# Traitement et influence de défauts ponctuels dans les nano-transistors

La diminution de la taille des MOSFETs vers les limites physiques et technologiques pose le choix des structures des prochaines générations CMOS en des termes nouveaux. Parmi les difficultés envisagées, les fluctuations aléatoires du nombre et de la position des impuretés dopantes des composants peuvent détériorer la fiabilité des transistors (variation de la tension de seuil et du courant  $I_{off}$ ) et les rendre impropres aux opérations CMOS [205,206]. En effet, lorsque les MOSFETs atteignent l'échelle nanométrique, la variation des paramètres du transistor dûe au faible nombre de dopants et à leur position dans le canal devient préocupante. Du fait de la réduction de la tension d'alimentation des transistors ultimes, les nouveaux circuits intégrés sont de surcroît plus sensibles aux fluctuations des caractéristiques des MOSFETs et les positions aléatoires des dopants se répercutent désormais sur les performances et la fonctionnalité des circuits analogiques et numériques.

Dans ce chapitre, nous utilisons une description quantique basée sur le formalisme des fonctions de GREEN hors-équilibre pour étudier l'influence de défauts ponctuels sur les paramètres électriques de structures MOSFETs émergentes. La première section présente la solution analytique d'un défaut ponctuel représenté par un potentiel intra-atomique, introduit dans une chaîne linéaire à l'équilibre. La section (6.2) applique cette approche au MOSFET double-grille dont le canal, ultimement confiné, est réduit à une chaîne atomique (cf chapitre 4). Cependant, l'influence du potentiel coulombien associé à l'écrantage par les charges du canal de l'impureté ionisée est négligé. La section (6.3) étend donc le modèle à une description quantique plus réaliste, capable de simuler un défaut dans des dispositifs émergents 3D décrits au chapitre 5 à l'aide de l'approximation "mode-space". La section (6.4) étudie l'évolution des paramètres physiques qui accompagne la présence d'un défaut et discute l'influence de la position et du type de ce dernier sur les caractéristiques électriques. La dernière section établit les conclusions et perspectives.

# 6.1 Défauts ponctuels dans une chaîne à l'équilibre

A l'échelle nanométrique, les propriétés électroniques des semiconducteurs sont particulièrement sensibles à la présence d'un défaut ponctuel. Il est reconnu que les défauts ponctuels brisent la périodicité du réseau et introduisent des états localisés dans le gap du matériau. Un état localisé peut être de deux types :

 $\cdot$  peu profond (*shallow*) dont l'orbitale est délocalisée sur une vingtaine de distances inter-atomiques,

 $\cdot$  profond (*deep*) qui correspond à une orbitale très localisée, incluant principalement les premiers et seconds voisins du défaut.

Le formalisme des fonctions de GREEN permet un traitement de ces défauts assez efficace. Nous considérons dans cette section un défaut neutre pour lequel le potentiel perturbateur est situé dans son voisinage et négligeons l'effet d'une éventuelle queue coulombienne. La longueur d'écrantage dans les semiconducteurs usuels étant de l'ordre de la distance inter-atomique, la description en liaisons fortes d'une impureté substitutionnelle neutre peut se réduire, en première approximation, à un potentiel perturbateur  $U_d$  sur le site du défaut. Soit un cristal parfait d'hamiltonien H et d'opérateur de GREEN G. L'introduction d'une impureté peut se représenter par une perturbation U (matrice associée au potentiel intra-atomique  $U_d$ ) qui conduit à un nouvel hamiltonien H' = H + U et un nouvel opérateur de GREEN G'. L'équation de SCHRÖDINGER du système perturbé est :

$$(\varepsilon - H) \left| \Psi' \right\rangle = U \left| \Psi' \right\rangle. \tag{6.1}$$

La solution  $|\Psi'\rangle$  de ce système différentiel est la somme d'une solution générale  $|\Psi\rangle$  de l'équation sans second membre, c'est-à-dire :

$$(\varepsilon - H) |\Psi\rangle = 0, \tag{6.2}$$

et d'une solution particulière qui peut s'écrire  $GU |\Psi'\rangle$ . Nous obtenons :

$$\left|\Psi'\right\rangle = \left|\Psi\right\rangle + GU\left|\Psi'\right\rangle. \tag{6.3}$$

L'équation (6.3) est valable pour les énergies  $\varepsilon$  appartenant à la bande d'énergie autorisée dans le système parfait. Dans le cas contraire, c'est-à-dire si  $\varepsilon$  appartient à un intervalle d'énergie interdit, nous avons :

$$\left|\Psi'\right\rangle = GU\left|\Psi'\right\rangle.\tag{6.4}$$

Les solutions de cette équation définissent les états localisés et diffèrent de la solution triviale nulle si et seulement si [193] :

$$\det(I - GU) = 0, (6.5)$$

où I est la matrice identité. L'équation (6.5) traduit tout l'intérêt des fonctions de GREEN : l'ensemble des caractéristiques du système (position des niveaux d'énergie, extension de la fonction d'onde correspondante ainsi que la modification de la densité d'états) est lié à la seule connaissance de la fonction de GREEN du système non perturbé et à la forme du potentiel perturbateur. Par exemple, la densité d'états locale à l'équilibre d'un atome i s'exprime sous la forme<sup>1</sup> :

$$N_{ii}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left( G_{ii}(\varepsilon) \right).$$
(6.6)

Nous considérons tout d'abord une chaîne atomique infinie à l'équilibre présentant les mêmes constantes de couplage  $\beta$  et distance inter-atomique *a* qu'au chapitre 4<sup>2</sup>. Chaque atome possède une orbitale et seules les interactions entre premiers voisins sont envisagées. Nous calculons ensuite la fonction de GREEN de l'atome origine 0 de la chaîne infinie (figure (6.1)a). D'après les équations (4.34) et (4.35), la fonction de GREEN de l'extrémité d'une chaîne semi-infinie à l'équilibre s'écrit :

$$G_{00}^{0}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2\beta^{2}} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{4\beta^{2}}{\varepsilon^{2}}} \right) \quad \text{si } |\varepsilon| > 2 |\beta|, \qquad (6.7)$$

$$G_{00}^{0}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2\beta^{2}} - \frac{i}{|\beta|} \sqrt{1 - \left|\frac{\varepsilon}{2\beta}\right|^{2}} \quad \text{si } |\varepsilon| < 2|\beta|, \qquad (6.8)$$

