Étude théorique du transport électronique dans les nanodispositifs à boîtes quantiques semiconductrices

Vincent Talbo

▶ **To cite this version:**

Vincent Talbo. Étude théorique du transport électronique dans les nanodispositifs à boîtes quantiques semiconductrices. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2012. Français. NNT : 2012PA112409 . tel-00783430

HAL Id: tel-00783430

https://theses.hal.science/tel-00783430

Submitted on 1 Feb 2013

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.

UNIVERSITÉ PARIS SUD

Comprendre le monde, construire l'avenir®

UNIVERSITE PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE : STITS
Institut d'Électronique Fondamentale

***DISCIPLINE** PHYSIQUE*

THÈSE DE DOCTORAT

soutenue le 17/12/2012

par

Vincent TALBO

Étude théorique du transport électronique dans les nanodispositifs à boîtes quantiques semiconductrices

Directeur de thèse :	Sylvie RETAILLEAU	Professeur (IEF- Université Paris-Sud)
Co-encadrant:	Philippe DOLLFUS	Directeur de Recherche (IEF - CNRS)
Composition du jury :		
Président du jury :	Francis CALMON	Professeur (INL – INSA Lyon)
Rapporteurs :	Jean-Luc AUTRAN	Professeur (IM2NP – Université Aix-Marseille)
	Luca VARANI	Professeur (IES – Université Montpellier 2)
Examinateurs :	Olivier PLUCHERY	M. de Conférence (INSP – Univ. Pierre et Marie Curie)
	Marc SANQUER	Directeur de Recherche (CEA INAC – Grenoble)

Remerciements

Je souhaite tout d'abord remercier Jean-Michel Lourtioz, Claude Chappert et André de Lustrac, qui se sont succédés à la direction de l'IEF (Institut d'Électronique Fondamentale) pour m'avoir accueilli au sein de ce laboratoire.

J'adresse ensuite mes profonds remerciements à Messieurs Jean-Luc Autran et Luca Varani pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ma thèse, et pour l'intérêt qu'ils ont manifesté à l'égard de cette étude. Ces remerciements tiennent aussi pour Messieurs Francis Calmon, président du jury, Olivier Pluchery et Marc Sanquer qui m'ont fait le plaisir d'être les examinateurs de ma thèse.

De simples remerciements ne seraient pas suffisants pour exprimer ma gratitude envers ma directrice de thèse, Madame Sylvie Retailleau, ainsi qu'à mon co-encadrant, Monsieur Philippe Dollfus, tant ils ont été déterminants dans l'élaboration de ce travail. Toujours présents pour comprendre, percer des "mystères", ouvrir de nouvelles perspectives de réflexion sans pour autant les imposer. Ce duo très complémentaire a également su me rassurer et me motiver. Il constitue sans nul doute l'environnement idéal pour l'épanouissement et l'émancipation d'un doctorant vers sa vie de chercheur. Chacun d'entre eux est un exemple à mes yeux, tant professionnellement qu'humainement.

Sylvie, malgré ses multiples responsabilités, a toujours été présente pour faire le point sur mon travail avec une grande réactivité. Son enthousiasme sans faille, ses encouragements, ont été d'un grand soutien. Son immense sens de la pédagogie et sa capacité à prendre du recul sur mon travail ont été un atout durant ces trois ans. Ses questions justes et précises m'ont permis d'aborder les problèmes sous un angle nouveau, et ainsi d'éclaircir mes raisonnements.

Philippe, en tant que responsable de l'équipe COMICS (ex-CMO) a tout d'abord été celui qui a rendu possible la réalisation de cette thèse dans l'équipe. Son calme, sa gentillesse et sa bonne humeur sont toujours au rendez-vous. Il incarne à mes yeux l'idéal d'un chef d'équipe grâce à son expertise scientifique, son écoute et son application à comprendre au plus profond des choses, quitte à s'y attarder de longues semaines. Son grand sens du pragmatisme permet de se recentrer vers ses objectifs, et ce sans qu'il ne hausse jamais la voix.

Au cours de cette thèse, j'ai également pu profiter de l'aide et des compétences de Jérôme Saint-Martin et Damien Querlioz. Leur esprit scientifique, leurs questions et leurs connaissances m'ont toujours permis d'approfondir les sujets traités, dans une excellente ambiance. Les discussions ne se sont jamais limitées à la science, au contraire, elles se sont étendues à d'autres sujets, des plus légers aux plus sérieux, le plus souvent avec le sourire ! Je les remercie donc pour tout cela.

Ces compliments et remerciements s'étendent à tous les permanents de l'équipe COMICS, tant mon séjour parmi eux a été des plus agréables. À Christophe Chassat tout d'abord, pour son aide infinie en informatique, mais aussi pour sa bonne humeur ! Il serait également prêt à réparer votre voiture, selon un collègue italien... Puis à Arnaud Bournel, dont les veillées nocturnes au laboratoire m'ont permis de discuter avec lui, puisqu'il n'y avait pas de réunion à ce moment-là...

Je tiens à remercier Audrey Valentin pour sa précieuse aide lors du lancement de cette thèse. Elle m'a permis de m'intégrer dans les meilleures conditions et de prendre en main, le plus rapidement possible, le programme de simulation, avec une grande gentillesse et une grande disponibilité.

Mes remerciements les plus sympathiques vont à Fulvio Mazzamuto, car au delà de son soutien professionnel et de ses qualités scientifique et informatique, il a, pour reprendre son expression, "rajouté du sel" à ma vie de doctorant, tant au laboratoire qu'à l'extérieur. Ces bons moments au bureau 113 ont été partagés, entre autres, par les doctorants (et maintenant docteurs) vietnamiens. Je remercie donc Thu Trang Nghiem qui a su apporter du sourire et de la vie au bureau, et Viet Hung Nguyen, qui malgré sa discrétion et sa dévotion au travail de recherche, a contribué à la bonne ambiance du bureau. Ce fut

également un plaisir d'encadrer Li Dongzhe lors de son master 1, et de le retrouver l'année suivante.

Parmi les collègues de "l'autre bureau", je remercie sincèrement Yann Apertet pour son aide précieuse, pour les multiples discussions que nous avons eues pour la beauté de la science, son sens de la pédagogie, et tout le reste. Je remercie également Salim Berrada, qui a survécu à mes blagues, et Ming Shi, pour sa gentillesse infinie. Cette dernière remarque vaut aussi pour Huu Nha Nguyen. Je souhaite beaucoup de réussite à Jérôme Larroque dans sa thèse.

La liste serait trop longue mais je tiens à remercier tous mes collègues doctorants de l'IEF, que j'ai eu l'honneur de représenter pendant une année, ainsi que certains permanents de l'IEF. Je pense notamment à Sylvie Durand pour son aide précieuse lors de la préparation de la conférence JNRDM.

Les meilleurs pour la fin, j'adresse des remerciements tout particuliers à mes amis, dont certains rencontrés lors de cette thèse, et surtout à ma famille, pour son soutien très important. Je remercie donc avec tout mon coeur ma maman, ma grand-mère, mon oncle et sa compagne pour avoir toujours été présents et pour m'avoir encouragé du début à la fin. Je rends finalement un hommage à mon grand-père, décédé au début de cette thèse, qui s'est toujours intéressé et m'a soutenu pendant toute ma scolarité. Ce manuscrit lui est dédié.

Table des matières

1 Contexte de l'étude **11**

1.1 La boîte quantique, acteur majeur de la recherche actuelle 11

1.2 Le confinement 0D en nanoélectronique : blocage de Coulomb 14

1.2.1 Principe du blocage de Coulomb 14

1.2.2 Mémoires flash et blocage de Coulomb 17

1.3 Le transistor à un électron (SET), dispositif élémentaire du blocage de Coulomb 20

1.3.1 Principe de fonctionnement d'un SET 21

1.3.2 État de l'art et applications du SET 23

1.4 Thermoélectricité et boîtes quantiques 27

1.4.1 Principe de la thermoélectricité 27

1.4.2 Conduction thermique, niveaux discrets et problème des phonons . . 30

1.5 Le bruit en nanoélectronique 31

1.6 Proposition de thèse 35

2 Le simulateur SENS (Single-Electron Nanostructure Simulation) pour les double-jonctions tunnel (DTJ) et les transistors à un électron (SET) 37

2.1 Introduction 37

2.2 Modèle à niveaux d'énergies discrets 39

2.2.1 Structure électronique des îlots Silicium 39

2.2.2 Fréquences de transfert tunnel 43
2.2.3 Courant électrique et courant de chaleur 48
2.3 Extension du modèle aux niveaux d'énergie élargis 53
2.3.1 Fonction spectrale 54
2.3.2 Taux de transferts tunnel 56
2.3.3 Courants électrique et de chaleur 56
2.4 Validité du modèle 58
2.4.1 Choix du potentiel à mi-barrière $\boldsymbol{V_{0_L}}$ 59
2.4.2 Equation maîtresse ou Monte-Carlo ? 60
2.4.3 Courants de chaleur sur niveaux discrets 61
2.4.4 Effet de l'élargissement sur le courant à $\boldsymbol{\Delta T = 0}$ 63
2.5 Conclusion 63

3 Étude du courant dans un SET **65**

3.1 De la fonction d'onde au courant 66
3.1.1 Des potentiels chimiques aux pics de courant 67
3.1.2 À propos de la hauteur des oscillations 68
3.1.3 Lecture approfondie des taux de transfert tunnel 69
3.1.4 Des fonctions d'onde dans l'îlot blotties dans l'îlot 70
3.2 Influence des paramètres géométriques et de la température 72
3.2.1 Influence de la taille et de la forme de l'îlot - Surface effective en regard de l'électrode grille 73
3.2.2 Influence des épaisseurs d'oxyde - États libres et occupés dans l'îlot . 75
3.2.3 Influence de la température 80
3.2.4 Conclusion 80

4 Application du SET à la thermoélectricité **83**

4.1 Conductance électronique, coefficient Seebeck et facteur de puissance 86
4.1.1 Determination de la conductance électronique et du coefficient Seebeck 86
4.1.2 Facteur de puissance 89
4.1.3 Le SET comme étalon thermoélectrique 91
4.1.4 Limite à l'approximation de l'élargissement des niveaux 92
4.2 Conductance thermique, figure de mérite et rendement 95
4.2.1 De grandes figures de mérite dans des îlots de petits élargissements . 96
4.2.2 Le difficile compromis entre puissance et rendement 97
4.2.3 La mauvaise influence des phonons 99
4.3 Conclusion 100

5 Bruit de grenaille dans les dispositifs à un électron 103

5.1 Introduction 103
5.2 Courant et bruit dans une Double Jonction Tunnel 105
5.3 Bruit sous-Poissonien dans les processus à deux états 109
5.3.1 Cas minimum de sous-Poissonien $\Gamma_{\rm in}(0) = \Gamma_{\rm out}(1) = \Gamma$ ($F = 0,5$) . . 109
5.3.2 Cas Poissonien $\Gamma_{\rm out}(1) \gg \Gamma_{\rm in}(0)$ (ou l'inverse, $F = 1$) 111
5.4 Apparition de bruit super-Poissonien dans les processus à trois états 112
5.4.1 1er cas : $\mathbf{\Gamma_{in}(0) = 10^7 s^{-1}}$, $\mathbf{\Gamma_{in}(1) = 10^8\ s^{-1}}$ et $\mathbf{\Gamma_{out}(2) = 10^9\ s^{-1}}$, $\mathbf{\Gamma_{out}(1)}$ variable 116
5.4.2 2e cas : $\mathbf{\Gamma_{in}(0) = 10^7 s^{-1}}$, $\mathbf{\Gamma_{out}(1) = 10^7\ s^{-1}}$ et $\mathbf{\Gamma_{out}(2) = 10^8\ s^{-1}}$, $\mathbf{\Gamma_{in}(1)}$ variable 118
5.4.3 3e cas : $\mathbf{\Gamma_{in}(0) = 10^8 s^{-1}}$, $\mathbf{\Gamma_{in}(1) = 10^9\ s^{-1}}$ et $\mathbf{\Gamma_{out}(1) = 10^9\ s^{-1}}$, $\mathbf{\Gamma_{out}(2)}$ variable 119
5.4.4 Cas du dispositif d'étude à trois états 121
5.4.5 Conclusion 122
5.5 Bruit de grenaille pour différentes géométries et SET 123

5.5.1 Influence de la géométrie de l'îlot 123
5.5.2 Influence de l'épaisseur des barrières 124
5.5.3 Bruit de grenaille dans un SET 127
5.6 Conclusion 127

Conclusion générale **129**

Annexes **137**

A Fonctions d'onde dans les électrodes métalliques dans l'approximation WKB **137**

A.1 Electrode source 137
A.2 Électrode drain 141

Bibliographie **143**

Publications et Activités récentes **160**

Chapitre 1

Contexte de l'étude

1.1 La boîte quantique, acteur majeur de la recherche actuelle

Une boîte quantique, appelée parfois îlot, ou point quantique (quantum dot en anglais) est un système (métallique ou semi-conducteur) dans lequel les particules (électrons, trous, excitons) sont confinés dans les trois directions et dont, typiquement, les dimensions sont de l'ordre du nanomètre. En termes d'ordre de grandeur, une boîte quantique est à une orange, ce qu'une orange est... à la Terre !

Les boîtes quantiques semiconductrices, souvent composées de nanocristaux, se caractérisent principalement par la discrétisation des niveaux d'énergies occupés par les porteurs, qui les rapproche de la structure électronique des atomes - c'est pour cette raison qu'ils

FIGURE 1.1 – Photoluminescence de solutions colloïdales de nanocristaux CdSe/ZnS de plusieurs tailles. Les particules les plus petites (1,7 nm) émettent dans le bleu, les plus grandes (5 nm) dans le rouge [Talapin 10].

sont également appelés atomes artificiels [Kastner 93] - et par une augmentation du gap entre la bande de conduction et la bande de valence avec la diminution de la taille de la particule, amenant un décalage de la fluorescence des boîtes vers le bleu, comme on peut l'observer sur la FIGURE 1.1.

Les premiers nanocristaux sont apparus il y a un peu plus de 20 ans, notamment dans les travaux d'Ekimov sur des matrices de verre [Ekimov 81] et Brus dans des solutions colloïdales [1] [Brus 83].

Les propriétés remarquables des nanocristaux sont si vastes et les domaines d'applications si nombreux que le marché des boîtes quantiques est en pleine expansion. En témoigne cette étude de marché faite en Février 2011 par la BCC Research (FIGURE 1.2) qui prévoit pour 2015, une présence des boîtes quantiques dans pas moins de six secteurs industriels, tandis que seul le marché du biomédical était concerné en 2009 [2].

