



INSTITUT NANOSCIENCES  
ET CRYOGÉNIE

la recherche, ressource fondamentale  
*research - a fundamental resource*

sp2m



[inac.cea.fr](http://inac.cea.fr)

PHYSIQUE DES MATERIAUX  
ET DES MICROSTRUCTURES

# De l'atome au composant électronique

Y.M. Niquet

CEA Grenoble, INAC, SP2M/L\_Sim, France

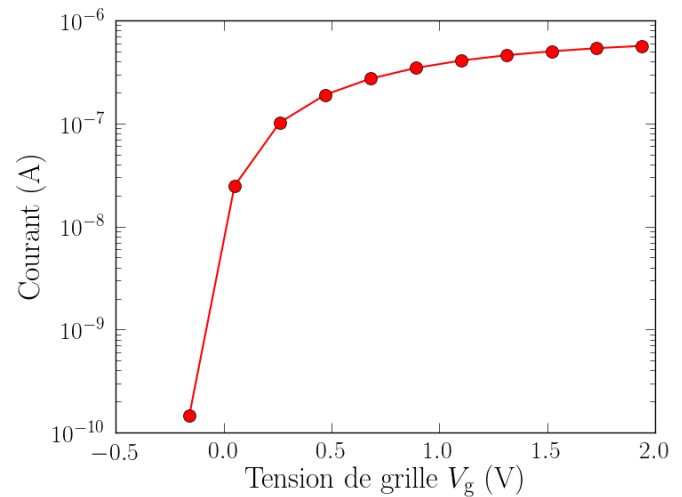
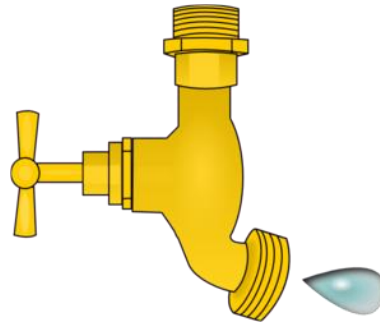
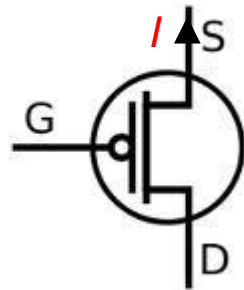
# Plan

- Le **transistor MOS**.
- Son **évolution**.
- Les **enjeux pour la simulation**.

*« De la mécanique (semi) classique à la mécanique quantique »*

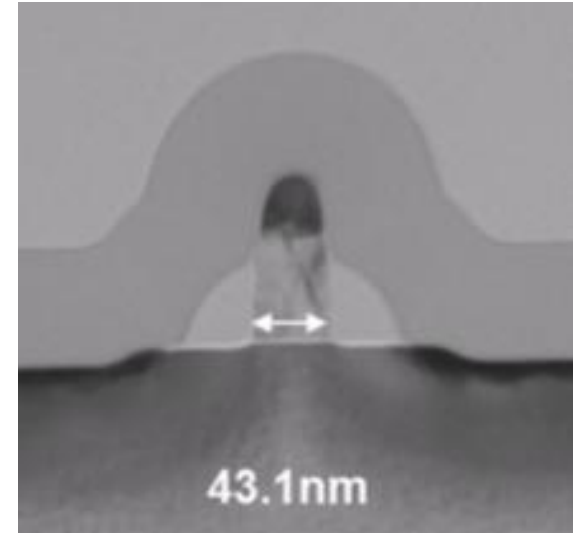
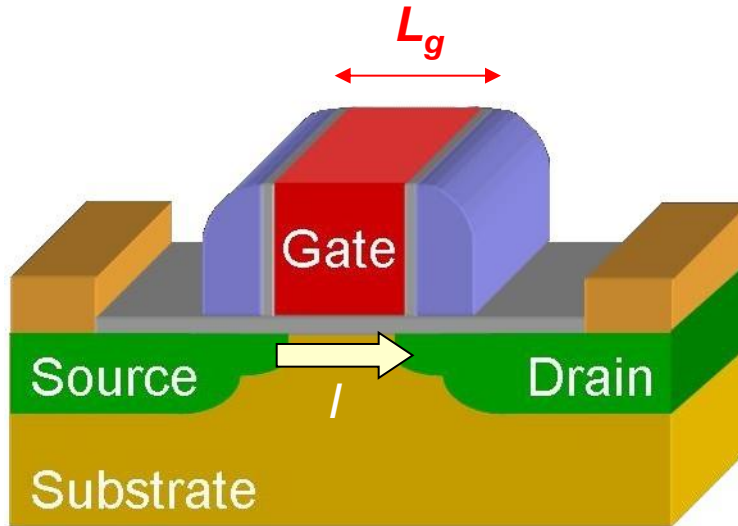
- Quelques **exemples** concrets.

# Le transistor MOS



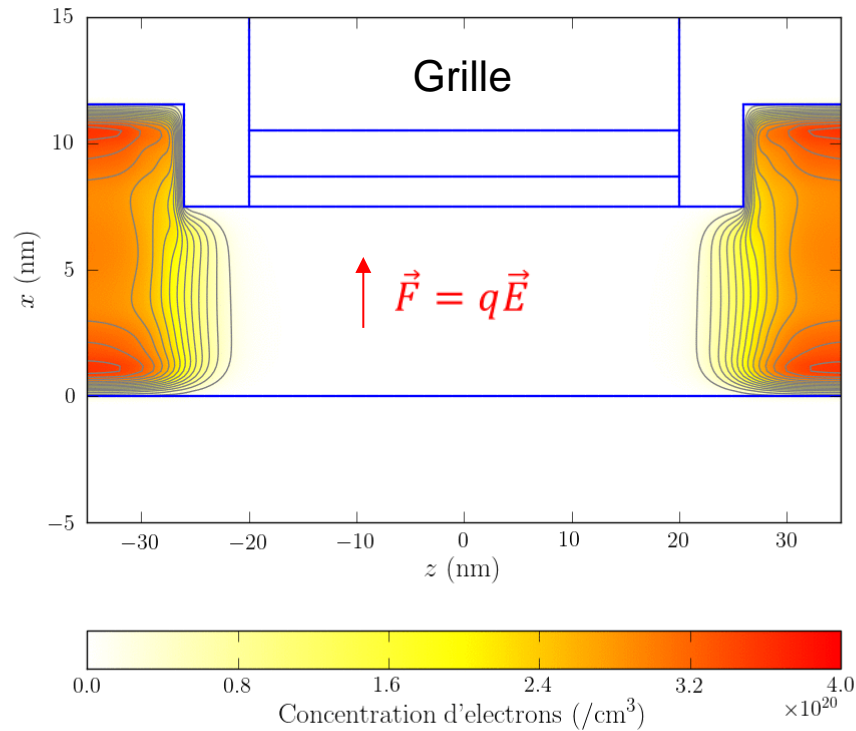
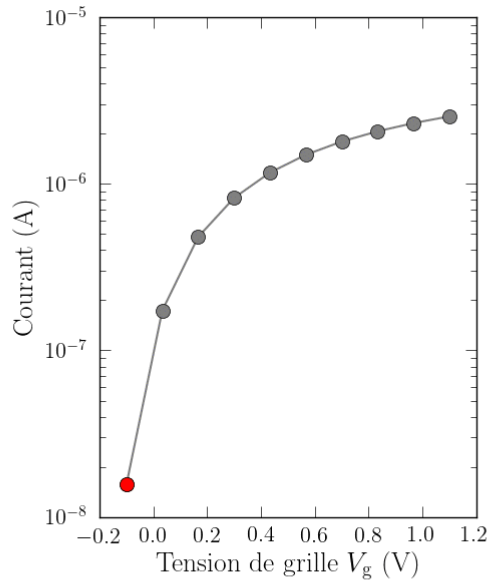
- **Le transistor est un interrupteur contrôlé électriquement :**  
Le courant  $I$  qui circule entre la « **source** » S et le « **drain** » D dépend de la tension appliquée sur la « **grille** » G.
- Le transistor est la brique de base du processeur. **Il permet notamment de stocker et de manipuler une information (⇒ Bit 0/1).**

# Le transistor MOS



- Principe :
  - **La grille attire ou repousse les électrons dans le « canal »** entre la source et le drain, et contrôle ainsi sur le courant.
- La taille du transistor MOS transistor est caractérisée par sa longueur de grille  $L_g$ .

# Le transistor MOS



- Principe :
  - La grille attire ou repousse les électrons dans le « canal » entre la source et le drain, et contrôle ainsi sur le courant.
- La taille du transistor MOS transistor est caractérisée par sa longueur de grille  $L_g$ .

