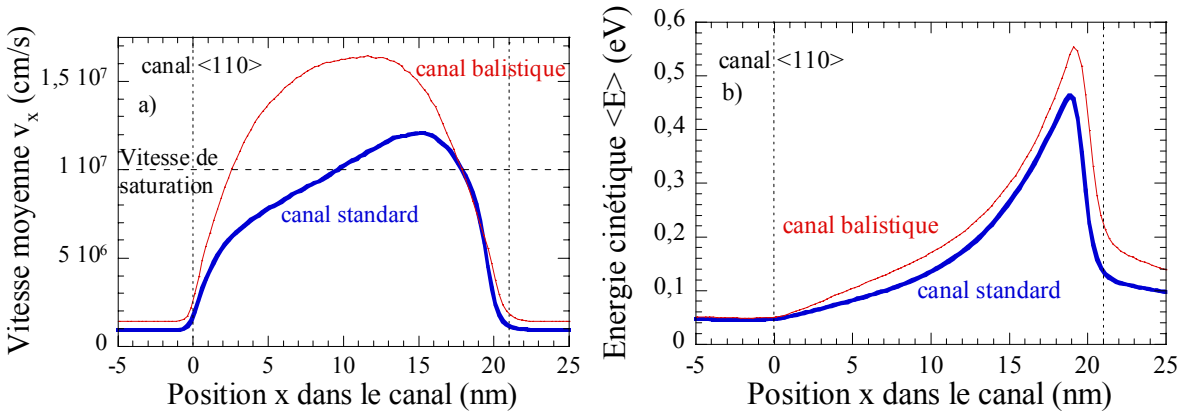

Figure 89 : pDG-MOSFET non contraint à canal orienté <110> à $V_{GS} = V_{DS} = -V_{DD}$ (état ON), trait épais : canal standard, trait fin : canal balistique, a) vitesse moyenne des porteurs dans la direction source-drain, b) énergie cinétique moyenne.

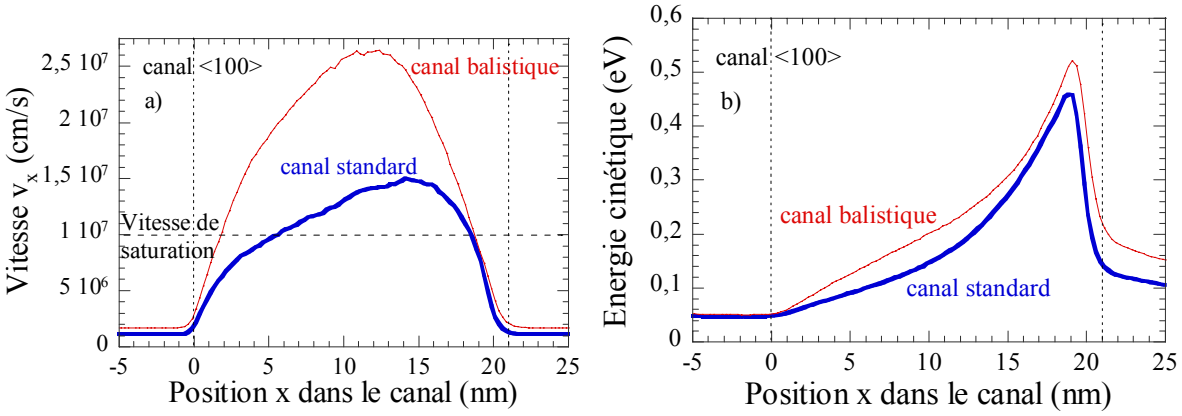

Figure 90 : même résultats que la Figure 89, mais pour un canal orienté <100>.

Afin de déterminer si cette limitation est intrinsèque à la structure de bandes, nous avons artificiellement supprimé toute interaction dans la région du canal (dispositif à canal balistique). Les comportements de la vitesse et de l'énergie cinétique correspondants sont

reportés en traits fins sur la Figure 89 et la Figure 90. On peut observer que les vitesses maximales atteintes dans le canal sont bien plus élevées, ce qui implique que le transport dans les dispositifs à canal standard est plus loin du régime balistique que dans le cas des électrons. Ainsi, la vitesse est encore en partie limitée par les interactions, même dans la région assez désertée de fin de canal. Cela peut se comprendre également du fait que la densité d'états de la bande de valence est bien plus élevée que celle de la bande de conduction, notamment pour les énergies élevées, ce qui implique des interactions plus fréquentes. Dans le cas balistique, on peut noter qu'il subsiste également une différence significative entre les deux orientations de canal, signature de l'anisotropie de la structure de bandes à haute énergie. En effet, pour le canal <100>, la vitesse atteint 2,5 10^7 cm/s, alors que pour le canal <110> elle semble saturer autour de 1,6 10^7 cm/s. L'orientation <100> dans le cas non contraint est la plus favorable, même en régime purement balistique.

Les dispositifs contraints présentent des comportements similaires et nous allons maintenant étudier l'influence de la contrainte sur les caractéristiques en courant et sur le comportement microscopique des porteurs.

2.3 Contrainte biaxiale en tension

La Figure 91 montre les caractéristiques électriques obtenues à fort $V_{DS} = -V_{DD}$ pour différentes contraintes biaxiales en tension dans le plan (001), pour les deux orientations de canal simulées <100> et <110>.

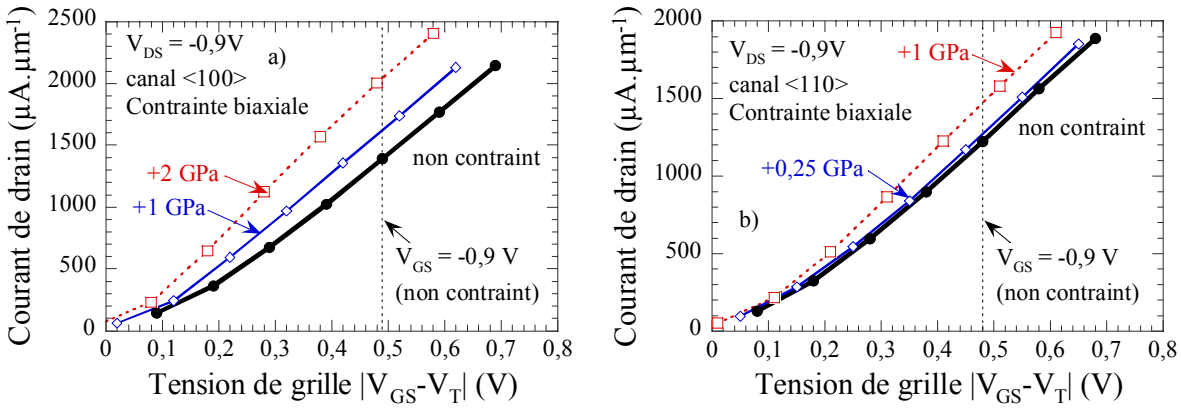

Figure 91 : Contrainte biaxiale et orientation de canal : caractéristiques $I_D(|V_{GS}-V_T|)$ à fort $V_{DS} = -V_{DD}$ pour différentes valeurs de contrainte biaxiale dans le plan (001), canal orienté a) selon <100>, b) selon <110>.

En premier lieu, on peut remarquer que, comme le laissaient présager les caractéristiques de vitesse vues dans la première partie du chapitre et au paragraphe précédent, le courant est plus élevé pour l'orientation <100> dans le cas non contraint. En second lieu, si on s'affranchit du léger décalage en tension de seuil pour se placer dans des conditions d'inversion comparables (courbes $I_D(|V_{GS}-V_T|)$), la contrainte induit une amélioration systématique des caractéristiques électriques.

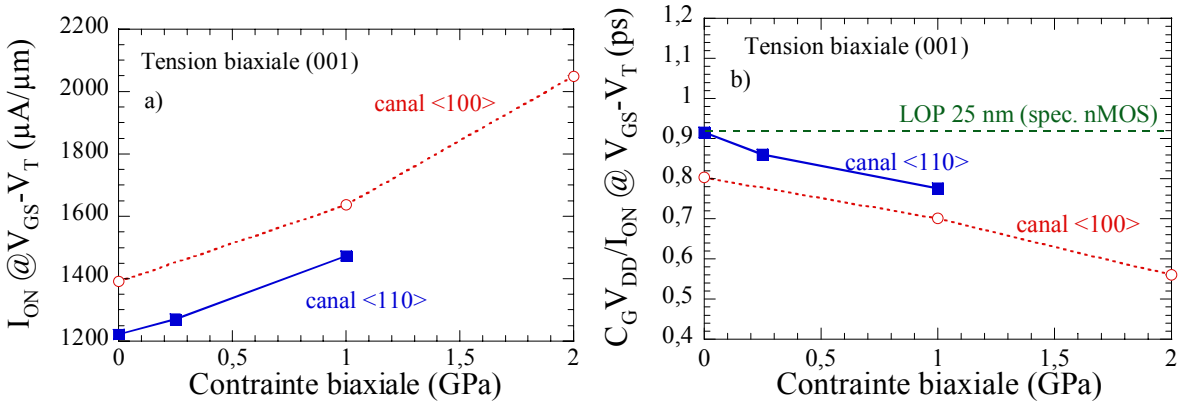

Figure 92 : a) I_{ON} obtenu à même $|V_{GS}-V_T|$ et à $V_{DS} = -V_{DD}$ en fonction de la contrainte biaxiale, pour un canal orienté <100> (cercles) et <110> (carrés), b) délai $C_G V_{DD}/I_{ON}$ correspondant comparé à la spécification de l'ITRS pour le nœud LOP 25 nm.

Les valeurs du courant à l'état ON extraites à même $|V_{GS}-V_T|$ sont reportées sur la Figure 92a en fonction de la contrainte appliquée. Afin de mieux quantifier les performances, les délais $\tau = C_G V_{DD}/I_{ON}$ correspondants (où C_G est extraite de la variation de charge en fonction de V_{GS} à faible $V_{DS} = -0{,}05$ V) sont reportés sur la Figure 92b. On peut remarquer que l'orientation de canal <100> reste la plus avantageuse. De plus, une relativement faible intensité de contrainte en tension permet de dépasser les objectifs du nœud *Low Operating Power* (LOP) 25 nm de l'ITRS ($\tau = 0{,}92$ ps, spécification 2009) pour l'orientation <110> en termes de délai pour les nMOSFET, sachant que la spécification pour les pMOSFET n'est pas clairement définie. On peut cependant considérer qu'elle vaut environ deux fois cette valeur. Néanmoins, il faut garder à l'esprit que nous nous sommes placés dans le cas le plus favorable où les résistances d'accès sont minimisées. Il faut ainsi garder une marge confortable sur le délai pour anticiper la dégradation de I_{ON} induite par des accès plus résistifs (190 Ω.µm pour le nœud LOP 25 nm).

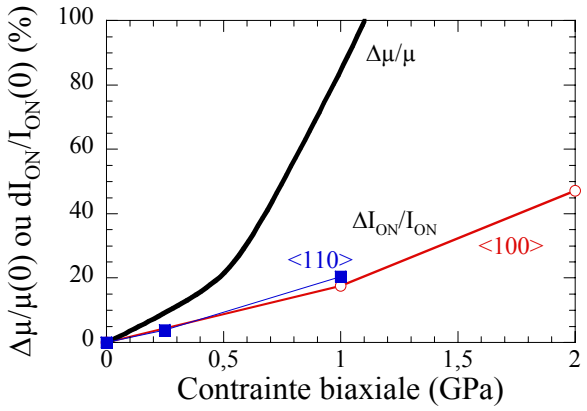

Figure 93 : Effet d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001) sur le courant relatif au pDG-MOSFET non contraint à même $|V_{GS}-V_T|$, comparé aux mobilités relatives issues du calcul MC (trait épais, phonons seuls), I_{ON} obtenu à fort $V_{DS} = -V_{DD}$, cercles : canal orienté <100>, carrés : <110>.

La Figure 93 compare le gain en I_{ON} au gain en mobilité faible champ calculé précédemment. On peut remarquer que l'amélioration des performances en fonction de la contrainte appliquée est quasiment la même pour les deux orientations de canal. Si on compare le gain en courant au gain en mobilité, on s'aperçoit que toute l'amélioration de la mobilité ne se reporte pas sur le courant et que l'accord n'est que qualitativement bon, en accord avec les tendantces expérimentales (cf. chapitre 1). Ainsi, la mobilité faible champ n'est qu'un indicateur qualitatif des performances que l'on peut attendre de la contrainte lorsqu'il s'agit de dispositifs courts. La résistance série pourrait éventuellement expliquer la différence observée, mais sa valeur est faible ($R_S \approx 18\ \Omega.\mu m$, extrait des profils de potentiels à fort V_{DS}). On pourrait également incriminer l'effet de diminution du gain en mobilité à fort champ parallèle (cf. Figure 85), mais étant donné les très forts champs présents, même au début du canal (>100 kV/cm), on s'attendrait à ce que le gain en courant correspondant soit au mieux de 10% dans tous les cas et non pas de plus de 20% comme reporté sur la Figure 93.

La Figure 94 montre l'effet de la contrainte biaxiale sur le comportement de la vitesse le long du canal pour les deux orientations. On peut voir que la vitesse n'est pas améliorée uniformément sur toute la longueur et pas de la même manière pour les deux orientations. Dans le cas du canal <100> (Figure 94a), le gain en vitesse concerne le début du canal et le pic de survitesse, alors que pour le canal <110> (Figure 94b), seul le début du canal est concerné.

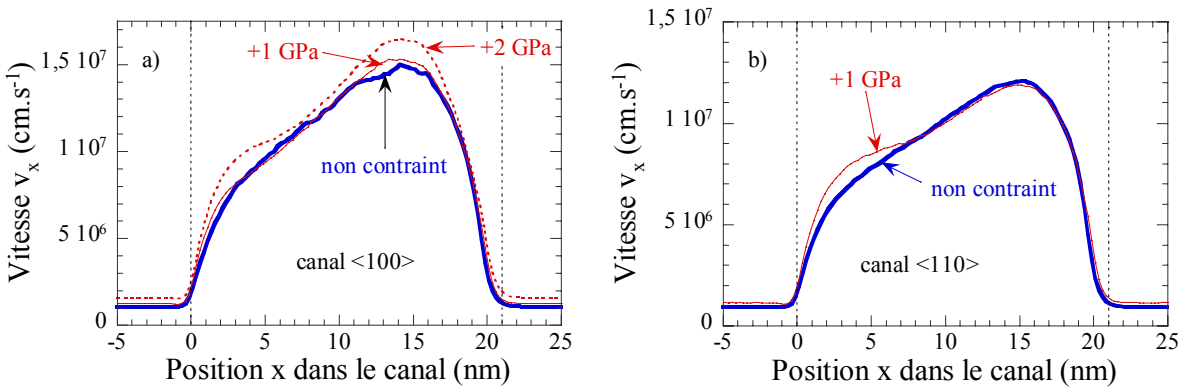

Figure 94 : pDGMOSFET à $V_{DS} = -V_{DD}$ et même $|V_{GS}-V_T|$, évolution de la vitesse moyenne des porteurs dans la direction source-drain, trait épais : non contraint, trait fin : contrainte biaxiale en tension +1 GPa, tirets : +2 GPa, a) canal <100>, b) canal <110>.

Afin de mieux discerner le rôle des interactions, on peut procéder au comptage d'interactions subies par les porteurs le long du canal depuis leur injection par la source jusqu'à leur absorption par le drain. On obtient ainsi des spectres de la proportion des porteurs injectés présents à la fin du canal en fonction du nombre d'interactions subies, représentés pour le canal <100> sur la Figure 95. On peut en déduire le taux de balisticité intrinsèque B_{int} (proportion de porteurs n'ayant subi aucune interaction) et le nombre moyen d'interactions subies $\langle N_{SC} \rangle$. On définit également une grandeur notée L_{SC}, corrélée au libre parcours moyen, en divisant la longueur de canal par $\langle N_{SC} \rangle$. Ces grandeurs permettent de quantifier les effets non stationnaires liés au transport quasi-balistique.

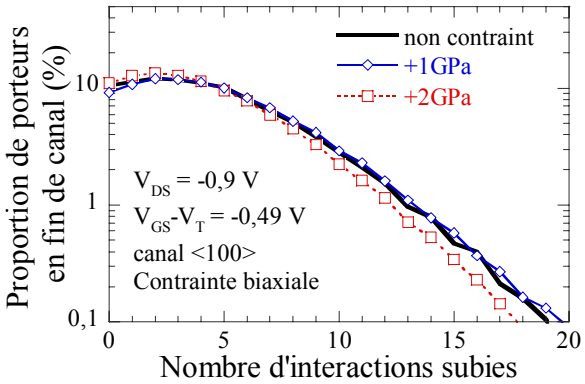

Figure 95 : Spectres de la proportion de porteurs présents en fin de canal en fonction du nombre d'interactions subies durant la traversée du canal orienté <100> pour différentes valeurs de contrainte biaxiale.

Le taux de balisticité B_{int} est assez faible dans ces dispositifs (10%) et varie peu en fonction de la contrainte (au maximum 11% pour une contrainte biaxiale de 2 GPa).

Néanmoins, les porteurs subissent peu d'interactions en moyenne ($<N_{SC}> \approx 4,5$ pour le canal <100> et 5,5 pour le canal <110>) et $<N_{SC}>$ varie également peu avec la contrainte appliquée, à savoir $|\Delta<N_{SC}>/<N_{SC}>| < 10\%$ pour une contrainte de 2 GPa. La longueur L_{SC} associée est de l'ordre de 4,2 nm pour le canal <100> et 3,5 nm pour le canal <110>, ce qui n'est pas faible devant la longueur de canal (19 nm). Ainsi, le transport dans ces dispositifs est à la frontière du régime quasi-balistique, caractérisé par une décroissance exponentielle de la proportion de porteurs ayant traversé le canal en fonction du nombre d'interactions subies [Saint-Martin2004a; Saint-Martin2004b]. Le taux de balisticité est moindre que dans les nMOSFET de longueur comparable où B_{int} peut atteindre 30 à 50% et L_{SC} environ 13 nm.

Contrairement au cas purement stationnaire vu au paragraphe précédent, le gain induit par la contrainte biaxiale ne semble pas dû à une suppression des interactions, car leur nombre change peu si on considère toute la longueur du canal. Ainsi, le gain est essentiellement dû à l'amélioration des courbures de bandes à faible énergie (gain de vitesse en zone « faible champ ») et à haute énergie (augmentation du pic de survitesse, essentiellement pour le canal <100> fortement contraint à 2 GPa).

Dans le cadre de cette étude, restreinte à un plan de transport (001), l'orientation de canal <100> est plus avantageuse que <110>, aussi bien en termes de transport balistique (moins d'interactions en moyenne) qu'en termes de structure de bandes (courbures de bandes globalement meilleures, même à haute énergie). En revanche, comme on pouvait s'y attendre étant donné les modifications de la structure de bandes, la contrainte biaxiale améliore les propriétés de transport de manière isotrope et ne privilégie pas une orientation particulière.

Nous allons maintenant nous intéresser au cas de la contrainte uniaxiale, dont les effets sur le transport sont connus pour être assez anisotropes [Irie2004].

2.4 Contrainte uniaxiale

Les caractéristiques électriques $I_D(|V_{GS}-V_T|)$ à fort V_{DS} obtenues pour le pDG-MOSFET à canal <110> sous différentes conditions de contrainte uniaxiale sont représentées sur la Figure 96a (selon <110>) et la Figure 96b (selon <-110>). De même que pour les tendances de la mobilité, la compression selon <110> et la tension selon <-110> améliorent le courant alors que les cas de contraintes réciproques le dégradent.

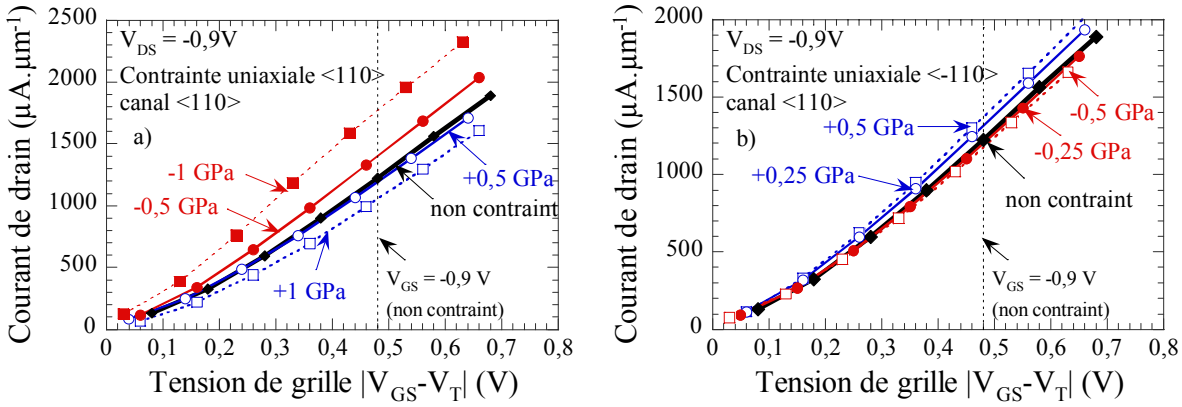

Figure 96 : Caractéristiques $I_D(|V_{GS}-V_T|)$ à fort $V_{DS}=-V_{DD}$, canal orienté <110> pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale a) selon <110>, b) selon <-110>.