La fonction de GREEN de la chaîne infinie se construit alors à partir de deux chaînes semi-infinies dont nous couplons les orbitales pendantes par un potentiel perturbateur  $\beta$ . Nous appliquons l'équation de DYSON en définissant  $G^0$  la fonction de GREEN de deux chaînes semi-infinies isolées et G la fonction de GREEN d'une chaîne infinie :

$$G_{00} = G_{00}^0 + G_{00}^0 \beta G_{10}, \tag{6.9}$$

 $\operatorname{et}$ 

$$G_{10} = G_{11}^0 \beta G_{00}. \tag{6.10}$$

Mais  $G_{00}^0 = G_{11}^0$ , et en injectant (6.10) dans (6.9), il résulte :

$$G_{00} = \frac{G_{00}^0}{1 - G_{00}^0 \beta^2 G_{00}^0}.$$
(6.11)

Nous substituons ensuite  $G_{00}^0$  par les expressions (6.7) et (6.8), la fonction de GREEN de l'atome 0 de la chaîne infinie est :

$$G_{00}(\varepsilon) = -\frac{i}{\sqrt{4\beta^2 - \varepsilon^2}}, \qquad \text{si } |\varepsilon| \le 2 |\beta|, \qquad (6.12)$$

$$G_{00}(\varepsilon) = \pm \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - 4\beta^2}}, \qquad \text{si } |\varepsilon| \ge 2 |\beta|, \qquad (6.13)$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Voir appendice sur les fonctions de GREEN.

 $<sup>{}^{2}\</sup>beta = -1.25 \,\mathrm{eV} \,\mathrm{et} \,a = 4 \,\mathrm{\AA}.$ 



FIG. 6.1: a) Chaîne linéaire atomique infinie dont les atomes sont numérotés de  $-\infty$  à  $+\infty$ . b) La perturbation induite par un défaut ponctuel se traduit par un potentiel intra-atomique  $U_d$  localisé sur le site du défaut.  $\beta$  représente l'énergie de couplage.

le signe de l'équation (6.13) étant déterminé par celui de  $\varepsilon$ . Utilisant l'équation (6.6), la densité d'états locale associée est :

$$N_{00}\left(\varepsilon\right) = \frac{1}{\pi} \times \frac{1}{\sqrt{4\beta^2 - \varepsilon^2}}.$$
(6.14)

Nous obtenons la densité d'états usuelle 1D divergente en  $1/\sqrt{X}$  en bord de bande.

La perturbation induite par un défaut ponctuel neutre (=non ionisé) peut se décrire en ajoutant un terme d'énergie potentielle  $U_d$  sur le site du défaut. Les autres interactions, y compris celles du défaut, restent inchangées. La matrice du potentiel perturbateur est donc diagonale, carrée et de rang égal au nombre d'orbitales considérées pour décrire l'impureté (1 dans notre cas). Notant  $G_{d_{00}}$  la fonction de GREEN du défaut introduit sur le site 0 (figure (6.1)b), l'équation de DYSON s'écrit :

$$G_{d_{00}} = (1 - G_{00}U_d)^{-1} G_{00}. ag{6.15}$$

Si  $|\varepsilon| \leq 2 |\beta|$ , la fonction de GREEN du système perturbé devient, ((6.12)) dans (6.15) :

$$G_{d_{00}}\left(\varepsilon\right) = -\frac{i\sqrt{4\beta^2 - \varepsilon^2} - U_d}{4\beta^2 - \varepsilon^2 + U_d^2},\tag{6.16}$$

à partir de laquelle est déduite la densité d'états locale du défaut :

$$N_{00}\left(\varepsilon\right) = \frac{1}{\pi} \times \frac{\sqrt{4\beta^2 - \varepsilon^2}}{4\beta^2 - \varepsilon^2 + U_d^2}.$$
(6.17)

En présence d'un défaut ponctuel, la densité d'états locale dans la bande d'énergie diminue avec l'augmentation de la perturbation  $|U_d|$ . L'introduction de défauts atténue l'allure caractéristique de la densité d'états 1D, dans laquelle la divergence des bords de bandes disparaît ( $|\varepsilon| = 2 |\beta|$ ). Nous rappelons que la relation de dispersion d'une chaîne linéaire caractérisée par une énergie



FIG. 6.2: Densité d'états localisée  $N_{00}(\varepsilon)$  de l'impureté en fonction du potentiel attractif  $U_d$ . On observe la disparition progressive de la densité d'états 1D et la création du niveau localisé sous la bande d'énergie (indiqué par les flèches).

de couplage  $\beta$  et une distance inter-atomique a est donnée par l'expression :

$$\varepsilon = 2\beta \cos ka,\tag{6.18}$$

où k est le vecteur d'onde.

Pour  $|\varepsilon| > 2 |\beta|$ , le calcul de l'énergie de l'état localisé s'obtient en résolvant l'équation (6.5), et conduit à deux valeurs possibles en-dehors de la bande d'énergie :

$$\det (I - GU) = 0 \to 1 - G_{00}U_d = 0 \to G_{00} = \frac{1}{U_d},$$
(6.19)

d'où

$$\pm \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_d^2 - 4\beta^2}} = \frac{1}{U_d},\tag{6.20}$$

et finalement,

$$\varepsilon_d = \pm \sqrt{U_d^2 + 4\beta^2}.$$
(6.21)

Si  $U_d < 0$ , les propriétés de la fonction de GREEN [190] excluent la solution positive. La valeur négative de  $U_d$  correspond à un potentiel attractif qui crée un état localisé, donneur d'électrons, en-dessous la bande d'énergie. La profondeur de l'état localisée augmente avec  $|U_d|$ . La figure (6.2) montre l'évolution de la densité d'états locale en fonction de la perturbaton  $U_d$ . Elle illustre d'une part la création de l'état localisé dont la profondeur augmente avec  $|U_d|$  et d'autre part la diminution associée de  $N_{00}(\varepsilon)$  afin d'assurer la normalisation. De plus, l'augmentation du pic de l'état localisé avec  $|U_d|$  reflète une localisation croissante de l'électron sur le niveau de l'impureté. Nous pouvons également évaluer l'extension de l'état localisé en appliquant l'équation maîtresse de la méthode des variations (cf § (4.1.2)). Dans une base d'orbitales atomiques  $\{|n\rangle\}_{n\in\mathbb{Z}}$ , l'état lié  $|\Psi_d\rangle$  peut s'écrire :

$$|\Psi_d\rangle = \sum_n a_n |n\rangle , \qquad (6.22)$$

où les  $|a_n|^2$  définissent le poids de l'état  $|\Psi_d\rangle$  sur l'orbitale atomique  $|n\rangle$ .