# Anatomie d'un supercalculateur (Curie@TGCC)

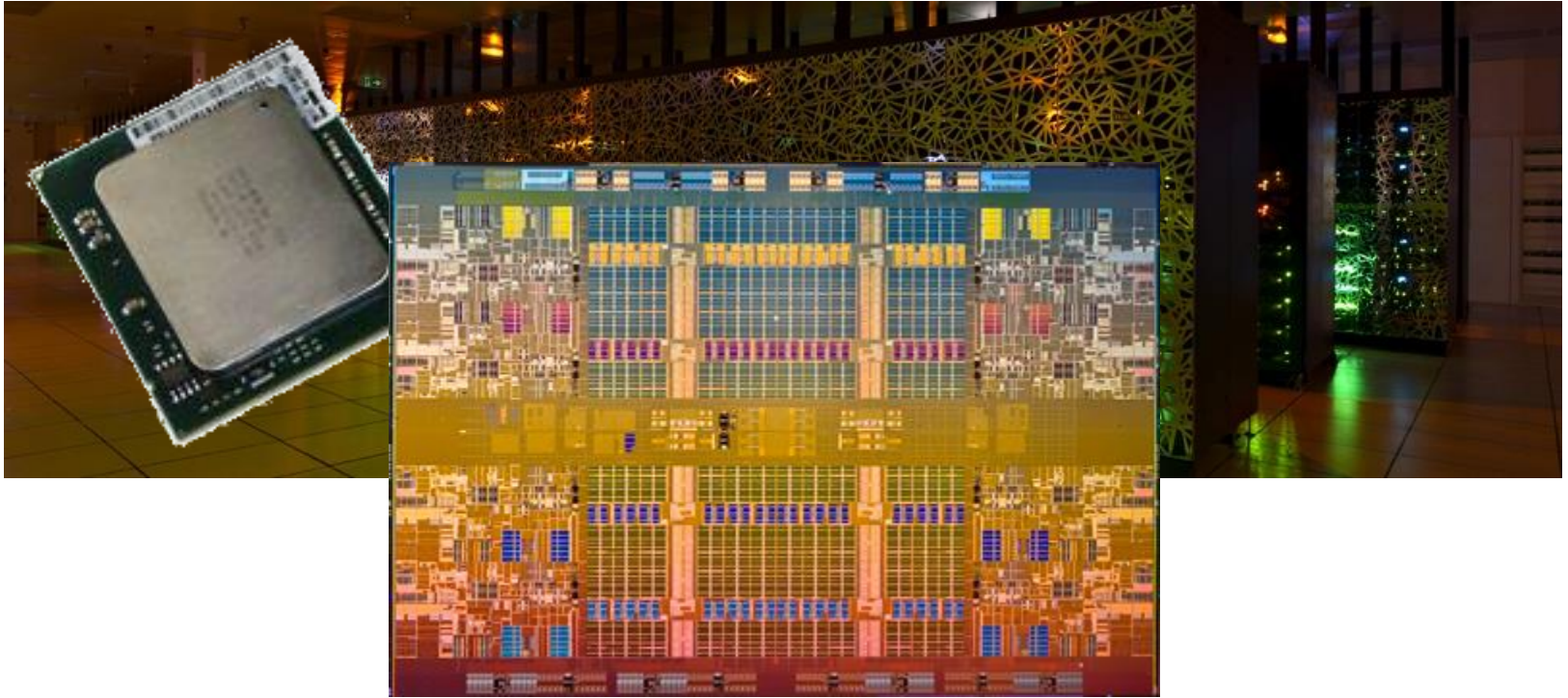


# Anatomie d'un supercalculateur (Curie@TGCC)



- Nœuds larges : 1440 processeurs Intel Xeon X7560 @ 2.26 GHz (Nehalem).

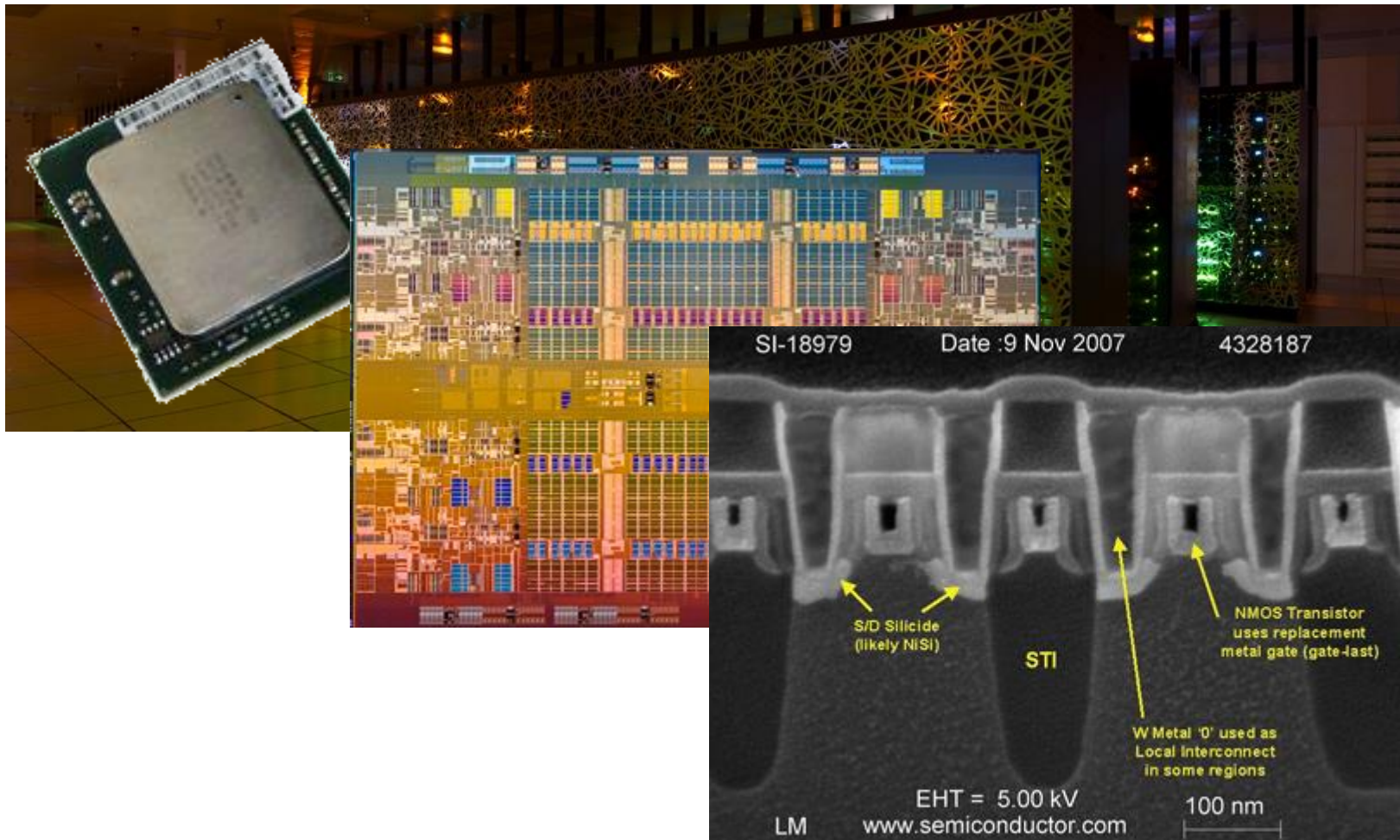
# Anatomie d'un supercalculateur (Curie@TGCC)



- 8 cœurs par processeur.



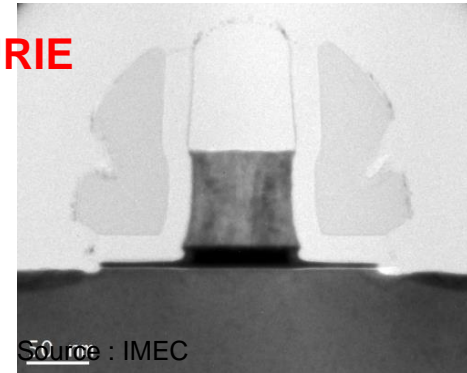
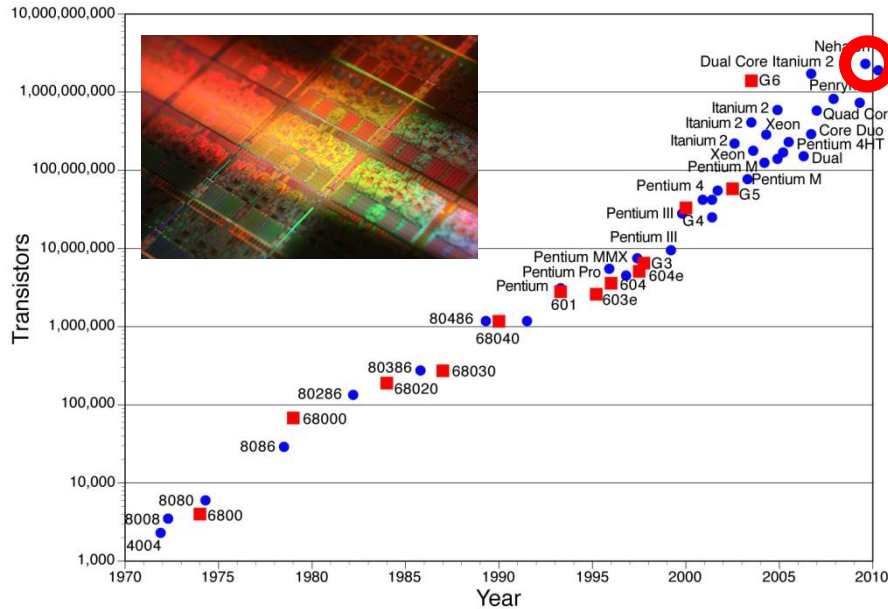
# Anatomie d'un supercalculateur (Curie@TGCC)



- **2 300 000 000** transistors par processeur.