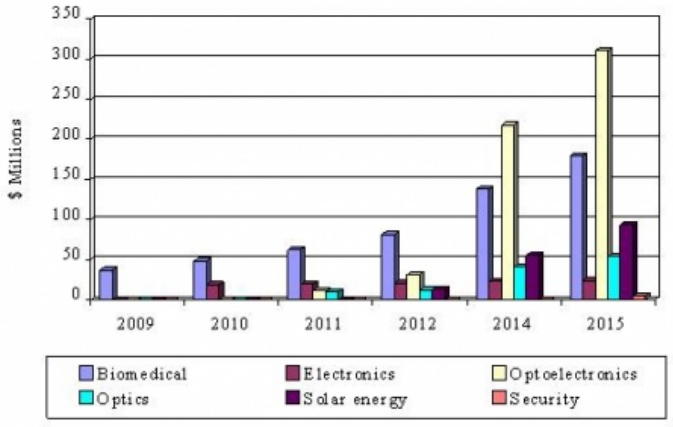


FIGURE 1.2 – Chiffres d'affaires prévisionnels liés à la commercialisation de produits basés sur des nanocristaux dans différents secteurs. Source : BCC Research.

Les applications, actuelles ou potentielles des boîtes quantiques sont donc nombreuses [3] [Talapin 10], et voici les plus importantes :

1. Une vidéo de ce dernier expliquant sa découverte est disponible ici : `http://www.youtube.com/watch?v=2aqDScoXOwA`
2. Étude disponible à l'adresse `http://www.bccresearch.com/report/quantum-dots-market-prospects-nan027c.html`
3. Voir un éditorial d'un numéro de Nature Nanotechnology en 2010 *The many aspects of quantum dots* : `http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2010.127`

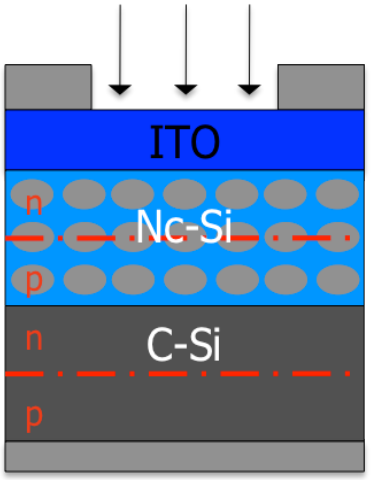


FIGURE 1.3 – Schéma d'une cellule photovoltaïque "tandem" à base silicium. L'intérêt des deux jonctions p-n est la limitation des pertes par thermalisation, bien qu'elles limitent la conductance électrique.

- En biomédical, les boîtes quantiques présentent de nombreux avantages comparés aux marqueurs traditionnels, en raison de leur luminescence et de leur stabilité.
- Les lasers à boîtes quantiques, profitant directement des états discrets dans les boîtes pour délivrer des raies d'émission ultra-fines. Ils sont également très stables avec la température. [Klimov 00]
- Réalisation de qubits pour le calcul quantique [Loss 98, Trauzettel 07]
- Les diodes électroluminescentes (QD-LED) permettent de créer des écrans ou ampoules délivrant une lumière plus proche de la lumière naturelle [4].
- Les cellules photovoltaïques de 3e génération à base de nanocristaux silicium (schéma en FIGURE 1.3) auraient des coûts de fabrication moindres par rapport aux cellules actuelles et offriraient des rendements plus importants, tout en profitant des propriétés optiques (gap modulable par la taille) des nanocristaux [Paquez 10].

Le domaine qui nous intéresse particulièrement dans cette thèse est celui de l'électronique. Si l'industrie électronique semble stagner selon cette étude, c'est parce qu'elle n'utilise aujourd'hui - à notre connaissance - les boîtes quantiques que pour des applications mémoires. Mais la recherche sur l'électronique à un électron, tirant profit du phénomène de

4. voir un article de 2010 dans The Economist *A quantum leap for lighting* : `http://www.economist.com/node/15582161`

blocage de Coulomb émerge, et de nouvelles applications de ces dispositifs sont à l'étude. Le blocage de Coulomb est une conséquence de la forte interaction électron-électron régnant au sein d'une boîte quantique.

1.2 Le confinement 0D en nanoélectronique : blocage de Coulomb

La structure élémentaire exploitant le blocage de Coulomb, et à partir de laquelle nous exposons ce phénomène est la double-jonction tunnel (DTJ), présentée en FIGURE 1.4. Elle se compose de deux électrodes métalliques, source et drain, séparées d'une boîte quantique, métallique ou semi-conductrice, par des barrières d'oxyde tunnel. Ce système se comporte alors comme une capacité quantique, dont l'énergie de charge, c'est-à-dire l'énergie électrostatique apportée par un électron supplémentaire dans l'îlot, est e/C_Σ, où C_Σ est la capacité équivalente du système. Cette capacité est très faible au vu des dimensions du système, donc l'énergie de charge peut être significative par rapport aux énergies mises en jeu pour pouvoir l'exploiter.

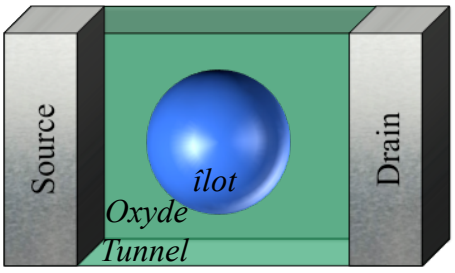


FIGURE 1.4 – Schéma d'une double-jonction tunnel.

1.2.1 Principe du blocage de Coulomb

Considérons tout d'abord le cas d'un îlot métallique, dans lequel nous pouvons négliger les effets de confinement, dans une structure symétrique, c'est-à-dire que d'un point de vue capacitif, la capacité source-îlot C_S et la capacité drain-îlot C_D sont les mêmes et égales à C, d'où $C_\Sigma = 2C$.

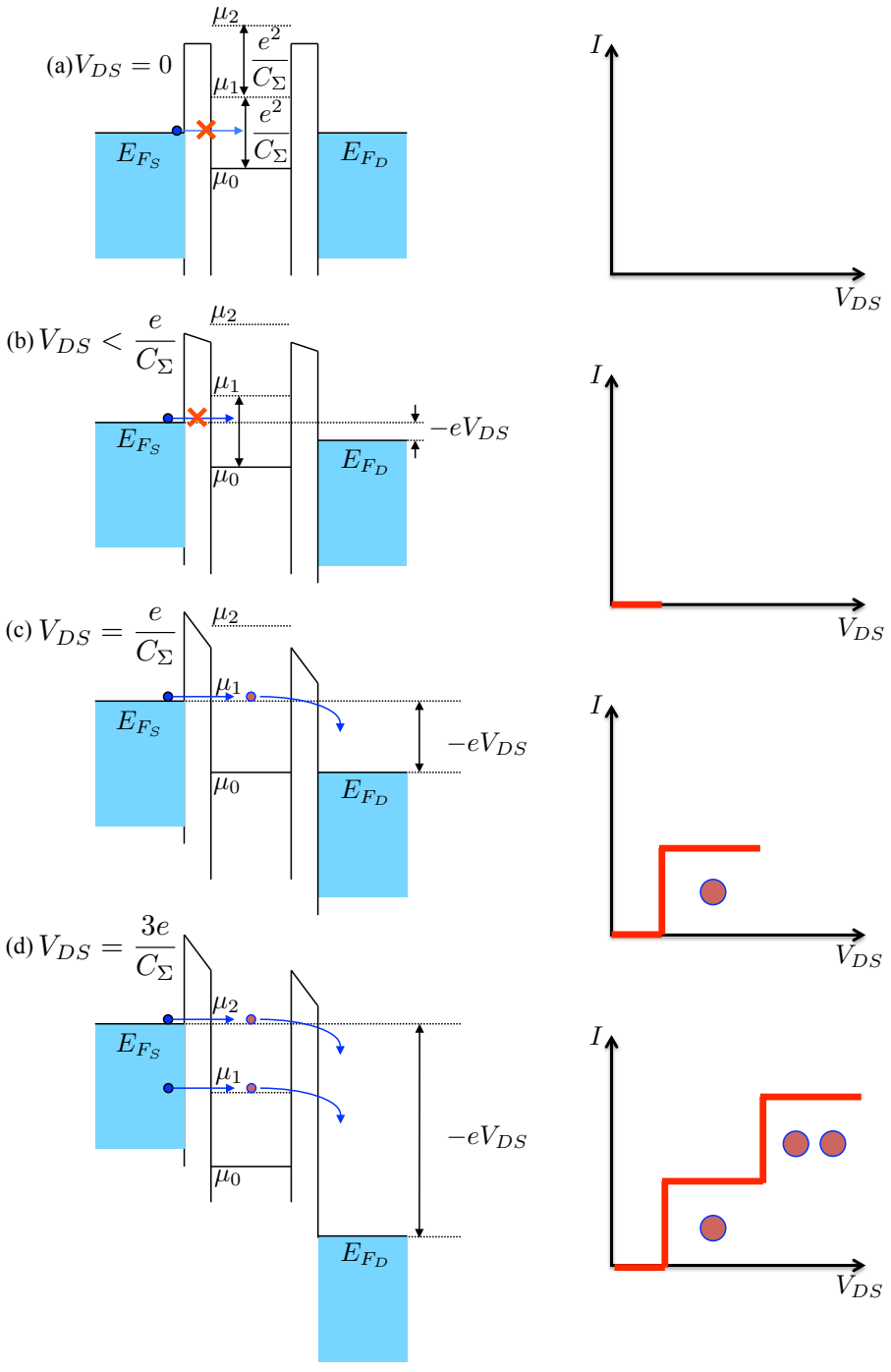


FIGURE 1.5 – Évolution du diagramme en bandes et du courant en fonction de la tension au bornes de la double jonction tunnel.(a) et (b) : régime de blocage de Coulomb ; (c) premier palier de Coulomb, les électrons passent un par un ; (d) deuxième palier de Coulomb, deux électrons peuvent passer dans la structure.

L'évolution du diagramme en bandes d'énergie du système et du courant avec la tension de drain V_{DS} est donnée en FIGURE 1.5.

Le niveau μ_0 correspond au niveau de Fermi dans l'îlot, et est situé, à $V_{DS} = 0$, à une énergie $e^2/2C_\Sigma$ par rapport au niveau de Fermi des électrodes E_{F_L}. μ_1 représente le niveau de Fermi dans l'îlot, en présence d'un électron supplémentaire, et est donc séparé de μ_0 par l'énergie de charge e^2/C_Σ. Ainsi, si la tension appliquée n'est pas suffisante pour vaincre cette énergie de charge, aucun électron ne transite dans la barrière source : nous sommes en régime de blocage de Coulomb (FIGURE 1.5a et b). Lorsque la tension devient suffisante ($V_{DS} = e/C_\Sigma$), le niveau de Fermi de la source et le niveau μ_1 deviennent alignés, un électron peut occuper le niveau dans l'îlot, et traverser la jonction drain (car $\mu_1 > E_{F_D}$), il y a apparition du premier palier de Coulomb (FIGURE 1.5c). Le niveau μ_2 étant à une énergie e^2/C_Σ plus haute que μ_1, un deuxième électron supplémentaire ne peut pas entrer dans l'îlot, il faut donc atteindre $V_{DS} = 3e/C_\Sigma$ pour voir le deuxième palier de Coulomb : la caractéristique courant-tension est en escalier (FIGURE 1.5d).

Dans le cas d'un îlot métallique, l'écart entre paliers consécutifs est constant, puisque l'entrée d'un nouvel électron nécessite toujours de fournir une énergie supplémentaire e^2/C_Σ. Dans le cas d'un îlot semi-conducteur, comme l'îlot Silicium qui sera étudié tout au long de cette thèse, il faut également considérer les niveaux quantifiés dans la boîte, ce qui complique quelque peu la description du système, même si le principe reste le même.

Influence de la température La distribution des électrons dans les électrodes présentée FIGURE 1.5 est réaliste à une température $T = 0$ K (Tous les électrons sont en dessous du niveau de Fermi). Dans le cas d'une température non nulle, la distribution électronique est déterminée par la statistique de Fermi-Dirac. Un électron peut donc quand même passer la barrière si $\mu_1 > E_{F_S}$, ce qui a donc pour effet de "lisser" la caractéristique en escalier, voir FIGURE 1.6. Une température trop haute peut donc aller jusqu'à supprimer le phénomène de blocage de Coulomb, si l'énergie thermique k_BT est supérieure à l'énergie de charge e^2/C_Σ. La dimension de la boîte quantique est donc une contrainte cruciale : à $T = 300$ K, la capacité doit être inférieure à $e^2/k_BT \simeq 5$ aF, et en considérant un condensateur plan

d'épaisseur $h = 2$ nm, on a $C = \varepsilon_0 S/h$ avec S la surface de la boîte, on obtient que la dimension d'une boîte doit être très inférieure à 10 nm.

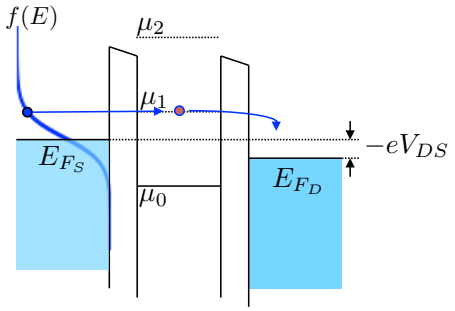


FIGURE 1.6 – Effet de la température sur le blocage de Coulomb : la distribution de Fermi à $T \neq 0$ K permet le passage d'un électron même lorsque le niveau de Fermi de la source est en dessous de celui de la boîte quantique.

1.2.2 Mémoires flash et blocage de Coulomb

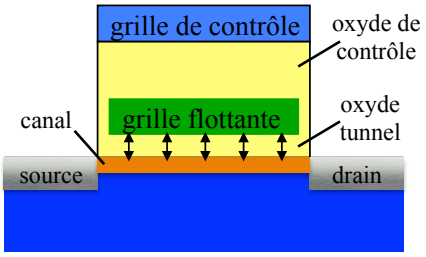


FIGURE 1.7 – Schéma d'une mémoire flash classique. Les doubles flèches indiquent les opérations d'écriture et d'effacement, qui se font via l'oxyde tunnel.