Les valeurs de courant à l'état ON extraites à même $V_{GS}-V_T$ sont reportées sur la Figure 97a en fonction de la contrainte appliquée pour les deux orientations de canal. Les délais C_GV_{DD}/I_{ON} correspondants sont reportés sur la Figure 97b. Les objectifs de l'ITRS en termes de délai sont atteints avec une faible intensité de contrainte. Comme dans le cas de la contrainte biaxiale, l'orientation de canal <100> reste la plus avantageuse, sauf dans le cas extrême de contrainte uniaxiale selon <110> de -1 GPa étudié ici. Comme pour la mobilité, le gain en courant ne semble par ailleurs pas tendre vers une saturation dans ce cas, ce qui implique que l'orientation <110> pourrait devenir la plus avantageuse si on parvient à induire des intensités de contrainte suffisamment élevées dans les dispositifs. On peut noter que l'effet de la contrainte est systématiquement bénéfique pour le canal orienté selon <100>.

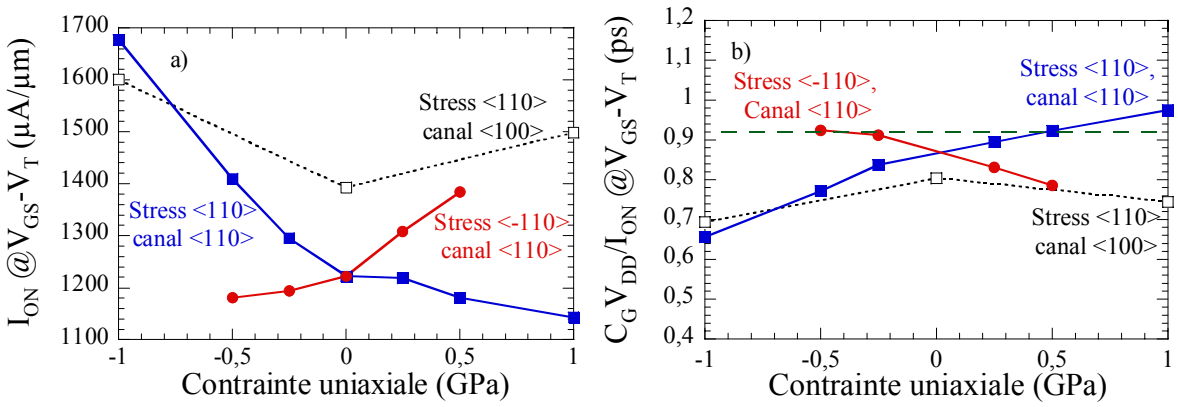

Figure 97 : a) I_{ON} obtenu à même $|V_{GS}-V_T|$ = 0,48 V, $V_{DS}=-V_{DD}$ pour un canal orienté <100> (tirets) et <110> (traits) en fonction de la contrainte uniaxiale selon <110> (carrés) et <-110> (cercles), b) délai CV_{DD}/I_{ON} correspondant comparé à la valeur donnée par l'ITRS pour la technologie *Low Operating Power* 25 nm pour les nMOSFET (tirets).

La Figure 98 compare le gain en I_{ON} pour l'orientation de canal <110> à la variation de mobilité (Figure 98a) et à celle de la vitesse thermique (Figure 98b) pour les deux directions de contrainte (<110> et <-110>). On retrouve à nouveau les tendances de la mobilité, mais l'accord n'est que qualitatif. En revanche, la variation de la vitesse thermique, qui traduit les modifications de courbures de bandes à faible énergie, est plus en accord avec le comportement de I_{ON}. Dans le cadre d'un transport quasi-balistique, cela traduit la répercussion sur le courant d'une variation intrinsèque au matériau de la vitesse d'injection des porteurs.

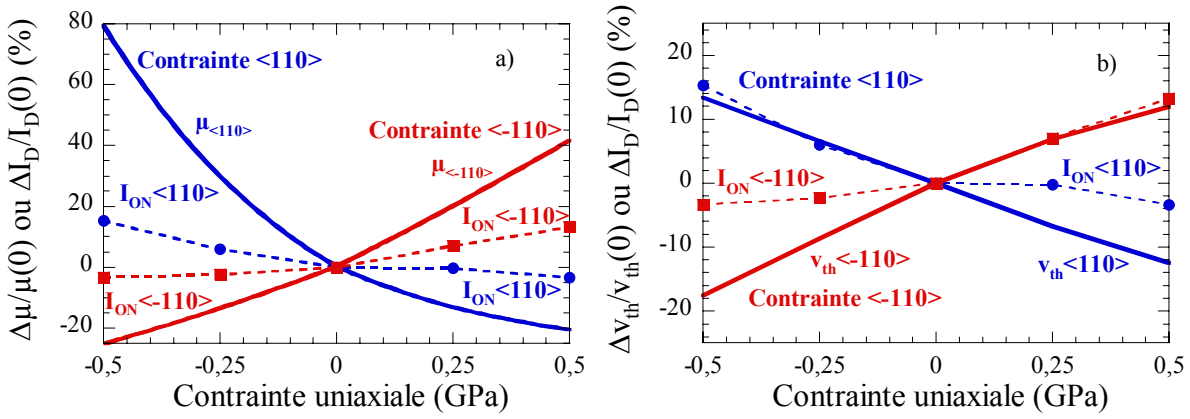

Figure 98 : Effet de contraintes uniaxiales selon <110> et <-110> sur le I_{ON} relatif au pDG-MOSFET à canal <110> non contraint à même $|V_{GS}-V_T| = 0{,}48$ V (tirets), a) comparé aux mobilités relatives issues du calcul MC (traits épais, phonons seuls), b) comparé à la variation de v_{th}.

Le comportement de la vitesse le long du canal est reporté sur la Figure 99 pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale selon <110>. Contrairement au cas de la contrainte biaxiale, la vitesse est modifiée sur toute la longueur du canal dans tous les cas. Pour la compression, le gain concerne essentiellement le début du canal, alors que pour la tension, la dégradation est assez uniforme.

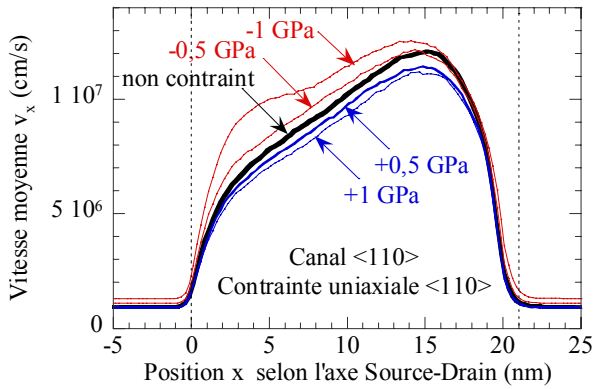

Figure 99 : Evolution de la vitesse moyenne des porteurs le long de l'axe source-drain dans les pDG-MOSFET à canal <110> à $V_{DS} = -V_{DD}$ et $|V_{GS}-V_T| = 0{,}48$ V sous contrainte uniaxiale selon <110>.

Comme au paragraphe précédent, nous avons procédé au comptage des interactions. Les spectres obtenus sont reportés sur la Figure 100a et les grandeurs $\langle N_{SC}\rangle$ (nombre moyen d'interactions et L_{SC} (pseudo libre parcours moyen) correspondantes sur la Figure 100b.

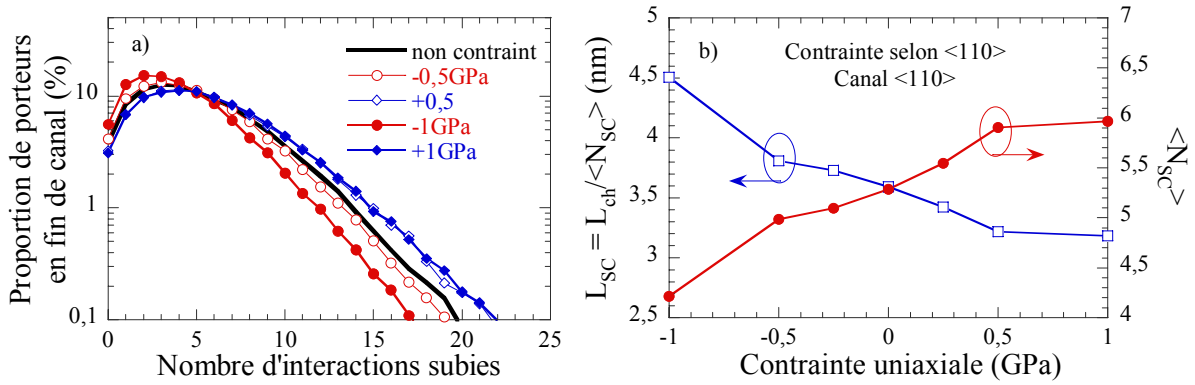

Figure 100 : a) Spectres de la proportion de porteurs présents en fin de canal en fonction du nombre d'interactions subies durant la traversée du canal orienté <110> pour différentes valeurs de contrainte uniaxiale, b) grandeurs L_{SC} et $\langle N_{SC}\rangle$ extraites correspondantes en fonction de la contrainte.

On voit que, contrairement au cas de la contrainte biaxiale, les spectres sont assez modifiés par la contrainte, notamment en ce qui concerne la queue de distribution. Cela se répercute sur le nombre moyen d'interactions qui varie assez significativement (Figure 100b). La valeur correspondant de L_{SC} se situe autour de 3,5 nm, non négligeable devant la longueur de canal.

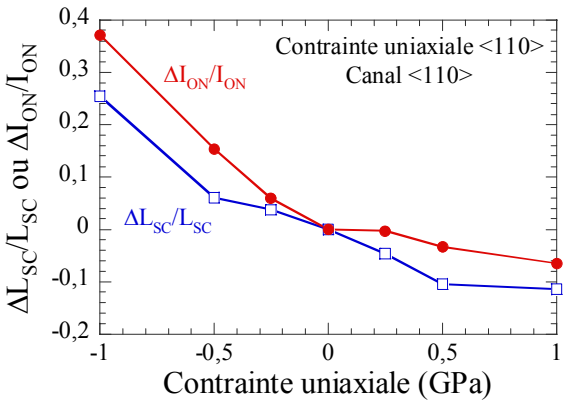

Figure 101 : Variation du courant à l'état ON avec la contrainte uniaxiale selon <110>, comparée à la variation du pseudo libre parcours moyen.

La Figure 101 compare la variation de L_{SC} avec la contrainte à la variation de courant. On peut voir que ces deux grandeurs sont fortement corrélées, ce qui implique que, contrairement au cas de contrainte biaxiale, la suppression des interactions interbandes joue un rôle au moins aussi important que les changements de courbure de bandes. Ce comportement est assez différent des effets de contrainte biaxiale sur le transport dans les nMOSFET, où la contrainte biaxiale a peu d'impact sur les courbures de la bande de conduction dans la direction de transport <100>. L'amélioration du courant et de la mobilité des électrons sont essentiellement dus à la diminution des interactions intervallées et à l'occupation préférentielle des vallées de faible masse dans la direction du transport, ce qui, comme mentionné au chapitre 3, induit une saturation du gain avec la contrainte. Ce type de saturation n'est pas observé expérimentalement dans les pMOSFET. En effet, si on se place dans un cas de contrainte favorable au transport, même si les interactions interbandes sont toutes supprimées par la levée de dégénérescence due à la contrainte, l'effet d'amélioration des courbures dans des directions préférentielles subsiste toujours.

2.5 Conclusion

Nous avons étudié l'influence de la contrainte sur le transport dans un dispositif de faible longueur de canal. Les propriétés de transport sont assez anisotropes. Dans le cadre d'un transport dans le plan (001), l'orientation <100> est la plus avantageuse en termes de performances, sauf dans le cas d'une forte compression uniaxiale. Nous avons vu que la mobilité ne peut prédire l'influence de la contrainte sur les performances que de manière qualitative. Les effets non stationnaires ont un impact non négligeable, même s'ils sont moins

importants que dans le cas du transport d'électrons. Ainsi, nous avons quantifié l'impact de la contrainte sur le transport non stationnaire.

Dans le cas de la contrainte biaxiale, le gain en courant est essentiellement causé par l'amélioration globale des courbures de bandes (aussi bien aux faibles qu'aux fortes énergies) et dans une moindre mesure par la suppression des interactions interbandes. Le gain en courant est systématique et l'amélioration des performances est isotrope. En revanche, dans le cas de la contrainte uniaxiale selon <110> et <-110>, les changements de courbures de bandes et la suppression des interactions interbandes jouent à parts égales sur les variations de courant.

Nous avons constaté que le transport de trous, même dans les dispositifs très courts, est encore assez loin de la limite balistique, ce qui est assez cohérent avec les observations expérimentales. En effet, nous avons vu au chapitre 3 l'influence des effets non stationnaires sur l'extraction de mobilité aux faibles longueurs de canal. Dans le cas des pMOSFET, la réduction de mobilité apparente observée expérimentalement [Andrieu2007b; Chaisantikulwat2006] est de bien moindre ampleur que dans le cas des nMOSFET. La mobilité extraite est ainsi plus représentative des performances des dispositifs. Néanmoins, le gain en mobilité intrinsèque ne se répercute pas complètement sur le courant, notamment pour les fortes intensités de contrainte. En effet, au vu des valeurs élevées d'énergie cinétique atteintes, il faut considérer l'influence de la contrainte sur une plus grande partie de la ZB que celle concernée par la mobilité (très proche de Γ).

Nous avons étudié le transport de trous dans des conditions assez fortement hors équilibre pour lesquelles l'approche 3Dk s'avère satisfaisante. Nous allons maintenant étudier le transport dans des couches d'inversion en régime de mobilité, dans des conditions où l'approche 2Dk s'avère indispensable pour la compréhension et la prédiction des effets de contrainte.

3 Trous en couche d'inversion

Cette partie est consacrée à l'étude de l'influence de la contrainte uniaxiale sur la mobilité des trous dans des couches d'inversion. Nous allons tout d'abord présenter l'expérience de *wafer bending* réalisée à STMicroelectronics (centres de Rousset et Crolles) par Christian Rivero, Romain Delamare et Denis Rideau [Rideau2008b] et comparer les mobilités extraites dans trois directions cristallographiques complémentaires <110>, <-110> et <100> au modèle piézorésistif développé au chapitre 1. Cette problématique a été étudiée par simulation MC exploitant des structures de bandes 3Dk [Bufler2006; Fan2007; Feraille2006] et avec le formalisme Kubo-Greenwood (KG) 2Dk [Fischetti2003; Pham2007; Wang2006]. Ici, à l'aide du formalisme de Kubo-Greenwood pour le calcul de mobilité faible champ, nous allons comparer l'approche 3Dk à l'approche 2Dk utilisant les structures de bandes calculées avec l'outil UTOX de résolution **k.p** Schrödinger/Poisson auto-cohérent [Rideau2008a] décrit au chapitre 2 (§1.3).

3.1 Expérience de wafer bending

Nous avons vu au chapitre 1 que de nombreuses mesures de variation de mobilité ont été réalisées par des expériences de *wafer bending* [Gallon2004; Irie2004; Thompson2006b; Thompson2006a; Wang2006], essentiellement pour des contraintes uniaxiales selon les axes <110> et <-110>. Ici, nous présentons également des mesures pour des contraintes selon l'axe <100>.

Les expériences utilisent un montage de type 4 pointes, présenté sur la Figure 102, développé dans le cadre d'un partenariat entre STMicroelectronics (Rousset et Crolles) et le Centre de Microélectronique de Provence (Gardanne) [Rideau2008b].

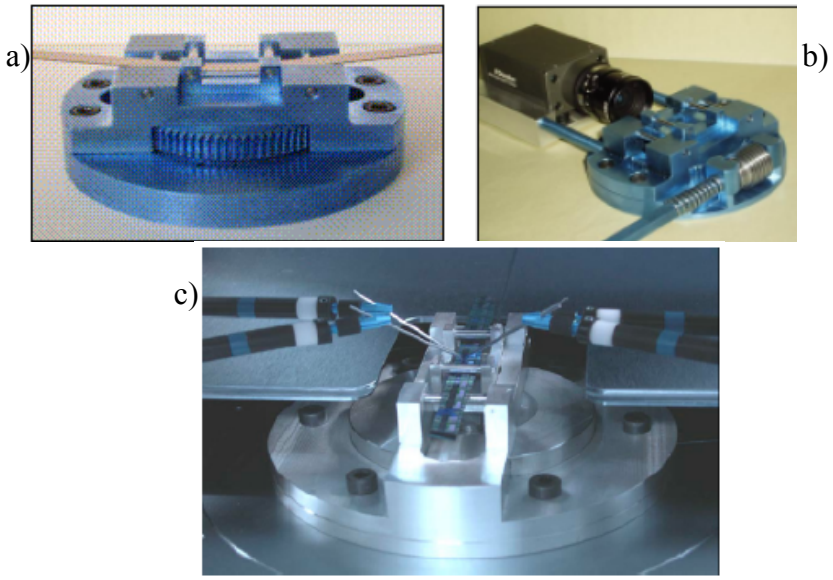

Figure 102 : [Rideau2008b] Montage expérimental de *wafer bending*, a) application de la contrainte uniaxiale sur une bande, b) mesure du rayon de courbure avec une caméra numérique, c) banc de caractérisation électrique.

Les échantillons sont des bandes du wafer, clivées dans la direction de la contrainte uniaxiale voulue (Figure 103a). Le rayon de courbure R est mesuré avec une caméra numérique, ce qui permet de déterminer l'intensité de la contrainte σ à la surface avec la relation suivante :

$$\sigma = -\frac{eE_S}{2R} \tag{3.4.1}$$

où E_S est le module d'Young dans la direction considérée ($E_{s<110>}$ = 168 GPa, $E_{s<100>}$ = 129,8 GPa) et e est l'épaisseur de la bande. Les pMOSFET étudiés sont représentatifs du nœud technologique 130 nm avec un oxyde de grille d'épaisseur 9 nm et une longueur de 10 µm, suffisante pour s'affranchir des SCE. Le canal est orienté <110> et le substrat est de type (001). Les caractéristiques $I_D(V_{GS})$ en régime linéaire (V_{DS} = -0,1 V) mesurées dans les conditions extrêmes de contraintes appliquées dans ce travail pour les trois directions considérées sont reportées sur la Figure 103b. Il faut préciser que la mesure de la référence non contrainte est systématiquement refaite après chaque application de contrainte afin de confirmer que l'échantillon n'est pas dégradé.

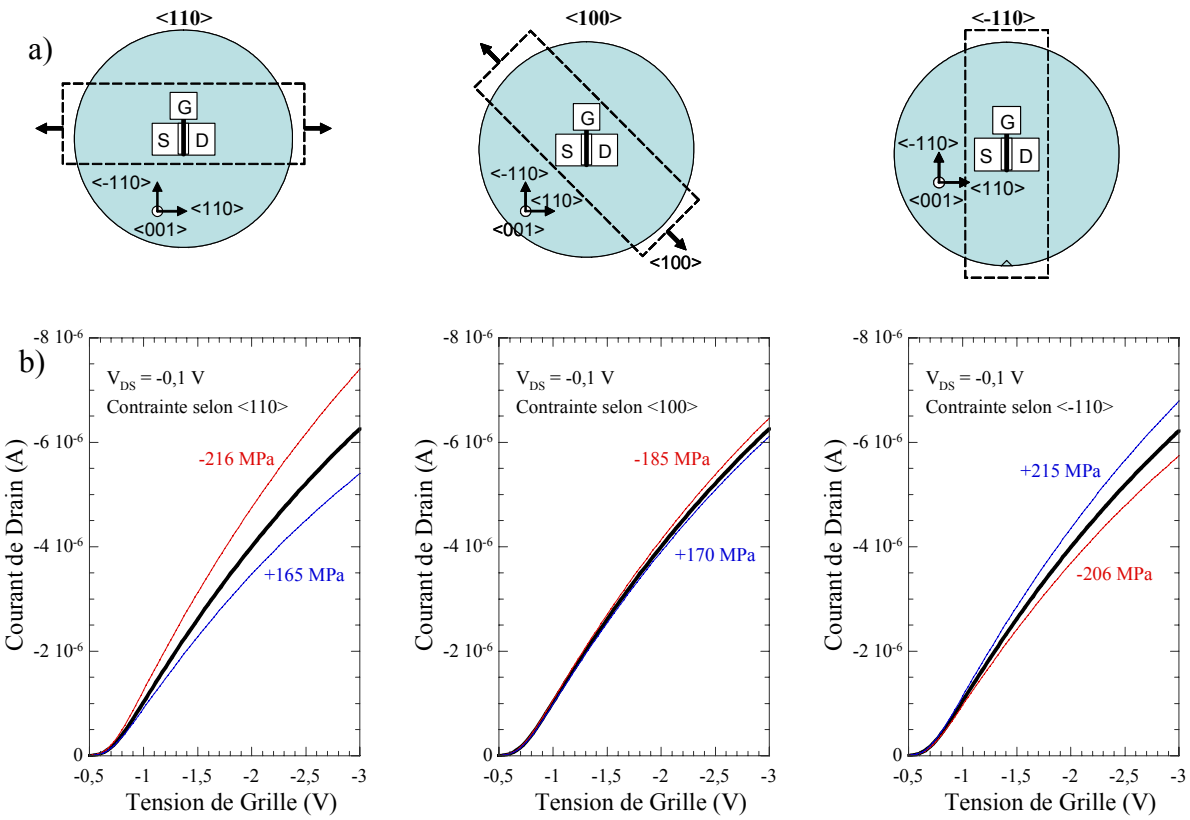

Figure 103 : a) Echantillons associés aux directions de contrainte uniaxiale. Les dispositifs ont un canal orienté selon <110>, b) caractéristiques $I_D(V_{GS})$ en régime linéaire (V_{DS} = -0,1 V) pour la référence non contrainte (trait épais) et les cas extrêmes de contrainte considérés [Huet2008a; Rideau2008b].