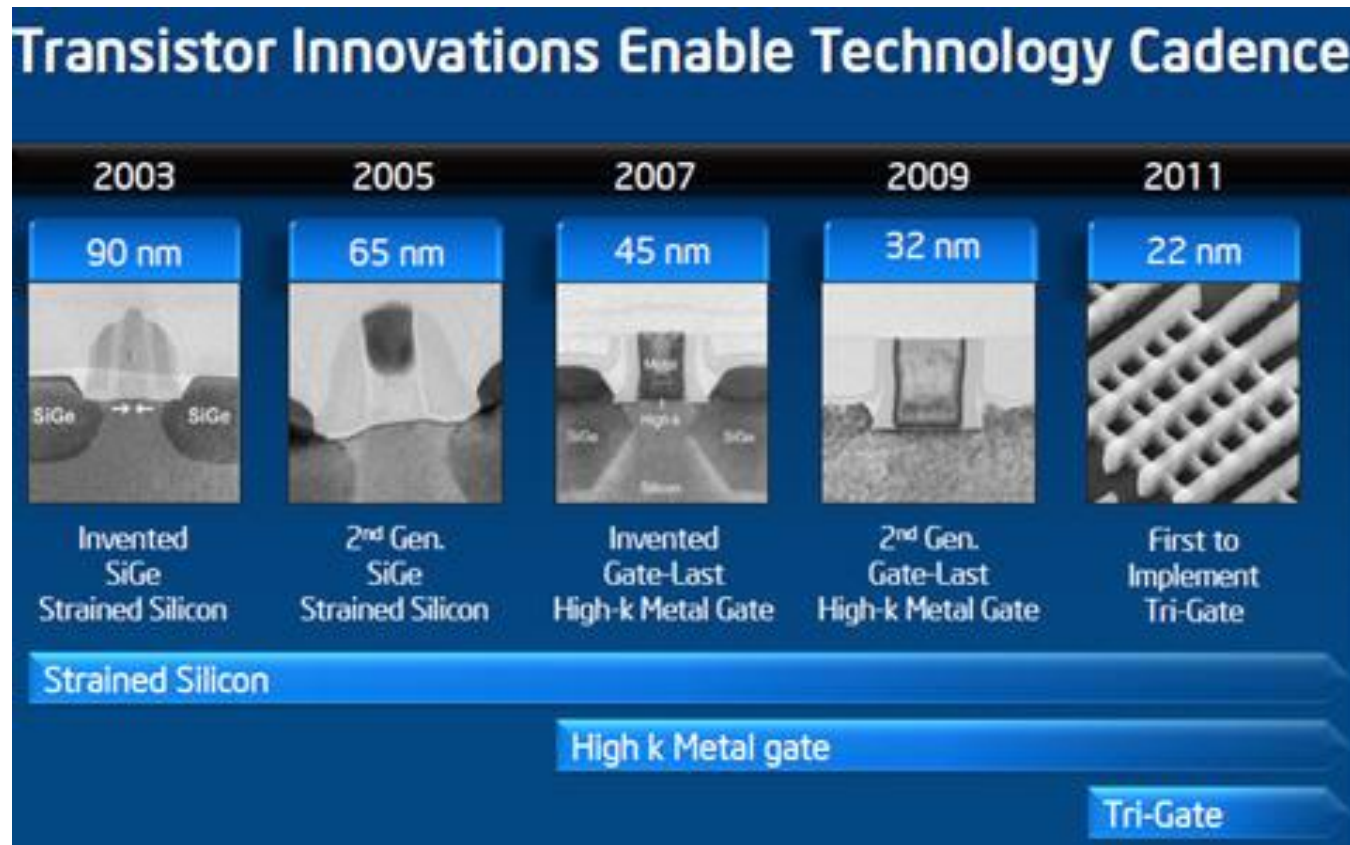
# La loi de Moore

- Loi de Moore : Le nombre de transistors sur un processeur double tous les ~1.5 ans.



- Longueur de grille de la technologie Ivy-Bridge d'INTEL : 22 nm.
- **Et après ? (16 nm ? 10 nm ? 5 nm ?)**

# Un vrai challenge pour les matériaux et la technologie

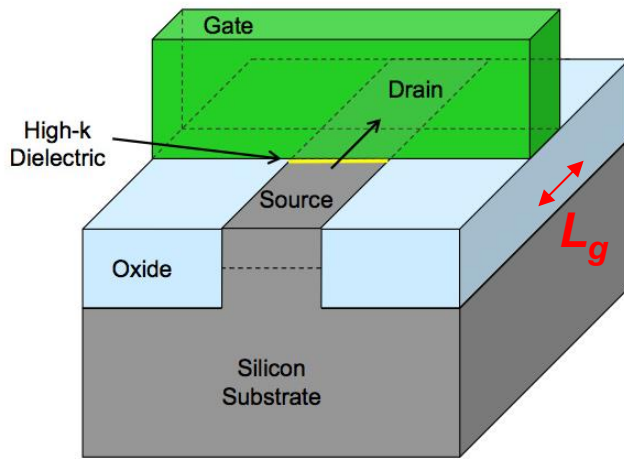


Source : Intel

- **Introduction de nouveaux matériaux** : Silicium contraint, « High- $\kappa$  », ...
- **Vers le transistor 3D !**

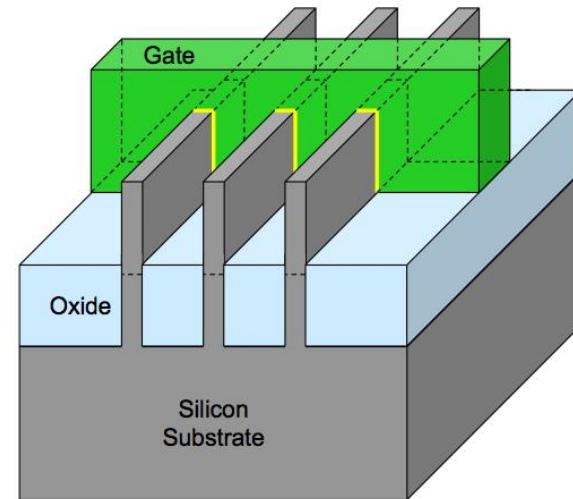
# Vers les architectures 3D

## Transistor 2D



- Le contrôle du courant devient difficile lorsque  $L_g < 20$  nm.

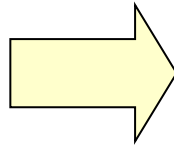
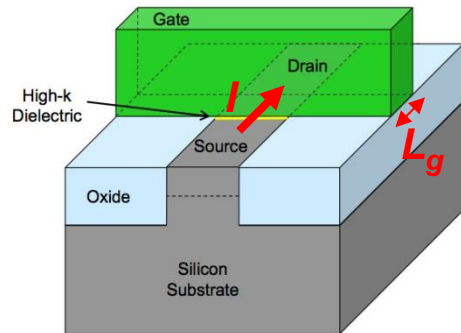
## Transistor « Tri-gate » 3D



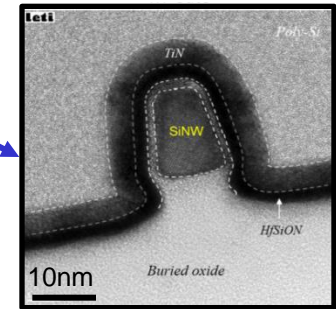
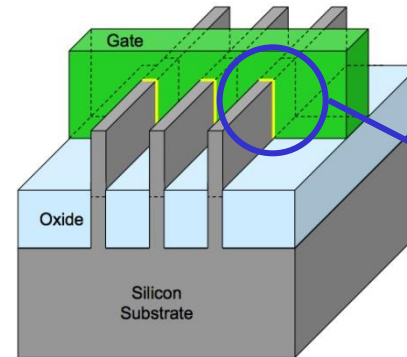
- **Meilleur contrôle par la grille** (meilleur interrupteur !)