· L'équation  $\langle n | H - \varepsilon | \Psi_d \rangle = 0$  (méthode des variations) se traduit sur le défaut (en 0) par :

$$(\varepsilon - U_d) a_0 = \beta \left( a_{-1} + a_1 \right). \tag{6.23}$$

· Loin du défaut (sur  $i^{ieme}$  atome), nous obtenons :

$$\varepsilon a_i = \beta \left( a_{i-1} + a_{i+1} \right). \tag{6.24}$$

Un tel système admet des solutions en  $(a_l)_{l \in \mathbb{Z}}$  de la forme :

$$a_l = a_0 K^{|l|}. (6.25)$$

Il en résulte deux équations :

$$(\varepsilon - U_d) = 2\beta K \quad (\text{sur le défaut})$$

$$\varepsilon = \beta \left( K + \frac{1}{K} \right) \quad (\text{loin du défaut})$$
(6.26)

La résolution du système (6.26) fournit les solutions suivantes :

$$K = -\frac{U_d}{2\beta} \pm \sqrt{\left(\frac{U_d}{2\beta}\right)^2 + 1},\tag{6.27}$$

où le choix du signe est déterminé par l'opposé de celui de  $U_d$  afin de conserver le bon niveau localisé  $\varepsilon_d$  en injectant K dans l'équation (6.26). La figure (6.3) montre les probabilités de présence  $(|\langle n | \Psi_d \rangle|^2)$  calculées à partir de l'équation (6.27) pour différentes valeurs de potentiels  $U_d$ . Notons qu'un comportement symétrique se produit pour une valeur positive de  $U_d$ . Dans ce cas, l'état localisé a une énergie donnée par la solution positive de l'équation (6.21) et correspond à un niveau accepteur d'électrons.

L'influence d'un défaut ponctuel est également visible sur le coefficient de transmission. La figure (6.4) montre l'effet d'un défaut donneur ( $U_d < 0$ ) sur la transparence calculée à l'aide du formalisme des fonctions de GREEN présenté au paragraphe (4.2). On constate une diminution de la transmission pour des défaut profonds, dûe à la réduction de  $N_{00}(\varepsilon)$ . Des potentiels très attractifs ( $U_d = -20 \text{ eV}$ ) conduisent au cas limite de la liaison brisée de la lacune, pour laquelle la transmission s'annule. La limite  $U_d = -\infty$  décale le niveau localisé vers les énergies infiniment négatives, et l'impureté n'interagit plus avec les états du reste du système.

Cette approche simple permet néanmoins de simuler une gamme variée de défauts, depuis l'impureté peu profonde jusqu'à la lacune. Nous avons étudié l'influence du défaut ponctuel



FIG. 6.3: Extension des états localisés en fonction du potentiel perturbateur du défaut  $U_d$ .



FIG. 6.4: Coefficients de transmission à travers une chaîne infinie à l'équilibre pour différentes valeurs du potentiel attractif  $U_d$ . L'état localisé induit une diminution de la transparence qui converge, pour de fortes valeurs de  $|U_d|$ , vers la limite du cas lacunaire.

sur la densité d'états locale et le coefficient de transmission. Dans la prochaine section, nous utilisons ce modèle pour traiter l'influence des défauts ponctuels sur le courant d'un MOSFET double-grille ultimement confiné.

## 6.2 Influence du défaut dans un MOSFET double-grille

Nous considérons le modèle du MOSFET double-grille décrit au chapitre 4 dans lequel une impureté est introduite dans le canal. L'impureté est toujours modélisée par un potentiel perturbateur intra-atomique  $U_d$  placé sur le site du défaut. Dans le cadre du système polarisé, le potentiel total est la superposition du potentiel auto-cohérent du système sans défaut et du potentiel local  $U_d$  caractérisant le défaut. Cette approche semble raisonnable puisque le premier est macroscopique alors que le second est purement local, les deux étant usuellement séparables. Dans toute cette section la longueur de grille  $L_G$  sera constante, égale à 10 nm.

Afin de mieux comprendre les effets engendrés par un défaut ponctuel, nous comparons les caractéristiques électriques avec et sans défaut. Il faut tout d'abord distinguer le potentiel répulsif  $(U_d > 0)$  du potentiel attractif  $(U_d < 0)$  qui créent respectivement un niveau accepteur et donneur d'électrons. La figure (6.5) montre l'influence de la position du défaut ponctuel le long du canal sur les caractéristiques du courant de drain  $(I_D)$  en fonction de la tension de grille  $(V_G)$ . Un défaut accepteur est dans un premier temps introduit dans le canal à deux nanomètres de la source, puis à deux nanomètres du drain. Deux amplitudes de potentiel de site sont étudiées :  $U_d = 1 \text{ eV}$  et  $U_d = 3 \text{ eV}$ . La comparaison avec le régime du réseau parfait montre que le courant sous le seuil en présence d'une impureté, quelle que soit sa position dans le canal et son potentiel intra-atomique, est toujours plus faible. Les pentes sous le seuil restent inchangées, mais les courants associés aux défauts sont décalés vers le bas.

Comme discuté dans la section précédente, l'impureté induit une diminution de la densité d'états, compensée par la création d'un état localisé au-dessus du continuum d'énergie. Il en résulte une augmentation de la composante tunnel du courant total qui réduit le coefficient de transmission. Le figure (6.5) montre également qu'un défaut donneur introduit près de la source dégrade plus fortement le courant que le même défaut positionné près du drain. L'impureté près de la source produit une importante réflexion des électrons qui peuvent facilement ré-intégrer le contact en réduisant le courant total. Lorsqu'une impureté identique est introduite dans la seconde partie du composant, les électrons se réfléchissent toujours, mais la barrière de potentiel du canal ainsi que la polarisation du drain s'opposent à leur retour vers la source : le courant est moins dégradé. Cette analyse est confirmée par la figure (6.6), dans laquelle les coefficients de transmission sont représentés dans l'état off ( $V_G = 0V$ ) pour les cinq cas précédemment décrits. La transparence du système sans défaut est toujours plus importante que celles associées à un défaut accepteur. Pour un potentiel  $U_d$  donné, les transparences sont assez similaires en bas de bande d'énergie du canal côté source (-2.5 eV  $\leq \varepsilon \leq -2.3$  eV). En revanche, le coefficient de transmission correspondant à un défaut introduit près du drain augmente plus rapidement



FIG. 6.5: Caractéristiques  $I_D - V_G$  d'un système sans défaut (ligne continue), et dans le modèle de l'impureté accepteuse ( $U_d > 0$ ). L'influence de la position de l'impureté le long du canal est étudiée : le défaut est d'abord introduit à deux nanomètres de la source ( $U_d = 1 \text{ eV}$  en ligne discontinue,  $U_d = 3 \text{ eV}$  en "petits tirets"), puis à deux nanomètres du drain ( $U_d = 1 \text{ eV}$  en pointillés,  $U_d = 3 \text{ eV}$  en "pointillé-tirets").  $V_{DS} = 0.3 \text{ V}$ .