Mémoire flash classique La structure classique d'une mémoire flash est présentée en FIGURE 1.7. Il s'agit d'un transistor MOSFET dont l'oxyde de grille comporte une grille flottante. L'information est stockée sur la grille flottante, qui agit sur la tension de seuil du transistor. Elle est lue en appliquant une tension entre la source et le drain, et c'est la valeur du courant obtenu qui donne l'information sur l'état de charge de la mémoire. Les trois opérations d'une mémoire flash sont donc la lecture (que l'on vient d'expliquer), ainsi que l'écriture et l'effacement. Le principe de l'écriture et de l'effacement est le même : on applique une tension sur la grille de contrôle (positive pour l'écriture, négative pour

l'effacement), suffisamment élevée pour permettre le transfert de charge entre le canal et la grille flottante par effet tunnel Fowler-Nodheim.

Aujourd'hui, la réduction des dimensions des composants, dans le but d'augmenter la densité d'intégration, soumet l'optimisation de l'oxyde tunnel entre la grille flottante et le canal a des conditions difficiles. C'est lui qui contrôle en effet les temps d'écriture et de rétention de la mémoire, et une réduction de son épaisseur favorise le phénomène de claquage d'oxyde. Le moindre défaut local peut provoquer une fuite de la charge de la grille flottante via ce défaut. La réduction de l'épaisseur d'oxyde tunnel entraîne donc une diminution de la durée de vie des composants ainsi que du temps de rétention de l'information.

Mémoire à grille flottante granulaire La première solution à ce problème profite de la plus simple des propriétés des nanocristaux : leur taille. Ainsi Tiwari [Tiwari 95] a proposé de remplacer la grille flottante continue par une grille flottante granulaire (FIGURE 1.8). La physique des opérations est la même, et le risque de claquage d'oxyde est tout aussi important, mais le défaut alors créé ne videra qu'un seul nanocristal, et le temps de rétention de l'information s'en retrouve augmenté, avec un composant qui fonctionne toujours au bout de 10^9 cycles d'écriture/effacement (FIGURE 1.8d), tandis que les mémoires

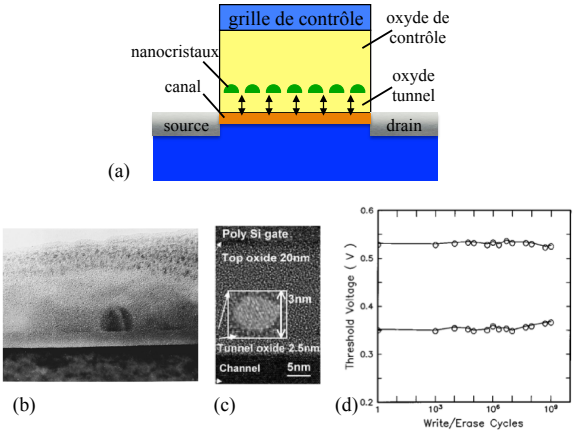


FIGURE 1.8 – (a) Schéma d'une mémoire flash à grille flottante granulaire, (b) vues MET de nanocristaux au sein de l'oxyde tunnel par (b) Tiwari [Tiwari 95] et (c) Molas [Molas 06], (d) tension de seuil en fonction du nombre du nombre de cycles écriture/effacement pour la mémoire de Tiwari.

classiques ont une durée de vie de 10^5 cycles. Freescale a lancé la production industrielle de ce type de mémoire en 2010 [5].

Mémoire à nanocristaux auto-alignés Une deuxième possibilité consiste à doubler la couche de nanocristaux. La couche "du haut" fait office de grille flottante et est chargée par la couche "du bas". Une fois chargée, la grille flottante ne peut se vider à cause de l'effet du blocage de Coulomb, même en cas de défaut dans l'oxyde tunnel. Cette structure, présentée par Ohba [Ohba 02] est représentée FIGURE 1.9. On constate en (c) que le temps de rétention dans la structure à double couche de nanocristaux est plus long que celui pour une mémoire à simple couche.

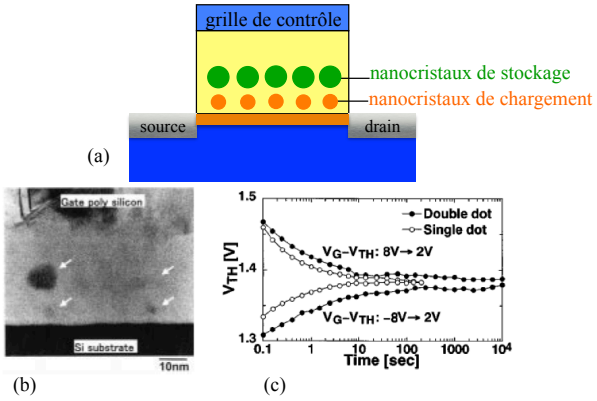


FIGURE 1.9 – (a)Schéma d'une mémoire flash à double couche de nanocristaux alignés, (b) vue MET des nanocristaux indiqués par les flèches, (c) temps de rétention de l'information pour une mémoire à simple couche et double couche de nanocristaux [Ohba 02].

Mémoire à jonctions tunnel multiples (MTJ) La dernière solution technologique apportée pour améliorer les mémoires flash est la mémoire à jonctions tunnel multiples [Deleruyelle 04] (FIGURE 1.10). Elle consiste à insérer une couche de nanocristaux non pas dans l'oxyde tunnel comme précédemment, mais dans l'oxyde de contrôle. Ainsi, la grille flottante n'est plus chargée par effet tunnel Fowler-Nordheim depuis le canal, mais par l'oxyde de contrôle, relâchant ainsi la contrainte sur l'oxyde canal-grille flottante. On peut ainsi optimiser séparément le temps d'écriture et celui de rétention. De plus, la tension

5. `http://www.electroiq.com/articles/stm/print/volume-6/issue-1/in-the-news/products/freescale-demos-24-mbit-nanocrystal-memory.html`

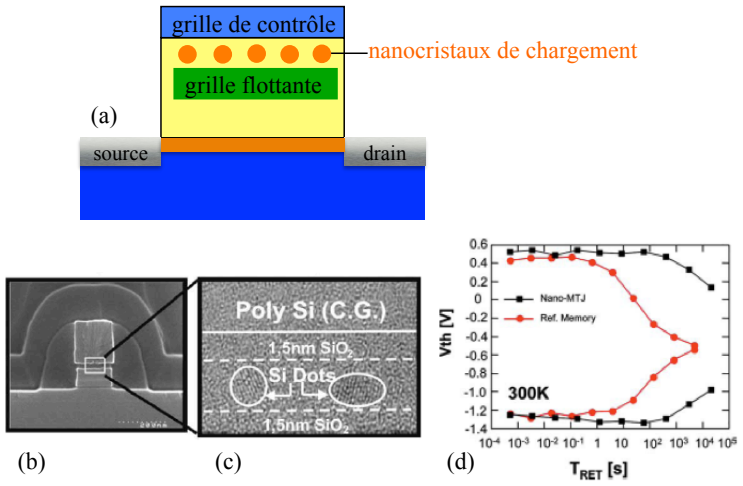


FIGURE 1.10 – (a) Schéma d'une mémoire flash à jonction tunnel multiples, (b) vue MEB du dispositif, (c).

de programmation est plus faible. Le temps de rétention est bien plus important qu'une mémoire classique, et on peut espérer des améliorations plus importantes en augmentant le nombre de couches de nanocristaux [Palun 00].

Nous voyons donc tout l'intérêt du blocage de Coulomb dans le cadre des mémoires flash. Il existe également une structure basique, basée sur l'effet transistor et le blocage de Coulomb, appelée transistor à un électron (ou SET pour Single-electron transistor) dont les caractéristiques pourraient ouvrir la voie à des applications électroniques nouvelles.

1.3 Le transistor à un électron (SET), dispositif élémentaire du blocage de Coulomb

La structure du SET, donnée en FIGURE 1.11 est très proche de la structure de la double-jonction tunnel, puisqu'il suffit d'y ajouter une grille qui, tel un transistor classique, va permettre d'en contrôler l'état (ON ou OFF). L'idée de ces dispositifs est venue de Averin et Likharev il y a 25 ans [Averin 86, Likharev 87]. Les SET offrent en principe un contrôle parfait du courant, grâce au blocage de Coulomb qui limite les fuites, et consomment peu, ils sont donc *a priori* très intéressants pour la nanoélectronique [Likharev 99, Takahashi 02]. Toutefois leurs courants très faibles, leur grande sensibilité aux charges parasites et égale-

ment la difficulté de leur réalisation technologique sont encore des freins à leur déploiement à large échelle.

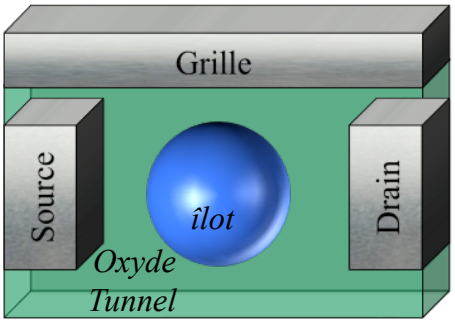


FIGURE 1.11 – Schéma d'un transistor à un électron.

1.3.1 Principe de fonctionnement d'un SET

Comme dans le cas de la double-jonction tunnel, nous nous plaçons dans le cas simple d'un îlot métallique. Le principe de fonctionnement demeure similaire à celui d'une double-jonction tunnel, et s'explique qualitativement en considérant les niveaux de Fermi des électrodes source et drain, ainsi que le niveau de Fermi dans l'îlot, comme illustré en FIGURE 1.12. L'écart énergétique entre un niveau à n électrons et un niveau à $n+1$ électrons, c'est à dire l'énergie à apporter, via la tension de grille, au système, est toujours en e^2/C_Σ.

On se place à une tension drain-source V_{DS} donnée. Tant que la tension de grille est insuffisante pour faire passer le premier électron (c'est-à-dire $\mu_1 > E_{F_S}$), l'électron ne peut pas passer ; nous sommes en régime de blocage de Coulomb. À $V_{GS} = V_{G_1}$ (FIGURE 1.12b), l'électron peut passer. Mais lorsqu'on augmente la tension de grille au delà de V_{G_2}, l'électron est "piégé" sur l'îlot car il ne peut sortir ($\mu_1 < E_{F_D}$, FIGURE 1.12c). Le courant a donc été non nul sur la plage $[V_{G_1}\ V_{G_2}]$, créant ainsi un pic sur la caractéristique courant-tension de grille. Il faut atteindre la tension $V_G = V_{G_1} + e/C_G$ pour voir l'apparition d'un nouveau pic de courant (FIGURE 1.12). L'écart de tension entre les pics est donc de e/C_G, où C_G fait office de "capacité de grille". Ces pics sur la caractéristique courant-tension de grille sont couramment appelés "Oscillations de Coulomb", et, en intégrant cette courbe pour plusieurs valeurs de tension de drain V_{DS}, nous obtenons un diagramme de stabilité du

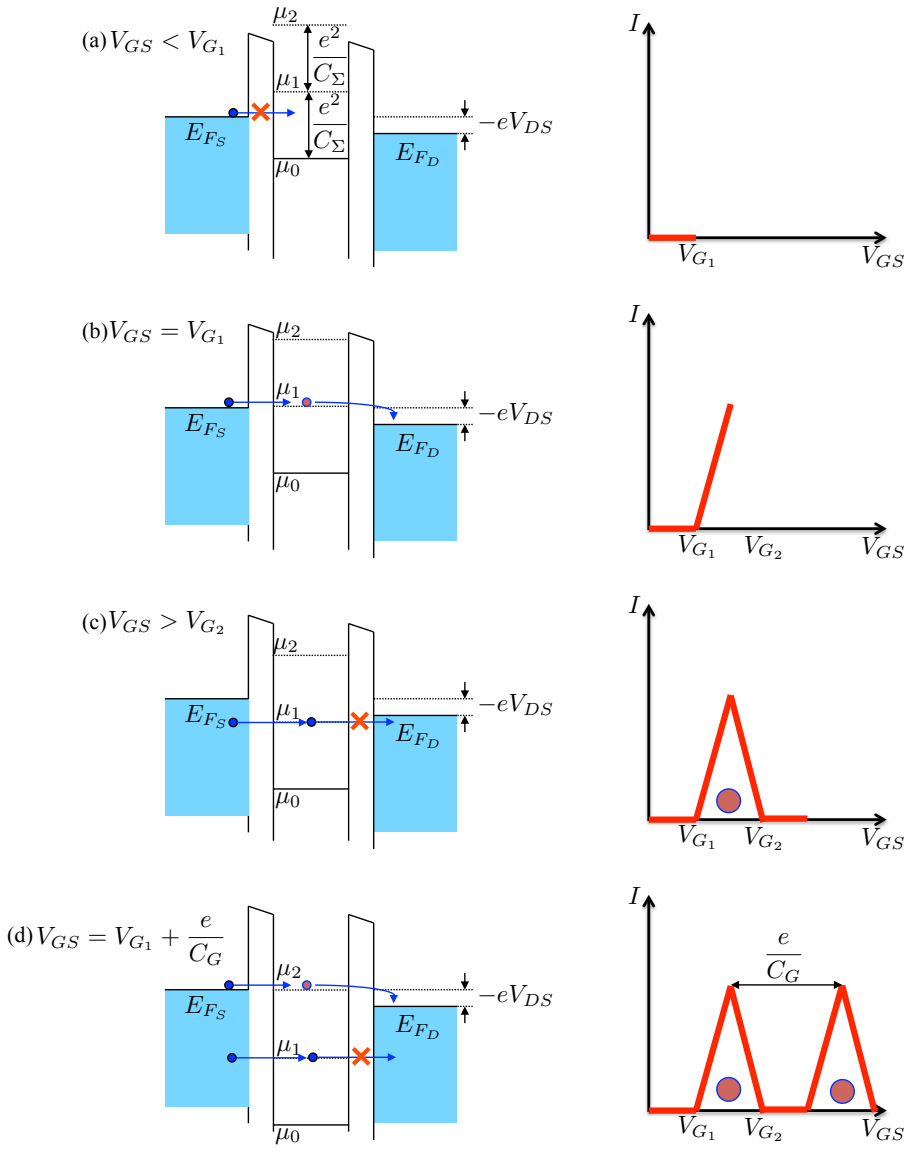


FIGURE 1.12 – Évolution du diagramme en bande et du courant en fonction de la tension de la tension de grille dans un SET.(a) régime de blocage de Coulomb, (b) $\mu_1 = E_{F_S}$, le courant peut passer, premier pic de Coulomb, (c) $\mu_1 < E_{F_D}$, le courant ne peut plus passer, le courant redevient nul, (d) $\mu_2 = E_{F_S}$,début du deuxième pic de Coulomb.

courant en diamants, où les diamants représentent les zones de blocage de Coulomb, tel que schématisé en FIGURE 1.13. Il est à noter que les électrons ne circulent qu'un par un dans ces structures, et que, comme pour la double-jonction tunnel et l'escalier de Coulomb, les oscillations de Coulomb sont fortement dégradées lorsque la température est telle que $k_B T \gtrsim e^2/C_G$.