# Pour résumer...

## Transistor 2D



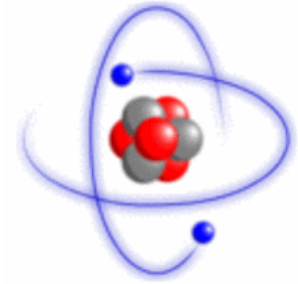
## Transistor « Tri gate »



- Tendances : **Améliorer performances et intégration** des dispositifs en diminuant la longueur de grille  $L_g$  (~20 nm aujourd'hui).
  - **Changement de dimensionnalité** :  
Transistor « Bulk » → FDSOI (films) → Trigate (fils)  
**Corrections quantiques** ↗
  - **Introduction de nouveaux matériaux** :
    - Oxydes « high- $\kappa$  »  $\text{HfO}_2$ ...
    - Canaux SiGe, III-V, Graphène,  $\text{MoS}_2$ ...
- Nouveaux paradigmes : Electronique de spin, électronique moléculaire...

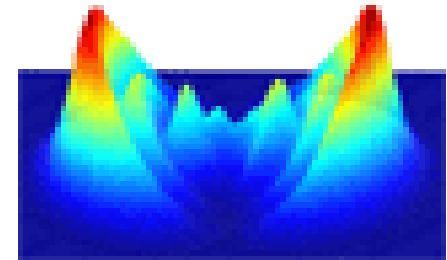
# De la physique classique à la physique quantique

- **Mécanique classique** : L'électron est décrit comme une particule ponctuelle soumise à la loi de Newton  $\vec{F} = m\vec{a}$ .



- **Mécanique quantique** : L'électron est représenté par une « fonction d'onde »  $\psi(\vec{r}, t)$ . Celle-ci décrit la probabilité de trouver l'électron au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ , et vérifie l'« équation de Schrödinger »

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

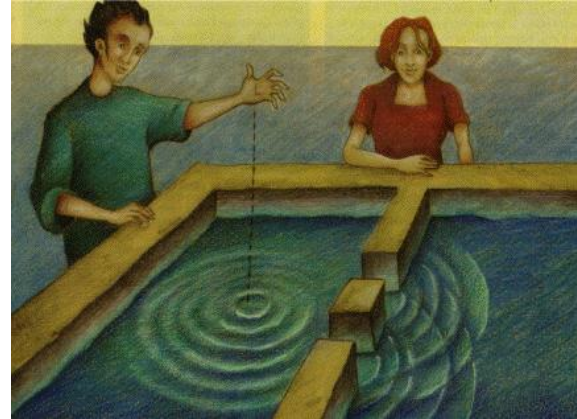
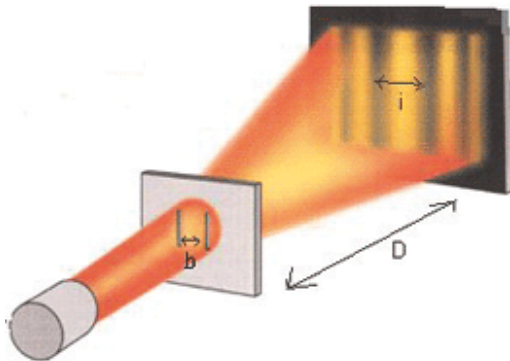


- La mécanique classique apparaît comme une limite de la mécanique quantique dans les systèmes macroscopiques dont les dimensions sont très supérieures à l'extension du paquet d'ondes – typiquement 10 à 20 nm.

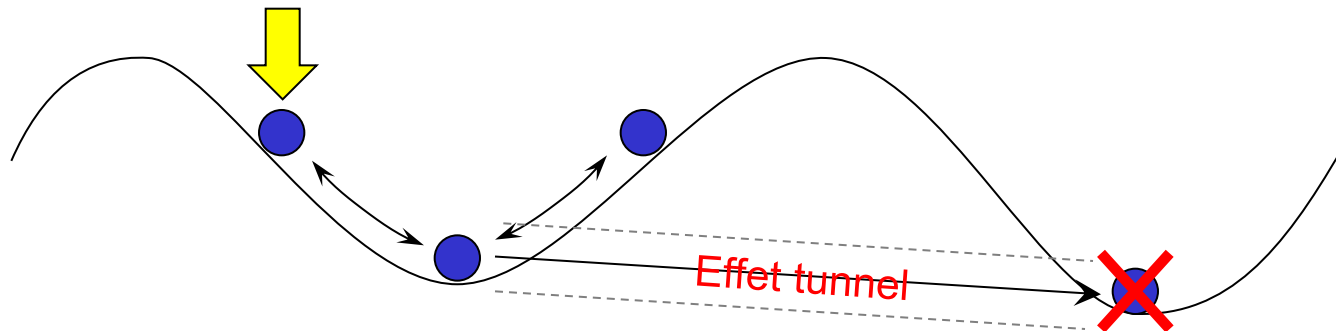
# De la physique classique à la physique quantique

- **Des comportements originaux :**

- Les électrons peuvent être diffractés et interférer (comme la lumière) :

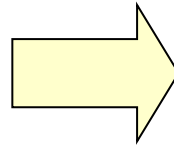
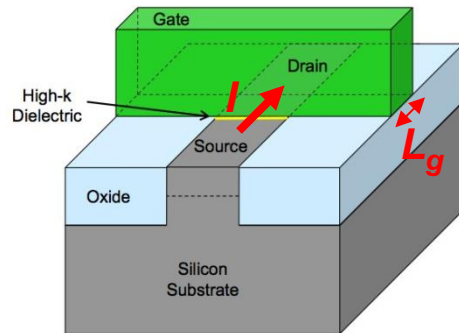


- **Effet tunnel** : Les électrons peuvent « franchir des obstacles » interdits classiquement.

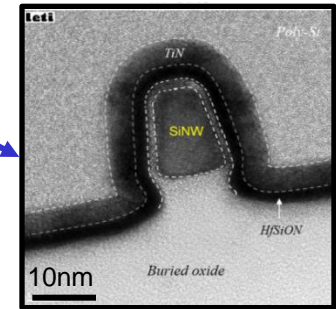
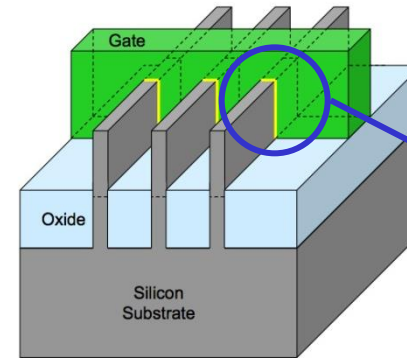


# Défis

## Transistor 2D



## Transistor « Tri gate »



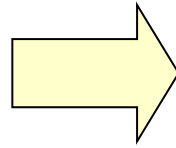
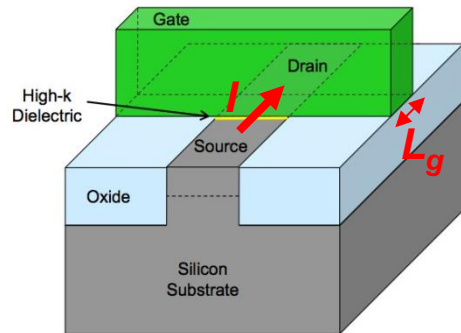
- Défis :

- Technologiques : Synthèse et procédés matériaux. Caractérisation.
- Conceptuels : Physique de plus en plus complexe, *non classique*. Beaucoup de questions restent ouvertes.

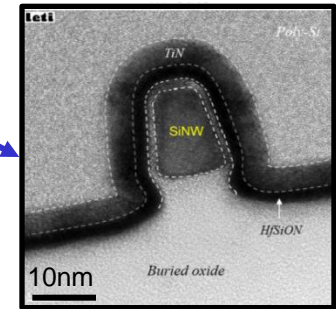
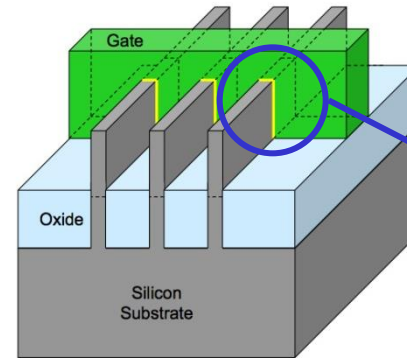