Les tensions de seuil extraites à partir de mesures de transconductance et de capacité varient très peu avec la contrainte ($\Delta V_T/V_T(\sigma = 0) < 2\%$). Ainsi, les variations de mobilité $\Delta\mu/\mu(\sigma = 0)$ peuvent être extraites directement par la variation relative de courant de Drain $\Delta I_D/I_D(\sigma = 0)$ à tension de grille V_{GS} donnée (ici -2,7 V, ce qui donne un champ effectif $E_{eff} \approx 1$ MV/cm). Cette approche a été validée par des mesures de transconductance et de densité d'inversion par split C-V.

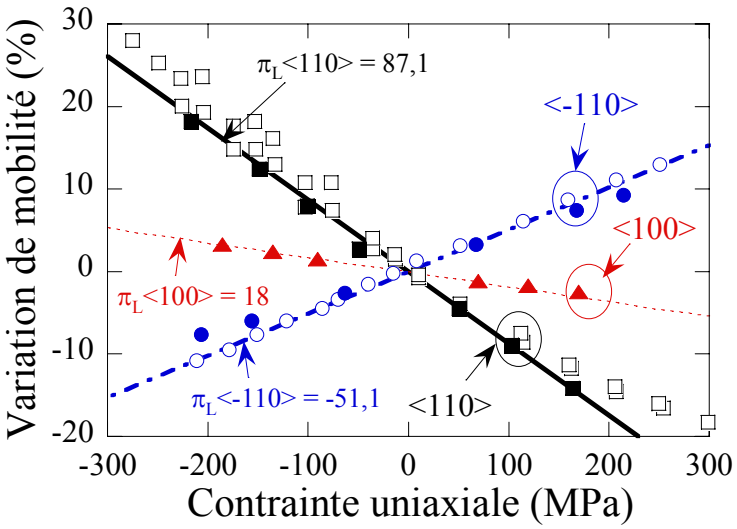

Figure 104 : [Huet2008a]Variations de mobilité extraites à V_{GS} = -2,7 V (symboles pleins) en fonction de la contrainte uniaxiale dans les directions <110> (carrés), <-110> (cercles) et <100> (triangles), comparée aux données expérimentales [Wang2006] (symboles vides) dans les directions <110> (carrés) et <-110> (cercles). Traits : modèle piézorésistif avec les coefficients π_L (10^{-11} Pa^{-1}) ajustés.

Les résultats obtenus pour les trois directions sont reportés sur la Figure 104. Ils sont en bon accord avec les données expérimentales de [Wang2006]. Les valeurs des coefficients de piézorésistance extraites de ces mesures sont reportées dans le Tableau 7 avec d'autres données de la littérature (Si massif et couche d'inversion) déjà présentées au chapitre 1. Dans ce travail, les trois coefficients sont extraits conjointement et les valeurs obtenues sont bien en accord avec les équations données au chapitre 1 (rappelées dans le Tableau 7). Comme nous l'avions déjà remarqué, dans les directions <110> et <-110>, les coefficients obtenus dans les couches d'inversion sont du même ordre de grandeur que ceux du Si massif. En revanche, dans la direction <100>, la valeur mesurée ici en est très éloignée (comme [Gallon2004]). Finalement, on peut voir sur la Figure 104 que le modèle piézorésistif décrit bien les données expérimentales pour les trois directions dans la gamme de contraintes appliquées si l'on ajuste correctement les coefficients.

π_L [10^{-11}.Pa^{-1}]	Surface (001), canal <110>	
	Silicium massif	**Couche d'inversion pMOS**
<110> $(\pi_{11}+\pi_{12}+\pi_{44})/2$	71,8 [a]; 53,5 [b]	71,7 [cd]; 60 [e]; 87,1 [f]
<-110> $(\pi_{11}+\pi_{12}-\pi_{44})/2$	-66,3 [a]; -58,5 [b]	-33,8 [cd]; -38,8 [e]; -51,1 [f]
<100> $(\pi_{11}+\pi_{12})/2$	2,8 [a]; -2,5 [b]	1,5 [cd]; 10,6 [e]; 18,0 [f]

Tableau 7 : Coefficients piézorésistifs longitudinaux π_L (10^{-11} Pa^{-1}) pour les trois directions de contrainte uniaxiale, [a] [Smith1954], [b] [Matsuda1993], [c] [Thompson2006b], [d] [Thompson2006a], [e] [Gallon2004], [f] [Huet2008a; Rideau2008b] issues de ce travail.

Afin d'étudier plus finement ces résultats et comprendre les phénomènes mis en jeu, nous allons maintenant passer à l'étude théorique du transport de trous dans les couches d'inversion.

3.2 Structure de bandes

La structure de bandes 3Dk est calculée avec la méthode **k.p** 30 bandes précédemment décrite [Rideau2006] sur la moitié de la ZB avec un maillage très fin (pas Δk de $0{,}006\times 2\pi/a_0$).

La structure de bandes 2Dk est quant à elle calculée avec le formalisme de la fonction enveloppe décrit au chapitre 2 en résolvant l'équation de Schrödinger (matrice **k.p** 6 bandes) de manière auto-cohérente avec l'équation de Poisson (UTOX). La moitié de la ZB est maillée avec un pas également assez fin (pas Δk de $0{,}0025\times 2\pi/a_0$).

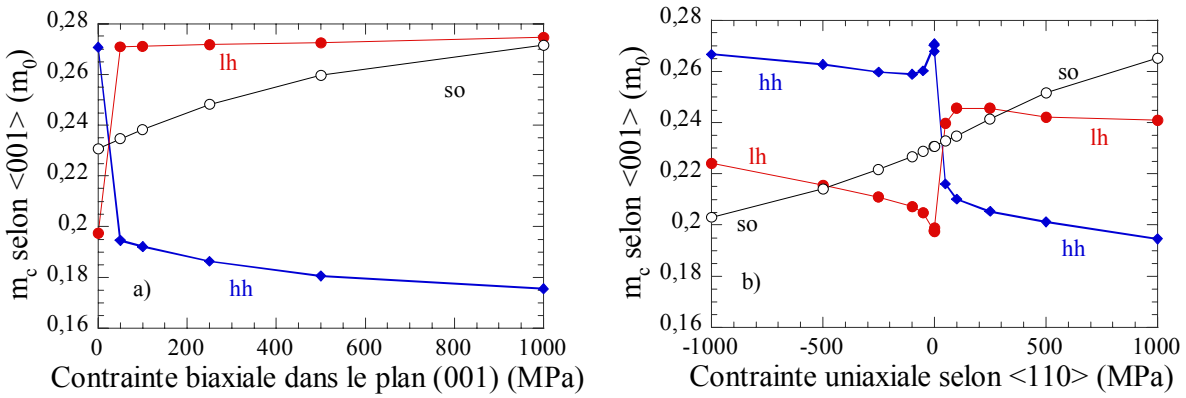

Figure 105 : Masses de courbures selon la direction de confinement <001> pour les 3 premières bandes de valence (calcul 3Dk, **k.p** 30 bandes), a) contrainte biaxiale en tension dans le plan (001), b) contrainte uniaxiale selon <110>.

On peut tenter d'avoir un aperçu qualitatif de l'influence de la contrainte sur la quantification dans le cadre de l'approximation de la masse effective. Les variations des masses de courbures dans la direction de quantification, issues du calcul **k.p** 30 bandes, sont reportées sur la Figure 105a pour une contrainte biaxiale et sur la Figure 105b pour une contrainte uniaxiale selon <110>. Nous avons vu au chapitre 1 que, dans le cas d'un puits de potentiel triangulaire, la bande présentant la masse la plus forte dans la direction de confinement est celle qui contribue le plus au transport, car elle donne le niveau le plus bas en énergie. Il semblerait donc que la bande lh domine dans le cas de la contrainte en tension biaxiale et uniaxiale (pour les faibles intensités de contrainte), alors que la bande hh domine dans le cas de la contrainte uniaxiale en compression.

Néanmoins, l'approche masse effective peut être trompeuse. En effet, il faut en réalité considérer que le confinement a déjà levé la dégénérescence dans le cas non contraint et que la contrainte en compression va éloigner les bandes alors qu'une tension va les rapprocher. Or, plus les bandes se rapprochent, plus elles sont couplées et plus leurs courbures sont perturbées [Rideau2008a]. La Figure 106 représente les relations de dispersion issues du calcul 2Dk dans le cas non contraint (Figure 106a) et pour la contrainte biaxiale en tension pour laquelle la levée de dégénérescence induite par le confinement est compensée (Figure 106b). On voit que les masses de conduction présentent des discontinuités dans ce type de cas.

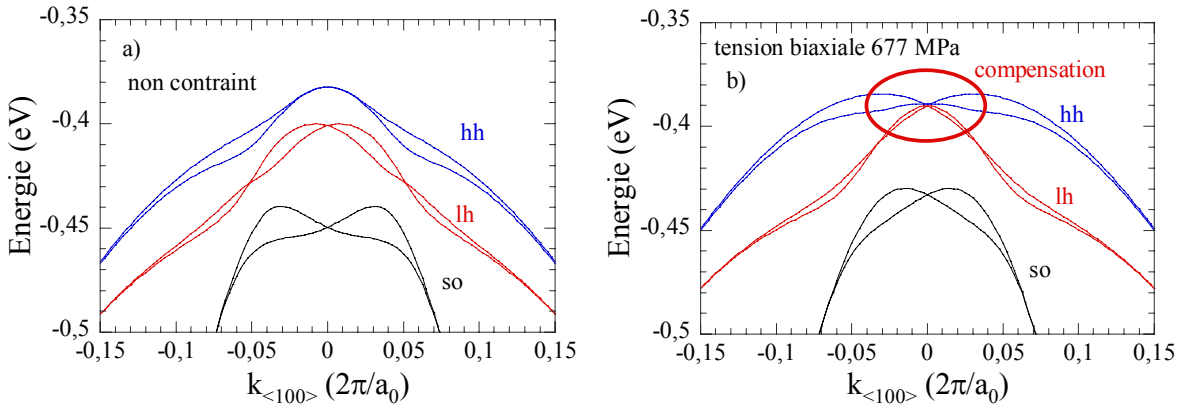

Figure 106 : Bandes de valence 2Dk (couche d'inversion pMOS où $E_{eff} \approx 1$ MV/cm) sur l'axe <100> a) non contraint, b) sous contrainte biaxiale en tension (677 MPa) pour laquelle la levée de dégénérescence induite par le confinement est exactement compensée par la contrainte.

Ce comportement, propre à la bande de valence, est impossible à reproduire avec l'approche de la masse effective. De plus, il a été démontré que cette dernière ne permet pas d'obtenir les écarts corrects entre les bandes [Rideau2008a].

Enfin, il faut préciser que la densité d'inversion p_S obtenue avec le calcul auto-cohérent est indépendante de la contrainte appliquée dans la gamme étudiée ici ($\Delta(1/p_S) < 0{,}1\%$). En revanche, si on utilise le potentiel issu du calcul dans le cas non contraint pour le calcul des structures de bandes dans les cas contraints, on observe des variations de p_S de l'ordre de grandeur de la variation de mobilité ($\Delta(1/p_S) \approx 4\%$), ce qui peut fausser les résultats obtenus. Ainsi, il est indispensable de procéder à un calcul auto-cohérent dans tous les cas étudiés. Il faut noter que la plupart des études [Fischetti2003; Wang2006] (à l'exception notable du travail de [Pham2007]) ont été faites sans auto-cohérence et en ajustant simplement le niveau de Fermi pour obtenir une densité d'inversion constante.

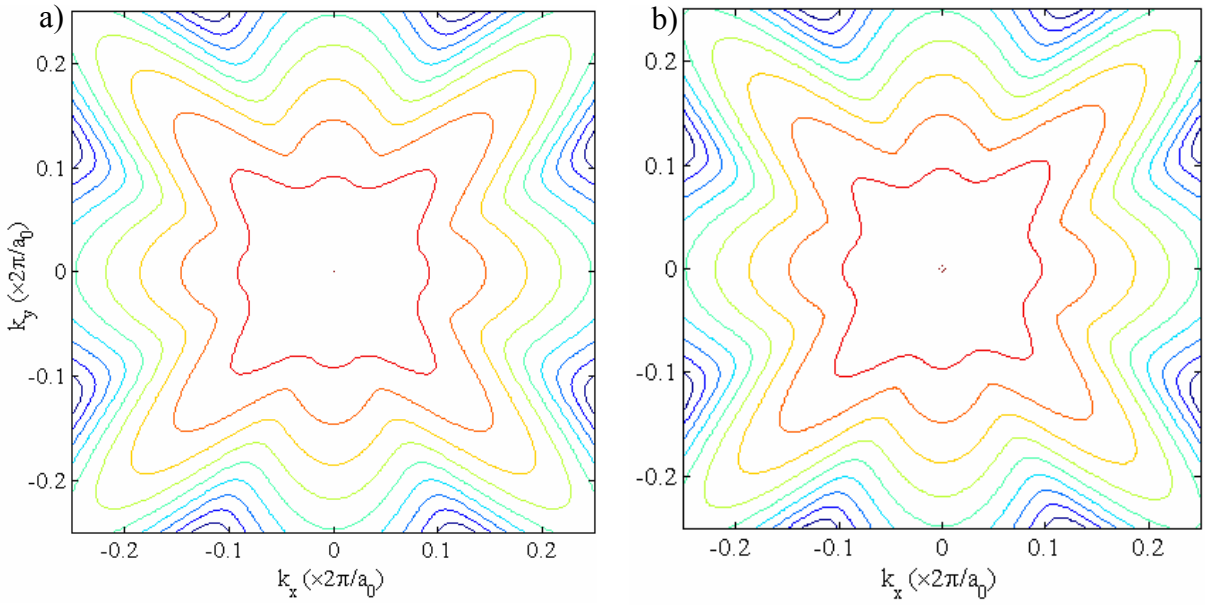

Figure 107 : Structures de bandes 2Dk pour le premier niveau (type hh) calculées avec UTOX. Ecart énergétique entre les contours $\Delta E = 40$ meV, a) non contraint, b) tension uniaxiale 200 MPa selon <110>.

La Figure 107 montre les contours isoénergies de la première bande de valence et l'effet d'une contrainte uniaxiale en tension selon <110>. Comme on l'a vu au chapitre 1, la contrainte uniaxiale brise certaines symétries et les courbures sont alors perturbées.

3.3 Calcul de mobilité et mécanismes d'interaction

La mobilité est calculée avec le formalisme de Kubo-Greenwood (KG) développé au chapitre 2 (§2.3.3.1) et adapté au cas du gaz 2Dk :

$$\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}=\frac{|q|}{(2\pi)^2 p_S k_B T}\sum_n\int_{ZB}\tau_n(\mathbf{k})v_n(\mathbf{k})\times v_n^{\dagger}(\mathbf{k})f_0(\mathbf{k})(1-f_0(\mathbf{k}))d^2k\cdot\mathbf{E} \qquad (3.4.2)$$

où $\boldsymbol{\mu}$ est le tenseur de mobilité (de dimension 2×2) et $\mathbf{E}$ est le vecteur champ électrique dans le plan de transport, $f_0(\mathbf{k})$ la fonction de Fermi-Dirac (calculée avec le niveau de Fermi issu du calcul auto-cohérent), $v_n(\mathbf{k})$ la vitesse de groupe dans le niveau n, issue de la structure de bandes et $\tau_n(\mathbf{k})$ le temps de relaxation total. Toutes les bandes avec une occupation supérieure à 0,1% de la densité totale pour le niveau de Fermi considéré sont prises en compte dans le calcul (au maximum 11 bandes, pour un champ effectif E_{eff} proche de 1 MV/cm).

Paramètre	Valeur
u_l (m/s)	9180
Ξ_{eff} (eV)	9,64
D_{op} (10^8 eV/cm)	12,72
$\hbar\omega_{op}$ (meV)	65

Tableau 8 : Paramètres des interactions électron-phonons, issus de [Wang2006].

Dans ce travail, nous ne considérons que les mécanismes d'interaction électron-phonon (acoustiques élastiques et optiques non polaires inélastiques), qui sont dominants aux densités d'inversion considérées [Pham2007]. Le temps de relaxation total s'obtient par une loi de Mathiessen. Les temps de relaxation sont calculés avec les formulations suivantes [Fischetti2003] pour chaque niveau n (approximation isotrope).

Pour les phonons acoustiques :

$$\frac{1}{\tau_n^{aco}(\mathbf{k})}=\frac{2\pi k_B T\left(\Xi_{eff}\right)^2}{\hbar\rho u_l^2}\sum_m F_{nm}DOS_m(E_m(\mathbf{k})-\Delta E_{mn}) \qquad (3.4.3)$$

où u_l est la vitesse du son longitudinale, Ξ_{eff} est le potentiel de déformation acoustique, ΔE_{mn} est l'écart entre les niveaux, $DOS_m(E)$ est la densité d'états d'énergie du niveau m et F_{nm} est l'intégrale de recouvrement entre les niveaux n et m.

Pour le phonon optique non polaire :

$$\frac{1}{\tau_n^{opt}(\mathbf{k})}=\frac{\pi D_{opt}^2}{\rho\omega_{op}}\sum_m\left(N_p+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\right)F_{nm}DOS_m(E_n(\mathbf{k})\mp\hbar\omega_{op}-\Delta E_{mn})\frac{1-f_0\left(E_n(\mathbf{k})\mp\hbar\omega_{op}\right)}{1-f_0\left(E_n(\mathbf{k})\right)} \qquad (3.4.4)$$

où ω_{op} est la pulsation du phonon optique polaire, N_p est l'occupation des phonons et D_{op} est le potentiel de déformation optique non polaire.

Les valeurs des paramètres utilisés sont issues de [Wang2006] et reportées dans le Tableau 8. L'intégrale de recouvrement F_{nm} est calculée en ne considérant que les fonctions d'ondes $\Psi_0(z)$ de chaque niveau en **k** = 0 [Fischetti2003] :

$$F_{nm} = \int_0^W \left|\Psi_0^n(z)\cdot\Psi_0^{m\dagger}(z)\right|^2 dz \qquad (3.4.5)$$

où z est la position dans la couche d'inversion et W est l'épaisseur considérée pour le calcul des structures de bandes. Sa valeur est reportée en fonction de l'indice du niveau initial pour deux densités d'inversion sur la Figure 108.

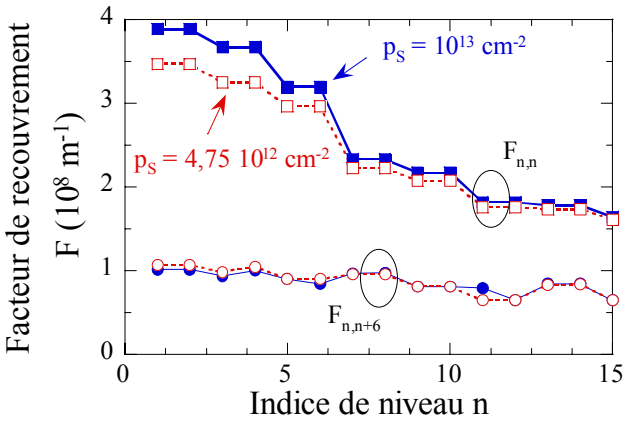

Figure 108 : Facteur de recouvrement obtenu avec UTOX pour du Si non contraint en fonction du niveau pour 2 densités d'inversion, symboles pleins $p_S = 10^{13}$ cm^{-2}, symboles vides : $p_S = 4{,}75\ 10^{12}$ cm^{-2}, carrés : états de « cœur » $F_{n,n}$, cercles : recouvrement entre les états de cœurs et le premier niveau excité correspondant $F_{n,n+6}$.