aux hautes énergies ( $\varepsilon \gtrsim -2.2 \,\mathrm{eV}$ ). Cette évolution traduit l'influence de  $V_{DS}$  sur le transport électronique près du drain, région dans laquelle la probabilité qu'un électron soit totalement réfléchi par un défaut est faible dès que l'énergie cinétique de la particule augmente. Nous étudions maintenant l'effet d'un défaut donneur d'électrons ( $U_d < 0$ ) sur les caractéristiques  $I_D - V_G$ . La figure (6.7) compare les courants de drain d'un système contenant un défaut donneur avec celui d'un réseau parfait. Deux positions d'impuretés sont toujours considérées (à deux nanomètres de la source et à deux nanomètres du drain) pour deux amplitudes de potentiel intra-atomique. La présence d'un défaut près du drain, redonne les résultats du défaut accepteur, c'est-à-dire que le courant est globalement diminué par rapport à la limite du cristal sans défaut. En revanche, la présence d'une impureté peu profonde ( $U_d = -1 \,\mathrm{eV}$ ) près de la source produit un courant sous le seuil plus important que celui donné par le composant parfait.

La figure (6.8), qui représente les coefficients de transmission dans l'état off pour plusieurs valeurs du potentiel du défaut, clarifie les résultats du courant. En bas de la bande d'énergie de la source ( $\varepsilon \simeq -2.5 \text{ eV}$ ), la présence d'une impureté peu profonde ( $|U_d| < 2 \text{ eV}$ ) s'accompagne d'une plus grande transparence que celle du composant parfait. Pour de plus grandes énergies, l'impureté introduite près de la source donne des coefficients de transmission supérieurs à ceux fournis par la même impureté située près du drain. Près de la source, le défaut donneur crée un état localisé sous la bande d'énergie qui induit un effet de tunnel assisté à travers la barrière de potentiel du canal. Les pics, visibles dans la transparence, pour des impuretés peu profondes, illustrent clairement l'effet tunnel via l'état localisé. Si le défaut est plus profond ( $U_d = -5 \text{ eV}$ ), les électrons ne peuvent plus "tunneler" à travers l'état localisé qui se comporte alors comme une perturbation diminuant la probabilité de transmission des électrons. Dans la situation opposée où un défaut donneur est introduit près du drain, la tension  $V_{DS}$  décale vers le bas le niveau de l'état localisé qui n'interagit pas avec les électrons de forte énergie ( $\varepsilon > -2.3 \text{ eV}$ ) : le coefficient de



FIG. 6.6: Coefficients de transmission à travers le canal pour un système sans défaut (ligne continu); pour un système contenant un défaut accepteur d'abord introduit à deux nanomètres de la source ( $U_d = 1 \text{ eV}$  en ligne discontinue,  $U_d = 3 \text{ eV}$  en "petits tirets"), puis à deux nanomètres du drain ( $U_d = 1 \text{ eV}$  en pointillés,  $U_d = 3 \text{ eV}$  en "pointillé-tirets".  $V_{DS} = 0.3 \text{ V}$ ,  $V_G = 0 \text{ V}$  et  $E_{\text{FS}}$  est le niveau de FERMI du contact de la source.



FIG. 6.7: Caractéristiques  $I_D - V_G$  dans un système sans défaut (ligne continue), et dans le modèle du défaut donneur ( $U_d < 0$ ). L'influence de la position de l'impureté le long du canal est étudiée : le défaut est d'abord introduit à deux nanomètres de la source ( $U_d = -1 \text{ eV}$  en ligne discontinue,  $U_d = -3 \text{ eV}$  en "petits tirets"), puis à deux nanomètres du drain ( $U_d = -1 \text{ eV}$  en pointillés,  $U_d = -3 \text{ eV}$  en "pointillé-tirets").  $V_{DS} = 0.3 \text{ V}$ .



FIG. 6.8: Coefficients de transmission à travers le canal dans le cas d'un cristal parfait, d'un défaut donneur introduit à 2 nm de la source et à 2 nm du drain (comme indiqué). Les flèches indiquent les pics de transmission associés à l'effet tunnel assisté à travers les états localisés.  $V_{DS} = 0.3 \text{ V}, V_G = 0 \text{ V}$  et  $E_{FS}$  est le niveau de FERMI du contact de source.

transmission ne présente pas de pic. Enfin la figure (6.9) montre les caractéristiques  $I_D-V_{DS}$  dans l'état passant ( $V_G = 0.4$  V) du composant sans défaut, et pour plusieurs composants contenant une impureté introduite à 2 nm de la source. En présence de défauts ponctuels, le courant simulé est toujours inférieur à celui obtenu avec un réseau parfait. Dans l'état passant, la diminution de la barrière de potentiel du canal atténue fortement la composante tunnel du courant total et l'état localisé créé par le défaut induit uniquement de la diffusion. Nous avons également représenté sur la figure (6.9) le courant fourni par le quantum de conductance  $G_0$  (cf § (3.3.1)), duquel s'éloignent les caractéristiques des composants lorsque  $U_d$  devient fortement attractif : cette évolution illustre la diminution du coefficient de transmission pour un état localisé profond. L'état localisé d'un niveau très profond ( $U_d < -5 \,\mathrm{eV}$ ) ne participe plus au transport électronique et le comportement du défaut ponctuel se rapproche progressivement de celui d'une lacune à travers laquelle aucun électron ne peut être transmis. Dans le cas d'un canal avec un seul mode de conduction, le composant agit alors comme un transistor bloqué en permanence.

#### Commentaires

Nous avons développé une approche basée sur le formalisme des fonctions de Green horséquilibre, qui simule un MOSFET double-grille à canal unique de conduction en présence de défauts ponctuels. Nous avons de façon générale obtenu une diminution du courant de drain traduisant la réflexion des électrons par le défaut. Cependant la présence d'un défaut donneur introduit près de la source peut produire un transport par effet tunnel assisté et conduire à des courants sous le seuil plus élevés que ceux obtenus avec un cristal parfait : un réseau idéal n'est pas la limite supérieure du courant dans les fils quantiques.



FIG. 6.9: Caractéristiques  $I_D - V_{DS}$  d'un composant parfait ou dans lequel une impureté est introduite à 2 nm de la source. Considérant plusieurs valeurs du potentiel attractif  $U_d$ , le courant dans l'état passant en présence d'impureté varie de 5 à 55% de la limite du cristal sans défaut.  $V_G = 0.4 \text{ V}$ 

Le présent traitement souffre néanmoins de ne pas inclure le potentiel de COULOMB associé à une impureté ionisée et écrantée par les électrons du reste du système. Les sections suivantes se proposent donc d'étendre ce modèle à des dispositifs réalistes 3D en considérant la queue coulombienne du défaut chargé comme une partie du potentiel macroscopique total.