# Enjeux pour la simulation

## Transistor 2D



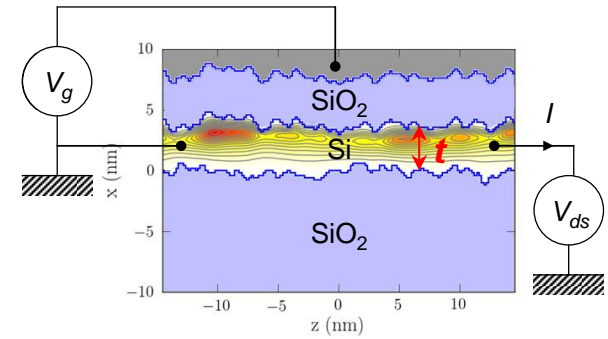
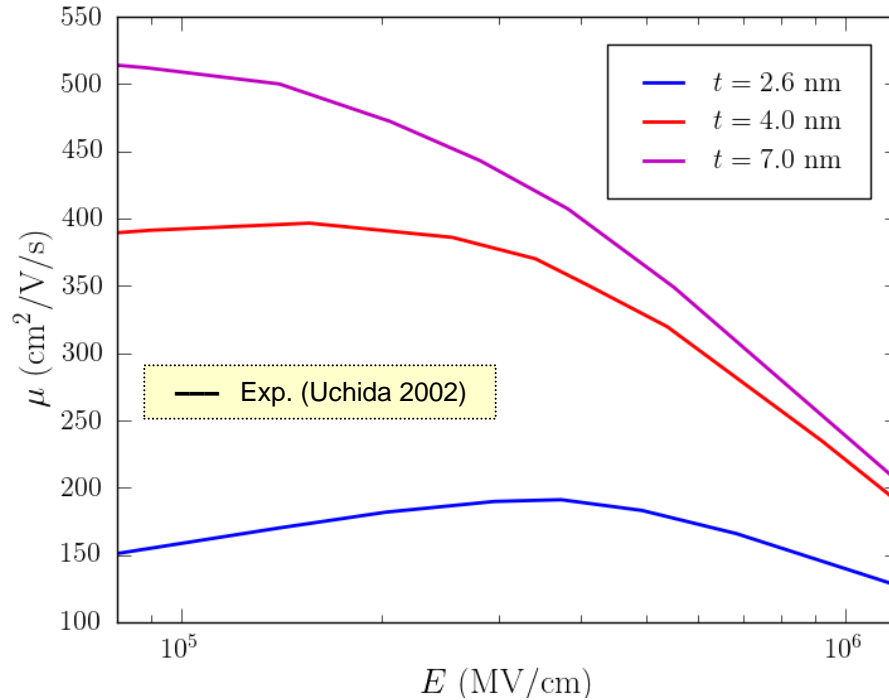
## Transistor « Tri gate »



- Enjeux : La modélisation doit permettre de :
  - **Comprendre**/anticiper la physique des dispositifs.
  - **Explorer** de nouveaux concepts.
  - Faire le **tri** parmi les options architectures/matériaux.
  - **Optimiser** les dispositifs.
- « **Caractérisation par la simulation** »...

# Problématiques

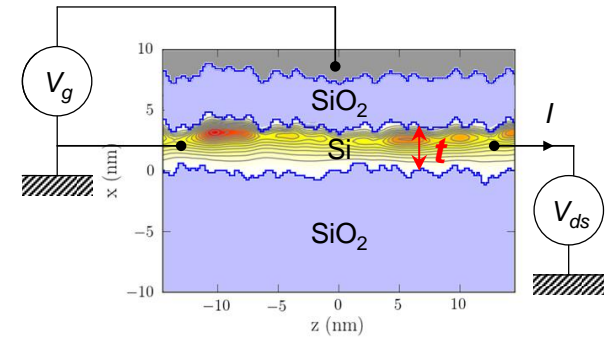
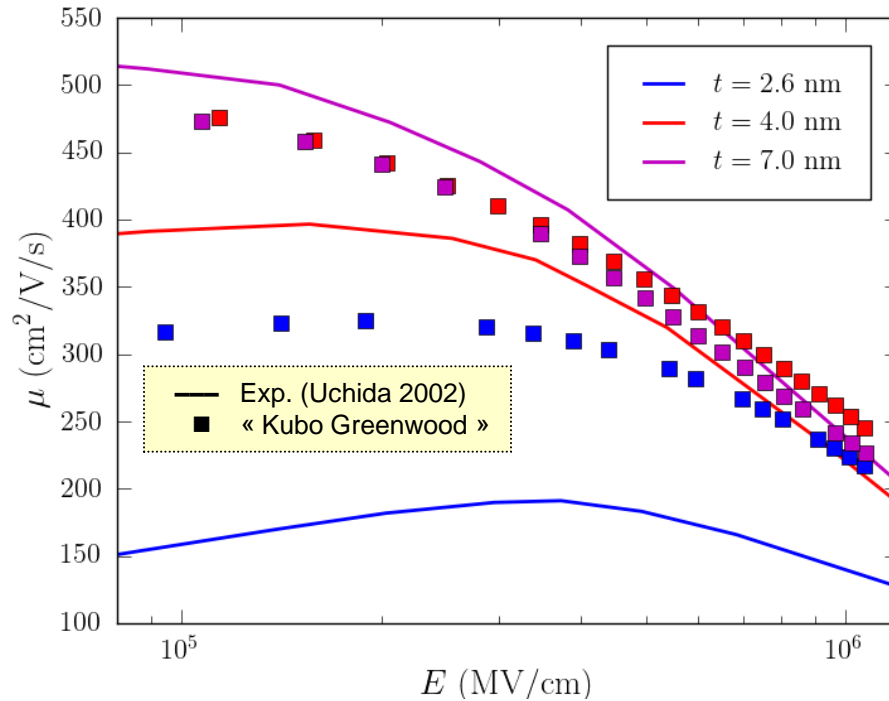
- La simulation n'est plus suffisamment quantitative pour être emmenée sur des terrains peu ou pas explorés.



$$I \propto \mu V_{ds}$$

# Problématiques

- La simulation n'est plus suffisamment quantitative pour être emmenée sur des terrains peu ou pas explorés.



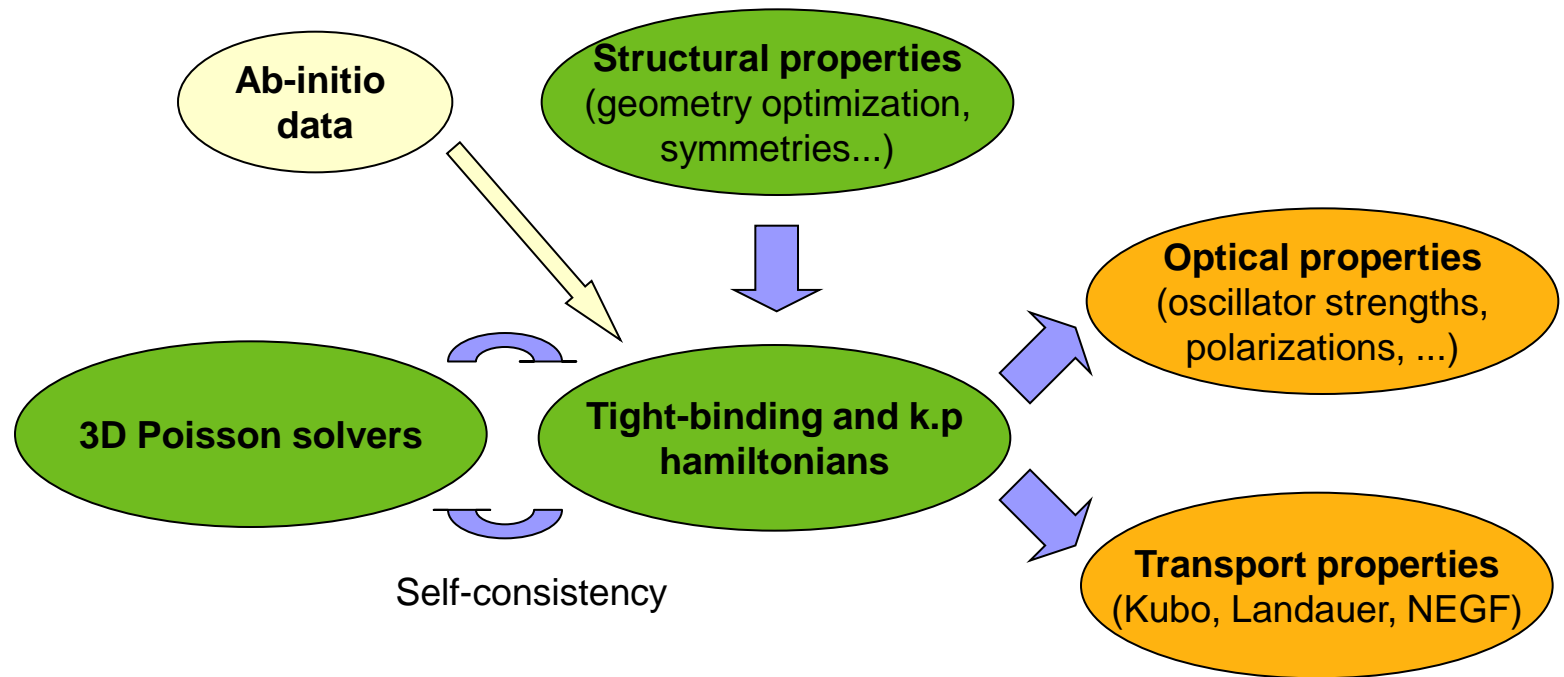
$$I \propto \mu V_{ds}$$

- Les méthodes « semi-classiques », calibrées à  $t = 7$  nm, sont incapables de rendre compte des tendances pour  $t = 4$  nm et  $t = 2.6$  nm.