Le facteur de recouvrement dépend fortement de la densité d'inversion pour les états dits de « cœur » (recouvrement d'un niveau avec lui-même) des 6 premiers niveaux. En revanche, le recouvrement entre les états de « cœur » (d'indice n) et le premier niveau excité correspondant (d'indice n+6 car la matrice **k.p** initiale est de dimension 6×6), qui correspond à la majeure partie des transitions inter sous-bandes, dépend très peu de la densité d'inversion et du niveau considéré.

3.4 Résultats

3.4.1 Contrainte uniaxiale

La Figure 109 représente l'intégrande de l'équation (3.4.2) dans la direction <100> (terme $\mu_{xx}(\mathbf{k})$) pour le cas non contraint (Figure 109a) et le cas d'une tension uniaxiale selon <110> (Figure 109b). Cette figure illustre bien les conséquences des ruptures de symétries observées sur la structure de bandes au niveau local, avec une déformation des lobes à forte mobilité au voisinage des axes <110> et <-110>.

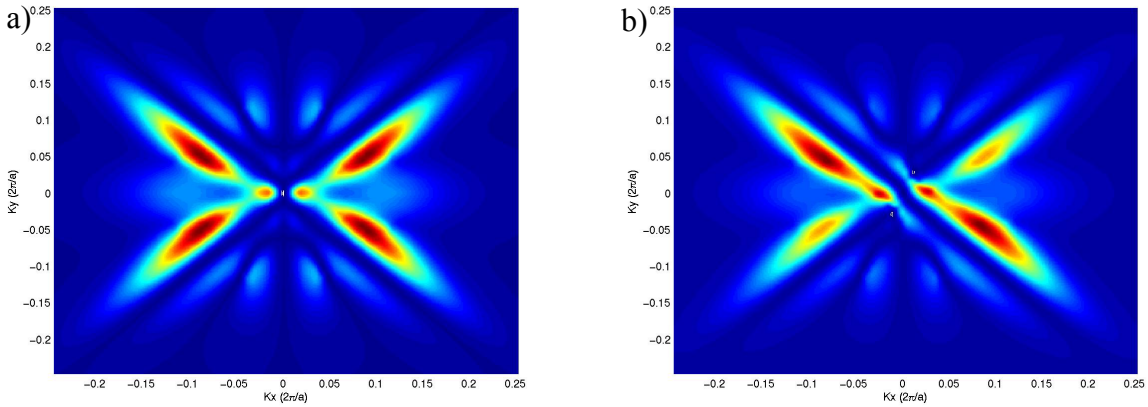

Figure 109 : Gaz de trous 2Dk, intégrande de la formulation de la mobilité $\mu_{xx}(\mathbf{k})$ du premier niveau quantifié (u.a.) en fonction de $(k_x,k_y)\times 2\pi/a_0$, les zone en rouge au voisinage des axes <110> et <-110> sont les lieux de forte mobilité. a) Cas non contraint, b) contrainte uniaxiale en tension selon <110> de 200 MPa.

Les variations de mobilité calculées (symboles) dans les cas de contrainte uniaxiales sont reportées sur la Figure 110, avec les résultats du modèle piézorésistif (tirets) calculés avec les coefficients issus des mesures détaillées au paragraphe précédent.

Les résultats 2Dk sont reportés sur la Figure 110a. L'accord avec les tendances expérimentales est excellent pour les trois directions de contrainte considérées (symboles pleins). En accord avec les conclusions de l'étude menée dans [Wang2006], les variations de mobilité sont essentiellement dues aux déformations de la structure de bandes induites par la contrainte. En effet, les résultats obtenus en considérant un temps de relaxation constant et indépendant de l'énergie (symboles vides) sont peu différents de ceux obtenus avec le calcul plus exact (symboles pleins, où τ dépend de $E(\mathbf{k})$). De plus, en accord avec les tendances expérimentales (Figure 104 et [Wang2006]), on peut remarquer que la variation de mobilité devient non linéaire pour des intensités de contrainte au-delà de 100 MPa environ.

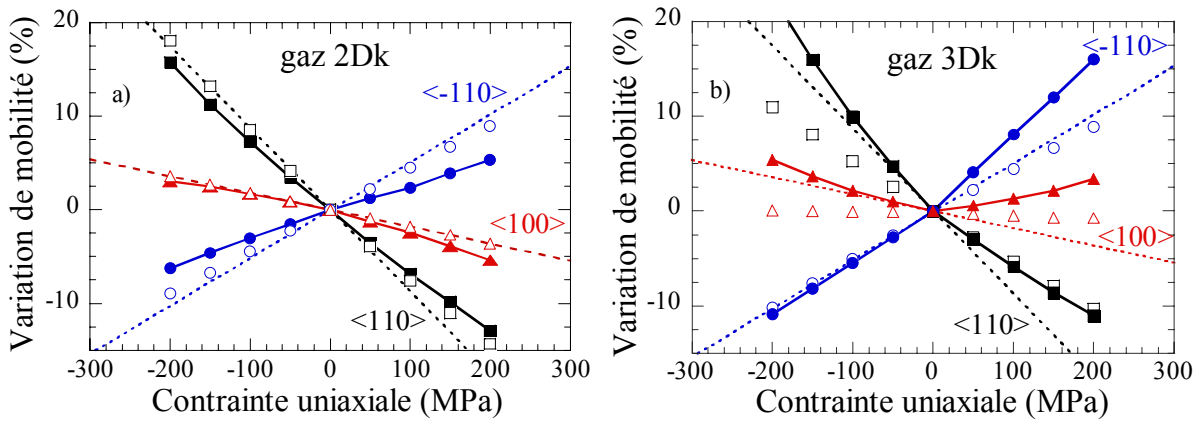

Figure 110 : [Huet2008a] Δμ/μ en fonction de la contrainte uniaxiale selon trois directions, a) 2Dk KG, b) 3Dk KG. Symboles vides : temps de relaxation τ constant indépendant de l'énergie, symboles pleins : τ dépendant de l'énergie. Tirets : Modèle piézorésistif (coefficients extrait des mesures de ce travail).

Comme on l'a vu précédemment, les résultats 3Dk reportés sur la Figure 110b montrent un bon accord pour les directions de contrainte uniaxiale <110> et <-110>. En revanche, les prédictions sont fausses en ce qui concerne la direction <100>. Notamment, dans le cas de la contrainte en tension, la mobilité expérimentale est dégradée, alors que le calcul 3Dk prédit une amélioration systématique. En fait, une contrainte uniaxiale appliquée dans cette direction modifie très peu la forme de la structure de bandes 3Dk (peu de changement des courbures de bandes, densités d'états similaires au cas non contraint). Ainsi, les variations de mobilité 3Dk induites dans ce cas sont essentiellement dues à la suppression des interactions induites par la levée de dégénérescence des bandes causée par la contrainte. En effet, on peut voir qu'en considérant un temps de relaxation constant (symboles vides), la variation de mobilité obtenue est négligeable. En revanche, la suppression des interactions entraîne une amélioration systématique de la mobilité (symboles pleins), ce qui est incohérent avec les calculs 2Dk et les tendances expérimentales.

3.4.2 Contrainte biaxiale en tension

L'erreur systématique induite par l'approche 3Dk dans les couches d'inversion est encore plus évidente dans le cas d'une contrainte biaxiale en tension dans le plan (001). Les résultats obtenus avec les approches 3Dk et 2Dk dans ce cas sont superposés aux données expérimentales [Rim2003a] (carrés pleins) dans des conditions d'inversion similaires ($E_{eff} \approx 1$ MV/cm) sur la Figure 111.

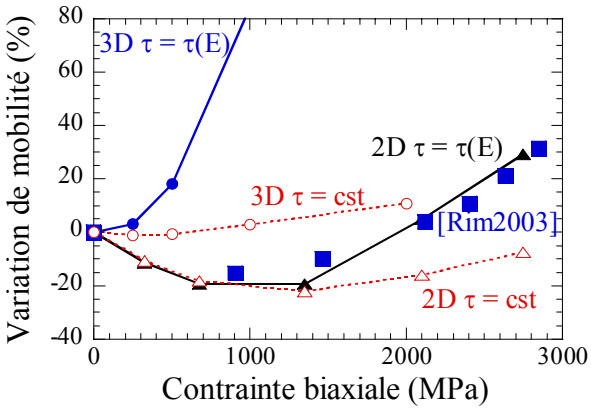

Figure 111 : [Huet2008a] Variation de mobilité en fonction de la contrainte biaxiale en tension sans le plan (001). Carrés : expérience dans des couches d'inversion avec $E_{eff} \approx 1$ MV/cm [Rim2003a], triangles: 2D KG, cercles : 3D KG, symboles vides : temps de relaxation τ constant indépendant de l'énergie, symboles pleins : τ dépendant de l'énergie.

Comme déjà mis en avant dans [Wang2006], la chute de mobilité autour de 1 GPa est essentiellement due à la perturbation de la structure de bandes 2Dk. En effet, on peut voir que le résultat 2Dk obtenu en considérant un temps de relaxation constant (triangles vides) est superposé au résultat du calcul plus exact (triangles pleins) pour les contraintes inférieures à 1,3 GPa. La diminution des interactions n'a un effet significatif que pour les intensités de contrainte plus élevées. En revanche, l'approche 3Dk sous-estime beaucoup l'influence de la modification des courbures de bandes (résultats à τ constant, cercles vides) qui n'induit pratiquement pas de variation de mobilité. Comme on l'a vu précédemment, l'effet de la suppression des interactions induite par la levée de dégénérescence conduit à une amélioration systématique de la mobilité avec la contrainte appliquée. Ainsi, le calcul 3Dk est insuffisant pour reproduire les variations de mobilité expérimentales dans des cas spécifiques.

En effet, dans le cas plus réaliste du gaz de trous 2Dk, la contrainte en tension diminue l'écart entre les niveaux les plus bas, importants pour le transport. Cela ne cause pas de suppression des interactions comme dans le cas du gaz 3Dk. De plus, les courbures de bande (i.e. les masses de conduction) sont dégradées de manière significative quand la levée de dégénérescence induite par le confinement commence à être compensée par la contrainte et que le couplage entre les niveaux augmente (cf. Figure 106). Ce n'est que pour les intensités de contrainte élevées que les couplages interbandes diminuent et que la diminution des interactions inter sous-bandes devient importante.

3.5 Conclusion

Dans cette étude, nous avons reporté des mesures de coefficients de piézorésistance extraits dans des couches d'inversion pour des contraintes uniaxiales selon trois directions complémentaires à l'aide d'une expérience de *wafer bending*. Les variations de mobilité expérimentales sont correctement reproduites avec un formalisme Kubo-Greenwood 2Dk. Après analyse, il s'avère que les tendances expérimentales à faible niveau de contrainte peuvent essentiellement se comprendre en termes de modifications de la structure de bandes 2Dk (courbures et densité d'états) induite par la contrainte. L'approche 3Dk, quant à elle, ne permet pas de reproduire les tendances expérimentales dans les cas de contrainte en tension biaxiale et uniaxiale selon <100>, alors que les cas de contraintes uniaxiales selon <110> et <-110> sont correctement décrits. De ce fait, en ce qui concerne l'étude des propriétés de transport à faible champ dans les couches d'inversion de type P, il est indispensable de prendre en compte les effets de confinement des porteurs, du fait de la forte dépendance entre les effets de quantification et de contrainte.

4 Conclusion et perspectives du chapitre IV

Dans ce chapitre, nous avons étudié le transport de trous en gaz 3Dk et 2Dk pour une orientation de substrat selon <001>. Dans tous les cas, il est clair que l'approche analytique de la masse effective est inadaptée pour la modélisation du transport de trous.

Dans un premier temps, nous avons étudié la structure de bandes 3Dk du Si massif sous contrainte biaxiale et uniaxiale et analysé les répercussions de la déformation des bandes sur le transport. Le gain à faible champ est le fruit d'une compétition entre la modification des courbures de bandes et la diminution des interactions interbandes induite par la levée de dégénérescence des bandes. A plus fort champ, le gain tend à s'annuler quand les porteurs atteignent la vitesse de saturation induite par les phonons optiques non polaires.

Dans un second temps, nous avons étudié des dispositifs pDG-MOSFET courts à l'état ON. Les propriétés de transport de trous restent anisotropes et on retrouve qualitativement les tendances observées dans le cas du barreau de Si massif. Du fait des effets non stationnaires, les effets de la contrainte sur la mobilité ne se répercutent pas intégralement sur le courant. En effet, même si le régime de transport est encore assez loin de la limite balistique, les porteurs atteignent des énergies cinétiques élevées. Ainsi, il faut prendre en compte les propriétés des structures de bandes aux hautes énergies.

Une analyse fine du comportement microscopique des porteurs a mis en évidence des différences entre les effets d'une contrainte biaxiale et ceux d'une contrainte uniaxiale sur les propriétés de transport dans les dispositifs à l'état ON. Dans le cas biaxial, l'augmentation du courant est essentiellement due à l'amélioration des courbures de bandes à haute énergie. En revanche, dans le cas d'une contrainte uniaxiale, les modifications des interactions et les perturbations des courbures jouent à parts égales sur les variations de courant. Dans la plupart des cas étudiés (à l'exception d'une contrainte uniaxiale selon <110> élevée), l'orientation de canal <100> est la plus avantageuse en termes de courant et de délai.

Dans un troisième temps, nous avons étudié la mobilité faible champ dans les couches d'inversion. Nous avons montré que l'approche en gaz 3Dk ne peut reproduire les tendances expérimentales de variation de mobilité dans le cas de la contrainte biaxiale en tension et uniaxiale selon <100>. L'approche en gaz 2Dk est en bien meilleur accord avec les valeurs mesurées. Ainsi, il est indispensable de prendre en compte à la fois les effets de confinement et de contrainte sur les structures de bandes. Enfin, pour les contraintes relativement faibles,

nous avons montré que les variations de mobilité sont essentiellement dues à la perturbation des bandes et dans une moindre mesure à la modification des fréquences de transition.

Les études menées dans ce chapitre ont été limitées à une orientation (001) du *wafer* traditionnellement utilisée en microélectronique. Or, il a été démontré qu'une orientation (011) du substrat est plus avantageuse en termes de mobilité et que la contrainte avait des effets différents sur les structures de bandes [Bufler2006; Irie2004; Sun2007a]. Ainsi, les perspectives de ce travail sont d'adapter les développements en gaz 2Dk et 3Dk à d'autres orientations cristallines afin de compléter les études menées pendant cette thèse. De plus, les outils développés pourront être couplés à des simulateurs de procédés et exploités par des outils TCAD pour l'étude des effets de contraintes induites par des procédés de type CESL, plus complexes que les cas types étudiés ici.

Conclusion Générale

L'ingénierie de contrainte mécanique est aujourd'hui une étape incontournable dans la course à la miniaturisation des transistors MOS. Le nombre croissant de procédés développés ainsi que les records de performance obtenus ces dernières années en démontrent bien les potentialités.

Dans ce cadre, les objectifs de cette thèse étaient de modéliser les dispositifs des prochains nœuds technologiques et de quantifier l'impact de la contrainte mécanique sur les performances. En général, la mobilité est le facteur de mérite principalement exploité pour quantifier les performances d'une technologie, et également l'un des paramètres clé des simulateurs TCAD utilisés pour l'optimisation des dispositifs. Pour développer des modèles fiables, une description réaliste de la structure de bandes couplée à une modélisation fine du transport de charges est nécessaire. C'est pourquoi nous avons fait évoluer la version initiale du simulateur particulaire Monte Carlo MONACO pour qu'il puisse prendre en compte une structure de bandes complète, ce qui en fait un simulateur MC *Full Band*, au prix d'un coût plus élevé en termes de temps de calcul et d'espace mémoire.

Cette nouvelle version a été exploitée dans deux cas : le transport électronique et le transport de trous. Il s'avère que l'approximation de la masse effective avec coefficient de non parabolicité est suffisante pour modéliser le transport en bande de conduction dans les cas de contrainte biaxiale, ce qui est loin d'être le cas en bande de valence.

Concernant les électrons, grâce à l'efficacité de l'approche en bandes analytiques, nous avons réalisé une analyse systématique de l'impact des effets non stationnaires sur la mobilité extraite de caractéristiques purement électriques et de magnétorésistance. Nous avons en particulier clarifié la notion controversée de « mobilité balistique » pour les deux méthodes d'extraction. Ainsi, la dégradation de mobilité observée dans des dispositifs courts à canal non dopé est essentiellement apparente et explicable en termes d'effets non stationnaires.

Quant aux trous, nous avons mis en évidence que le transport dans les pDG-MOSFET est moins balistique que dans le cas des électrons mais qu'il reste fortement non stationnaire. L'amélioration des performances avec la contrainte est très liée à la perturbation des courbures de bandes et ne suit que qualitativement les tendances de la mobilité.

Dans les couches d'inversion, grâce à des comparaisons entre des calculs de mobilité Kubo-Greenwood avec des mesures de piézorésistance par *wafer bending*, nous avons mis en évidence les limitations de l'approche en gaz 3Dk. Ainsi, il est indispensable de prendre en compte à la fois les effets de confinement et de contraintes dans une approche en gaz 2Dk. Nous avons montré que les variations de mobilité à faible intensité de contrainte sont essentiellement dues à la perturbation des bandes et dans une moindre mesure à la modification des interactions.

Dans la continuité directe de ce travail de thèse, il serait intéressant d'étudier d'autres orientations de substrat et de canal en combinaison avec la contrainte uniaxiale. La première étape est d'adapter les algorithmes à un maillage à pas variable afin d'optimiser l'espace mémoire et ainsi permettre l'étude d'un plus grand nombre de cas de contrainte. Le formalisme Kubo-Greenwood ayant démontré son efficacité, il serait judicieux de l'exploiter pour la bande de conduction afin de comparer les approches gaz 3Dk et 2Dk aux expériences de *wafer bending* déjà réalisées à STMicroelectronics. Cet outil pourra fournir les données de référence pour la mise au point de modèles de mobilité basés sur l'approche piézorésistive, intégrables dans les outils TCAD pour optimiser les profils de contrainte.

Ce travail avait pour fil directeur la mobilité dans les MOS comme concept clé du transport. Nous avons montré qu'il est périlleux d'interpréter directement cette grandeur comme un facteur de mérite. Des modèles physiques et précis de ce paramètre sont nécessaires pour continuer à l'utiliser dans le cadre de l'optimisation des technologies. Ainsi, la simulation Monte Carlo est un outil précieux dans cette tâche car elle sert de référence fiable. En effet, la compréhension fine du transport qui en découle peut se transférer vers des outils efficaces pour le dimensionnement et la conception de circuits.

De manière générale, on ne peut plus se contenter d'approches analytiques trop simples non soutenues par la physique. Une approche multi-échelles, issue de collaborations riches et fructueuses entre experts dans les domaines allant de l'atome au circuit, est indispensable pour continuer le développement d'outils de modélisation représentatifs de physique, à la fois efficaces et prédictifs, et concevoir ainsi les composants de la microélectronique de demain.

Annexes

Annexe 1 : Choix de l'état final

Cette annexe donne des précisions sur les développements concernant le choix du vecteur d'onde final après interaction. Tout d'abord, l'algorithme de choix de l'état final repose sur le calcul de la densité d'états locale (qui sert également au calcul de la DOS totale). Ensuite, une fois la maille sélectionnée par l'algorithme de réjection, il s'agit de sélectionner un vecteur d'onde aléatoirement dans la maille pour éviter les problèmes de discrétisation.

1 Calcul de densité d'états locale

Il s'agit de calculer la surface constituée par l'intersection entre une maille et la surface isoénergie E donnée.

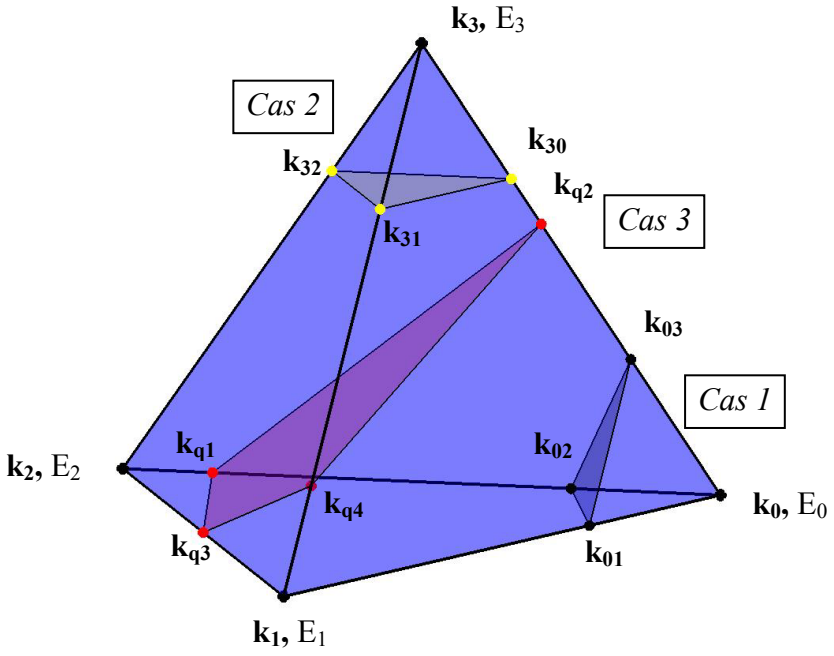

Figure 112 : Intersections possibles d'une surface isoénergie avec une maille tétraédrique.