## 6.3 Défauts ponctuels ionisés dans les MOSFETs multi-grilles

Considérons le transistor MOSFET gate-all-around (GAA) de la figure (6.10) dans lequel l'interface Si/SiO<sub>2</sub> est perpendiculaire à la direction cristalline  $\langle 100 \rangle$ . Le système, traité en liaisons fortes, est supposé en première approximation présenter une structure cubique simple (figure (6.11)) dans laquelle la distance inter-atomique *a* est identique suivant toutes les directions (a = 0.2 nm). Les réservoirs de source et drain ont une distribution de dopants simulée par un dopage continu égal à  $10^{26} \text{ m}^{-3}$ . En revanche, la concentration des impuretés dopantes du canal, considérée homogène dans les composants macroscopiques, subit désormais des fluctuations aléatoires spatiales. En effet, un canal dopé de type P avec une concentration  $10^{25} \text{ m}^{-3}$ , et dont les dimensions sont  $L_G \times T_{\text{Si}} \times W_{\text{Si}} = 10 \times 5 \times 3 \text{ nm}^3$ , contient en moyenne 1.5 impureté. Cette étude s'intéresse donc à l'influence sur les paramètres physiques et les propriétés électriques de la position et du type d'impureté du canal.



FIG. 6.11: Le silicium et son oxyde sont supposés, en première approximation, présenter une structure cubique simple dans laquelle seules les interactions entre premiers voisins sont considérées. Par volonté de clarté la structure des oxydes de grille n'est pas représentée.



FIG. 6.10: Schéma d'un transistor MOSFET Gate-All-Around (GAA) : a) vue en perspective, b) coupe transverse.

Une impureté ionisée est définie par un potentiel d'interaction coulombien à longue distance combiné à un potentiel intra-atomique que nous avons précédemment traité dans le cas d'une impureté neutre (non ionisée). La queue coulombienne, qui résulte des interactions électrostatiques du défaut avec les électrons du système, est une variation lente et macroscopique du potentiel électrostatique total. En revanche, le potentiel intra-atomique génère des variations très localisées qui modifient au voisinage du défaut les états transverses 2D associés au confinement des plans atomiques **y-z**.

L'approche "mode-space" utilisée dans le chapitre 5, et qui consiste à séparer le traitement du confinement de celui du transport, n'est donc plus valide. Les états propres transverses varient le long de l'axe du transport et les différentes sous-bandes d'énergie ne sont plus indépendantes. Une solution est cependant de dissocier les deux termes du potentiel du défaut en incluant le potentiel de COULOMB macroscopique dans l'auto-cohérence de l'approche "mode-space" et de traiter le potentiel local intra-atomique une fois l'auto-cohérence atteinte, à l'aide d'une

description 3D dans l'espace réel. Le potentiel intra-atomique n'induisant qu'une perturbation très localisée, son influence sur le courant total devrait être de faible envergure dans un système réaliste 3D et cautionne donc cette décomposition.

Nous adoptons de nouveau l'approche dans laquelle l'équation de POISSON 3D est résolue de façon auto-cohérente avec l'équation de SCHRÖDINGER 3D. L'approximation "mode-space" divise l'équation de SCHRÖDINGER 3D en une équation 2D incluant le confinement de la section transverse (plan y-z), et une équation 1D décrivant le transport balistique le long de l'axe sourcedrain à l'aide du formalisme des fonctions de GREEN hors-équilibre. La zone active (silicium et oxydes de grilles) est représentée par une version simplifiée de la théorie des liaisons fortes avec une seule orbitale par atome et en considérant seulement les interactions entre premiers voisins<sup>3</sup>.

Nous reprenons un calcul des charges en tout point similaire à celui du chapitre 5 dans lequel le potentiel macroscopique coulombien de l'impureté est incorporé. L'hamiltonien 2D  $(H_{conf})$ de chaque plan atomique *n* perpendiculaire à l'axe source-drain est tout d'abord résolu :

$$H_{conf} \left| \psi_{n,i} \right\rangle = \varepsilon_{n,i} \left| \psi_{n,i} \right\rangle, \tag{6.28}$$

avec :

$$H_{conf} = \sum_{l,m} V_{lmn,lmn}^{def} |l, m, n\rangle \langle l, m, n| + \beta_y \sum_{l,m} |l, m, n\rangle \langle l, m + 1, n| + \beta_z \sum_{l,m} |l, m, n\rangle \langle l + 1, m, n|, \qquad (6.29)$$

où  $|l, m, n\rangle$  est le ket représentant l'orbitale de l'atome de coordonnées  $z = l \times a$ ,  $y = m \times a$ du  $n^{i \grave{e} m e}$  plan vertical.  $V_{lmn,lmn}^{def}$  est l'élément de matrice du potentiel électrostatique supposé diagonal dans la base atomique. Il est la somme du potentiel  $V_{lmn,lmn}$  fourni par l'équation de POISSON, et du potentiel coulombien  $V_{lmn,lmn}^{Coul}$  défini par :

$$V_{lmn,lmn}^{Coul} = \pm \frac{1 - e^{\left(-\sqrt{(l-l')^2 + (m-m')^2 + (n-n')^2}/L_C\right)}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{\rm Si} \times \left(\sqrt{(l-l')^2 + (m-m')^2 + (n-n')^2}\right)},\tag{6.30}$$

où l', m' et n' caractérisent les coordonnées du défaut ponctuel et  $L_C$  est une longueur caractéristique, égale à  $10^{-10}$  m,permettant de lisser l'allure du potentiel coulombien au voisinage du défaut afin d'éviter qu'il ne diverge. Le signe de  $V_{lmn,lmn}^{Coul}$  détermine le type de l'impureté  $\langle <0 \rightarrow$  défaut donneur,  $>0 \rightarrow$  défaut accepteur).  $|\psi_{n,i}\rangle$  et  $\varepsilon_{n,i}$  sont respectivement les vecteurs et les valeurs propres des plans transverses. Enfin  $\beta_y$  et  $\beta_z$  sont les énergies de couplages entre premiers voisins le long des directions correspondantes. Elles sont reliées aux masses effectives

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Cette représentation est équivalente à l'approximation de la masse effective (cf  $\S$  (4.1.2)).

par les expressions suivantes (cf  $\S$  (4.1.2)) :

$$\beta_y = -\frac{\hbar^2}{2m_y^* a^2}, \text{ et } \beta_z = -\frac{\hbar^2}{2m_z^* a^2}.$$
 (6.31)

La structure cubique simple est étendue aux oxydes de grille dont la description est intégrée dans l'hamiltonien  $H_{conf}$  autorisant ainsi la pénétration des fonctions d'onde  $|\psi_{n,i}\rangle$ . Les mêmes couplages  $\beta_y$  et  $\beta_z$  sont conservés dans les oxydes puisqu'il a été vérifié que la différence de gap entre le Si et le SiO<sub>2</sub> ( $\approx 3$  eV) déterminait pour l'essentiel la pénétration de l'état transverse dans l'oxyde.