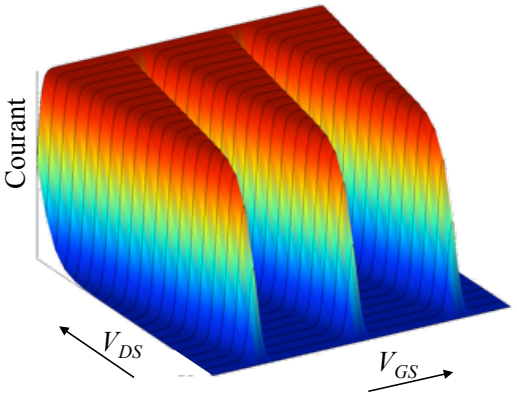


FIGURE 1.13 – Diagramme de stabilité du courant dans un SET. Les zones bleues foncées représentent les zones de courant nul, c'est-à-dire, de blocage de Coulomb.

1.3.2 État de l'art et applications du SET

Bien qu'il soit difficile technologiquement d'isoler un îlot de quelques nanomètres de diamètre - afin de conserver des oscillations à température ambiante -, la perspective d'avoir un dispositif hautement sensible, d'ultra basse consommation et dont la taille s'adapte parfaitement aux techniques d'intégration à très grande échelle (VLSI) font des SET un sujet d'étude encore très actif, aux applications potentielles diverses. Un bilan complet de l'état de l'art complet serait trop long dans cette thèse ; nous avons donc sélectionné quelques réalisations expérimentales récentes qui présentent un intérêt certain par leur fonctionnement à haute température, leur reproductibilité, leur application, ou encore leur possible intégration en technologie CMOS, c'est à dire essentiellement basé sur une technologie silicium.

SET à base de FinFET Une équipe de Chungbuk, Corée, a obtenu un SET avec un îlot silicium de 2 nm (physique) en réduisant la structure d'un FinFET par un procédé

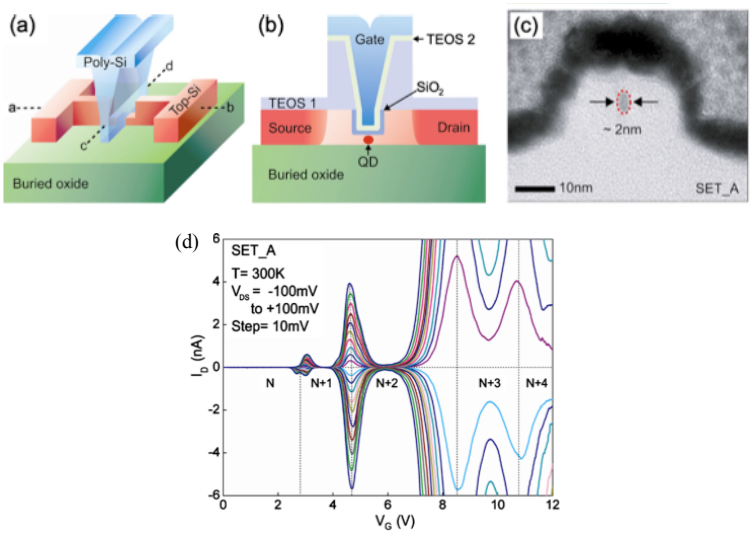


FIGURE 1.14 – (a) Schéma d'un SET basé sur la réduction d'un FinFET, (b) vue en coupe suivant le canal (a-b) et (c) courant mesuré à 300 K en fonction de la tension de grille pour des tensions de drain allant de -100 mV à 100 mV [Shin 10].

d'oxydation (FIGURE 1.14) [Shin 10]. Les caractéristiques courant-tension de drain à $T = 300$ K données en FIGURE 1.14d montrent un fonctionnement en oscillations de Coulomb (c'est-à-dire, avec passage à $I_{OFF} = 0$) pour les deux premiers pics. Cette réalisation est très intéressante car elle est très adaptée à la technologie CMOS Silicium, mais son processus d'oxydation "extrême" peut conduire à une grande variabilité sur la taille de l'îlot, et donc sur les caractéristiques courant-tension.

Une équipe de Tokyo a développé d'autres SET/SHT (pour single-hole transistors) fonctionnant à température ambiante. La méthode consiste à créer un fil ultrafin par oxydation thermique, dans lequel un îlot silicium de l'ordre de 5 nm de diamètre est intrinsèquement formé [Kobayashi 07, Lee 08, Saitoh 04]. L'inconvénient de cette méthode par rapport à celle proposée à l'université coréenne, repose sur le fait que le nombre d'îlots intrinsèquement formés n'est pas connu, ainsi que leur taille, déterminée uniquement à partir des énergies de charge.

SET traité par "nano damascène" La plus haute température de fonctionnement pour un SET a été obtenue par une équipe de l'Université de Sherbrooke au Québec, avec un blocage de Coulomb observé à 430 K dans un système Ti-TiOx [Dubuc 07] (FIGURE

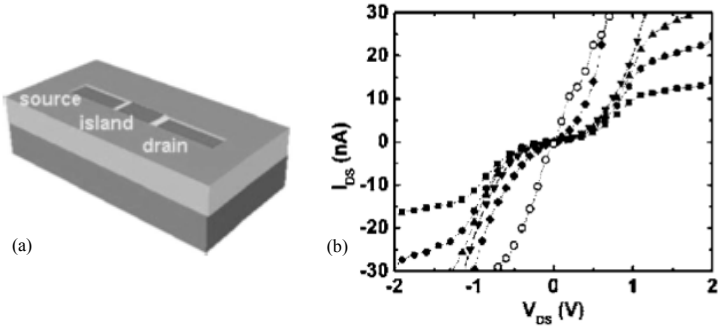


FIGURE 1.15 – (a)SET obtenu après "nano damascene" et (b) caractéristiques courant-tension de drain pour différentes températures, les diamants représentant la courbe à 433 K exhibe du blocage de Coulomb [Dubuc 07].

1.15). Le procédé repose sur une technique "nano damascene", qui permet, via un polissage du métal, de contrôler son épaisseur avec une précision de 2 nm, et de diminuer les capacités des jonctions tunnel. L'îlot titane a une dimension de (2 nm x 10 nm x 60 nm), et les jonctions tunnel font 10 nm. En outre, l'auteur indique que ce dispositif s'adapte aux procédés de fabrication de masse actuel, et que les trois premiers dispositifs obtenus par cette méthode sont fonctionnels, démontrant ainsi l'efficacité de cette technique.

SET à nanofils Des SET ont également été réalisés à partir de nanofils issus de la technologie MOS sur SOI du CEA-LETI [Hofheinz 06a, Hofheinz 06b, Hofheinz 07]. Ces

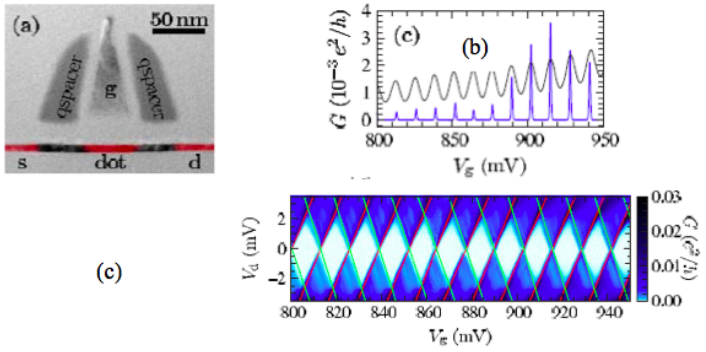


FIGURE 1.16 – (a) image TEM du dispositif, avec les espaceurs et la grille en gris foncé, la silice en gris clair et le canal en noir. (b) caractéristique courant-tension de grille à 0,4 mK (courbe bleue) et 4,2 K (courbe noire). (c) diagramme de stabilité du dispositif [Hofheinz 07].

nanofils sont fortement dopés, exceptés sous la grille et les espaceurs, placés en amont de l'implantation ionique. Les régions sous les espaceurs font donc office de barrière de potentiel (FIGURE 1.16a). Lorsqu'une tension est appliquée à la grille, la partie du canal sous la grille forme une boîte quantique. Les jonctions tunnel sont de l'ordre de 40 nm tandis que l'îlot a des dimensions de l'ordre de (30 nm x 40 nm x 17 nm). Ces dispositifs fonctionnent à basse température, et présentent des pics de conductances et des diagramme de stabilité parfaitement réguliers (FIGURE 1.16b et c). Ils sont également facilement reproductibles. Cette équipe vient de démontrer un tel fonctionnement dans des dispositifs à nanofils étroits, à température ambiante, dont les résultats seront présentés prochainement.

Opérations logiques sur SET à double grille Récemment, un groupe autour de Yutaka Majima a assemblé chimiquement un SET à double grille, capable de réaliser des opérations logiques telles que XOR ou XNOR (FIGURE 1.17) [Maeda 12]. L'îlot est une nanoparticule d'or de 9 nm déposé entre deux électrodes source et drain séparées de 10 nm, et couplé capacitivement à 2 grilles, protégées par des couches isolantes (FIGURE 1.17a). Ces couches isolantes assurent la stabilité du système. Le SET affiche un diagramme de stabilité (FIGURE 1.17b) et des oscillations de Coulomb régulières à 9 K. Pour une tension V_{DS} donnée, et selon un choix judicieux de "0" et de "1" pour les tensions de grille, le dispositif se comporte comme une porte logique OU exclusif ou NON OU exclusif (FIGURE 1.17c et d). Des ilots plus petits devraient permettre la réalisation de ces portes logiques à température ambiante.

Ces 4 exemples ne sont qu'un échantillon très restreint des réalisations expérimentales ainsi que des applications des transistors à un électron. On peut également signaler des applications en radiofréquence [Angus 07], de qubit [Elzerman 04] ou encore de détection de charge [Zhou 12]. Des SET à deux îlots ont été réalisés et simulés, exhibant un diagramme de stabilité non plus en diamants, mais en nids d'abeille [Fujiwara 06, van der Wiel 02].

Depuis quelques années, une nouvelle utilisation du SET en tant que module thermoélectrique suscite l'intérêt des chercheurs [Beenakker 92, Nakpathomkun 11]. Ce domaine ne cherche pas réellement à tirer profit du blocage de Coulomb, mais voit d'un bon oeil la discrétisation des niveaux d'énergie dans l'îlot.

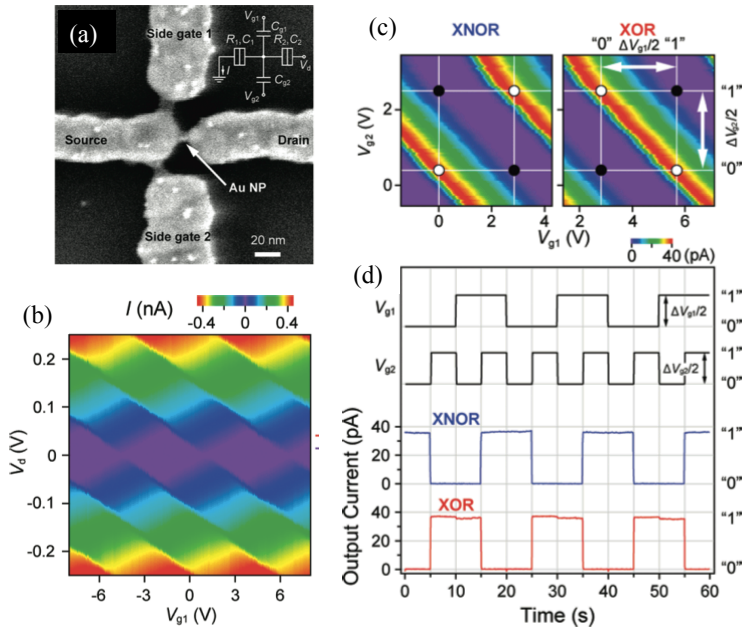


FIGURE 1.17 – (a) Vue SEM du SET, (b) diagramme de stabilité en fonction de la grille 1, (c) diagramme du courant en fonction des tensions de grille, à une tension V_{DS} donnée et (d) opérations XNOR et XOR réalisées à partir de ces courbes.

1.4 Thermoélectricité et boîtes quantiques

1.4.1 Principe de la thermoélectricité

Les effets thermoélectriques, ou la possibilité de produire de l'électricité à partir d'une différence de température (et vice-versa), ont été découverts il y a plus de deux siècles. Après des premières applications au début du XXe siècle, vite supplantées par les moteurs thermiques, ce sujet est réapparu dans les années 50, avec la nécessité d'alimenter électriquement les sondes spatiales (Voyager, lancée en 1977) et grâce aux travaux de Ioffé sur les semi-conducteurs. Mais ce n'est que depuis le milieu des années 90, avec la grande contrainte de l'échauffement dans les micro et nanodispositifs, et dans un contexte où l'impact environnemental des énergies fossiles combiné à la demande mondiale en énergie cristallisent les tensions politiques et sociales, que la thermoélectricité revêt un importance cruciale. La possibilité de récupérer et de convertir la chaleur perdue par les moteurs, usines ou logements est donc une sujet de recherche très en vue. [6]

6. Le cours de Lundstrom à Purdue propose une vision physique "simple" pour comprendre ces effets dans les nanodispositifs : `http://nanohub.org/resources/7370`

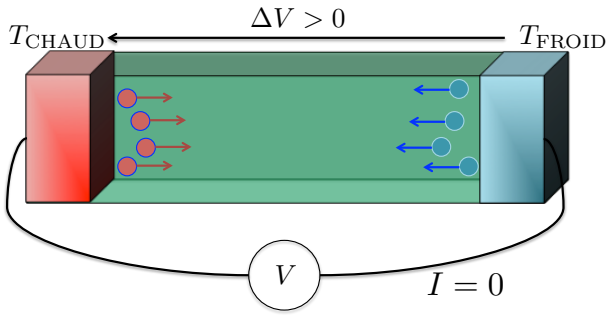


FIGURE 1.18 – Illustration de l'effet Seebeck dans un semi-conducteur de type n dont les extrémités sont à deux températures différentes. Nous sommes en circuit ouvert. Les électrons rouges représentent les électrons diffusant la chaleur de la source chaude à la source froide. Pour contrer ce courant, une différence de tension $\Delta V = V_{oc}$ se crée et les électrons bleus circulent de la source froide à la source chaude pour rétablir $I = 0$.