Cette intersection est considérée comme une surface qui est soit inscrite dans un triangle, soit dans un quadrangle (cf. Figure 112). Lehmann et Taut [Lehmann1972] ont réduit

les expressions dépendant initialement des vecteurs d'ondes aux nœuds des mailles tétraédriques afin d'obtenir des relations uniquement fonction de l'énergie considérée (et ce grâce à l'interpolation linéaire). Cela nécessite d'ordonner les nœuds de chaque maille par énergie croissante afin de limiter les types de surface possibles.

Les densités d'états par maille sont alors données suivant les formules suivantes [Lehmann1972], où V est 6 fois le volume de la maille tétraédrique :

Cas 1 : $E_0 \leq E \leq E_1$

$$DOS_1(E) = \frac{V}{8\pi^3} \frac{(E - E_0)^2}{(E_1 - E_0)(E_2 - E_0)(E_3 - E_0)}$$

Cas 2 : $E_2 \leq E \leq E_3$

$$DOS_2(E) = \frac{V}{8\pi^3} \frac{(E - E_3)^2}{(E_3 - E_0)(E_3 - E_1)(E_3 - E_2)}$$

Cas 3: $E_1 \leq E \leq E_2$

$$DOS_3(E) = DOS_1(E) - \frac{V}{8\pi^3} \frac{(E - E_1)^2}{(E_1 - E_0)(E_2 - E_1)(E_3 - E_1)}$$

2 Interpolation inverse

La maille sélectionnée doit être traversée par la surface isoénergie E. Dans le cadre de l'interpolation linéaire, cette surface est approchée par un plan dans la maille. Pour des raisons de conservation de l'énergie, le vecteur d'onde final doit nécessairement être sélectionné aléatoirement sur cette surface. Les nœuds ayant préalablement été ordonnés par énergie croissante ($E_0<E_1<E_2<E_3$), on peut distinguer 3 cas possibles qui seront traités différemment (Figure 112).

Dans tous les cas on procède de la manière suivante [Lehmann1972; Sée2003] :

- Choix d'un vecteur d'onde de référence (un des nœuds de la maille).
- Détermination des vecteurs $\mathbf{k_i}$ points d'intersection maille/surface isoénergie.
- Eventuellement choix d'une surface triangulaire (cf. cas 3).
- Calcul du vecteur d'onde final **k'** comme une combinaison linéaire aléatoire des vecteurs précédemment calculés.
- Vérification de l'appartenance de **k'** à la surface triangulaire choisie et validation.

Les 3 cas possibles sont les suivants :

Cas 1 : E_0<E'<E_1

La surface est un triangle. On choisit naturellement $\mathbf{k_0}$ comme vecteur de référence. Les coordonnées des vecteurs $\mathbf{k_{0i}}$ points d'intersection se calculent en inversant la formule d'interpolation :

$$\mathbf{k_{0i}} = \frac{E' - E_0}{E_i - E_0}(\mathbf{k_i} - \mathbf{k_0})$$

Le vecteur **k'** est alors une combinaison linéaire de ces vecteurs :

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_{01} + \alpha.(\mathbf{k}_{02} - \mathbf{k}_{01}) + \beta.(\mathbf{k}_{03} - \mathbf{k}_{01})$$

où α et β sont des nombres aléatoirement choisis entre 0 et 1 selon une loi uniforme. Le vecteur $\mathbf{k'-k_0}$ se trouve alors obligatoirement dans la surface définie par le losange ABCD représenté sur la Figure 113.

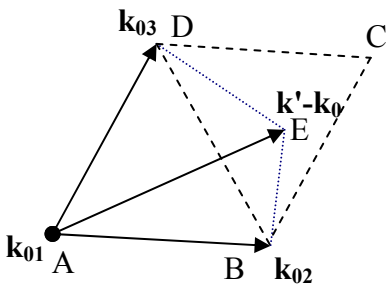

Figure 113 : Vecteur d'onde final sur une surface isoénergie triangulaire.

On peut détecter si le vecteur calculé est hors du triangle ABD en calculant les aires des surfaces ADE et ABE (norme de produits vectoriels). Si ADE+ABE > ABD, on est hors de la surface permise et on ramène donc le vecteur dans le triangle par symétrie :

$$\mathbf{k}'' - \mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_{02} + \mathbf{k}_{03} - (\mathbf{k}' - \mathbf{k}_0)$$

Cas 2 : E_2<E'<E_3

La surface est de nouveau un triangle, mais on choisira cette fois-ci $\mathbf{k_3}$ comme vecteur de référence. Les vecteurs $\mathbf{k_{3i}}$ points d'intersection se calculent de la même manière que précédemment :

$$\mathbf{k}_{3i} = \frac{E' - E_3}{E_i - E_3}.(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_3)$$

On en déduit le vecteur d'onde final de la même manière que pour le cas précédent.

Cas 3 : E_1<E'<E_2

Ce cas est un peu particulier du fait que la surface isoénergie est maintenant un quadrangle. Il y a alors 2 vecteurs de référence pour la détermination des vecteurs points d'intersection $\mathbf{k_{qi}}$ et on peut définir 2 triangles (figure 2.10). Les points d'intersection $\mathbf{k_{qi}}$ (i=1 à 4) sont respectivement situés sur les arêtes $\mathbf{k_0}$-$\mathbf{k_2}$, $\mathbf{k_0}$-$\mathbf{k_3}$, $\mathbf{k_1}$-$\mathbf{k_2}$, $\mathbf{k_1}$-$\mathbf{k_3}$.

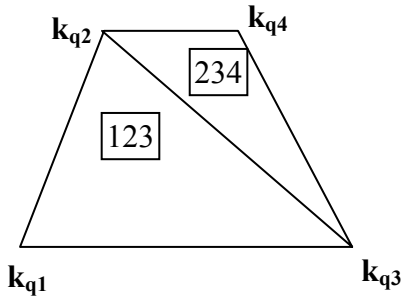

Figure 114 : Surface isoénergie de type quadrangle

Il y a donc 2 vecteurs de référence selon l'arête considérée : $\mathbf{k_0}$ pour $\mathbf{k_{q1}}$ et $\mathbf{k_{q2}}$, $\mathbf{k_1}$ pour $\mathbf{k_{q3}}$ et $\mathbf{k_{q4}}$. L'un des triangles est alors choisi aléatoirement et les vecteurs redéfinis en conséquence pour le calcul de la surface. Le vecteur d'onde final est alors déterminé comme dans les cas précédents.

Annexe 2 : Impuretés ionisées

Les caractéristiques principales de cette interaction sont les suivantes :

- Interaction intravallée
- Fréquence importante à "faible" énergie (selon dopage)
- Fréquence d'interaction dépendant de ***k*** initial et ***k'*** final (anisotrope)
- Effet de l'interaction anisotrope (dépendant de ***k'*** final)

1 Du début du calcul

Dans le cadre du traitement de l'interaction comme une perturbation dépendant du temps, on résout l'équation de Schrödinger. Pour ce faire on utilise un potentiel perturbateur (dû à la présence de l'impureté) de la forme suivante [Cohen-Tanoudji2000] :

<u>Espace réel (avec L longueur d'écran) :</u>

$$V_0(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{sc}} \frac{\exp\left(-|\mathbf{r}|/L\right)}{|\mathbf{r}|}$$

r est la position spatiale du porteur, e la charge, *Z* l'état de charge de l'impureté ionisée.

<u>Espace de Fourier :</u>

$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ (vecteur d'onde de transition)

- Potentiel non écranté :

$$U_0(\mathbf{q}) = \frac{Ze}{\varepsilon_0\varepsilon_{sc}} \left(\frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \right)$$

- Potentiel total :

$$U(\mathbf{q}) = \frac{U_0(\mathbf{q})}{\varepsilon(\mathbf{q},0)}$$

Grâce à la règle d'or de Fermi, on en déduit le terme s(**k**,**k'**) (densité de probabilité d'interaction) via :

$$s(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \delta(E'(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}))$$

Soit : $s(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{8\pi^3}\left|U(\mathbf{q})\right|^2.\delta(E'-E)$,

où on utilise la fonction diélectrique de Lindhard

$$\varepsilon(\mathbf{q},0) = \frac{1}{|\mathbf{q}|^2}\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}|\mathbf{q}|^2 + \beta_s^2.F(\xi,0)\right)$$

Avec β_s longueur d'écran (Debye) :

$$\beta_s^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0\varepsilon_{sc}k_BT}$$

où n est la densité de porteurs,

et $F(\xi,0)$ est la fonction d'écrantage dépendant de la forme de la vallée.

2 A la fonction d'écrantage

2.1 L'approximation sphérique

Pour une vallée sphérique (approximation isotrope de la fonction diélectrique [Galdin1992]) :

$$F(\xi,0) = \frac{\sqrt{\pi}}{2i\xi}\exp(-\xi^2)\mathrm{erf}(i\xi) \qquad \text{avec} \qquad \xi^2(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2|\mathbf{q}|^2}{8m_{eff}k_BT}$$

où m_{eff} est la masse effective de densité d'états pour la vallée considérée ($m_{eff} = 0{,}3215m_0$ pour les électrons dans le Si massif) et erf est la fonction d'erreur. Si on veut considérer une vallée de type ellipsoïdale, la formulation de la fonction diélectrique de Lindhard sera plus complexe [Aldrich1977].

2.2 De la pertinence de celle-ci

Des calculs numériques de la fonction diélectrique dépendant du vecteur d'onde ont été menés par Walter et Cohen [Walter1970] en utilisant des fonctions d'ondes et des structures de bandes issues de calculs de type EPM (Si, Ge, GaAs et ZnSe)

Ils montrent que l'anisotropie de $\varepsilon(\mathbf{q},0)$ est surtout visible dans la direction <111> (valeur légèrement plus faible), mais qu'elle ne dépasse pas 10% environ (écart $\varepsilon_{<100>}-\varepsilon_{<111>}$ pour $\mathbf{q}=\pi/a_0$). Pour les faibles $\mathbf{q}$, $\Delta\varepsilon$ tourne autour de 2% environ (valeur pour $0{,}4\pi/a_0$).

Sachant cela, on peut considérer que l'approximation d'une fonction diélectrique isotrope suffit pour un calcul de fréquence d'interaction.

$\beta^2(q)=\beta_s^2.F(\xi)$ est approchée par trois polynômes (faibles, moyens et forts ξ) et tabulée [Galdin1992]. Elle est représentée en Figure 115. On peut observer que l'écrantage variable a d'autant plus d'influence que **q** est faible.

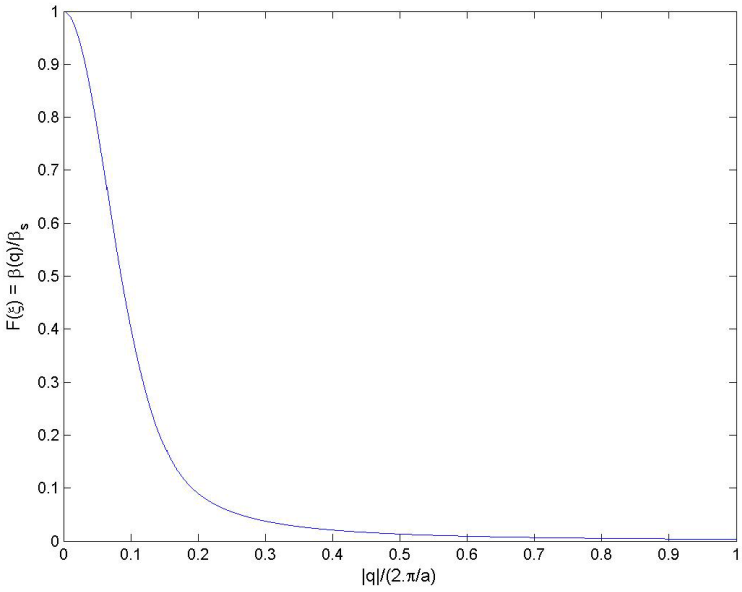

Figure 115 : Fonction d'écrantage.

3 A l'obtention de la fréquence d'interaction

Avec les approximations précédentes, on obtient :

$$s(\mathbf{k},\mathbf{k}') = s(\mathbf{q}) = \frac{Ne^2}{4\pi^2\hbar\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}\right)^2}.\frac{\left|G(\mathbf{k},\mathbf{k}')\right|^2}{\left[\left|\mathbf{q}\right|^2+\beta_s^2.F(\xi,0)\right]^2}.\delta(E(\mathbf{k})-E(\mathbf{k}')) \quad (3.1)$$

3.1 De l'intégrale de recouvrement

Le carré de l'intégrale de recouvrement des fonctions d'ondes (G(**k**,**k'**)) peut être approché à partir des relations de dispersion analytiques [Galdin1992]. Le terme G(**k**,**k'**) apparaît dans toutes les fréquences d'interaction quel que soit le processus considéré. Pour le calculer plus exactement, il faut passer par des méthodes de type **k.p** ou EPM (*Empirical Pseudopotential Method*). En ce qui concerne le Silicium, cela ne serait utile qu'aux énergies élevées (quelques 100 meV). Pour les faibles énergies et pour des tranferts intra-bande, on approxime souvent G(**k**,**k'**) par [Dollfus1999] :

- G = 1 pour les électrons car on est loin du centre de zone et θ est donc très faible

- G = 0,25-0,75cos²(θ) pour les trous (θ étant l'angle entre **k** et **k'**)

Il faut cependant garder à l'esprit que la valeur de l'intégrale de recouvrement est souvent incluse dans les paramètres ajustables de l'interaction (potentiels de déformation, d'alliage, constante d'écrantage…) et qu'elle peut avoir son importance quand on étudie des phénomènes à haute énergie ou inter-bandes.

3.2 De l'intégration sur les état finaux

Dans le cas d'une interaction élastique, on a E(**k**)=E(**k**') et on se place donc sur une surface isoénergie pour calculer la probabilité de transition de **k** à **k'**.

Pour obtenir la probabilité d'interaction pour un vecteur d'onde initial **k** donné, il faut sommer s(**k**,**k'**) sur tous les états finaux possibles **k'** de la surface isoénergie. On obtient alors :

$$\lambda(\mathbf{k}) = \int s(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^3k$$

On peut observer que la probabilité obtenue va dépendre de la forme de la surface isoénergie considérée. Si elle est sphérique, la probabilité sera indépendante du vecteur d'onde incident. Dans le cas où elle est anisotrope (par exemple ellipsoïdale), la probabilité dépendra du **k** incident.

Il faut également tenir compte du fait que l'état final peut se situer dans une des zones de Brillouin voisines (**k'** = **k** + **q** hors première zone de Brillouin). Dans la pratique, du fait de la dépendance en $1/|\mathbf{q}|^4$, les transitions concernées emmènent les porteurs dans les vallées Δ équivalentes (symétriques par rapport au centre de zone Γ), i.e. avec le même axe de symétrie. Il convient donc de prendre en compte ces transitions à la fois dans l'intégration sur tous les **k'** possibles et dans le choix de l'état final. Leur probabilité augmentera d'autant plus que **k** sera proche du bord de Zone de Brillouin.

3.3 De l'intégrale enfin discrétisée

Fischetti et al. [Fischetti1988; Fischetti1995] utilisent cette même intégrale (avec des notations différentes et un calcul **k.p** de l'intégrale de recouvrement) qu'ils discrétisent. Ils ont pour base un maillage cubique, mais le raisonnement est le même dans le cas de tétraèdres.

Afin de calculer la fréquence d'interaction à partir d'une structure de bandes tabulée, il faut pouvoir transformer les intégrales sur les **k'** (états finaux possibles) en sommes. Pour ce

faire, on utilise une interpolation linéaire dans les mailles **i**. Dans chacune d'elles, la surface isoénergie est approchée par une surface plane (soit un triangle, soit un quadrangle), dont la surface $S_{\mathbf{i}}$ est proportionnelle à la densité d'états locale $DOS_{\mathbf{i}}(E')$ (nulle si la maille ne contient pas E').

On peut donc remplacer les intégrales par les sommes si on remplace les Dirac par ces surfaces. On obtient alors la forme discrétisée de la fréquence d'interaction :

$$\lambda_{disc}(\mathbf{k}) = \frac{Ne^2}{4\pi^2\hbar\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}\right)^2}\sum_{\substack{q_i\in ZB\\ i\in IsoE}}\frac{S_i}{\left[\left|\mathbf{q}_i\right|^2+\beta_s^2F(\xi_i,0)\right]^2} \qquad (3.3)$$

où la somme se fait sur les mailles traversées par la surface isoénergie E = E' (IsoE),

- S_i est proportionnelle à $DOS_{\mathbf{i}}(E')$
- $\mathbf{q}_i = \mathbf{k} - \mathbf{k}'_i$ avec $\mathbf{k'_i}$ barycentre de la surface dans la maille considérée
- $\xi_i^2(\mathbf{q}_i) = \dfrac{\hbar^2\left|\mathbf{q}_i\right|^2}{8m_{eff}k_BT}$, $F(\xi,0)$ étant tabulée pour $|\mathbf{q}|$ allant de 0 à $2\pi/a_0$.

Le résultat obtenu après intégration numérique avec une relation de dispersion de type parabolique et des surfaces isoénergie ellipsoïdales est représenté en fonction de l'énergie sur la Figure 116 pour des dopages de 10^{17} et 10^{18} cm^{-3} (chaque point est un vecteur d'onde **k** donné).

On peut observer que plus le dopage est élevé, moins les variations en fonction de **k** à une énergie E donnée sont importants. Cela est simplement dû à la prédominance (croissante avec le dopage) de la longueur d'écran aux faibles $|\mathbf{q}|$ ($F(\xi,0) \approx 1$) sur l'influence de la structure de bandes (via le terme $|\mathbf{q}|^2$).

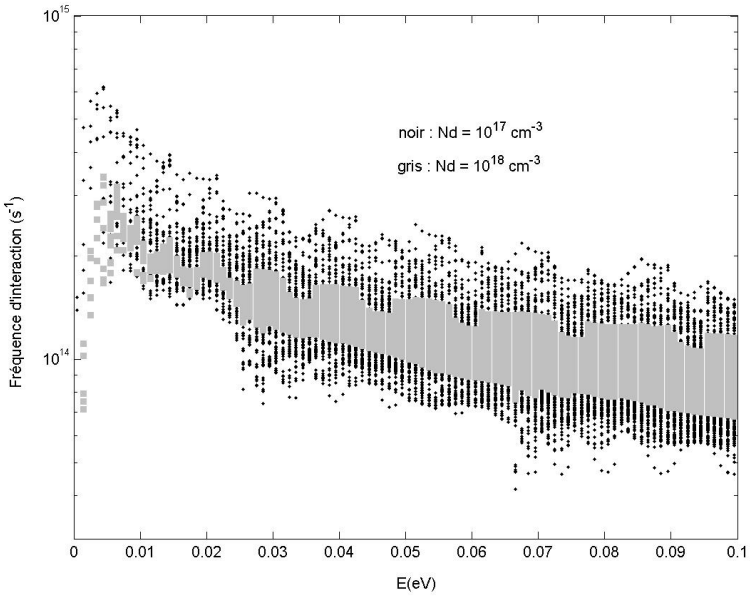

Figure 116 : Fréquences d'interaction intégrées numériquement avec les impuretés ionisées pour Nd = 10^{17}(noir) et 10^{18} (gris) cm^{-3}.

Remarque : Les points situés à faible énergie ont des fréquences d'interaction assez faibles. C'est un des effets de la discrétisation de la structure de bandes du matériau. Avec la tabulation actuelle, et dans le cas du Si massif, l'approche discrète n'est valide que pour des énergies supérieures à 10 meV environ.

4 Au passage au temps de relaxation

4.1 De l'intérêt de la chose

Aux "faibles" dopages ($N < 10^{18}$ cm^{-3}), ce calcul de $\lambda(\mathbf{k})$ présente deux inconvénients majeurs :

- $\lambda(\mathbf{k})$ est grande pour les faibles énergies (Figure 116).
- $\lambda(\mathbf{k})$ favorise les faibles **q**, l'effet de l'interaction est donc anisotrope (Figure 117).

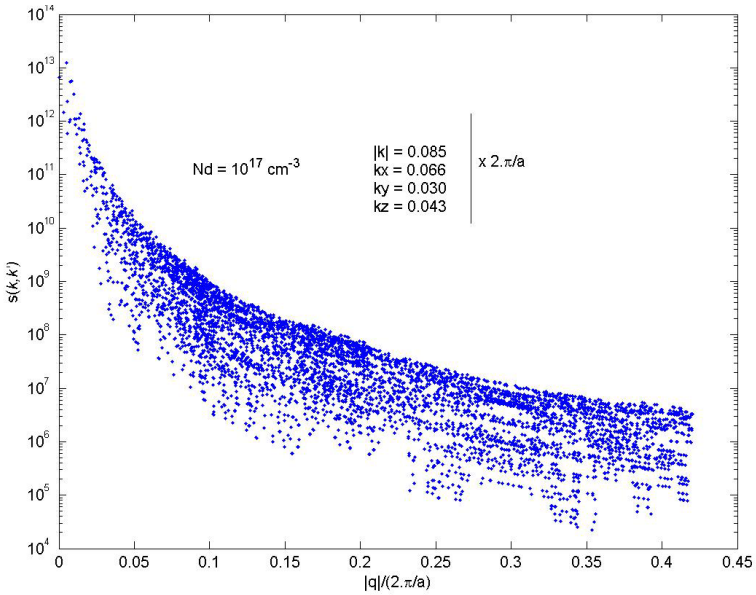

Figure 117 : Terme s(**k**,**k'**) pour **k** donné et E = 10 meV en fonction de |**q**| = |**k-k'**|.