Si la perturbation engendrée par le potentiel coulombien reste macrospique et s'étend sur plusieurs plans atomiques, les électrons se répartissent en sous-bandes indépendantes et la matrice de l'hamiltonien 3D est diagonale par blocs :

$$H_{3D} = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & h_2 & 0 & \cdots & \cdots \\ \cdots & 0 & \ddots & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & 0 & h_i & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \ddots \end{bmatrix},$$
 (6.32)

оù

$$h_{i} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{1,i} & \beta_{x} & 0 & \cdots \\ \beta_{x} & \varepsilon_{2,i} & \beta_{x} & 0 \\ 0 & \beta_{x} & \ddots & \beta_{x} \\ \cdots & 0 & \beta_{x} & \varepsilon_{N_{X},i} \end{bmatrix}$$
(6.33)

est l'hamiltonien de la sous-bande i,  $N_X$  est le nombre d'atomes le long de l'axe source-drain et  $\beta_x$  est l'énergie de couplage suivant  $\mathbf{x}$  reliée à la masse effective par (cf § (4.1.2)) :

$$\beta_x = -\frac{\hbar^2}{2m_x^* a^2}.\tag{6.34}$$

Nous calculons alors la fonction de GREEN retardée de la  $i^{i \grave{e}me}$  sous-bande :

$$G_{i}(\varepsilon) = \lim_{\eta \to 0^{+}} \left[ (\varepsilon + i\eta) I - h_{i} - \Sigma^{i} \right], \qquad (6.35)$$

où  $\varepsilon$  est l'énergie et  $\Sigma^i$  est la self-énergie des contacts qui modélise l'élargissement des niveaux d'énergie du système fini lors des couplages avec les réservoirs d'électrons :

$$\Sigma^i = \Sigma^i_S + \Sigma^i_D. \tag{6.36}$$

 $\Sigma_S^i$  et  $\Sigma_D^i$  traduisent le couplage des extrémités de la sous-bande *i* de la zone active avec les réservoirs macroscopiques de la source et du drain respectivement. Leur expression est détaillée au paragraphe (5.1.2). Nous définissons ensuite deux nouvelles quantités qui représentent la force

$$\Gamma_S^i = i \left( \Sigma_S^i - \left( \Sigma_S^i \right)^\dagger \right) \text{ et } \Gamma_D^i = i \left( \Sigma_D^i - \left( \Sigma_D^i \right)^\dagger \right), \tag{6.37}$$

et qui ont la dimension d'une énergie.

Les fonctions de la densité spectrale des contacts s'expriment alors sous la forme :

$$A_S^i = G_i \Gamma_S^i G_i \text{ et } A_D^i = G_i \Gamma_D^i G_i.$$
(6.38)

Il en résulte l'expression de la matrice densité électronique le long de la sous-bande i:

$$n_{i}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi a} \times \left[ f_{S}(\varepsilon) A_{S}^{i} + f_{D}(\varepsilon) A_{D}^{i} \right].$$
(6.39)

La densité électronique totale 3D s'obtient finalement en intégrant l'équation (6.39) sur l'énergie, en sommant les contributions de chaque vallée et sous-bandes, et en les multipliant par le module au carré de l'état transverse  $|\langle l, m, n | \psi_{n,i} \rangle|^2$ :

$$n_{l,m,n}^{3D} = \sum_{l,m,n} \sum_{i} \left| \langle l,m,n \left| \psi_{n,i} \right\rangle \right|^2 \int_{0}^{+\infty} n_i\left(\varepsilon\right) d\varepsilon,$$
(6.40)

où *i* représente les premières sous-bandes de chaque vallée, c'est-à-dire celles peuplées d'électrons. La densité rétro-agit ensuite sur l'équation de POISSON 3D. Le nouveau potentiel électrostatique  $V_{lmn,lmn}$  obtenu, nous lui ajoutons le potentiel coulombien centré autour du site du défaut ponctuel  $V_{lmn,lmn}^{Coul}$  défini par (6.30). A chaque boucle de SCHRÖDINGER-POISSON, l'impact du potentiel coulombien est ainsi pris en compte. Lorsque l'auto-cohérence est atteinte, le courant du canal est calculé en clivant virtuellement le système en deux régions dans le plan du défaut ponctuel (figure (6.12) et section (3.3.3)). A ce stade nous ne calculons pas le courant de chaque sous-bande, mais utilisons une description dans l'espace réel 3D afin d'inclure par la suite le potentiel intra-atomique du défaut. Cette approche nous permet de modéliser le potentiel localisé du défaut sans appréhender un couplage entre sous-bandes puisque la validité du traitement 3D dans l'espace réel ne repose pas sur l'indépendance des sous-bandes. Le passage de l'espace des modes à l'espace réel s'effectue en calculant la fonction de GREEN de chaque surface  $S_1$  et  $S_2$ . Concrètement si  $G_i^1(\varepsilon)$  est la fonction de GREEN de la sous-bande *i* dans la région 1, la fonction de GREEN de la surface  $S_1$  s'écrit :

$$\langle l,m,n|G_{S_1}(\varepsilon)|l',m',n'\rangle = \sum_i \langle l,m,n|\psi_{n,i}\rangle \langle \psi_{n,i}|G_i^1(\varepsilon)|\psi_{n',i}\rangle \langle \psi_{n',i}|l',m',n'\rangle, \quad (6.41)$$

De même, si  $G_i^2(\varepsilon)$  est la fonction de GREEN de la sous-bande *i* dans la région 2, la fonction de GREEN de la surface S<sub>2</sub> est :

$$\langle l,m,n|G_{S_2}(\varepsilon)|l',m',n'\rangle = \sum_i \langle l,m,n|\psi_{n,i}\rangle \langle \psi_{n,i}|G_i^2(\varepsilon)|\psi_{n',i}\rangle \langle \psi_{n',i}|l',m',n'\rangle.$$
(6.42)



FIG. 6.12: Calcul du courant : le système 3D est virtuellement clivé en deux régions dans le plan du défaut afin de déterminer les charges circulant à travers les sections  $S_1$  et  $S_2$ . Le transport étant balistique, le nombre d'électrons transmis est constant le long de la zone active, et le plan du clivage n'a pas d'incidence sur le résultat.