Le premier à observer un phénomène thermoélectrique fut Thomas Seebeck, en 1821. Il observa qu'une différence de température appliquée à travers un matériau, créait une différence de potentiel. Pour illustrer l'effet Seebeck, nous prenons l'exemple d'un semi-conducteur de type n en circuit ouvert ($I = 0$), aux extrémités duquel nous appliquons une différence de température $\Delta T = T_{\text{CHAUD}} - T_{\text{FROID}}$ (FIGURE 1.18). La différence de température implique une diffusion des électrons du réservoir chaud au réservoir froid. Or, étant donné que le courant est nul aux bornes du semi-conducteur, une différence de potentiel $\Delta V = V_{oc}$ (pour *open circuit*) dans le sens réservoir froid vers réservoir chaud se crée afin de forcer un flux d'électrons de l'électrode froide à la chaude égal à celui se déplaçant de la source chaude à la froide.

Ainsi, si sur ce même dispositif, nous appliquons une différence de potentiel positive mais inférieure à V_{oc}, celle-ci n'est pas suffisante pour contrer le courant du à la différence de température : le courant et la tension sont dans le même sens, nous sommes en système générateur. Ce type de générateur thermoélectrique est appelé moteur thermique à échange de particules (*particle-exchange heat engine*), les particules se déplaçant en pompant de l'énergie au réservoir chaud qu'elles relâchent ensuite dans le réservoir froid [Humphrey 05]. La qualité d'un dispositif thermoélectrique est traditionnellement quantifiée par la figure de mérite sans dimension ZT, donné par la relation :

$$ZT = \frac{G_e \alpha^2}{K} T \tag{1.1}$$

où G_e est la conductance électronique, α le coefficient Seebeck, et K la conductance thermique. Toute la difficulté de trouver un bon matériau pour des applications thermoélectriques se trouve dans cette formule, tant il semble difficile d'avoir un bon conducteur électrique - propriété plutôt réservée aux métaux - qui soit également un mauvais conducteur thermique, ce qui est plutôt l'apanage des isolants. La loi de Wiedemann-Franz, dans les métaux, qui énonce la relation $\kappa = LT\sigma$, où κ et σ sont les conductivités thermique et électrique, T la température, et L le nombre de Lorenz, illustre les limites pour optimiser le ZT dans les solides conventionnels, puisqu'une augmentation de la conductance électrique conduit à une augmentation comparable de la conductance thermique.

Aussi, pour être compétitifs face aux moteurs thermiques conventionnels, on estime que les dispositifs doivent atteindre un ZT autour de 2, tandis que les meilleurs dispositifs mis sur le marché ont une figure de mérite proche de l'unité [Bell 08]. Le matériau le plus courant pour des applications thermoélectriques reste le Tellurure de Bismuth(III) Bi_2Te_3, connu depuis les années 1950 [Heikes 61]. Ses alliages avec le Sb_2Te_3 ou le Bi_2Se_3, pour différentes concentrations de porteurs, permettent d'obtenir des ZT entre $0,8$ et $1,1$, à différentes températures de fonctionnement. Les matériaux basés sur des éléments du groupe IV (PbTe, GeTe et SnTe) conduisent à des ZT dans cette même gamme, pour des températures entre 500 K et 900 K. Une revue plus détaillée est proposée dans [Snyder 08].

La recherche de nouveaux matériaux pour la thermoélectricité reste donc très ouverte, et depuis 1993, se tourne vers les systèmes à faible dimension. Cette année-là, Hicks et Dresselhaus du MIT proposaient un modèle théorique prédisant une augmentation des figures de mérite dans les nanofils et puits quantiques en bismuth, comparé au bismuth massique [Hicks 93a, Hicks 93b].

Dès lors, les systèmes à faible dimensionnalité ont été étudiés pour leurs applications thermoélectriques. Un ZT de $2,4$ à température ambiante a été montré dans un réseau de couches minces thermoélectriques [Venkatasubramanian 01], un réseau de boîtes quantiques a ensuite permis d'atteindre une figure de mérite de $3,2$ à 500°C [Harman 02]. Une variation de la taille et du dopage en impuretés des nanofils silicium permet également de moduler leurs performances thermoélectriques ($ZT \simeq 1$) [Boukai 08, Hochbaum 08]. Dans notre équipe, Fulvio Mazzamuto a démontré théoriquement que la nanostructuration du graphène

permettait de réduire énormément la conductance thermique du graphène, qui possède pourtant la conductivité thermique la plus élevée des principaux matériaux utilisés en électronique, obtenant ainsi un ZT de 1 pour une nanostructuration particulière avec un très fort facteur de puissance [Mazzamuto 11a, Mazzamuto 11b].

1.4.2 Conduction thermique, niveaux discrets et problème des phonons

Lors du transfert thermique, il faut différencier deux processus de transfert d'énergie. Le premier est lié à un déplacement macroscopique de particules, et donc au courant, qu'on peut qualifier d'advection électronique, chaque électron portant une énergie αTe où α est le coefficient Seebeck, e est la charge élémentaire d'un électron (trou) et T la température moyenne du dispositif. Si le courant est nul dans un dispositif, alors le terme d'advection l'est également. Le transfert thermique peut également se faire par conduction via les électrons/trous et les phonons, de proche en proche, et peut donc exister en l'absence de courant, en cas de différence de température, et le courant thermique résultant est donné par $K\Delta T$ avec K la conductance thermique [Apertet 12]. Le courant thermique I^Q s'écrit finalement :

$$I^Q = \alpha T I + K\Delta T \tag{1.2}$$

Ainsi, le courant advectif va plutôt favoriser l'effet thermoélectrique, l'électron apportant sa chaleur d'une électrode à l'autre, tandis que le courant conductif va être considéré comme une perte d'énergie, l'électron se relaxant durant son trajet. C'est pour cette raison que la conductance thermique K apparait au dénominateur de la figure de mérite ZT (1.1).

Conductance thermique sur un niveau discret Dans le modèle semi-classique, l'énergie d'un électron est :

$$E = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*} \tag{1.3}$$

où $\hbar$ est la constante de Planck réduite, k le vecteur d'onde et m^* est la masse effective (isotrope). On sait que si une dimension du matériau suivant une direction est de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi $\lambda_F = 2\pi/k$, alors l'énergie dans cette direction est quantifiée. Ainsi, dans une boîte quantique, le matériau est confiné dans les trois dimensions, et l'énergie est quantifiée dans les trois dimensions. Ainsi, dans une boîte quantique, un

électron ne peut relaxer et perdre de l'énergie : la conductance thermique (des électrons) est nulle, la figure de mérite est largement améliorée. Les structures à boîtes quantiques ont donc un intérêt potentiel élevé pour la thermoélectricité.

Le SET, dispositif très simple utilisant une boîte quantique, est donc un candidat très sérieux en tant que dispositif thermoélectrique : si l'on considère que le transfert tunnel se fait à énergie constante, le système oxyde-îlot-oxyde a une conductance thermique due aux électrons nulle, conduisant théoriquement à des figures de mérite infinies. La conductance électronique ne doit pas être nulle, c'est pour cette raison qu'il faudra éviter les zones de blocage de Coulomb et se placer à des tensions de grille telles que $\Delta I/\Delta V_{DS}$ autour de $V_{DS} = 0$ ne soit pas nul.

Contribution des phonons Nous venons de voir que la conductance thermique due aux électrons est nulle dans un îlot quantique. Mais il ne faut pas oublier que deux sources de pertes thermiques existent : les électrons, et les phonons. La contribution de ces derniers est supérieure à celle des électrons dans le cas d'un îlot semi-conducteur (l'inverse dans le cas métallique), et ont un second effet pervers : ils augmentent certes la conductivité thermique par la vibration du réseau cristallin, mais ils interagissent également avec les électrons, permettant ainsi la relaxation en énergie de ceux-ci, et l'élargissement des niveaux d'énergie dans l'îlot.

Cet effet d'élargissement par collision, ou *collisional broadening*, fut souligné par Büttiker [Buttiker 88], et il a été démontré que son importance est cruciale dans les nanocristaux [Efros 75, Inoshita 96, Inoshita 97, Král 98, Seebeck 05, Stauber 00, Valentin 08]. La diminution des pertes de chaleur par les phonons est donc un problème majeur, qui peut être résolu en multipliant les interfaces à faibles dimensions, stratégie connue pour disperser les phonons [Harman 02, Venkatasubramanian 01].

1.5 Le bruit en nanoélectronique

En 1918, Walter Schottky [Schottky 18] a déterminé, après élimination de toutes les sources de bruit extérieures, deux sources de bruit dans les diodes à vide. La première

source, due aux mouvements des électrons induits par la température, est appelée bruit thermique, ou encore bruit de Johnson-Nyquist. Le second type de bruit est le bruit de grenaille (shot noise (SN) en anglais), conséquence directe de la discrétisation de la charge. En effet, si le courant électrique est bien la conséquence d'un flux d'électron, deux électrons ne passent pas dans une jonction dans des intervalles de temps réguliers. Tel un passage de voitures sur une autoroute ou la désintégration de noyaux radioactifs, le passage des électrons entre deux électrodes dans une diode à vide suit une loi de Poisson (du nom de Siméon Denis Poisson, 1781–1840).

L'entrée de l'électronique dans le monde mésoscopique, où seuls quelques électrons sont impliqués, ont fait du bruit de grenaille une thématique importante au cours des deux dernières décennies, et on peut retrouver d'exhaustifs tours d'horizons des travaux effectués dans [de Jong 97, Blanter 00, Blanter 05].

En particulier, l'analyse du SN fournit des informations sur les régimes de transport, complémentaires aux caractéristiques courant-tension observées jusqu'à présent, le courant étant une caractéristique électronique du premier ordre, le bruit du deuxième.

Le SN est traditionnellement caractérisé dans les nanodispositifs par la densité spectrale des fluctuations de courant à une fréquence ω, $S(\omega)$, comparée à la densité spectrale d'un système aux événements non corrélés (typiquement, la diode à vide), c'est à dire un processus de Poisson, où $S(\omega) = 2e < I >$, avec e la charge élémentaire d'un électron (en valeur absolue) et $< I >$ le courant moyen parcourant le dispositif. L'augmentation ou la diminution du bruit de grenaille à fréquence nulle $S(0)$ sont quantifiées par le facteur de Fano, $F = S(0)/2e < I >$. Ainsi, si $F = 1$, le transport est Poissonnien, si $F < 1$, le transport est sous-Poissonien, et si $F > 1$, super-Poissonien. Une autre manière – équivalente – d'obtenir le facteur de Fano est de comparer la variance et le nombre moyen d'électrons N passant dans le dispositif pendant un temps donné, assez long pour considérer une fréquence nulle. Le facteur de Fano est alors donné par : $F = \mathrm{var}(N)/ < N >$. Cette donnée est également connue en probabilité et en statistique sous le terme «indice de dispersion».

De nombreux travaux ont été consacrés aux calculs de bruit de grenaille dans les RTD, fonctionnant en régime cohérent ou séquentiel. Une diminution du bruit est couramment observée à la tension de résonance. Du bruit Super-poissonien a été mis en

évidence dans le régime de conductance différentielle négative (NDC), à la fois expérimentalement [Kuznetsov 98, Safonov 03, Nauen 04] et théoriquement [Aleshkin 06, Do 06, Oriols 04, Song 03]. La règle d'exclusion de Pauli, l'interaction de Coulomb (pour le bruit sous-Poissonien) et l'accumulation de charge (à l'origine à la fois du bruit sous et super-

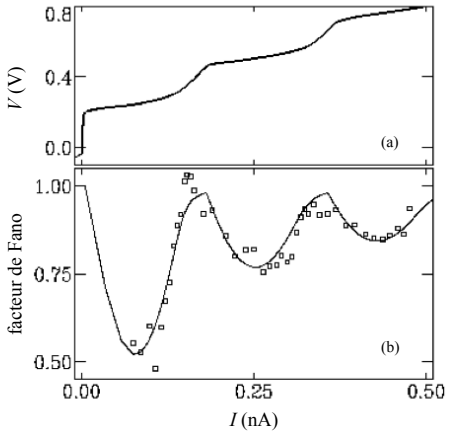


FIGURE 1.19 – (a) Tension de drain et (b) facteur de Fano en fonction du courant dans une double-jonction tunnel. Les carrés représentent les valeurs expérimentales obtenues par Birk [Birk 95], en trait continu, par la théorie de Hershfield [Hershfield 93].

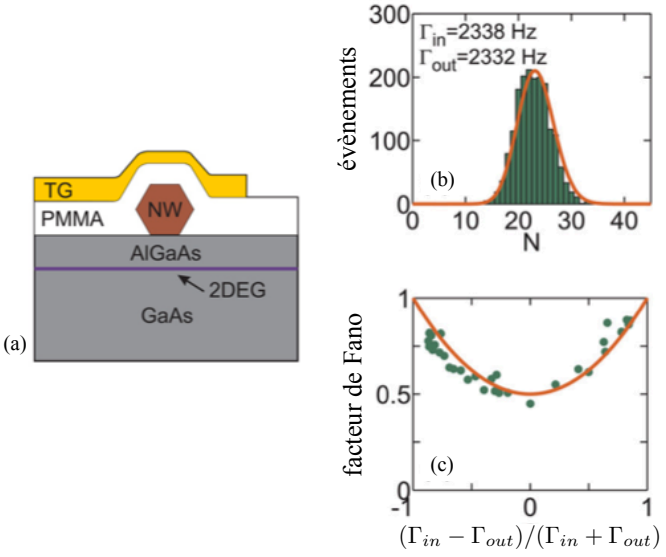


FIGURE 1.20 – (a) Schéma d'une vue en coupe du dispositif à un électron à boîte quantique formée dans un nanofil concu par Choi, (b) distribution statistique du nombre d'électrons passés dans le dispositif pour des taux de transfert données et (c) facteur de Fano pour différentes asymétries de taux de transfert tunnel. Les traits continus correspondent aux valeurs théoriques [Hershfield 93].

Poissonnien) sont généralement invoqués pour expliquer ces comportements, sans plus d'explications.

Le cas des systèmes de blocage de Coulomb, pour lesquels la granularité des électrons est le cœur du fonctionnement, est encore plus intéressant. Dans le cas des boîtes quantiques couplées à des électrodes par des jonctions tunnel, Hershfield *et al.* [Hershfield 93] ont prédit que si la caractéristique $I - V$ présente des escaliers de Coulomb bien définis, le bruit de grenaille pouvait diminuer et atteindre une valeur limite $F_{\min} = 0,5$ lorsqu'il y a symétrie entre taux d'entrée Γ_{in} et taux de sortie Γ_{out} par transfert tunnel. Cela fut également observé expérimentalement par Birk (FIGURE 1.19) [Birk 95], et Choi (FIGURE 1.20) [Choi 12].