Ce dernier inconvénient donne lieu à de très nombreux événements ayant peu d'effets sur le porteur (faible variation du vecteur d'onde), ce qui risque de ralentir considérablement les simulations Monte Carlo sans gain notable en précision.

Afin de pallier ce problème, on remplace souvent la fréquence d'interaction par l'inverse du temps de relaxation [Kosina1999] :

$$\lambda^{rel}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\tau_{imp}(\mathbf{k})} = \int (1-\cos(\theta))s(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^3k \quad (4.1)$$

où θ est l'angle entre les **k** et **k'** cinétiques (i.e. origine des **k** au minimum de la vallée considérée).

Cela présente deux avantages majeurs :

- Les interactions avec un fort angle de déviation (**q** élevé) sont favorisées (par le terme 1-cos(θ)) par rapport aux petits angles (**q** faible). Cela favorise les interactions qui vont entraîner une relaxation du moment cinétique plus rapide.
- L'inverse du temps de relaxation est généralement plus faible que la fréquence d'interaction (à énergie plus élevée), ce qui diminue la probabilité pour l'interaction avec les impuretés ionisées de survenir et augmente alors l'efficacité de l'algorithme Monte Carlo.

Cette approximation peut être acceptée dans la mesure où l'on peut dire qu'une interaction avec un fort θ correspond en fait à plusieurs interactions à faible θ cumulées [Kosina1999].

De plus, pour des dopages relativement faibles ($N < 10^{18}$ cm^{-3}) et des énergies élevées (> quelques 100 meV), l'approximation est d'autant plus justifiée que l'on sait que l'interaction avec les impuretés ionisées est loin d'être dominante (la mobilité est alors limitée par les interactions avec les phonons du réseau cristallin).

Il faut cependant préciser qu'à fort dopage (> 5.10^{19} cm^{-3} environ), le modèle utilisé montre ses limites et nécessite des corrections plus complexes [Kosina1998] pour décrire correctement les données expérimentales.

Le calcul discrétisé se fait de la même manière que précédemment, avec en plus le calcul de l'angle de déviation et la pondération de s(**k**,**k'**) par (1-cos(θ)) :

$$\lambda_{disc}^{rel}(\mathbf{k}) = \frac{Ne^2}{4\pi^2\hbar\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}\right)^2}\sum_{\substack{q_i\in ZB\\ i\in IsoE}}\frac{(1-\cos(\theta_i))S_i}{\left[\left|\mathbf{q}_i\right|^2+\beta_s^2F(\xi_i,0)\right]^2} \qquad (4.2)$$

avec $\cos(\theta_i) = \dfrac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}_i'}{\left|\mathbf{k}\right|\left|\mathbf{k}_i'\right|}$

On peut comparer le résultat de l'intégration numérique de s(**k**,**k'**) avec et sans pondération par (1-cos(θ)) sur la Figure 118 (dopage Nd = 10^{17} cm^{-3}).

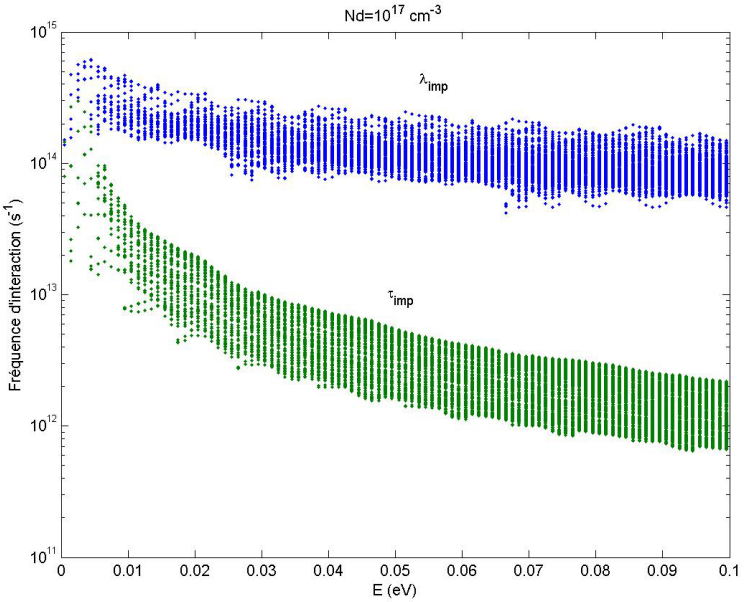

Figure 118 : Fréquence d'interaction en fonction de l'énergie avec (τ_{imp}) et sans (λ_{imp}) pondération par 1-cos(θ) (chaque point est la valeur de fréquence pour un **k** donné).

4.2 De la compatibilité avec MONACO

Dans la version initiale de MONACO, les interactions étaient toutes calculées à l'aide de relations de dispersion analytiques et les fréquences tabulées en énergie. Or, dans le cas des impuretés, les variations de $\lambda(\mathbf{k})$ sur une surface isoénergie peuvent atteindre 100% et plus (cf. Figure 116 et Figure 118).

On peut cependant conserver la tabulation en énergie si on met en place un algorithme de réjection (type *self-scattering*) pour tenir compte de la dépendance en **k** de la fréquence :

- Dans une certaine plage énergétique (à déterminer), on précalcule les fréquences d'interaction pour chaque maille tétraédrique (l'un des $\lambda_{disc}(\mathbf{k})$ précédemment détaillés) et on en extrait la valeur maximale calculée pour une énergie donnée ($\lambda_{max}(E)$) dans un tableau.
- Cette valeur remplace le $\lambda(E)$ analytique habituel. Les tirages aux sort successifs des temps de vol et des interactions se font de la même manière qu'habituellement.
- Lorsque l'interaction impureté est sélectionnée, on calcule la valeur "réelle" de $\lambda_{disc}(\mathbf{k})$ que l'on compare à $R.\lambda_{max}(E)$ où R est une valeur aléatoire entre 0 et 1.
- Si $\lambda_{disc}(\mathbf{k}) > R.\lambda_{max}(E)$, l'interaction est prise en compte et on passe au choix de l'état final **k'**, sinon l'interaction est rejetée et l'état du porteur ne subit aucune modification (*self-scattering*).

5 Au choix de l'état final après interaction

5.1 D'un choix "simple" (anisotropie de structure de bandes)…

Si l'on considère l'approximation par temps de relaxation, il faut en tenir compte lors du choix de l'état final (une fois l'interaction sélectionnée). Dans le cas des interactions isotropes (phonons), le choix de l'état final se fait uniquement proportionnellement à la densité d'états disponibles (DOS(E',**k'**)) à l'énergie après interaction (via une méthode de réjection). Cela reflète l'anisotropie de la structure de bande du matériau considéré, i.e. la dépendance en **k** de $\lambda(E)$.

Dans le cas des impuretés, si l'on veut être cohérent, il faut également tenir compte de la préférence pour les interactions à fort angle de déviation θ. Pour ce faire, il faut donc choisir l'état final proportionnellement à $(1-\cos(\theta)).\mathrm{DOS}(E',\mathbf{k}')$. La méthode de réjection suit

alors le schéma de la Figure 119 (**i** est une maille donnée, R est une variable aléatoire uniformément choisie entre 0 et 1 à chaque itération) :

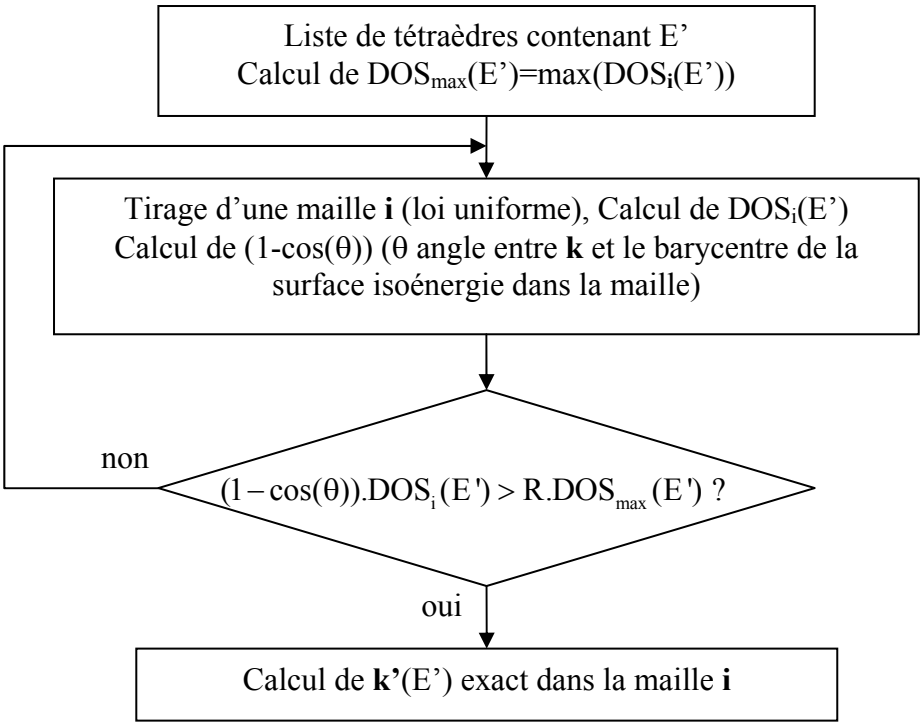

Figure 119 : Algorithme de réjection isotrope.

Cette méthode présente l'avantage d'être simple et rapide, mais reflète l'anisotropie de la structure de bandes sans tenir compte de l'anisotropie propre à l'interaction.

5.2 … au juste choix (anisotropie de l'interaction)

Afin de choisir plus rigoureusement l'état final, on devrait normalement utiliser une loi de probabilité plus proche de la forme de s(**k**,**k'**). On rappelle que la densité de probabilité de passage d'un état **k** à un état **k'**, dans le cadre de l'approximation de la fréquence par l'inverse du temps de relaxation, peut s'écrire (une fois discrétisée) :

$$(1-\cos(\theta))s(\mathbf{k},\mathbf{k}') = s(\mathbf{q}) = \frac{Ne^2}{4\pi^2\hbar\left(\varepsilon_0\varepsilon_{sc}\right)^2}\frac{\left|G(\mathbf{k},\mathbf{k}')\right|(1-\cos(\theta))S_i(E,\mathbf{k}')}{\left[\left|\mathbf{q}\right|^2+\beta_s^2.F(\xi,0)\right]^2}$$

où $S_i(E,\mathbf{k'})$ est une surface proportionnelle à la densité d'états à E = E' dans la maille contenant **k'**, et θ l'angle entre **k** et **k'** (référence des **k** au minimum de vallée). L'intégrale de recouvrement est prise à 1 pour les électrons.

Ici, il est compliqué d'utiliser la méthode de réjection précédente car la définition d'un maximum est rendue difficile par la présence du terme de la forme $\frac{1}{\left[|\mathbf{q}|^2+\beta^2\right]^2}$.

On choisit en général comme maximum $1/\beta_s^4$ [Hjelm2002], mais ce terme est très grand devant le vrai s(**k**,**k'**) (plusieurs ordres de grandeur) dès que **q** augmente un peu, comme on le voit sur la Figure 120.

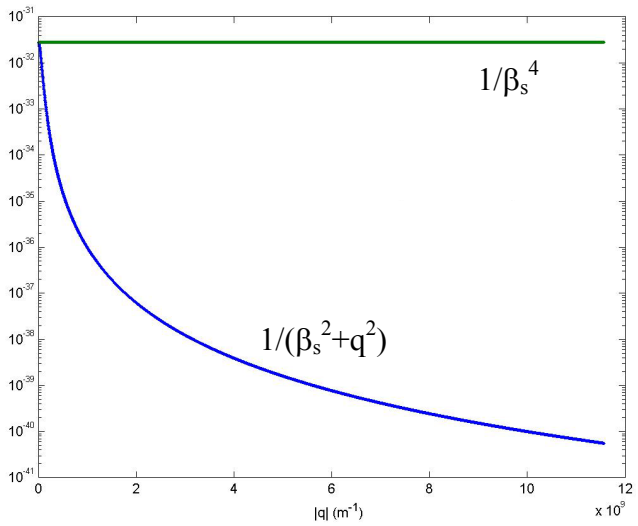

Figure 120 : Termes significatifs de s(**k**,**k'**) en fonction du vecteur d'onde de transition **q.**

Cela entraîne de nombreuses évaluations de s(**k**,**k'**) ne menant pas à la sélection d'un état final et nuit donc à la rapidité de l'algorithme sans en améliorer la précision.

Une autre façon de procéder, inspirée de la méthode décrite par Jacoboni [Jacoboni1983], consiste à utiliser la valeur intégrée de s(**k**,**k'**), soit λ(**k**) que l'on peut préalablement tabuler. Il s'agit de sommer les s(**k**,**k'**) obtenus en parcourant les états finaux possibles jusqu'à dépasser R.λ(**k**) où R est une variable aléatoire uniforme tirée entre 0 et 1. Le schéma de sélection de l'état final devient alors le suivant :

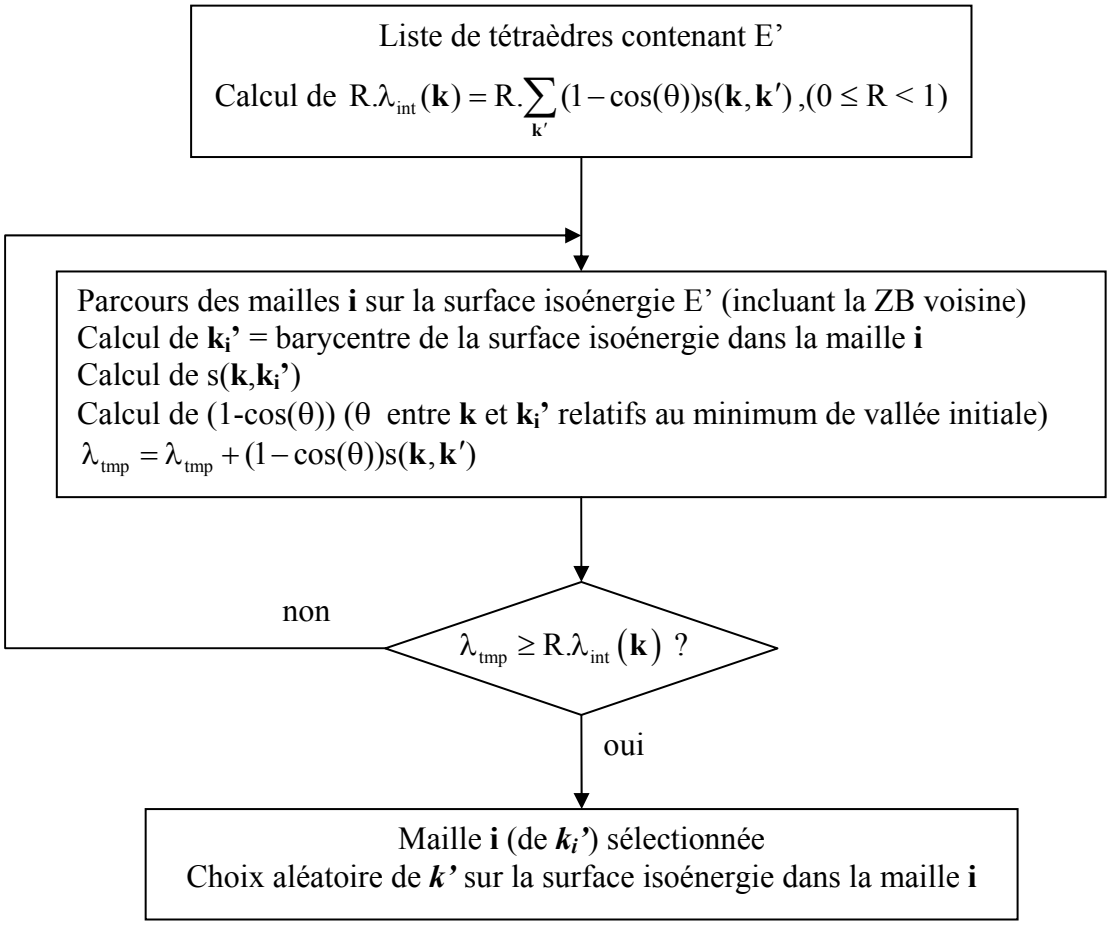

Figure 121 : Algorithme de réjection anisotrope.

Cet algorithme a été développé au début de la thèse. Les mobilités faible champ des électrons obtenues sont très proches des résultats issus des traitements plus simples (bandes analytiques, approximation isotrope). Etant donné les très longs temps de simulation et de l'espace mémoire requis, nous avons finalement décidé de nous servir du traitement le plus simple, en utilisant l'approche de la masse effective avec coefficient de non parabolicité pour la structure de bandes. Néanmoins, le travail fourni sur cette problématique étant non négligeable et exploitable pour d'autres études, nous avons jugé utile de le rajouter dans cette annexe.

Références Bibiographiques

[Abinit.org] www.abinit.org.

[Aldrich1977] C. Aldrich, "*Screened donor impurities in many-valley semiconductors with anisotropic masses*", Physical Review B, vol. **16**, no. 6, p.2723, 1977.

[Ando1982] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, "*Electronic properties of two-dimensional systems*", Reviews of Modern Physics, vol. **54**, no. 2, p.437, 1982.

[Andrieu2005] F. Andrieu, "*Transistors CMOS décananométriques à canaux contraints sur silicium massif ou sur SOI*", **Thèse de Doctorat**, INPG, Grenoble, 2005.

[Andrieu2007a] F. Andrieu, O. Faynot, F. Rochette et al., "*Impact of Mobility Boosters (XsSOI, CESL, TiN gate) on the Performance of <100> or <110> oriented FDSOI cMOSFETs for the 32nm Node*", Symposium on VLSI Technology, 2007a

[Andrieu2007b] F. Andrieu, O. Weber, T. Ernst et al., "*Strain and channel engineering for fully depleted SOI MOSFETs towards the 32 nm technology node*", Microelectronic Engineering, vol. **84**, no. 9-10, p.2047-2053, 2007b.

[Ang2005] K.-W. Ang, K.-J. Chui, V. Bliznetsov et al., "*Thin body silicon-on-insulator N-MOSFET with silicon-carbon source/drain regions for performance enhancement*", IEEE IEDM Technical Digest, 2005

[Ang2007] K.-W. Ang, J. Lin, C.-H. Tung et al., "*Beneath-The-Channel Strain-Transfer-Structure (STS) and Embedded Source/Drain Stressors for Strain and Performance Enhancement of Nanoscale MOSFETs*", Symposium on VLSI Technology, 2007

[Ang2006] K. W. Ang, K. J. Chui, H. C. Chin et al., "*50 nm Silicon-On-Insulator N-MOSFET Featuring Multiple Stressors: Silicon-Carbon Source/Drain Regions and Tensile Stress Silicon Nitride Liner*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Ashcroft1976] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, "*Solid State Physics*", Brooks/Cole, 1976.

[Aubry-Fortuna2005] V. Aubry-Fortuna, P. Dollfus and S. Galdin-Retailleau, "*Electron effective mobility in strained-Si/Si1-xGex MOS devices using Monte Carlo simulation*", Solid-State Electronics, vol. **49**, no. 8, p.1320-1329, 2005.

[Aulbur2000] W. G. Aulbur, M. Städele and A. Görling, "*Exact-exchange-based quasiparticle calculations*", Physical Review B, vol. **62**, no. 11, p.7121, 2000.

[Barraud2001] S. Barraud, "*Effet d'une répartition discrète et aléatoire des impuretés dans le canal des MOSFET sub-100 nm : Etude théorique par simulation Monte Carlo*", **Thèse de Doctorat**, Université Paris-Sud, Orsay, 2001.

[Bethoux2006] J. M. Bethoux, H. Happy, G. Dambrine et al., "*An 8-GHz f_t carbon nanotube field-effect transistor for gigahertz range applications*", IEEE Electron Device Letters, vol. **27**, no. 8, p.681-683, 2006.

[Bir1974] G. L. Bir and G. E. Pikus, "*Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*", Wiley, New York, 1974.

[Blöchl1994] P. E. Blöchl, O. Jepsen and O. K. Andersen, "*Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations*", Physical Review B, vol. **49**, no. 23, p.16223, 1994.