La somme sur *i* des équations (6.41) et (6.42) s'étend sur tous les modes transverses de façon à prévoir le couplage par le potentiel intra-atomique de sous-bandes très éloignées. Enfin, les kets  $|l, m, n\rangle$  et  $|l', m', n'\rangle$  représentent les orbitales des surfaces S<sub>1</sub> puis S<sub>2</sub> respectivement.

Le potentiel intra-atomique de l'impureté  $U_d$  est ensuite pris en compte à l'aide de l'équation de DYSON. Suivant que le défaut se situe sur la surface  $S_1$  ou  $S_2$ , la fonction de GREEN associée sera modifiée en considérant le potentiel  $U_d$  comme une perturbation. On a donc :

$$G'_{S_1}(\varepsilon) = \left(I_S - G_{S_1}(\varepsilon) U\right)^{-1} G_{S_1}(\varepsilon), \qquad (6.43)$$

si le défaut est sur la surface  $S_1$ , et :

$$G'_{S_2}(\varepsilon) = \left(I_S - G_{S_2}(\varepsilon) U\right)^{-1} G_{S_2}(\varepsilon), \qquad (6.44)$$

si le défaut est sur la surface S<sub>2</sub>. U désigne la matrice de perturbation associée au défaut, qui dans le cas présent a tous ses éléments nuls excepté celui de l'orbitale du site du défaut, égal à  $U_d$ .

La matrice de la fonction de GREEN du système découplé exprimée dans l'espace réel s'écrit :

$$G_{S}^{0}\left(\varepsilon\right) = \begin{bmatrix} G_{S_{1}}^{\prime}\left(\varepsilon\right) & 0\\ 0 & G_{S_{2}}\left(\varepsilon\right) \end{bmatrix},\tag{6.45}$$

si le défaut est sur la surface  $S_1$ . La matrice de couplage entre les deux régions est définie par les matrices des blocs non-diagonaux de l'hamiltonien des surfaces  $S_1$  et  $S_2$ :

$$C = \begin{bmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{bmatrix}.$$
 (6.46)



FIG. 6.13: Représentation des six ellipsoïdes équivalents du silicium volumique. Sous l'influence du confinement, trois paires de vallées prennent des énergies différentes.

En se reportant au paragraphe (5.1.2), l'expression finale du courant est :

$$I = -\frac{4\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \ Tr_1 \left[ N_{11}^0 \Lambda_{11}^{\dagger} C_{12} N_{22}^0 C_{21} \Lambda_{11} \right] \left( f_S \left( \varepsilon \right) - f_D \left( \varepsilon \right) \right), \tag{6.47}$$

où  $Tr_1$  désigne la trace restreinte à la base des orbitales de la surface  $S_1$ ,  $N^0 = \left[(-1/\pi) \operatorname{Im}(G_S^0)\right]$  est la matrice de la densité à l'équilibre du système non-couplé et  $\Lambda = \left[I - G_S^0 C G_S^0 C\right]^{-1}$ .

Le calcul doit être bien entendu répété pour toutes les vallées du silicium. Nous considérons toujours les six ellipsoïdes équivalents du silicium volumique définis par les masses effectives suivantes :

 $\cdot$  Vallées  $\Delta 1$  :

- 
$$m_x^* = m_l$$
, et  $m_y^* = m_z^* = m_t$ ,

 $\cdot$  Vallées  $\Delta 2$  :

- 
$$m_x^* = m_z^* = m_t$$
, et  $m_y^* = m_l$ ,

 $\cdot$  Vallées  $\Delta 3$  :

-  $m_x^* = m_y^* = m_t$ , et  $m_z^* = m_l$ . Pour des raisons de confinement et de valeurs de masses effectives discutées dans le paragraphe (5.1.2), seules les vallées  $\Delta 2$  et  $\Delta 3$  participent efficacement au transport et seront traitées dans cette étude.



FIG. 6.14: Afin d'analyser l'influence d'une impureté sur le transport, nous définissons quatre positions références de l'impureté dopante dans le canal (cercles blancs) : a) défaut introduit à 1 nm de la source, centré dans la section transverse; b) défaut introduit à 1 nm de la source, excentré à 0.4 nm des bords du fil de silicium; c) défaut introduit à 1 nm du drain, centré dans la section transverse; d) défaut introduit à 1 nm du drain, excentré à 0.4 nm des bords du fil de silicium.

### 6.4 Résultats

Nous considérons dans cette section le transistor MOSFET gate-all-around de la figure (6.10) avec un dopage homogène de type N de  $10^{20}$  cm<sup>-3</sup> dans la source et le drain. La longueur de grille  $L_G$  vaut 8 nm et les dimensions transverses sont :  $W_{\rm Si} = T_{\rm Si} = 3$  nm. L'épaisseur de l'oxyde de grille est également un paramètre fixé à  $T_{ox} = 1$  nm. Le canal présente une concentration de défauts accepteurs  $N_A = 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>, ce qui correspond en moyenne à 0.72 impureté dans le volume du canal  $V (= L_G \times W_{\rm Si} \times T_{\rm Si} = 72 \,\mathrm{nm}^3)$ . Le dopage de cette région revêt en conséquence une concentration microscopique hautement aléatoire dont nous tenons compte en n'introduisant qu'une seul défaut accepteur dans cette région. La suite de ce travail consiste à mesurer l'influence de la position et du type (ionisé ou pas) de l'impureté sur les caractéristiques électriques du MOSFET GAA. Nous modélisons dans un premier temps une impureté localisée en début de canal au centre de la section transverse (figure (6.14)a).

La figure (6.15) représente les deux premières sous-bandes de la vallée  $\Delta 2$  (ou vallée (010)) superposées à celles d'un composant au canal intrinsèque, c'est-à-dire sans impureté. La présence de l'impureté affecte fortement les sous-bandes au voisinage du défaut et les décale vers des valeurs supérieures. Néanmoins, les sous-bandes ne s'interceptent pas et restent indépendantes, ce qui valide l'utilisation de l'approche "mode-space". La figure (6.16) compare le module au carré du premier état propre transverse avec et sans impureté ionisée. L'état est visuellement modifié, mais le produit scalaire des deux fonctions d'onde atténue cet première intuition et montre qu'ils sont en fait très similaires. Nous obtenons une moyenne un produit scalaire égale à



FIG. 6.15: Sous-bandes le long de l'axe source-drain du transistor sans défaut (lignes continues), et du transistor dopé avec un défaut accepteur introduit à 1 nm de la source centré dans la section transverse (lignes discontinues). La ligne verticale indique la position du défaut.  $V_{DS} = 0.5$  V et  $V_G = 0$  V.