Du bruit super-Poissonien a également été démontré théoriquement par Gattobigio et al. [Gattobigio 02] et V. Hung Nguyen [Nguyen 05, Nguyen 06] dans des systèmes métalliques à boîtes quantiques couplées par des capacités (voir FIGURE 1.21). Il a également été observé expérimentalement dans des îlots semi-conducteurs, en sondant pour des grandes tensions les niveaux excités à temps de relaxation lent [Gustavsson 06b]. Le bruit a été formulé théoriquement pour le cas général de nano-objets asymétriques couplés à des électrodes donnant naissance à des régimes de NDC [Thielmann 05].

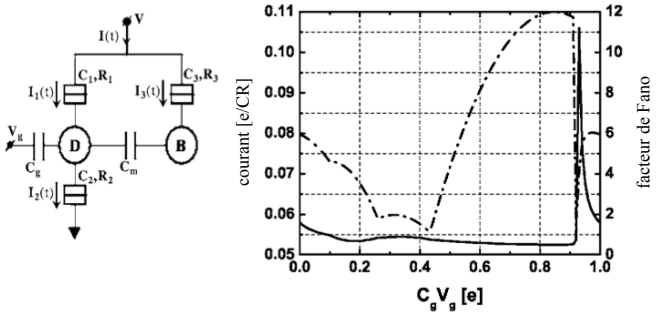


FIGURE 1.21 – (a) Schéma électrique du dispositif à double boîtes couplées capacitivement simulé par V.H. Nguyen et (b) courant et facteur de Fano en fonction de la tension de grille. Du bruit super-Poissonien ($F = 11$) apparait dans la zone de résistance différentielle négative.

1.6 Proposition de thèse

Ce travail de thèse a pour objectif d'étudier le transport électronique dans les dispositifs à nanocristaux silicium. L'étude porte en grande partie sur une compréhension physique avancée des phénomènes liés au transport à un électron, en particulier le courant et le bruit de grenaille, mais elle discute également de la pertinence de l'application du SET à la thermoélectricité, puisque les nanocristaux semblent être de bons candidats pour obtenir des figures de mérite ZT importantes.

Pour ce faire, j'ai mis en oeuvre une extension du simulateur SENS (pour Single-Electron Nanostructures) développé dans l'équipe pour l'étude du courant dans les double-jonction tunnel [Sée 03] puis des modes de phonons dans les nanocristaux avec l'objectif de déterminer le courant dans les dispositifs à deux îlots [Valentin 08], afin de calculer les courants électroniques et thermiques dans les SET, ainsi que le bruit de grenaille dans les dispositifs étudiés. Ce simulateur 3D repose sur la résolution des équations couplées de Poisson-Schrödinger, donnant accès aux fonctions d'onde et énergies électroniques en fonction des tensions de drain et de grille. Ces fonctions d'onde et énergies sont ensuite utilisées pour calculer les taux de transfert tunnel dans le cadre de la règle d'or de Fermi. Ces taux de transfert tunnel permettent ensuite de calculer à la fois le courant électronique, le courant thermique (des électrons) ainsi que le bruit de grenaille. L'élargissement des niveaux par interaction électron-phonon a également été intégré aux calculs en considérant des élargissements Lorentziens.

Ce mémoire s'articule autour de cinq chapitres. Dans le premier chapitre introductif, nous avons fait un petit tour d'horizon des propriétés des boîtes quantiques et des applications existantes ou potentielles qui en découlent, avant de nous concentrer sur le blocage de Coulomb, conséquence de la forte interaction électron-électron régnant au sein de l'îlot. Après avoir étudié le principe du blocage de Coulomb dans une structure appelée double-jonction tunnel, nous avons discuté succinctement comment ce phénomène permettait d'augmenter la durée de vie des mémoires flash. Nous avons ensuite décrit le fonctionnement d'un SET, dispositif basique reposant sur le blocage de Coulomb, et fait un court état de l'art sur les SET expérimentaux actuels et leurs utilisations. La thermo-

électricité, que nous avons introduite, est l'un des domaines particulièrement intéressants pour le SET, pour sa structure électronique discrète, supprimant les pertes thermiques par les électrons. Enfin, nous nous sommes penchés sur le bruit de grenaille, conséquence de la granularité de la charge, de plus en plus mise en évidence dans les nanodispositifs, et qui plus est au coeur même du principe de fonctionnement des dispositifs à un électron. Cette problématique est très étudiée en physique mésoscopique.

Le travail effectué durant cette thèse est développé dans les quatre chapitres suivants :

- Le deuxième chapitre détaille les caractéristiques du simulateur SENS, et précise notamment les modifications apportées pour l'étude du SET, ainsi que les méthodes développées pour calculer les courants électroniques et de chaleur dans ces dispositifs, dans le cas d'îlots à niveaux discrets et dans celui d'îlots à niveaux élargis par *collisional broadening*.
- Le troisième chapitre est consacré à l'étude du courant obtenu dans un SET, en remontant depuis l'étude des fonctions d'onde en passant par les taux de transfert tunnel. L'influence de paramètres tels que la taille de l'îlot, la dimension des barrières tunnel, la température et le nombre d'électrons occupant la boîte est étudiée et discutée.
- Le quatrième chapitre porte sur le comportement du SET en tant que module thermoélectrique. Une différence de température aux électrodes y est appliquée, et nous nous interrogerons sur la pertinence de l'utilisation d'un SET pour deux applications, en tant qu'étalon pour le coefficient Seebeck, et en tant que générateur thermoélectrique. L'influence de la contribution des phonons sur les performances du SET est également discutée.
- Enfin, le cinquième chapitre porte sur l'étude du bruit de grenaille dans une double-jonction tunnel. La description d'un tel phénomène étant souvent obscure, nous tentons d'élaborer un outil simple et pédagogique, autant que possible, de compréhension du comportement du bruit basé sur l'étude des taux de transfert tunnel, véritables indicateurs du bruit de grenaille. L'influence des paramètres géométriques est également étudiée afin de dégager des critères technologiques permettant de limiter ou *a contrario* d'augmenter le bruit de grenaille dans un dispositif à un électron.

Chapitre 2

Le simulateur SENS (Single-Electron Nanostructure Simulation) pour les double-jonctions tunnel (DTJ) et les transistors à un électron (SET)

2.1 Introduction

La compréhension du comportement des dispositifs à un électron tel que le SET, nécessite l'élaboration de modèles afin de pouvoir simuler les dispositifs. La plupart des approches sont basées sur la théorie dite "orthodoxe", une théorie phénoménologique qui repose sur l'analyse électrique de circuits contenant des jonctions tunnel (dualité condensateur/résistance) et des capacités (pour l'électrode de grille d'un SET, par exemple) [Cordan 00, Likharev 99, Royer 03, Uchida 00, Wasshuber 97]. Un schéma d'un SET et de son circuit équivalent est donné en FIGURE 2.1.

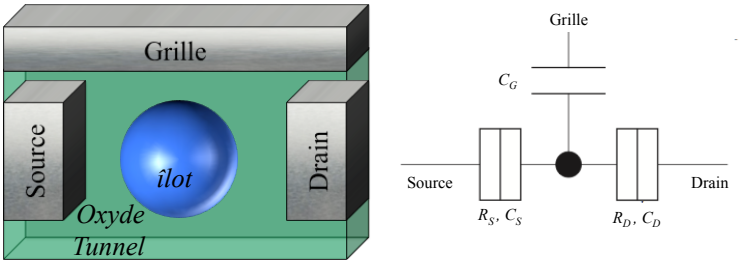


FIGURE 2.1 – Représentation schématique d'un SET et schéma électrique équivalent.

Les modèles basés sur la théorie orthodoxe sont très pratiques pour simuler des composants et des circuits, demandant des temps de calculs courts, mais ont aussi leurs inconvénients :

- Cette théorie nécessite la connaissance de "résistances tunnel" pour déterminer le courant. Ces données sont indépendantes de la température et donc ne sont théoriquement correctes qu'à faible température.
- Ils sont discutables dans le cas d'îlots semi-conducteurs, car ils ne peuvent prendre en compte tous les détails de la quantification des niveaux d'énergie dans les semiconducteurs, bien que des corrections puissent être apportées pour les décrire de façon approximative [Dan 10].

Ainsi, pour des dispositifs à îlots métalliques, des modèles basés sur la description physique des jonctions tunnel et des capacités ont vu le jour afin de se libérer de la contrainte de la détermination d'une "résistance tunnel". Les taux de transfert tunnel sont ensuite calculés à partir des fonctions d'onde métalliques calculés dans l'approximation WKB. Un simulateur MATLAB a été développé dans l'équipe par Johann Sée [Sée 03] pour calculer le courant dans une double-jonction tunnel à îlots métalliques. La structure simulée fut modifiée par Li Dongzhe au cours de son stage de Master, pour pouvoir simuler un dispositif asymétrique (électrodes de métaux différents et jonctions tunnel différentes) à îlot sphérique, incluant donc les capacités sphère-plan entre les électrodes et l'îlot [Li 11]. Ce modèle avait pour objectif de simuler la réponse électronique en sortie d'un AFM (pointe tungstène) d'une structure composée de nanoparticules d'or déposées sur un isolant formé par des molécules organiques auto-organisées (SAM) sur un substrat de silicium, lequel SAM présente l'intérêt d'avoir une épaisseur bien contrôlée [Aureau 10, Humbert 12].

Le code MARSSEA développé conjointement par l'Institut de Nanotechnologie de Lyon (INL) et l'Université de Sherbrook (LN2) reposant sur le même principe et incluant une contribution thermoionique permet de simuler des SET à îlots métalliques à haute température afin de les intégrer dans des circuits CMOS [Jouvet 12].

Une description physique des îlots semi-conducteurs nécessite la résolution des équations couplées de Poisson et Schrödinger [de Sousa 02] pour obtenir les fonctions d'onde et

les énergies dans l'îlot. Quelques modèles ont été proposés en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), afin d'inclure les effets à plusieurs corps. Scholtz a calculé la réponse linéaire d'un SET GaAs/GaAlAs où l'îlot est formé électrostatiquement dans un gaz 2D et couplé à un réservoir par des constrictions [Scholze 00]. Fiori a determiné la conductance d'un (SOI)SET en utilisant une expression générique pour la conductance [Fiori 05].

Dans notre équipe, Johann Sée a développé le simulateur SENS dans le cadre de sa thèse afin de simuler une double-jonction tunnel à îlot silicium [Sée 03]. L'effet des phonons a ensuite été intégré dans le simulateur par Audrey Valentin afin de justifier l'hypothèse d'un transport séquentiel dans ces dispositifs, ainsi que pour calculer le courant dans une triple-jonction tunnel (structure à deux îlots) [Valentin 08]. Ce travail de thèse a été consacré au développement du simulateur pour prendre en compte l'ajout d'une électrode grille, et ainsi simuler un SET.

Le simulateur SENS repose sur trois parties :

- Détermination de la structure électronique des nanocristaux de Silicium par résolution des équations couplées de Poisson et Schrödinger (fonctions d'ondes et énergies dans l'îlot)
- Calcul de taux de transfert tunnel par la règle d'or de Fermi et le formalisme de Bardeen
- Obtention des caractéristiques électroniques et thermiques, par résolution de l'équation maîtresse ou algorithme Monte-Carlo

2.2 Modèle à niveaux d'énergies discrets

2.2.1 Structure électronique des îlots Silicium

La structure électronique des nanocristaux de Silicium entourés de silice est obtenue en résolvant les équations couplées de Poisson et Schrödinger. L'équation de Schrödinger est résolue par la méthode de Hartree dans l'approximation de la masse effective. La méthode d'Hartree part du principe que la fonction d'onde globale Ψ peut se décomposer en un

produit de fonctions d'ondes électroniques élémentaires Ψ_i associées à chacun des électrons pris indépendamment.

$$\Psi = \Psi_1 \cdots \Psi_N \tag{2.1}$$

Cette méthode ne prend pas en compte l'antisymétrie de la fonction d'onde globale, et n'est donc théoriquement pas correcte pour les systèmes à plus de deux électrons sur le niveau fondamental (pour les niveaux à deux électrons, l'antisymétrie est assurée par le spin de la fonction d'onde), sachant que, du fait des six vallées Δ et du spin, les niveaux dans le silicium sont 12 fois dégénérés. Néanmoins en comparant cette méthode avec la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), théoriquement « plus exacte » car prenant en compte les effets à plusieurs corps, les résultats sont sensiblement identiques pour des nanocristaux comptant jusqu'à 15 électrons en leur sein, avec une erreur ne dépassant pas les 5% [Sée 02b]. La méthode de Hartree présente l'avantage de donner accès aux fonctions d'onde électroniques et aux énergies de chaque électron individuellement, cruciales pour la détermination des taux de transfert tunnel, c'est pourquoi cette méthode est retenue. La seconde approximation, celle de la masse effective – considérée isotrope car aucune direction cristalline préférentielle n'est retenue – a également été validée pour des îlots de diamètre supérieurs à 3 nm, en comparaison avec un modèle semi-empirique de liaisons fortes $sp3d^5$ [Sée 02a].

Au cours de cette thèse, les simulations ne dépassent jamais 7 électrons. Nous nous contenterons alors de considérer uniquement le niveau fondamental dans le nanocristal.

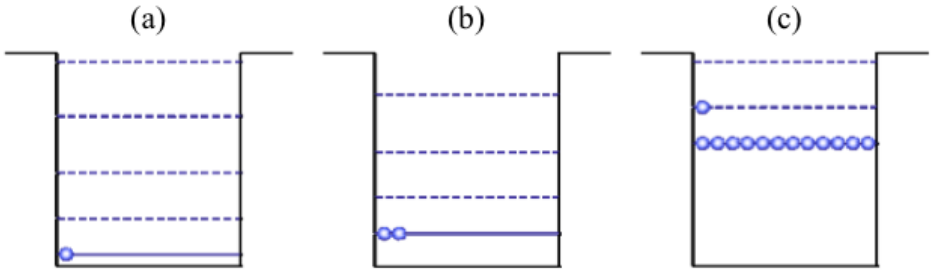


FIGURE 2.2 – Allure des niveaux d'énergie dans une boîte quantique : (a) elle contient un niveau fondamental et plusieurs niveaux excités ; (b) l'ajout d'un électron décale tous les niveaux ;(c) chaque niveau est 12 fois dégénéré, si la boîte contient un nombre supérieur d'électron, les niveaux excités se remplissent (figure issue de [Valentin 08])

Néanmoins, en raison de la forte interaction électron-électron dans la boîte, la hauteur du niveau fondamental dépend du nombre d'électrons qu'il contient FIGURE 2.2. Ainsi, chaque électron sur le niveau fondamental a la même fonction d'onde électronique Ψ_i et la même énergie (ou potentiel chimique) μ_i, mais celles-ci dépendent du nombre d'électrons N dans l'îlot.