# Solutions

- Développer un code :
  - Basé sur la **mécanique quantique**.
  - Capable de décrire des **matériaux complexes**.
  - « **Multi-échelles** » : Description milieux continus/atomistique.

# Le code **TB\_Sim**



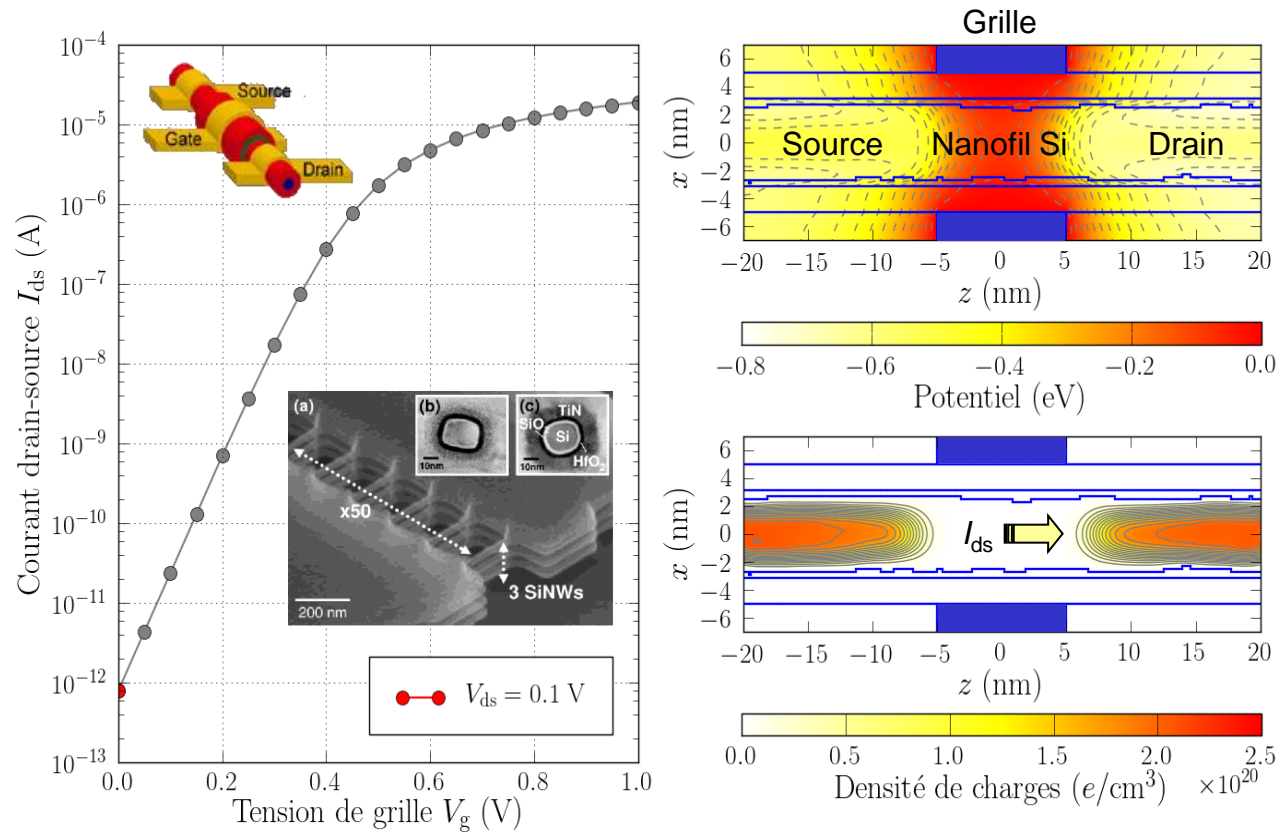
- Code liaisons fortes/**k.p** développé au CEA Grenoble.
- Couplé aux codes *ab initio* (**siesta** A linear-scaling density-functional method).
- Adapté aux infrastructures de calcul hautes performances.

# Prix Bull Fourier 2012

Simulation des propriétés électriques des transistors de prochaine génération sur GPU (code « **TB\_Sim** »)

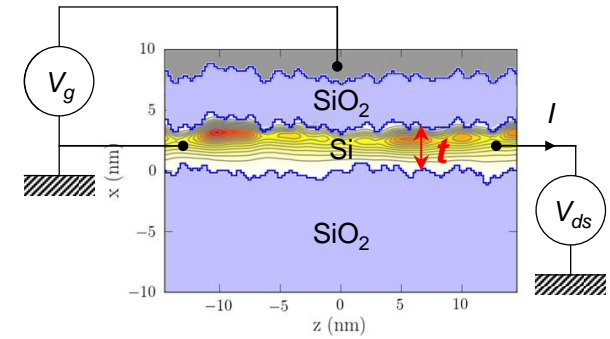
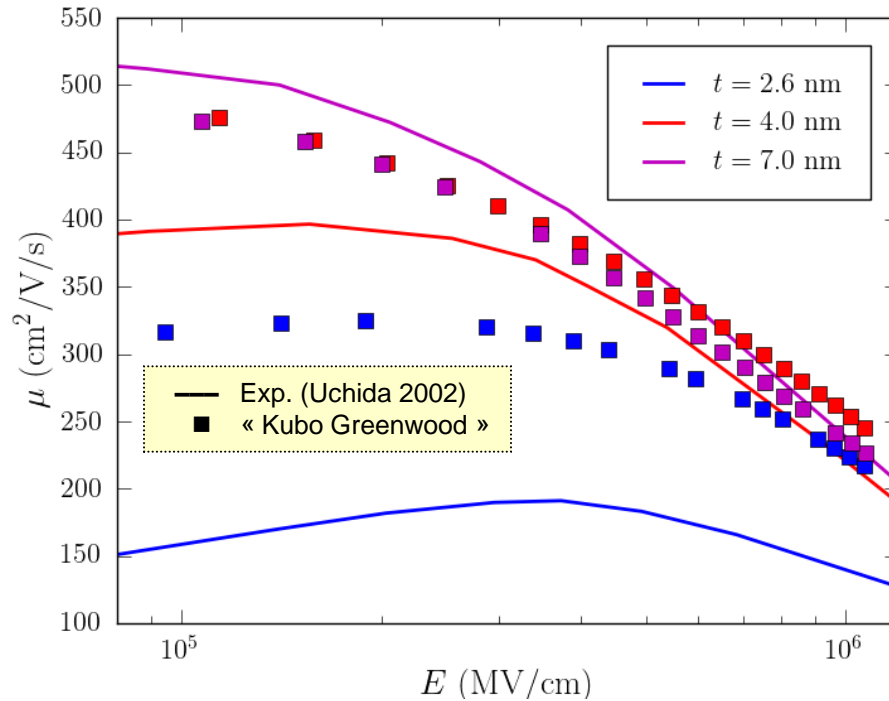


Y.M. Niquet (CEA/INAC), F. Triozon (CEA/LETI) & C. Delerue (CNRS/IEMN Dept ISEN)



# Mobilité dans les films de silicium

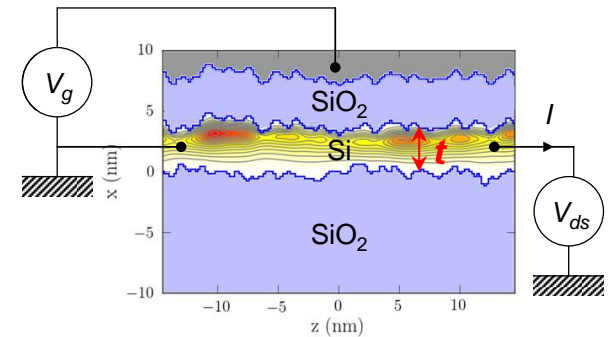
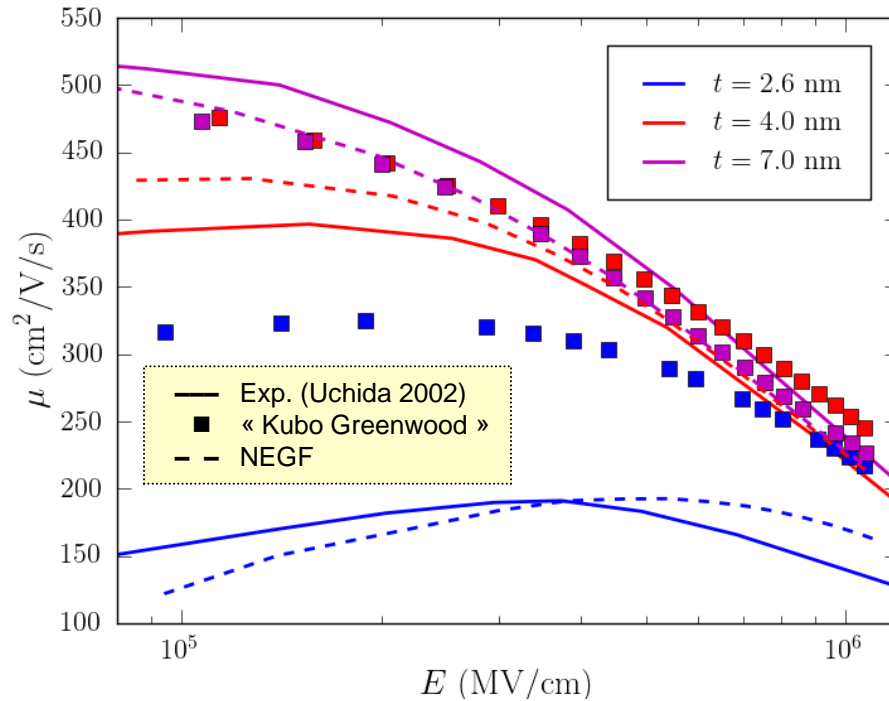
- « Fonctions de Green hors-équilibre » pour le transport quantique.



$$I \propto \mu V_{ds}$$

# Mobilité dans les films de silicium

- « **Fonctions de Green hors-équilibre** » pour le transport quantique.