[Bonno2008] O. Bonno, S. Barraud, D. Mariolle et al., "*Effect of strain on the electron effective mobility in biaxially strained silicon inversion layers: An experimental and theoretical analysis via atomic force microscopy measurements and Kubo-Greenwood mobility calculations*", Journal of Applied Physics, vol. **103**, no. 6, p.063715-9, 2008.

[Bradley2001] A. T. Bradley, R. C. Jaeger, J. C. Suhling et al., "*Piezoresistive characteristics of short-channel MOSFETs on (100) silicon*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **48**, no. 9, p.2009-2015, 2001.

[Brisset1994] C. Brisset, "*Etudes théoriques par simulation Monte-Carlo 3D de la sensibilité aux irradiations des technologies CMOS/SOI*", **Thèse de Doctorat**, Université Paris-Sud, Orsay, 1994.

[Bufler2001] F. M. Bufler, A. Schenk and W. Fichtner, "*Simplified model for inelastic acoustic phonon scattering of holes in Si and Ge*", Journal of Applied Physics, vol. **90**, no. 5, p.2626-2628, 2001.

[Bufler2003] F. M. Bufler, "*Full-Band Monte Carlo Simulation of Nanoscale Strained-Silicon MOSFETs*", Series in Microelectronics, vol. **140**, 2003.

[Bufler2006] F. M. Bufler, A. Tsibizov and A. Erlebach, "*Scaling of Bulk pMOSFETs: (110) Surface Orientation Versus Uniaxial Compressive Stress*", IEEE Electron Device Letters, vol. **27**, no. 12, p.992-994, 2006.

[Bychkov1984] Y. A. Bychkov and É. Rashba, "*Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*", Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, vol. **39**, p.78, 1984.

[Canali1971] C. Canali, G. Ottaviani and A. Alberigi Quaranta, "*Drift velocity of electrons and holes and associated anisotropic effects in silicon*", Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. **32**, no. 8, p.1707-1720, 1971.

[Canali1979] C. Canali, F. Ferla, B. Morten et al., "*Piezoresistivity effects in MOS-FET useful for pressure transducers*", Journal of Physics D: Applied Physics, vol. **12**, no. 11, p.1973-1983, 1979.

[Cardona1966] M. Cardona and F. H. Pollak, "*Energy-Band Structure of Germanium and Silicon: The **k.p** Method*", Physical Review, vol. **142**, no. 2, p.530-543, 1966.

[Caughey1967] D. M. Caughey and R. E. Thomas, "*Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field*", Proceedings of the IEEE, vol. **55**, no. 12, p.2192-2193, 1967.

[Cazin d'Honincthun2005] H. Cazin d'Honincthun, S. Galdin-Retailleau, J. See et al., "*Electron-phonon scattering and ballistic behavior in semiconducting carbon nanotubes*", Applied Physics Letters, vol. **87**, no. 17, p.172112, 2005.

[Chaisantikulwat2006] W. Chaisantikulwat, M. Mouis, G. Ghibaudo et al., "*Differential magnetoresistance technique for mobility extraction in ultra-short channel FDSOI transistors*", Solid-State Electronics, vol. **50**, no. 4, p.637-643, 2006.

[Chaisantikulwat2007] W. Chaisantikulwat, M. Mouis, G. Ghibaudo et al., "*Experimental evidence of mobility enhancement in short-channel ultra-thin body double-gate MOSFETs by magnetoresistance technique*", Solid-State Electronics, vol. **51**, no. 11-12, p.1494-1499, 2007.

[Chelikowsky1976] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, "*Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*", Physical Review B, vol. **14**, no. 2, p.556, 1976.

[Chen2004] C.-H. Chen, T. L. Lee, T. H. Hou et al., "*Stress memorization technique (SMT) by selectively strained-nitride capping for sub-65nm high-performance strained-Si device application*", Symposium on VLSI Technology, 2004

[Chen2006] X. Chen, S. Fang, W. Gao et al., "*Stress Proximity Technique for Performance Improvement with Dual Stress Liner at 45nm Technology and Beyond*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Clerc2006] R. Clerc, P. Palestri and L. Selmi, "*On the physical understanding of the kT-layer concept in quasi-ballistic regime of transport in nanoscale devices*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **53**, no. 7, p.1634-1640, 2006.

[Cohen-Tanoudji2000] C. Cohen-Tanoudji, B. Diu and F. Laloe, "*Mecanique Quantique*", Hermann, Paris, 2000.

[Cohen1966] M. L. Cohen and T. K. Bergstresser, "*Band Structures and Pseudopotential Form Factors for Fourteen Semiconductors of the Diamond and Zinc-blende Structures*", Physical Review, vol. **141**, no. 2, p.789, 1966.

[Colinge2007] J. P. Colinge, "*Multi-gate SOI MOSFETs*", Microelectronic Engineering, vol. **84**, no. 9-10, p.2071-2076, 2007.

[Colman1968] D. Colman, R. T. Bate and J. P. Mize, "*Mobility Anisotropy and Piezoresistance in Silicon p-Type Inversion Layers*", Journal of Applied Physics, vol. **39**, no. 4, p.1923-1931, 1968.

[Cros2006] A. Cros, K. Romanjek, D. Fleury et al., "*Unexpected mobility degradation for very short devices: A new challenge for CMOS scaling*", IEEE IEDM Technical Digest, San Francisco, 2006

[Currie2001] M. T. Currie, C. W. Leitz, T. A. Langdo et al., "*Carrier mobilities and process stability of strained Si n- and p-MOSFETs on SiGe virtual substrates*", Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, vol. **19**, no. 6, p.2268-2279, 2001.

[Datta1995] S. Datta, "*Electronic transport in mesoscopic systems*", Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[Datta2000] S. Datta, "*Nanoscale device modeling: the Green's function method*", Superlattices and Microstructures, vol. **28**, no. 4, p.253-278, 2000.

[De Jaeger2007] B. De Jaeger, G. Nicholas, D. P. Borneo et al., "*High Performance High-k/Metal Gate Ge pMOSFETs with gate lengths down to 125 nm and halo implant*", Proc. ESSDERC, 2007

[Do2007a] V.-N. Do, "*Modeling and simulating quantum electronic transport in semiconductor nanometer devices*", **Thèse de Doctorat**, Univ. Paris-Sud, Orsay, 2007a.

[Do2007b] V. N. Do and P. Dollfus, "*Oscillation of gate leakage current in double-gate metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **101**, no. 7, p.073709-6, 2007b.

[Dollfus1999] P. Dollfus, "*Etudes théoriques de structures pour l'électronique rapide et contribution au développement d'un simulateur particulaire Monte Carlo*", **Habilitation à Diriger les Recherches**, Université Paris Sud, Orsay, 1999.

[Donetti2007a] L. Donetti, F. Gamiz and S. Cristoloveanu, "*Monte Carlo simulation of Hall and magnetoresistance mobility in SOI devices*", Solid-State Electronics, vol. **51**, no. 9, p.1216-1220, 2007a.

[Donetti2007b] L. Donetti, F. Gamiz and S. Cristoloveanu, "*A theoretical interpretation of magnetoresistance mobility in silicon inversion layers*", Journal of Applied Physics, vol. **102**, no. 1, p.013708, 2007b.

[Dresselhaus1955a] G. Dresselhaus, A. F. Kip, H.-Y. Ku et al., "*Cyclotron Resonance in Ge-Si Alloys*", Physical Review, vol. **100**, no. 4, p.1218, 1955a.

[Dresselhaus1955b] G. Dresselhaus, A. F. Kip and C. Kittel, "*Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*", Physical Review, vol. **98**, no. 2, p.368, 1955b.

[Dupré2007] C. Dupré, T. Ernst, J. M. Hartmann et al., "*Carrier mobility degradation due to high dose implantation in ultrathin unstrained and strained silicon-on-insulator films*", Journal of Applied Physics, vol. **102**, no. 10, p.104505-8, 2007.

[Fan2007] X.-F. Fan, L. F. Register, B. Winstead et al., "*Hole Mobility and Thermal Velocity Enhancement for Uniaxial Stress in Si up to 4 GPa*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **54**, no. 2, p.291-296, 2007.

[Feraille2006] M. Feraille, D. Rideau, A. Ghetti et al., "*Low-Field Mobility in Strained Silicon with Full Band Monte Carlo Simulation using **k.p** and EPM Bandstructure*", Proc. SISPAD, 2006

[Ferry2000] D. K. Ferry, R. Akis and D. Vasileska, "*Quantum effects in MOSFETs: use of an effective potential in 3D Monte Carlo simulation of ultra-short channel devices*", IEEE IEDM Technical Digest, 2000

[Ferry2007] D. K. Ferry, "*Quo Vadis Nanoelectronics?*" physica status solidi (c), vol. **9999**, no. 9999, p.NA, 2007.

[Fischer1999] B. Fischer and K. R. Hofmann, "*Full-band Monte Carlo model of electron and hole transport in strained Si including inelastic acoustic phonon scattering*", Applied Physics Letters, vol. **74**, no. 15, p.2185-2187, 1999.

[Fischer2000] B. Fischer and K. R. Hofmann, "*A full-band Monte Carlo model for the temperature dependence of electron and hole transport in silicon*", Applied Physics Letters, vol. **76**, no. 5, p.583-585, 2000.

[Fischetti1988] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "*Monte carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects*", Physical Review B, vol. **38**, no. 14, p.9721, 1988.

[Fischetti1991] M. V. Fischetti and J. M. Higman, "*Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*", Kluwer, 1991.

[Fischetti1995] M. V. Fischetti, S. E. Laux and E. Crabbe, "*Understanding hot-electron transport in silicon devices: Is there a shortcut?*" Journal of Applied Physics, vol. **78**, no. 2, p.1058-1087, 1995.

[Fischetti2002] M. V. Fischetti, F. Gamiz and W. Hansch, "*On the enhanced electron mobility in strained-silicon inversion layers*", Journal of Applied Physics, vol. **92**, no. 12, p.7320-7324, 2002.

[Fischetti2003] M. V. Fischetti, Z. Ren, P. M. Solomon et al., "*Six-band **k.p** calculation of the hole mobility in silicon inversion layers: Dependence on surface orientation, strain, and silicon thickness*", Journal of Applied Physics, vol. **94**, no. 2, p.1079-1095, 2003.

[Fishman1988] G. Fishman, "*Énergie et fonction d'onde des semi-conducterus*", Éditions de Physique, Les Ulis, 1988.

[Fishman2008] G. Fishman, "*Semi-conducteurs : Les bases de la théorie **k.p***", à paraître, 2008.

[Foreman1997] B. A. Foreman, "*Elimination of spurious solutions from eight-band **k.p** theory*", Physical Review B, vol. **56**, no. 20, p.R12748, 1997.

[Fuchs2005] E. Fuchs, P. Dollfus, G. Le Carval et al., "*A new backscattering model giving a description of the quasi-ballistic transport in Nano-MOSFET*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **52**, no. 10, p.2280-2289, 2005.

[Galdin1992] S. Galdin, "*Etude du transistor bipolaire à double hétérojonction Si/SiGe/Si par simulation Monte Carlo*", **Thèse de Doctorat**, Université Paris-Sud, Orsay, 1992.

[Galdin2000] S. Galdin, P. Dollfus, V. Aubry-Fortuna et al., "*Band offset predictions for strained group IV alloys: $Si_{1-x-y}Ge_xCy$ on Si (001) and $Si_{1-x}Ge_x$ on $Si_{1-z}Ge_z$ (001)*", Semiconductor Science and Technology, vol. **15**, no. 6, p.565-572, 2000.

[Gallon2004] C. Gallon, G. Reimbold, G. Ghibaudo et al., "*Electrical analysis of external mechanical stress effects in short channel MOSFETs on (001) silicon*", Solid-State Electronics, vol. **48**, no. 4, p.561-566, 2004.

[Gannavaram2000] S. Gannavaram, N. Pesovic and C. Ozturk, "*Low temperature (800°C) recessed junction selective silicon-germanium source/drain technology for sub-70 nm CMOS*", IEEE IEDM Technical Digest, 2000

[Ghani2003] T. Ghani, M. Armstrong, C. Auth et al., "*A 90nm high volume manufacturing logic technology featuring novel 45nm gate length strained silicon CMOS transistors*", IEEE IEDM Technical Digest, 2003

[Ghetti2007] A. Ghetti, G. Carnevale and D. Rideau, "*Coupled Mechanical and 3-D Monte Carlo Simulation of Silicon Nanowire MOSFETs*", IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. **6**, no. 6, p.659-666, 2007.

[Ghibaudo1988] G. Ghibaudo, "*New method for the extraction of MOSFET parameters*", Electronics Letters, vol. **24**, no. 9, p.543-545, 1988.

[Ghyselen2004] B. Ghyselen, J. M. Hartmann, T. Ernst et al., "*Engineering strained silicon on insulator wafers with the Smart Cut^{TM} technology*", Solid-State Electronics, vol. **48**, no. 8, p.1285-1296, 2004.

[Godfrey1996] M. J. Godfrey and A. M. Malik, "*Boundary conditions and spurious solutions in envelope-function theory*", Physical Review B, vol. **53**, no. 24, p.16504, 1996.

[Grudowski2006] P. Grudowski, V. Adams, X. Z. Bo et al., "*1-D and 2-D Geometry Effects in Uniaxially-Strained Dual Etch Stop Layer Stressor Integrations*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Guillaume2005] T. Guillaume, "*Influence des contraintes mécaniques non-intentionnelles sur les performances des transistors MOS à canaux ultra-courts*", **Thèse de Doctorat**, INPG, Grenoble, 2005.

[Guillaume2006] T. Guillaume and M. Mouis, "*Calculations of hole mass in [110]-uniaxially strained silicon for the stress-engineering of p-MOS transistors*", Solid-State Electronics, vol. **50**, no. 4, p.701-708, 2006.

[Haensch2006] W. Haensch, E. J. Nowak, R. H. Dennard et al., "*Silicon CMOS devices beyond scaling*", IBM Journal of Research and Development, vol. **50**, no. 4-5, p.339-361, 2006.

[Hamer1986] M. F. Hamer, "*First-order parameter extraction on enhancement silicon MOS transistors*", IEE Proceedings. Part I. Solid-state and electron devices, vol. **133**, no. 2, p.49-54, 1986.

[Harrison2003] S. Harrison, P. Coronel, F. Leverd et al., "*Highly performant double gate MOSFET realized with SON process*", IEEE IEDM Technical Digest, 2003

[Hedin1965] L. Hedin, "*New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem*", Physical Review, vol. **139**, no. 3A, p.A796, 1965.

[Hinckley1990] J. M. Hinckley and J. Singh, "*Influence of substrate composition and crystallographic orientation on the band structure of pseudomorphic Si-Ge alloy films*", Physical Review B, vol. **42**, no. 6, p.3546, 1990.

[Hjelm2002] M. Hjelm and H. E. Nilsson, "*Methods for anisotropic selection of final states in the full band ensemble Monte Carlo simulation framework*", Simulation Practice and Theory, vol. **9**, no. 6-8, p.321-332, 2002.

[Hou2001] Y.-T. Hou and M.-F. Li, "*A simple and efficient model for quantization effects of hole inversion layers in MOS devices*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **48**, no. 12, p.2893-2898, 2001.

[Houlet1999] P. Houlet, Y. Awano and N. Yokoyama, "*Influence of non-linear effects on very short pMOSFET device performances*", Physica B: Condensed Matter, vol. **272**, no. 1-4, p.572-574, 1999.

[Hudait2007] M. K. Hudait, G. Dewey, S. Datta et al., "*Heterogeneous Integration of Enhancement Mode In0.7Ga0.3As Quantum Well Transistor on Silicon Substrate using Thin (< 2 µm) Composite Buffer Architecture for High-Speed and Low-voltage (0.5V) Logic Applications*", IEEE IEDM Technical Digest, 2007

[Huet2007] K. Huet, J. Saint-Martin, A. Bournel et al., "*Monte Carlo Study of Apparent Mobility Reduction in Nano-MOSFETs*", Proc. ESSDERC, Munich, 2007

[Huet2008a] K. Huet, M. Feraille, D. Rideau et al., "*Experimental and Theoretical Analysis of Hole Transport in Uniaxially Strained pMOSFETs*", Proc. ESSDERC, Edinburg, UK, 2008a

[Huet2008b] K. Huet, C. Chassat, D. P. Nguyen et al., "*Full band Monte Carlo study of ballistic effects in nanometer-scaled strained P channel Double Gate MOSFETs*", Physica Status Solidi (c), vol. **5**, no. 1, p.43-46, 2008b.

[Huet2008c] K. Huet, D. Querlioz, W. Chaisantikulwat et al., "*Monte Carlo study of apparent magnetoresistance mobility in nanometer scale metal oxide semiconductor field effect transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **104**, no. 4, p.044504-7, 2008c.

[Irie2004] H. Irie, K. Kita, K. Kyuno et al., "*In-plane mobility anisotropy and universality under uni-axial strains in nand p-MOS inversion layers on (100), [110], and (111) Si*", IEEE IEDM Technical Digest, 2004

[Ito2000] S. Ito, H. Namba, K. Yamaguchi et al., "*Mechanical stress effect of etch-stop nitride and its impact on deep submicron transistor design*", IEEE IEDM Technical Digest, 2000

[ITRS2007] (2007, "*International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS)*." http://public.itrs.net/.

[Jacoboni1983] C. Jacoboni and L. Reggiani, "*The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*", Reviews of Modern Physics, vol. **55**, no. 3, p.645, 1983.

[Jacoboni1989] C. Jacoboni and P. Lugli, "*The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*", Springer-Verlag New York, 1989.

[Jaud2006a] M.-A. Jaud, "*Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs*", **Thèse de Doctorat**, Université Paris Sud, 2006a.

[Jaud2006b] M.-A. Jaud, S. Barraud, P. Dollfus et al., "*Quantum-corrected Monte-Carlo simulation of double-Gate nMOSFET*", Journal of Computational Electronics, vol. **5**, no. 2-3, p.171-175, 2006b.

[Jungemann1999] C. Jungemann, S. Keith, M. Bartels et al., "*Efficient full-band Monte Carlo simulation of silicon devices*", IEICE Transactions on Electronics, vol. p.870-879, 1999.

[Jungemann2003] C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "*Hierarchical device Simulation: The Monte Carlo perspective*", Springer, Wien-New York, 2003.

[Kampen2008] C. Kampen, A. Burenkov, A. Bournel et al., "*An Application Driven Improvement of the Drift Diffusion Model for Carrier Transport in Decanano-Scaled CMOS Devices*", IEEE Transactions on Electron Devices, to be published, 2008.

[Kane1957] E. O. Kane, "*Band structure of indium antimonide*", Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. **1**, p.249-261, 1957.

[Kittel1971] C. Kittel, "*Introduction to solid state physics*", New York, 1971.

[Kosina1997] H. Kosina, "*Efficient Evaluation of Ionized-Impurity Scattering in Monte Carlo Transport Calculations*", Physica Status Solidi (a), vol. **163**, no. 2, p.475-489, 1997.

[Kosina1998] H. Kosina and G. Kaiblinger-Grujin, "*Ionized-impurity scattering of majority electrons in silicon*", Solid-State Electronics, vol. **42**, no. 3, p.331-338, 1998.

[Kosina1999] H. Kosina, "*A method to reduce small-angle scattering in Monte Carlo device analysis*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **46**, no. 6, p.1196-1200, 1999.

[Landolt-Börnstein1982] N. D. Landolt-Börnstein, "*Functional Relationship in Science and Technology*", Ed. Springer, vol. **III/17a**, p.381, 1982.

[Le Royer2007] C. Le Royer, L. Clavelier, C. Tabone et al., "*0.12µm P-MOSFETs with High-K and Metal Gate Fabricated in a Si Process Line on 200mm GeOI Wafers*", Proc. ESSDERC, 2007

[LeCam2006] C. LeCam, F. Guyader, C. d. Buttet et al., "*A Low Cost Drive Current Enhancement Technique Using Shallow Trench Isolation Induced Stress for 45-nm Node*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Lee2006] H. Lee, L. E. Yu, S. W. Ryu et al., "*Sub-5nm All-Around Gate FinFET for Ultimate Scaling*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Lee2003] M. L. Lee and E. A. Fitzgerald, "*Hole mobility enhancements in nanometer-scale strained-silicon heterostructures grown on Ge-rich relaxed* $Si_{1-x}Ge_x$", Journal of Applied Physics, vol. **94**, no. 4, p.2590-2596, 2003.

[Lee2004] M. L. Lee and E. A. Fitzgerald, "*Electron mobility characteristics of n-channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors fabricated on Ge-rich single- and dual-channel SiGe heterostructures*", Journal of Applied Physics, vol. **95**, no. 3, p.1550-1555, 2004.

[Lee2005] M. L. Lee, E. A. Fitzgerald, M. T. Bulsara et al., "*Strained Si, SiGe, and Ge channels for high-mobility metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **97**, no. 1, p.011101-28, 2005.

[Lehmann1972] G. Lehmann and M. Taut, "*On the Numerical Calculation of the Density of States and Related Properties*", Physica Status Solidi (b), vol. **54**, no. 2, p.469-477, 1972.