Pour chaque configuration en tension (drain et grille) et chaque nombre d'électrons i dans l'îlot, dans les approximations sus-citées, le système d'équations couplées Poisson-Schrödinger est donc :

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\left(\frac{1}{m}\vec{\nabla}\right) + V_{conf} + V_{pol} + V_{coul_i}\right]\Psi_i = \mu_i\Psi_i \\ \vec{\nabla}\left(\varepsilon\varepsilon_0\vec{\nabla}V_{coul_i}\right) = \bar{e}\rho_i \\ \rho_i = -\sum\limits_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} |\Psi_j|^2 \end{cases} \tag{2.2}$$

avec :

Ψ_i	Fonction d'onde du i^{e} électron
μ_i	Energie du niveau occupé par le i^{e} électron
V_{conf}	Potentiel de confinement
V_{pol}	Potentiel du à la polarisation aux électrodes (voir ci-après)
V_{coul_i}	Potentiel d'interaction entre l'électron i et le reste des électrons dans l'îlot
ρ_i	Densité électronique vue par l'électron i dans l'îlot
m	Masse effective
$\varepsilon_0, \varepsilon$	Permittivité du vide, permittivité relative
$\hbar$	Constante de Planck
$\bar{e}$	charge élémentaire d'un électron

Il faut prendre garde en calculant ρ_i et V_{coul_i} à ne pas prendre en compte le i^{e} électron sur le niveau, afin d'éviter de calculer l'interaction de l'électron sur lui-même (d'où la somme de 1 à N en excluant l'électron i dans l'expression (2.2) de ρ_i).

Détermination du potentiel de polarisation V_{pol} Ce potentiel est dû à l'application d'un potentiel aux électrodes, et est obtenu en amont de la simulation Poisson-Schrödinger, en résolvant l'équation de Poisson sans charge.

$$\vec{\nabla}\left(\varepsilon\varepsilon_0\vec{\nabla}V_{pol}\right) = 0 \tag{2.3}$$

Les conditions aux limites (de Dirichlet) pour résoudre cette équation dépendent du dispositif étudié. Ainsi, les conditions aux limites définies pour la double jonction tunnel

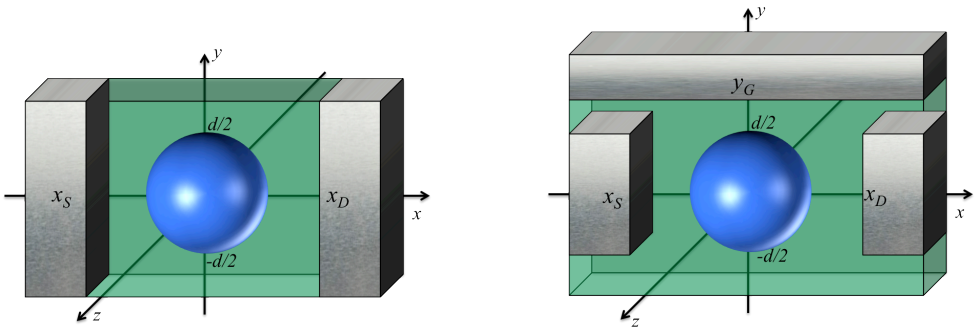
(FIGURE 2.3a) sont, avec les notations de la FIGURE 2.3 :

$$\begin{cases} V_{pol}(x \leq x_S, y, z) = 0 \\ V_{pol}(x \geq x_D, y, z) = \bar{e}V_{DS} \end{cases} \tag{2.4}$$

Pour simuler le potentiel de polarisation dans un SET (FIGURE 2.3b), il a fallu limiter ces électrodes dans l'espace en raison de la présence de l'électrode de grille, et en utilisant les notations de la FIGURE 2.3, ces conditions deviennent :

$$\begin{cases} V_{pol}(x \leq x_S, -d/2 \leq y \leq d/2, z) = 0 \\ V_{pol}(x \geq x_D, -d/2 \leq y \leq d/2, z) = \bar{e}V_{DS} \\ V_{pol}(x, y \geq y_G, z) = \bar{e}V_{GS} \end{cases} \tag{2.5}$$

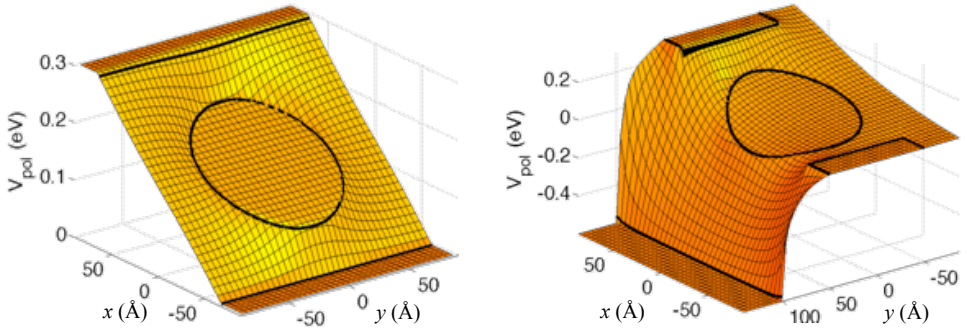
La différence entre ces deux potentiels est illustrée en FIGURE 2.4



(a) Double-jonction tunnel (b) Transistor à un électron

FIGURE 2.3 – Schéma d'une double-jonction tunnel(a) et d'un SET(b) avec les coordonnées de l'électrode et de l'îlot

$V_{DS} = -0,3V$ $V_{DS} = -0,3V ; V_{GS} = 0,5V$



(a) Double-jonction tunnel (b) Transistor à un électron

FIGURE 2.4 – Potentiel de polarisation d'une double-jonction tunnel(a) et d'un SET(b) avec les mêmes dimensions d'îlot, d'oxyde source et drain.

Résolution des équations couplées de Poisson et Schrödinger L'équation de Schrödinger est résolue numériquement en la discrétisant par méthode des différences finies, et les valeurs propres sont définies par un algorithme de type Arnoldi, bien adapté aux matrices creuses.

Les équations de Poisson (sans charge pour le calcul de V_{pol}, avec charge pour celui de V_{coul_i}) sont discrétisées par différences finies et les potentiels d'interaction et de polarisation sont déterminés par un algorithme de relaxation.

Le critère de tolérance *tol* de fin de la résolution porte sur l'énergie totale E_{TOT} dans le système, définie comme la somme de l'énergie de chaque électron, à laquelle nous soustrayons la moitié de la contribution de l'intéraction électron-électron V_{coul_i}, car prise en compte deux fois dans la somme des énergies :

$$E_{TOT} = i\left(\mu_i - \frac{1}{2}\int \bar{\Psi}_i V_{coul_i} \Psi_i dV\right) \tag{2.6}$$

Un schéma de l'algorithme de résolution auto-cohérente des équations de Poisson et Schrödinger est proposé en FIGURE 2.5.

2.2.2 Fréquences de transfert tunnel

Les fréquences de transferts tunnel électrodes source ou drain vers l'îlot (noté d) lorsque que n électrons sont dans la boîte sont notées $\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n)$ et d'îlot vers électrode $\Gamma_{\mathrm{dL}}(n)$, avec L = S(ource) ou D(rain). On considère que dans un SET, l'oxyde de grille est assez épais pour considérer le transfert électronique entre grille et îlot négligeable. Les quatre taux de transfert tunnel sont schématisés dans la FIGURE 2.6.

Le transport des électrons au sein des dispositifs étudiés est considéré comme séquentiel [Valentin 08] ; dès lors, nous traitons l'effet tunnel comme une perturbation et appliquons la règle d'or de Fermi. En l'absence d'élargissement des niveaux d'énergie dans l'îlot, c'est-à-dire, dans le cas de niveaux discrets, les taux de transfert tunnel sont donnés par :

$$\begin{cases} \Gamma_{\mathrm{Ld}}(n) = \frac{2\pi}{\hbar}\int |M_L(E_L, n+1)|^2 \rho_L(E_L) f_L(E_L, T) l_{\mathrm{dot}}(n) \delta(E_L - \mu_{n+1}) dE_L \\ \Gamma_{\mathrm{dL}}(n) = \frac{2\pi}{\hbar}\int |M_L(E_L, n)|^2 \rho_L(E_L)(1 - f_L(E_L, T)) g_{\mathrm{dot}}(n) \delta(E_L - \mu_n) dE_L \end{cases} \tag{2.7}$$

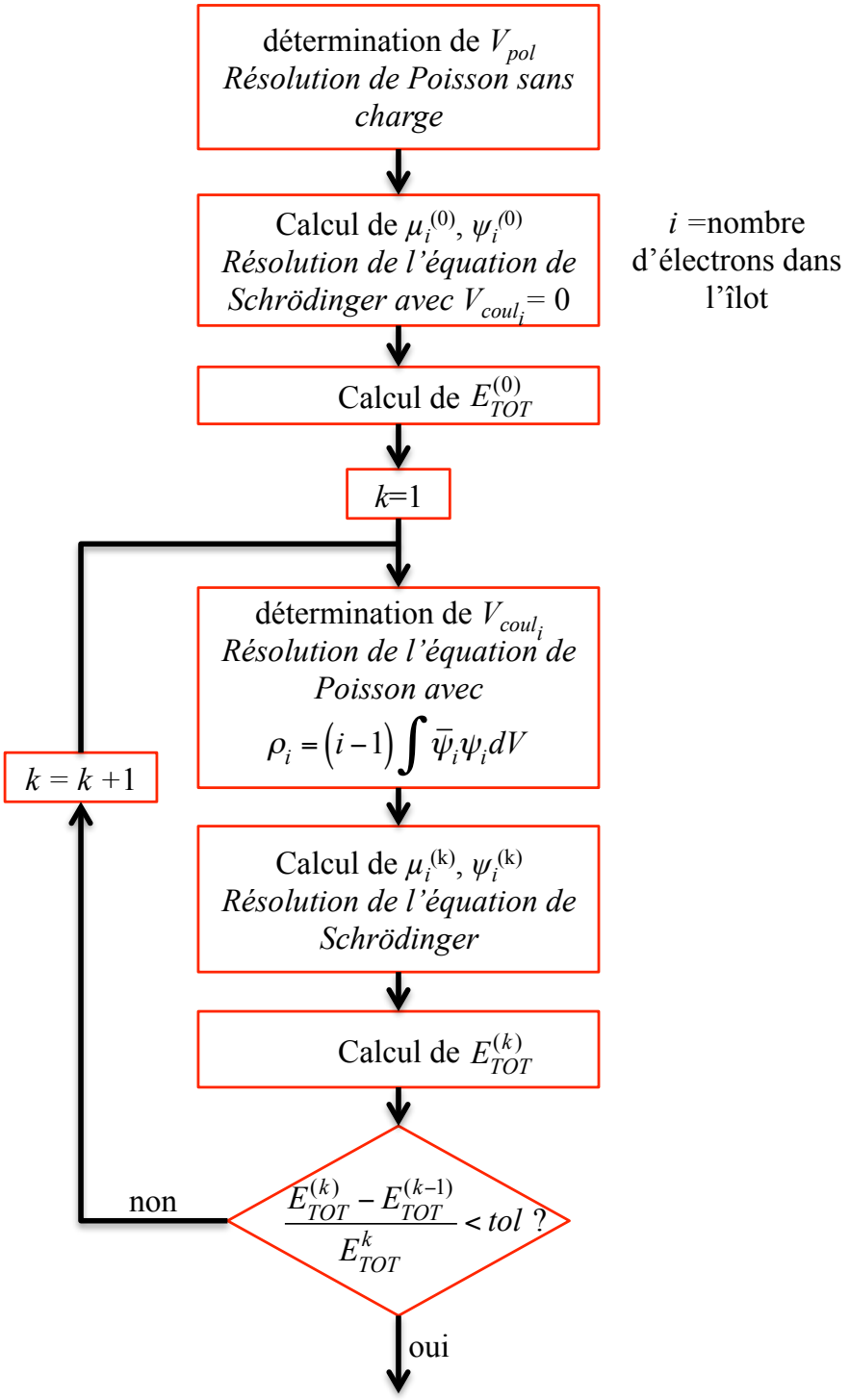


FIGURE 2.5 – Algorithme de la résolution auto-cohérente des équations de Schrödinger et Poisson dans le cadre de la méthode de Hartree, pour une tension V_{DS} (et V_{GS}) et un nombre d'électron donné.

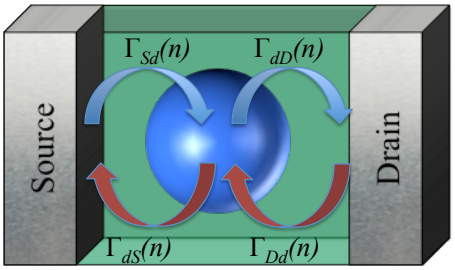


FIGURE 2.6 – Représentation des taux de transfert tunnel dans une double-jonction tunnel (les mêmes que dans un SET)

avec

$\rho_L(E)$	Densité électronique dans l'électrode L à l'énergie E
$f_L(E,T)$	Statistique de Fermi-Dirac dans l'électrode L, à l'énergie E et la température T
$l_{\text{dot}}(n), g_{\text{dot}}(n)$	Nombre d'états libres (occupés) dans l'îlot. Pour n électrons, $l_{\text{dot}}(n) = 12 - g_{\text{dot}}(n)$
$M_L(E,n)$	Élément de matrice quantifiant la probabilité de transmission des électrons par effet tunnel

Les $n+1$ apparaissant dans $\Gamma_{\text{Ld}}(n)$ sont dus au fait que lorsque le transfert se fait vers le $(n+1)^{\text{e}}$ niveau, il y a n électrons dans la boîte.