FIG. 6.16: Modules au carré des états transverses de la première sous-bande a) dans une section sans défaut; b) dans une section contenant l'impureté dopante décrite figure (6.15). Le cercle blanc localise l'impureté.

0.95 traduisant la conservation de la fonction d'onde en présence du défaut et le léger impact du potentiel coulombien dans les directions transverses fortement confinées. L'approche de l'espace des modes, dont la validité nécessite une faible variation de l'état transverse le long de la zone active, est donc confortée. De plus, la barrière de potentiel source-drain augmente et l'on peut s'attendre à une diminution des charges dans le canal. La figure (6.17) illustre cette évolution en représentant la densité électronique le long du canal au centre de la section transverse. Les charges du composant dopé sont localement inférieures à celles d'un composant intrinsèque. Plus précisément, seule la densité électronique associée à l'injection de la source est réduite, alors que celle de la composante du drain reste inchangée. Les électrons de drain n'interagissent pas avec une impureté introduite dans la première moitié du canal. Au vue des premiers effets de la présence d'une impureté ionisée sur les quantités locales, une influence significative de la position et du type de l'impureté est envisageable.



FIG. 6.18: Comparaison de la première sous-bande en fonction de la position du dopant : canal intrinsèque (ligne continue), impureté introduite à 2 nm de la source, centrée (tirets), puis excentrée (pointillés).  $V_{DS} = 0.4 \text{ V}$ . La ligne verticale indique la position du défaut alors que la figure insérée représente les modules au carré du premier état transverse dans les trois cas. Les cercles blancs localisent l'impureté.



FIG. 6.17: Influence d'un défaut ponctuel sur la densité électronique le long de l'axe sourcedrain au centre de la section transverse. La ligne discontinue indique la position de l'impureté.  $V_{DS} = 0.5 \text{ V}$  et  $V_G = 0 \text{ V}$ .

La figure (6.18) représente la première sous-bande de la vallée  $\Delta 1$  pour différentes positions dans la section transverse de l'impureté introduite près de la source. Nous constatons que l'influence du défaut se fait davantage ressentir lorsque ce dernier est au centre de la section transverse. A l'opposé, une impureté située dans les coins génère une sous-bande très proche de celle du canal sans défaut. La figure insérée montre que le module au carré du premier état transverse associé à l'impureté excentrée est très peu modifié par rapport à celui de réseau parfait. Son produit scalaire avec le même vecteur propre d'une section sans défaut vaut 0.99.



FIG. 6.19: Caractéristiques  $I_D - V_G$  associées à trois configurations de dopage : sans impureté (ligne continue), impureté introduite à 2 nm de la source, centrée (tirets), puis excentrée (pointillés).  $U_d = 2 \text{ eV}$ , et  $V_{DS} = 0.4 \text{ V}$ .

Les conséquences sur les caractéristiques de courant  $I_D - V_G$  correspondantes sont représentées sur la figure (6.19). Le courant du canal sans impureté est le plus élevé dans tous les régimes (sous le seuil et saturé) alors que celui obtenu avec un défaut localisé au centre de la section transverse est minimum. Entre ces deux extrema, la présence d'un défaut dans les contours du fil de silicum est moins influente en termes de réduction de courant : le courant sous le seuil atteint la moitié de celui d'un réseau parfait. De plus, nous pouvons noter que la différence entre les courbes n'est pas un décalage global de la caractéristique, mais plutôt une variation de la pente sous le seuil, c'est-à-dire de la transconductance. En somme, modifier la position transverse de l'impureté induit un changement des propriétés de transport qui se répercute directement sur le courant de drain. La figure (6.20) compare la caractéristique d'une impureté neutre (sans potentiel coulombien) à celle d'une impureté ionisée. On observe que la variation du courant en présence d'une impureté neutre est négligeable et redonne quasi-fidèlement le courant de drain d'un composant sans défaut. Une impureté neutre ne suffit donc pas à bloquer un mode de conduction (ou une sous-bande). Le mode de transport d'un composant 3D n'est pas affecté par ce type de défaut isolé, que les électrons "contournent" par les atomes voisins non perturbés.



FIG. 6.20: Caractéristiques  $I_D - V_G$  associées à trois configurations de dopage : sans impureté (ligne continue), impureté introduite à 2 nm de la source, neutre (pointillés), impureté ionisée (pointillés). Impureté neutre :  $U_d = 100 \,\text{eV}$ , impureté ionisée :  $U_d = 2 \,\text{eV}$ .  $V_{DS} = 0.4 \,\text{V}$ .

## 6.5 Conclusion

A l'aide d'une simulation en liaisons fortes exprimée dans le formalisme des fonctions de GREEN, nous avons développé un modèle pour évaluer les effets d'un dopage discret du canal de MOSFETs nanométriques. L'effet du type et de la position le long de la zone active d'une impureté neutre a d'abord été étudié dans le transistor double-grille à canal unique de conduction. Nous avons détaillé les différents processus de transport électronique et illustré le cas particulier du transport par effet tunnel assisté. Ce modèle a ensuite été étendu au cas du défaut accepteur introduit dans le canal d'un transistor MOSFET gate-all-around. L'influence de quatre<sup>4</sup> positions significatives de l'impureté a été analysé dans un canal de 8 nm et une section transverse de 9  $\text{nm}^2$  en termes de quantités physiques (densité électronique, états quantiques transverses, sous-bandes électroniques) et de courant de drain. La variation de position de l'impureté ionisée modifie substantiellement les propriétés de transport qui se traduit par des modifications de la transconductance. En conséquence, le courant de drain peut subir une diminution de plus de 70% en fonction de la position de l'impureté ionisée. Une impureté introduite près de la source au centre de la section transverse dégrade très fortement les caractéristiques, alors que le même défaut excentré dans les coins du fil de silicium a peu d'impact. De plus, les résultats des simulations ont montré qu'une impureté neutre (sans potentiel coulombien) n'avait pas ou très peu d'influence sur le courant total : un défaut neutre isolé ne détériore pas les propriétés d'un transistor de taille nanométrique. Ce travail s'est limité à l'étude d'impuretés dans le canal. Le présent traitement peut sans modification s'appliquer également à l'étude de défauts donneurs dans les réservoirs de source et de drain. Enfin, une autre voie de recherche serait de simuler

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Calculs pour les deux positions près du drain en cours d'interprétation.