[Leitz2001] C. W. Leitz, M. T. Currie, M. L. Lee et al., "*Hole mobility enhancements in strained* $Si/Si_{1-y}Ge_y$ *p-type metal-oxide-semiconductor field-effect transistors grown on relaxed* $Si_{1-x}Ge_x$ *(x<y) virtual substrates*", Applied Physics Letters, vol. **79**, no. 25, p.4246-4248, 2001.

[Leitz2002] C. W. Leitz, M. T. Currie, M. L. Lee et al., "*Hole mobility enhancements and alloy scattering-limited mobility in tensile strained Si/SiGe surface channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **92**, no. 7, p.3745-3751, 2002.

[Li2008] X. Li, X. Wang, L. Zhang et al., "*Chemically Derived, Ultrasmooth Graphene Nanoribbon Semiconductors*", Science, vol. **319**, no. 5867, p.1229-1232, 2008.

[Liu2006] P. Liu, J. Pan, T. Chang et al., "*Superior Current Enhancement in SiGe Channel p-MOSFETs Fabricated on [110] Surface*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Liu2007] Y. Liu, O. Gluschenkov, J. Li et al., "*Strained Si Channel MOSFETs with Embedded Silicon Carbon Formed by Solid Phase Epitaxy*", Symposium on VLSI Technology, 2007

[Lombardi1988] C. Lombardi, S. Manzini, A. Saporito et al., "*A physically based mobility model for numerical simulation of nonplanar devices*", IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, vol. **7**, no. 11, p.1164-1171, 1988.

[Lundstrom2000] M. Lundstrom, "*Fundamentals of Carrier Transport*", Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

[Lundstrom2002a] M. Lundstrom and Z. B. Ren, "*Essential physics of carrier transport in nanoscale MOSFETs*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **49**, no. 1, p.133-141, 2002a.

[Lundstrom2002b] M. Lundstrom and J. H. Rhew, "*A Landauer Approach to Nanoscale MOSFETs*", Journal of Computational Electronics, vol. **1**, no. 4, p.481-489, 2002b.

[Lusakowski2005] J. Lusakowski, W. Knap, Y. Meziani et al., "*Ballistic and pocket limitations of mobility in nanometer Si metal-oxide semiconductor field-effect transistors*", Applied Physics Letters, vol. **87**, no. 5, 2005.

[Lusakowski2007] J. Lusakowski, M. J. M. Martinez, R. Rengel et al., "*Quasiballistic transport in nanometer Si metal-oxide-semiconductor field-effect transistors: Experimental and Monte Carlo analysis*", Journal of Applied Physics, vol. **101**, no. 11, p.114511-6, 2007.

[Masetti1983] G. Masetti, M. Severi and S. Solmi, "*Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **30**, no. 7, p.764-769, 1983.

[Matsuda1993] K. Matsuda, K. Suzuki, K. Yamamura et al., "*Nonlinear piezoresistance effects in silicon*", Journal of Applied Physics, vol. **73**, no. 4, p.1838-1847, 1993.

[McLarty1995] P. K. McLarty, S. Cristoloveanu, O. Faynot et al., "*A simple parameter extraction method for ultra-thin oxide MOSFETs*", Solid-State Electronics, vol. **38**, no. 6, p.1175-1177, 1995.

[Meziani2004] Y. M. Meziani, J. Lusakowski, W. Knap et al., "*Magnetoresistance characterization of nanometer Si metal-oxide-semiconductor transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **96**, no. 10, p.5761-5765, 2004.

[Moran2007] D. A. J. Moran, R. J. W. Hill, X. Li et al., "*Sub-micron, metal gate, high-k dielectric, implant-free, enhancement-mode III-V mosfets*", Proc. ESSDERC, 2007

[nanohub.org] www.nanohub.org.

[Natori1994] K. Natori, "*Ballistic metal-oxide-semiconductor field effect transistor*", Journal of Applied Physics, vol. **76**, no. 8, p.4879-4890, 1994.

[Natori2003] K. Natori, T. Shimizu and T. Ikenobe, "*Multi-subband effects on performance limit of nanoscale MOSFETs*", Japanese Journal of Applied Physics Part 1, vol. **42**, no. 4B, p.2063-2066, 2003.

[Nayak1993] D. K. Nayak, J. C. S. Woo, J. S. Park et al., "*High-mobility p-channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistor on strained Si*", Applied Physics Letters, vol. **62**, no. 22, p.2853-2855, 1993.

[Nilsson1999] H.-E. Nilsson, M. Hjelm, C. Frojdh et al., "*Full band Monte Carlo simulation of electron transport in 6H-SiC*", Journal of Applied Physics, vol. **86**, no. 2, p.965-973, 1999.

[Ota2006] K. Ota, T. Sanuki, K. Yahashi et al., "*Scalable eSiGe S/D Technology with Less Layout Dependence for 45-nm Generation*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Ottaviani1975] G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali et al., "*Hole drift velocity in silicon*", Physical Review B, vol. **12**, no. 8, p.3318-3329, 1975.

[Palestri2005] P. Palestri, D. Esseni, S. Eminente et al., "*Understanding quasi-ballistic transport in nano-MOSFETs: Part I - Scattering in the channel, and in the drain*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **52**, no. 12, p.2727-2735, 2005.

[Payne1992] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan et al., "*Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients*", Reviews of Modern Physics, vol. **64**, no. 4, p.1045, 1992.

[Pham2007] A. T. Pham, C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "*Physics-Based Modeling of Hole Inversion-Layer Mobility in Strained-SiGe-on-Insulator*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **54**, no. 9, p.2174-2182, 2007.

[Querlioz2006a] D. Querlioz, J. Saint-Martin, V.-N. Do et al., "*Fully quantum self-consistent study of ultimate DG-MOSFETs including realistic scattering using a Wigner Monte-Carlo approach*", IEEE IEDM Technical Digest, San Francisco, 2006a

[Querlioz2006b] D. Querlioz, J. Saint-Martin, V. N. Do et al., "*A Study of Quantum Transport in End-of-Roadmap DG-MOSFETs Using a Fully Self-Consistent Wigner Monte Carlo Approach*", IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. **5**, no. 6, p.737-744, 2006b.

[Querlioz2007] D. Querlioz, J. Saint-Martin, K. Huet et al., "*On the Ability of the Particle Monte Carlo Technique to Include Quantum Effects in Nano-MOSFET Simulation*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **54**, no. 9, p.2232-2242, 2007.

[Querlioz2008] D. Querlioz, Y. Apertet, A. Valentin et al., "*Suppression of the orientation effects on bandgap in graphene nanoribbons in the presence of edge disorder*", Applied Physics Letters, vol. **92**, no. 4, p.042108-3, 2008.

[Rhew2002] J.-H. Rhew and M. S. Lundstrom, "*Drift-diffusion equation for ballistic transport in nanoscale metal-oxide-semiconductor field effect transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **92**, no. 9, p.5196-5202, 2002.

[Richard2004a] S. Richard, F. Aniel and G. Fishman, "*Energy-band structure of Ge, Si, and GaAs: A thirty-band **k.p** method*", Physical Review B, vol. **70**, no. 23, p.235204-6, 2004a.

[Richard2004b] S. Richard, "*Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques*", **Thèse de Doctorat**, Université Paris-Sud, Orsay, 2004b.

[Richard2005] S. Richard, F. Aniel and G. Fishman, "*Band diagrams of Si and Ge quantum wells via the 30-band **k.p** method*", Physical Review B, vol. **72**, no. 24, p.245316-7, 2005.

[Rideau2006] D. Rideau, M. Feraille, L. Ciampolini et al., "*Strained Si, Ge, and $Si_{1-x}Ge_x$ alloys modeled with a first-principles-optimized full-zone **k.p** method*", Physical Review B, vol. **74**, no. 19, p.195208, 2006.

[Rideau2008a] D. Rideau, M. Feraille, M. Michaillat et al., "*On the validity of the effective mass approximation and the Luttinger **k.p** model in fully depleted SOI MOSFETs*", Solid State Electronics, to be published, 2008a.

[Rideau2008b] D. Rideau, "*Rapport Interne*", STMicroelectronics, Crolles, 2008b.

[Rim2002] K. Rim, S. Narasimha, M. Longstreet et al., "*Low field mobility characteristics of sub-100 nm unstrained and strained Si MOSFETs*", IEEE IEDM Technical Digest, 2002

[Rim2003a] K. Rim, K. Chan, L. Shi et al., "*Fabrication and mobility characteristics of ultra-thin strained Si directly on insulator (SSDOI) MOSFETs*", IEDM Technical Digest, Washington, DC, 2003a

[Rim2003b] K. Rim, R. Anderson, D. Boyd et al., "*Strained Si CMOS (SS CMOS) technology: opportunities and challenges*", Solid-State Electronics, vol. **47**, no. 7, p.1133-1139, 2003b.

[Riolino2006] I. Riolino, M. Braccioli, L. Lucci et al., "*Monte-Carlo Simulation of Decananometric Double-Gate SOI devices: Multi-Subband vs. 3D-Electron Gas with Quantum Corrections*", Proc. ESSDERC, 2006

[Romanjek2004] K. Romanjek, F. Andrieu, T. Ernst et al., "*Improved split C-V method for effective mobility extraction in sub-0.1µm Si MOSFETs*", IEEE Electron Device Letters, vol. **25**, no. 8, p.583-585, 2004.

[Saint-Martin2004a] J. Saint-Martin, V. Aubry-Fortuna, A. Bournel et al., "*Influence of Ballistic Effects in Ultra-Small MOSFETs*", Journal of Computational Electronics, vol. **3**, no. 3, p.207-210, 2004a.

[Saint-Martin2004b] J. Saint-Martin, A. Bournel and P. Dollfus, "*On the ballistic transport in nanometer-scaled DG MOSFETs*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **51**, no. 7, p.1148-1155, 2004b.

[Saint-Martin2005] J. Saint-Martin, "*Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts à grille multiple sur SOI*", **Thèse de Doctorat**, Université Paris-Sud, Orsay, 2005.

[Saint-Martin2006] J. Saint-Martin, A. Bournel and P. Dollfus, "*Comparison of multiple-gate MOSFET architectures using Monte Carlo simulation*", Solid-State Electronics, vol. **50**, no. 1, p.94-101, 2006.

[Sarnet2005] T. Sarnet, G. Kerrien, N. Yaakoubi et al., "*Laser doping for microelectronics and microtechnology*", Applied Surface Science, vol. **247**, no. 1-4, p.537-544, 2005.

[Scott1999] G. Scott, J. Lutze, M. Rubin et al., "*NMOS drive current reduction caused by transistor layout and trench isolation induced stress*", IEEE IEDM Technical Digest, 1999

[Sée2003] J. Sée, "*Théorie du blocage de Coulomb appliquée aux nanostructures semi conductrices : modélisation des dispositifs à nanocristaux de silicium*", **Thèse de Doctorat**, Univ. Paris Sud, Orsay, 2003.

[Sheraw2005] C. D. Sheraw, M. Yang, D. M. Fried et al., "*Dual stress liner enhancement in hybrid orientation technology*", Symposium on VLSI Technology 2005

[Shi2004] Z. Shi, D. Onsongo, R. Rai et al., "*Hole mobility enhancement and Si cap optimization in nanoscale strained Si1-xGex PMOSFETs*", Solid-State Electronics, vol. **48**, no. 12, p.2299-2306, 2004.

[Shifren2003] L. Shifren, C. Ringhofer and D. K. Ferry, "*A Wigner function-based quantum ensemble Monte Carlo study of a resonant tunneling*

diode", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **50**, no. 3, p.769-773, 2003.

[Shimizu2001] A. Shimizu, K. Hachimine, N. Ohki et al., "*Local mechanical-stress control (LMC): a new technique for CMOS-performance enhancement*", IEEE IEDM Technical Digest, 2001

[Shur2002] M. S. Shur, "*Low ballistic mobility in submicron HEMTs*", IEEE Electron Device Letters, vol. **23**, no. 9, p.511-513, 2002.

[Smith1954] C. S. Smith, "*Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon*", Physical Review, vol. **94**, no. 1, p.42, 1954.

[Smith2005] L. Smith, V. Moroz, G. Eneman et al., "*Exploring the limits of stress-enhanced hole mobility*", IEEE Electron Device Letters, vol. **26**, no. 9, p.652-654, 2005.

[Steegen1999] A. Steegen, M. Stucchi, A. Lauwers et al., "*Silicide induced pattern density and orientation dependent transconductance in MOS transistors*", IEEE IEDM Technical Digest, 1999

[Sugii1999] N. Sugii, K. Nakagawa, S. Yamaguchi et al., "*Role of $Si_{1-x}Ge_x$ buffer layer on mobility enhancement in a strained-Si n-channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistor*", Applied Physics Letters, vol. **75**, no. 19, p.2948-2950, 1999.

[Sugii2002] N. Sugii, D. Hisamoto, K. Washio et al., "*Performance enhancement of strained-Si MOSFETs fabricated on a chemical-mechanical-polished SiGe substrate*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **49**, no. 12, p.2237-2243, 2002.

[Sun2007a] G. Sun, Y. Sun, T. Nishida et al., "*Hole mobility in silicon inversion layers: Stress and surface orientation*", Journal of Applied Physics, vol. **102**, no. 8, p.084501-7, 2007a.

[Sun2007b] Y. Sun, S. E. Thompson and T. Nishida, "*Physics of strain effects in semiconductors and metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **101**, no. 10, p.104503-22, 2007b.

[Suthram2007] S. Suthram, J. C. Ziegert, T. Nishida et al., "*Piezoresistance Coefficients of (100) Silicon nMOSFETs Measured at Low and High (~1.5 GPa) Channel Stress*", IEEE Electron Device Letters, vol. **28**, no. 1, p.58-61, 2007.

[Suthram2008] S. Suthram, M. M. Hussain, H. R. Harris et al., "*Comparison of Uniaxial Wafer Bending and Contact-Etch-Stop-Liner Stress Induced Performance Enhancement on Double-Gate FinFETs*", IEEE Electron Device Letters, vol. **29**, no. 5, p.480-482, 2008.

[Svizhenko2003] A. Svizhenko and M. P. Anantram, "*Role of scattering in nanotransistors*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **50**, no. 6, p.1459-1466, 2003.

[Takagi1994a] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase et al., "*On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET's: Part I-effects of substrate impurity concentration*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **41**, no. 12, p.2357-2362, 1994a.

[Takagi1994b] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase et al., "*On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET's: Part II-effects of surface orientation*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **41**, no. 12, p.2363-2368, 1994b.

[Takagi2003] S. Takagi, T. Mizuno, T. Tezuka et al., "*Channel structure design, fabrication and carrier transport properties of strained-Si/SiGe-on-insulator (strained-SOI) MOSFETs*", IEEE IEDM Technical Digest, 2003

[Takimoto1959] N. Takimoto, "*On the Screening of Impurity Potential by Conduction Electrons*", Journal of the Physical Society of Japan, vol. **14**, no. 9, p.1142-1158, 1959.

[Tanabe2007] R. Tanabe, T. Yamasaki, Y. Ashizawa et al., "*Analysis of nano-scale MOSFET including uniaxial and biaxial strain*", Journal of Computational Electronics, vol. **6**, no. 1, p.49-53, 2007.

[Taur1992] Y. Taur, D. S. Zicherman, D. R. Lombardi et al., "*A new `shift and ratio' method for MOSFET channel-length extraction*", IEEE Electron Device Letters, vol. **13**, no. 5, p.267-269, 1992.

[Tezuka2006] T. Tezuka, T. Irisawa, T. Numata et al., "*Relationship Between Hole Mobility and Current Drive Enhancement in Uniaxially Strained Thin-Body SiGe-on-Insulator pMOSFETs*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Thean2006] A. Thean, D. Zhang, V. Vartanian et al., "*Strain-Enhanced CMOS Through Novel Process-Substrate Stress Hybridization of Super-Critically Thick Strained Silicon Directly on Insulator (SC-SSOI)*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Thevenod2005] L. Thevenod, M. Casse, M. Mouis et al., "*Influence of TiN metal gate on Si/SiO2 surface roughness in N and PMOSFETs*", Microelectronic Engineering, vol. **80**, p.11-14, 2005.

[Thompson2004] S. E. Thompson, M. Armstrong, C. Auth et al., "*A 90-nm logic technology featuring strained-silicon*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **51**, no. 11, p.1790-1797, 2004.

[Thompson2006a] S. E. Thompson, S. Suthram, Y. Sun et al., "*Future of Strained Si/Semiconductors in Nanoscale MOSFETs*", IEEE IEDM Technical Digest, 2006a

[Thompson2006b] S. E. Thompson, S. Guangyu, C. Youn Sung et al., "*Uniaxial-process-induced strained-Si: extending the CMOS roadmap*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **53**, no. 5, p.1010-1020, 2006b.

[Ungersboeck2007] E. Ungersboeck, S. Dhar, G. Karlowatz et al., "*The Effect of General Strain on the Band Structure and Electron Mobility of Silicon*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **54**, no. 9, p.2183-2190, 2007.

[Vasileska2006] D. Vasileska, S. S. Ahmed, M. Mannino et al., "*Schred*", 2006

[Venturini2004] J. Venturini, M. Hernandez, K. Huet et al., "*Integration of a long pulse laser thermal process for ultra shallow junction formation of CMOS devices*", 12th IEEE International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors (RTP), 2004

[Venugopal2002] R. Venugopal, Z. Ren, S. Datta et al., "*Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches*", Journal of Applied Physics, vol. **92**, no. 7, p.3730-3739, 2002.

[Venugopal2003] R. Venugopal, M. Paulsson, S. Goasguen et al., "*A simple quantum mechanical treatment of scattering in nanoscale transistors*", Journal of Applied Physics, vol. **93**, no. 9, p.5613-5625, 2003.

[Walter1970] J. P. Walter and M. L. Cohen, "*Wave-Vector-Dependent Dielectric Function for Si, Ge, GaAs, and ZnSe*", Physical Review B, vol. **2**, no. 6, p.1821, 1970.

[Wang2006] E. X. Wang, P. Matagne, L. Shifren et al., "*Physics of Hole Transport in Strained Silicon MOSFET Inversion Layers*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **53**, no. 8, p.1840-1851, 2006.

[Wang2007] J. Wang, Y. Tateshita, S. Yamakawa et al., "*Novel Channel-Stress Enhancement Technology with eSiGe S/D and Recessed Channel on Damascene Gate Process*", Symposium on VLSI Technology, 2007

[Welser1992] J. Welser, J. L. Hoyt and J. F. Gibbons, "*NMOS and PMOS transistors fabricated in strained silicon/relaxed silicon-germanium structures*", IEEE IEDM Technical Digest, 1992

[Welser1994] J. Welser, J. L. Hoyt, S. Takagi et al., "*Strain dependence of the performance enhancement in strained-Si n-MOSFETs*", IEEE IEDM Technical Digest, 1994

[Widiez2006] J. Widiez, T. Poiroux, M. Vinet et al., "*Experimental Comparison Between Sub-0.1-µm Ultrathin SOI Single- and Double-Gate MOSFETs: Performance and Mobility*", IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. **5**, no. 6, p.643-648, 2006.

[Wigner1932] E. Wigner, "*On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium*", Physical Review, vol. **40**, p.749-759, 1932.

[Winstead2003] B. Winstead and U. Ravaioli, "*A quantum correction based on Schrodinger equation applied to Monte Carlo device simulation*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **50**, no. 2, p.440-6, 2003.

[Yang2007] B. F. Yang, K. Nummy, A. Waite et al., "*Stress dependence and poly-pitch scaling characteristics of (110) PMOS drive current*", Symposium onVLSI Technology, 2007

[Yang2004] H. S. Yang, R. Malik, S. Narasimha et al., "*Dual stress liner for high performance sub-45nm gate length SOI CMOS manufacturing*", IEEE IEDM Technical Digest, 2004

[Yang2006] M. Yang, V. W. C. Chan, K. K. Chan et al., "*Hybrid-orientation technology (HOT): opportunities and challenges*", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. **53**, no. 5, p.965-978, 2006.

[Yasutake2007] N. Yasutake, A. Azuma, T. Ishida et al., "*Record-high performance 32 nm node pMOSFET with advanced Two-step recessed SiGe-S/D and stress liner technology*", Symposium on VLSI Technology, 2007

[Yeo2000] Y.-C. Yeo, Q. Lu, T.-J. King et al., "*Enhanced performance in sub-100 nm CMOSFETs using strained epitaxial silicon-germanium*", IEEE IEDM Technical Digest, 2000

[Yin2006] H. Yin, Z. Ren, H. Chen et al., "*Integration of Local Stress Techniques with Strained-Si Directly on Insulator (SSDOI) Substrates*", Symposium on VLSI Technology, 2006

[Yu1996] P. Y. Yu and M. Cardona, "*Fundamentals of semiconductors*", Springer-Verlag, Berlin, 1996.

[Zilli2007] M. Zilli, D. Esseni, P. Palestri et al., "*On the Apparent Mobility in Nanometric n-MOSFETs*", IEEE Electron Device Letters, vol. **28**, no. 11, p.1036-1039, 2007.