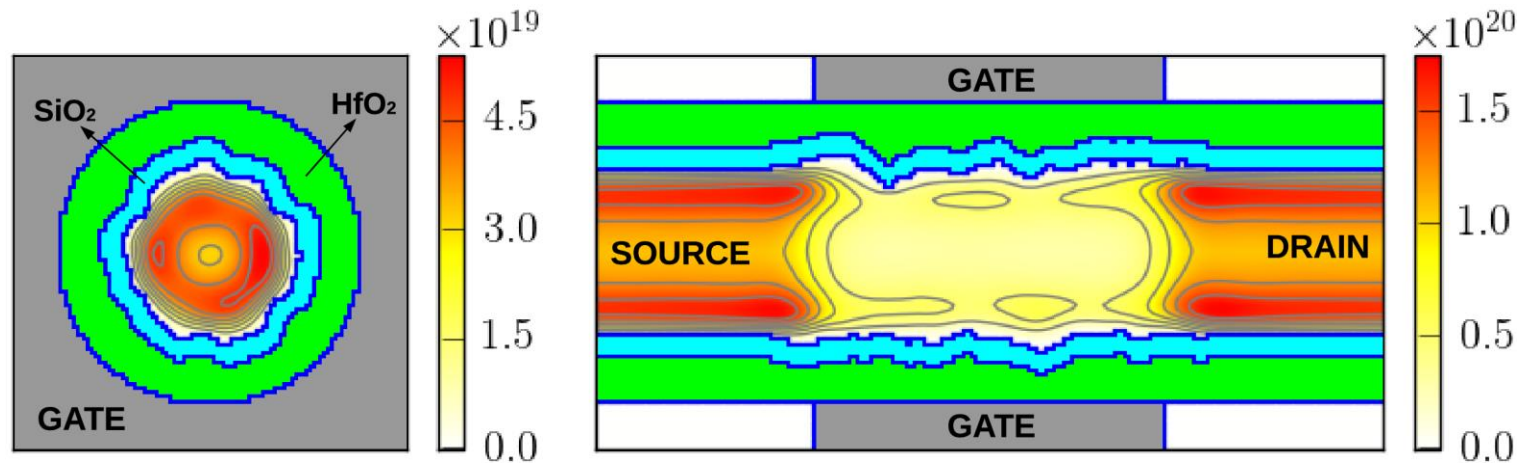


$$I \propto \mu V_{ds}$$

- Les fonctions de Green reproduisent les tendances pour  $t$  arbitraire, à l'inverse des méthodes semi-classiques.

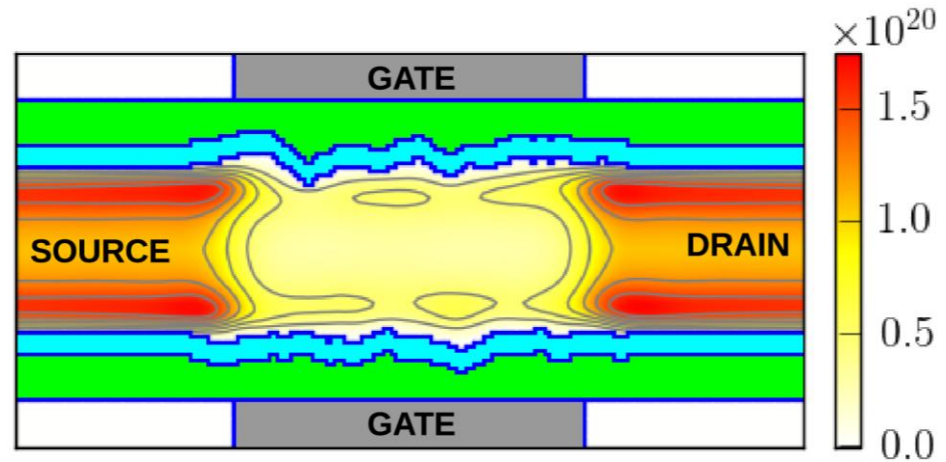
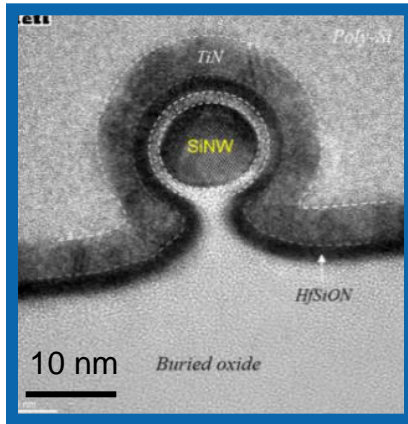


# Réponse des nanofils de silicium aux contraintes



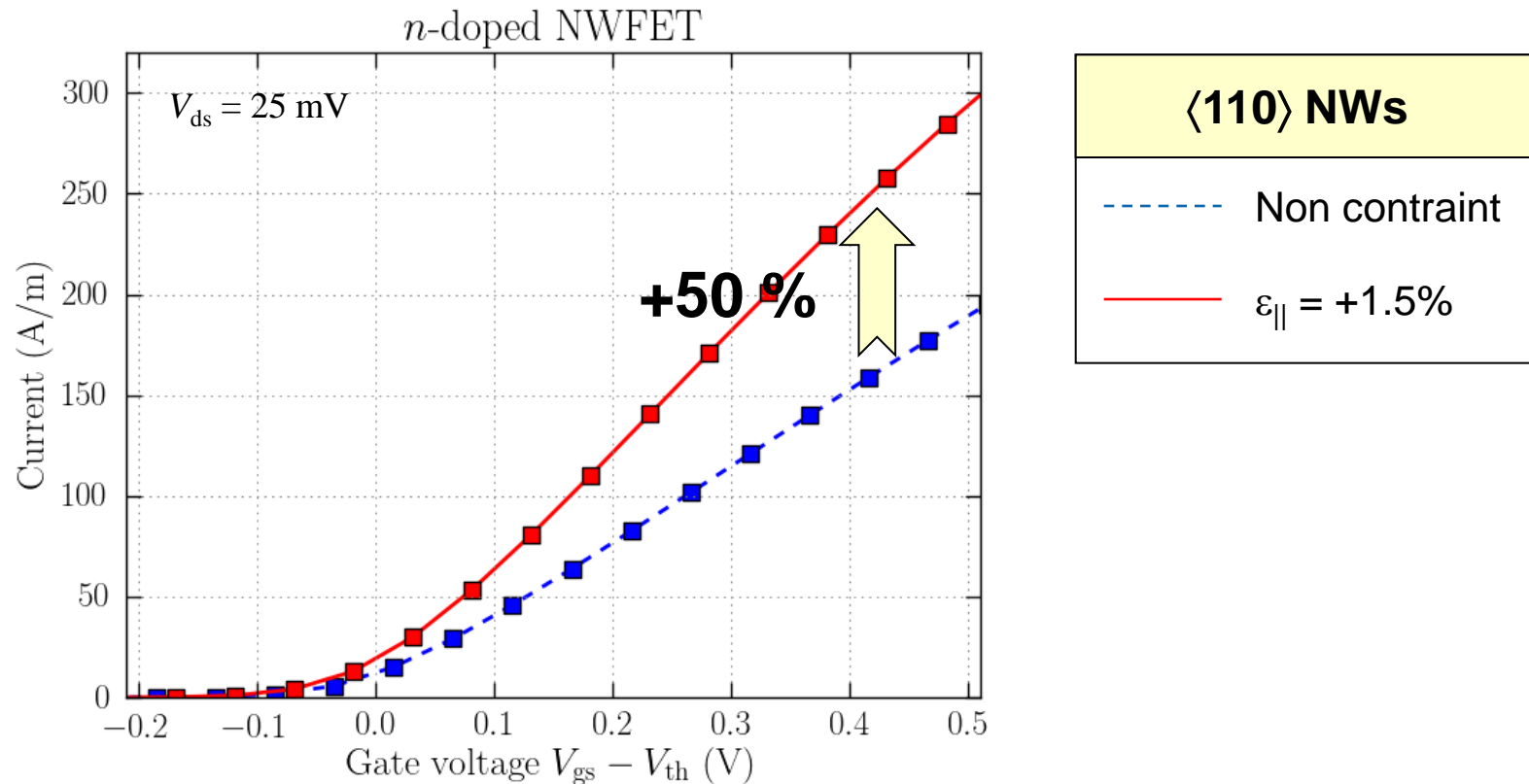
- Objectif : Comprendre la réponse électrique d'un nanofil de silicium à une élévation.
- Dispositif simulé :
  - Fils de silicium « **gate-all-around** ».
  - Diamètre  $d = 8$  nm.
  - Longueur du canal  $L_g = 16$  nm.

# Réponse des nanofils de Si aux contraintes



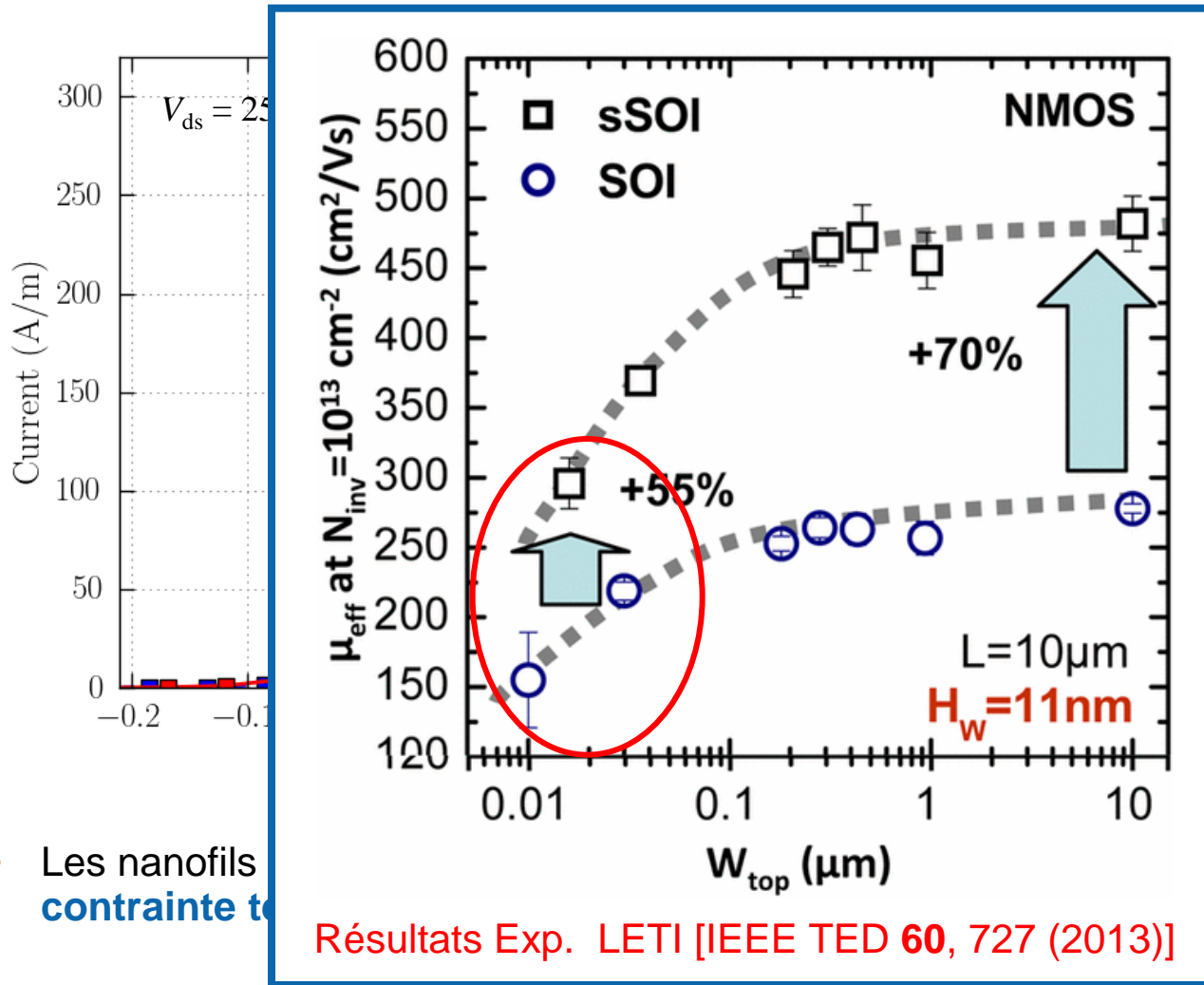
- Objectif : Comprendre la réponse électrique d'un nanofil de silicium à une élongation.
- Dispositif simulé :
  - Fils de silicium « gate-all-around ».
  - Diamètre  $d = 8$  nm.
  - Longueur du canal  $L_g = 16$  nm.

# Réponse des nanofils de silicium aux contraintes



- Les nanofils de silicium **répondent favorablement à une contrainte tensile.**

# Réponse des nanofils de silicium aux contraintes



0) NWs  
 Non contraint  
 $\epsilon_{\parallel} = +1.5\%$

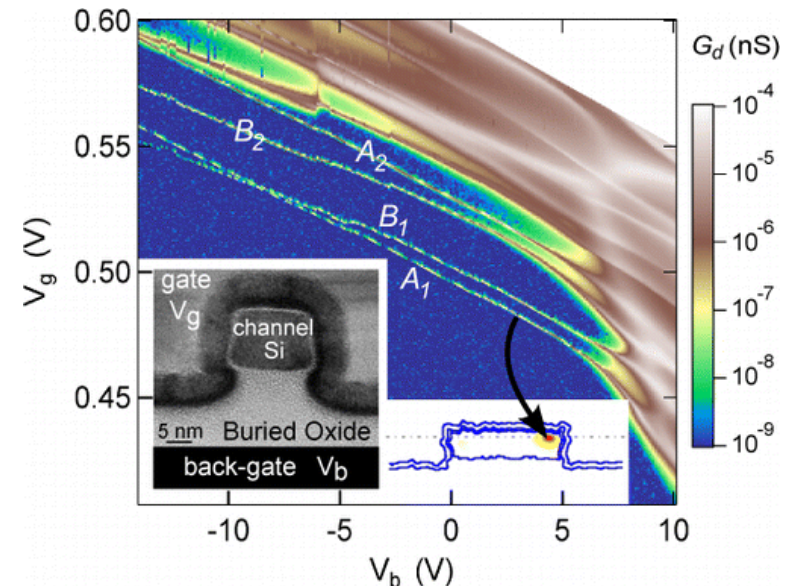
- Les nanofils **contrainte t**

à une

# Perspectives

- **Exploration de dispositifs originaux exploitant ces effets quantiques :**
  - Transistors à effet tunnel...
  - Transistors à « un électron » (contrôle du courant électron par électron).
  - Manipulation des fonctions d'onde des électrons ( $\Rightarrow$  ordinateur quantique).
- **Exploration de la physique des matériaux nanostructurés :**

- Les transistors sont à « l'état de l'art » de la science des matériaux et constituent un formidable terrain pour explorer et comprendre la physique quantique. En particulier, ces transistors montrent une physique extrêmement riche à basse température.



# La fin de la Loi de Moore ?

- **Certes, nous n'avons jamais été aussi près de la fin de la loi de Moore « conventionnelle »...**

- Les dispositifs sont de plus en plus difficiles à réaliser.
- Les gains de performances sont de plus en plus faibles.

... mais il reste encore de la marge et les techniques de fabrication (lithographie...) évoluent vite.

- **Différentes « évolutions » se préparent :**

- Introduction de matériaux nouveaux : III-V, MoS<sub>2</sub> et autres matériaux « 2D », ...
- Electronique « 3D » avec plusieurs niveaux de transistors empilés.

- **La « révolution » viendra d'un changement de paradigme :**

- Dispositifs très basse tension d'alimentation/très basse consommation : TunnelFETs ? Dispositifs « à un électron » ?
- Calcul quantique (très prospectif !!).

# Remerciements

Ce travail a reçu le soutien de :



## TB\_Sim devs :

- François Triozon (LETI)
- Christophe Delerue (CNRS)
- Ivan Duchemin (INAC)

## Doctorants :

- Aurélien Lherbier
- Dulce Camacho

## Postdoctorants :

- Martin Persson
- Hector Mera
- Manuel Cobian
- Viet-Hung Nguyen
- Jing Li

## Collaborateurs :

- Denis Rideau (ST)
- Marc Sanquer (INAC)
- Sylvain Barraud (LETI)
- Mikaël Cassé (LETI)
- ...