En simplifiant le terme $\delta(E_L - \mu_{n(+1)})$, exprimant la conservation de l'énergie au cours du transfert tunnel, nous obtenons :

$$\begin{cases} \Gamma_{\text{Ld}}(n) = \frac{2\pi}{\hbar}|M_L(\mu_{n+1}, n+1)|^2 \rho_L(\mu_{n+1}) l_{\text{dot}}(n) f_L(\mu_{n+1}, T) \\ \Gamma_{\text{dL}}(n) = \frac{2\pi}{\hbar}\int |M_L(\mu_n, n)|^2 \rho_L(\mu_n) g_{\text{dot}}(n)(1 - f_L(\mu_n, T)) \end{cases} \tag{2.8}$$

Calcul de l'élément de matrice M_L L'élément de matrice M_L est determiné par le formalisme de Bardeen [Bardeen 61, Sée 03].

$$M_L(n) = \frac{\hbar^2}{m_{\text{SiO}_2}} \iint_{S_{barr}} (\Psi_L \vec{\nabla} \Psi_{dot}(n) - \Psi_{dot}(n) \vec{\nabla} \Psi_L) dS \tag{2.9}$$

Ψ_L et $\Psi_{dot}(n)$ sont les fonctions d'onde électronique dans les électrodes et dans l'îlot, respectivement. S_{barr} est une surface choisie arbitrairement dans la barrière tunnel entre l'électrode et l'îlot. Pour calculer cet élément de matrice, nous séparons tout d'abord le système (source-oxyde-îlot-oxyde-drain) en trois sous-systèmes (source-oxyde, oxyde-îlot-

oxyde et oxyde-drain) de la manière présentée FIGURE 2.7, chaque fonction d'onde (Ψ_S, Ψ_{dot} et Ψ_D respectivement) étant calculée dans un sous-système. Pour des raisons pratiques, la séparation des systèmes est faite au milieu des barrières.

Les fonctions d'onde dans l'îlot $\Psi_{dot}(n)$ sont les fonctions d'onde déterminées pour chaque électron par les équations de Poisson-Schrödinger. Les fonctions d'onde dans les électrodes (Ψ_S et Ψ_D) sont estimées en utilisant une expression analytique, dans l'approximation de Wentzel-Kramer-Brillouin (WKB). Le calcul détaillé de ces fonctions d'ondes et des éléments de matrice en résultant est présenté dans l'annexe A. En utilisant les notations de la FIGURE 2.7, avec Ω_S et Ω_D volume des électrodes source et drain respectivement, et en posant :

$$\begin{aligned} k_S &= \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_{C_S})} \qquad \alpha_S = \sqrt{\frac{2m_{\mathrm{SiO_2}}}{\hbar^2}(V_{barr} + V_{0_S} - E)} \\ k_D &= \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_{C_D})} \qquad \alpha_D = \sqrt{\frac{2m_{\mathrm{SiO_2}}}{\hbar^2}(V_{barr} + V_{0_D} - E)} \end{aligned} \tag{2.10}$$

les éléments de matrice (au carré, car c'est ainsi qu'ils sont utilisés en (2.8)) prennent la forme :

$$\begin{aligned} |M_S|^2 =& \left(\frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{SiO_2}}}\right)^2 \frac{2}{\Omega_S} \frac{k_S^2}{k_S^2 + \frac{m_e^2}{m_{\mathrm{SiO_2}}^2}\alpha_S^2 \left|1 - \frac{V_{0_S}}{V_{barr} + V_{0_S} - E}\right|} \\ &\times \exp\left(-2\alpha_S \frac{h_S(V_{barr} + V_{0_S} - E)}{3V_{0_S}} \left[1 - \left(1 - \frac{V_{0_S}}{V_{barr} + V_{0_S} - E}\right)^{3/2}\right]\right) \\ &\times \left| \iint_{S_{barr}} (\vec{\nabla}\Psi_{dot}(-d/2 - h_S/2, x, y) + \alpha_S \Psi_{dot}(-d/2 - h_S/2, x, y)) dydz \right|^2 \end{aligned} \tag{2.11}$$

et

$$\begin{aligned} |M_D|^2 =& \left(\frac{\hbar^2}{m_{\mathrm{SiO_2}}}\right)^2 \frac{2}{\Omega_D} \frac{k_D^2}{k_D^2 + \frac{m_e^2}{m_{\mathrm{SiO_2}}^2}\alpha_D^2 \left|1 - \frac{V_{0_D} + eV}{V_{barr} + V_{0_D} - E}\right|} \\ &\times \exp\left(-2\alpha_D \frac{h_D(V_{barr} + V_{0_D} - E)}{3(V_{0_D} + eV)} \left[1 - \left(1 - \frac{V_{0_D} + eV}{V_{barr} + V_{0_D} - E}\right)^{3/2}\right]\right) \\ &\times \left| \iint_{S_{barr}} (\vec{\nabla}\Psi_{dot}(d/2 + h_D/2, x, y) - \alpha_D \Psi_{dot}(d/2 + h_D/2, x, y)) dydz \right|^2 \end{aligned} \tag{2.12}$$

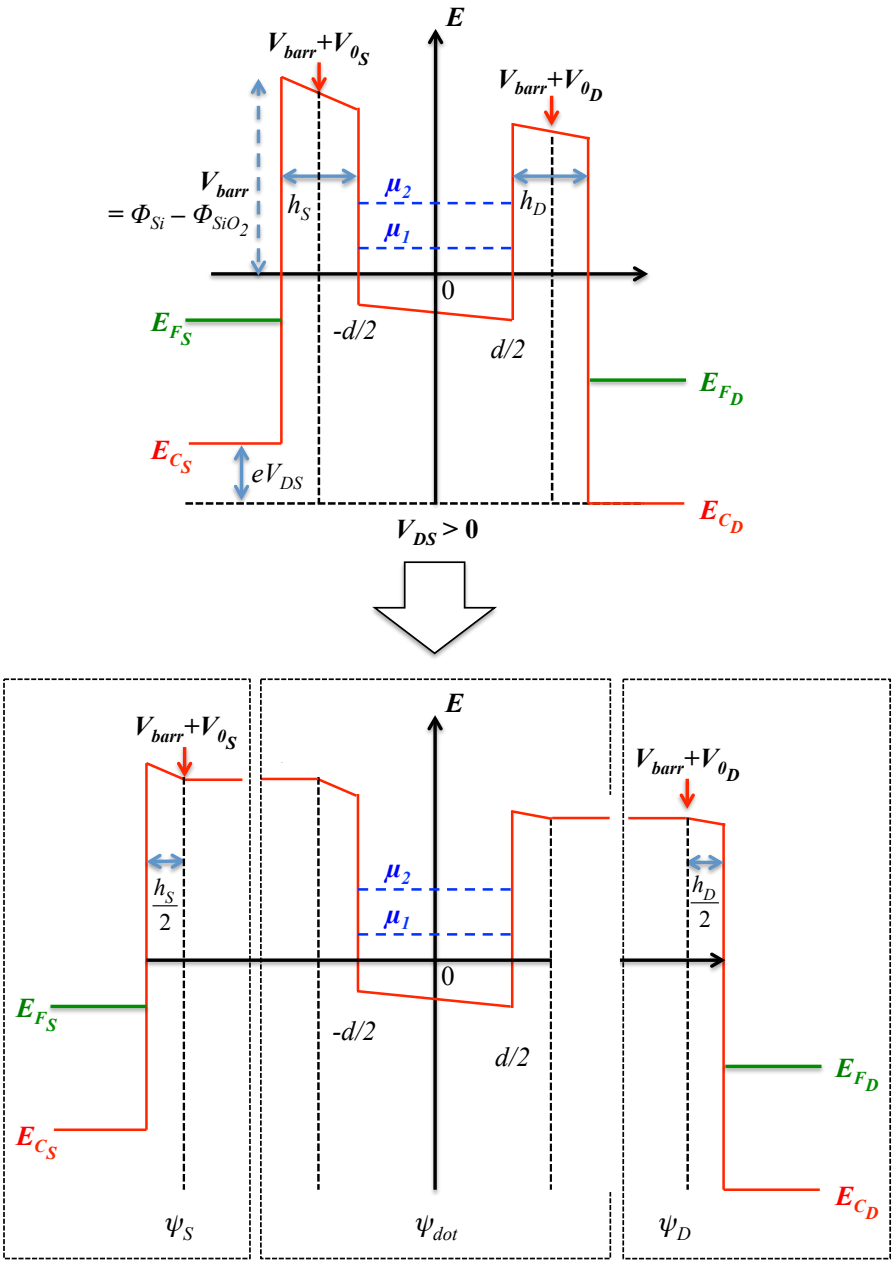


FIGURE 2.7 – Diagramme des bandes de la structure ainsi que la décomposition du système en trois sous-systèmes indépendants.

2.2.3 Courant électrique et courant de chaleur

Pour déterminer les courants électriques (charge moyenne passée dans une jonction par unité de temps) et les courants de chaleur (énergie moyenne passée dans une jonction par unité de temps), notre modèle dispose de deux méthodes, chacune présentant ses avantages :

- **l'équation maîtresse**, rapide mais ne donnant que des résultats en terme du nombre moyen d'électrons dans l'îlot.
- **un algorithme Monte-Carlo**, coûteuse en temps de calcul, mais permettant de suivre instantanément l'évolution du nombre d'électrons dans la boîte quantique, utile dans l'étude du bruit, que l'on verra dans le chapitre 5.

  Nous privilégierons l'équation maîtresse dans les autres chapitres.

Ces méthodes sont détaillées dans la thèse de J. Sée [Sée 03], et nous nous contenterons ici d'en exposer les étapes les plus importantes, celles qui nous seront utiles dans cette thèse.

2.2.3.1 Équation maîtresse

La méthode de l'équation maîtresse consiste à trouver la probabilité $P(n,t)$ d'avoir n électrons dans l'îlot à l'instant t. On s'aide pour cela de la probabilité $P(n,t+dt)$ d'avoir n électrons dans la boîte à l'instant $t+dt$. C'est donc la somme de la probabilité d'avoir n électrons à l'instant t, et aucun événement tunnel entre t et $t+dt$, de la probabilité d'avoir $n-1$ électrons à l'instant t, et un événement tunnel électrode vers îlot entre t et $t+dt$, et de la probabilité d'avoir $n+1$ électrons à l'instant t, et un événement tunnel îlot vers électrode entre t et $t+dt$. Ce qui en équation se traduit par :

$$\begin{aligned} P(n,t+dt) =& P(n,t)[1-\Gamma_{Sd}(n)dt][1-\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n)dt][1-\Gamma_{\mathrm{dS}}(n)dt][1-\Gamma_{\mathrm{dD}}(n)dt] \\ &+P(n-1,t)[\Gamma_{Sd}(n-1)dt+\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n-1)dt] \\ &+P(n+1,t)[\Gamma_{\mathrm{dS}}(n+1)dt+\Gamma_{\mathrm{dD}}(n+1)dt] \end{aligned} \tag{2.13}$$

En ne conservant que les termes du premier ordre, nous obtenons l'équation maîtresse :

$$\begin{aligned} \frac{dP(n,t)}{dt} =& -P(n,t)[\Gamma_{Sd}(n)+\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n)+\Gamma_{\mathrm{dS}}(n)+\Gamma_{\mathrm{dD}}(n)] \\ &+P(n-1,t)[\Gamma_{Sd}(n-1)+\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n-1)] \\ &+P(n+1,t)[\Gamma_{\mathrm{dS}}(n+1)+\Gamma_{\mathrm{dD}}(n+1)] \end{aligned} \tag{2.14}$$

dont la solution est :

$$\boldsymbol{P}(t) = e^{-\boldsymbol{\Gamma} t}\boldsymbol{P}(0) \tag{2.15}$$

avec $\boldsymbol{P}(t) = \begin{pmatrix} P(0,t) \\ P(1,t) \\ \vdots \\ P(N,t) \end{pmatrix}$ où N est le nombre maximal d'électrons dans l'îlot

et la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$ définie comme :

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{pmatrix} -\Gamma^0(0) & \Gamma^-(1) & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \cdot \\ 0 & \Gamma^+(n-2) & -\Gamma^0(n-1) & \Gamma^-(n) & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & \Gamma^+(n-1) & -\Gamma^0(n) & \Gamma^-(n+1) & \cdot & \cdot \\ \cdot & & \cdot & \Gamma^+(n) & -\Gamma^0(n+1) & \Gamma^-(n+2) & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \Gamma^+(N-1) & -\Gamma^0(N) \end{pmatrix}$$

où : $\begin{cases} \Gamma^0(n) &= \Gamma_{Sd}(n) + \Gamma_{\mathrm{Dd}}(n) + \Gamma_{\mathrm{dS}}(n) + \Gamma_{\mathrm{dD}}(n) \\ \Gamma^+(n) &= \Gamma_{Sd}(n) + \Gamma_{\mathrm{Dd}}(n) \\ \Gamma^-(n) &= \Gamma_{\mathrm{dS}}(n) + \Gamma_{\mathrm{dD}}(n) \end{cases}$

En faisant tendre t vers l'infini, nous avons donc accès à la probabilité stationnaire d'avoir n électrons dans l'îlot $P(n) = P(n, t \to \infty)$

2.2.3.2 Monte-Carlo

Un autre moyen d'obtenir le courant est la méthode Monte-Carlo. Cette méthode est très puissante car elle permet de suivre l'évolution du nombre d'électrons n dans l'îlot en fonction du temps, comme on peut le voir FIGURE 2.8, ainsi que le nombre d'électrons n_S ou n_D ayant traversé la jonction tunnel source ou drain respectivement.

L'algorithme va consister à tirer au sort tout d'abord un temps de vol τ_{vol} (un temps durant lequel le nombre d'électrons dans l'îlot ne va pas changer, ou, autrement dit, un temps durant lequel aucun événement tunnel ne se produit). Ce tirage au sort est fonction de la somme des fréquences de tous les transferts tunnel possibles à cet état n, c'est-à-dire $\Gamma_{tot}(n) = \Gamma_{Sd}(n) + \Gamma_{\mathrm{Dd}}(n) + \Gamma_{\mathrm{dS}}(n) + \Gamma_{\mathrm{dD}}(n)$. Après cela, nous tirons au sort l'événement tunnel se produisant après ce temps de vol, sachant que la probabilité qu'un événement tunnel i soit tiré au sort est Γ_i/Γ_{tot} . Le processus est répété jusqu'à atteindre un temps total t_{tot} suffisamment grand pour atteindre le régime stationnaire. L'organigramme simplifié de la simulation Monte-Carlo est montré en FIGURE 2.9.

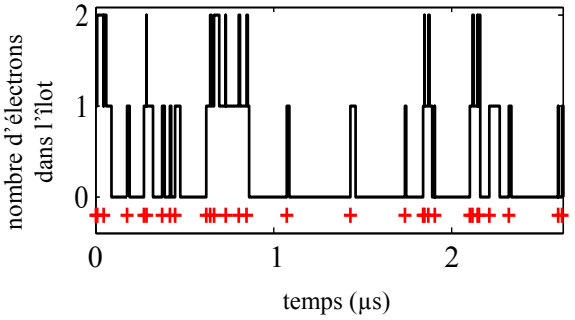


FIGURE 2.8 – Exemple de suivi temporel du nombre d'électrons dans l'îlot par méthode Monte-Carlo dans un dispositif limité à 2 électrons. Les croix rouges représentent un passage dans la jonction source. Le courant résultant de l'algorithme complet est de 2 pA

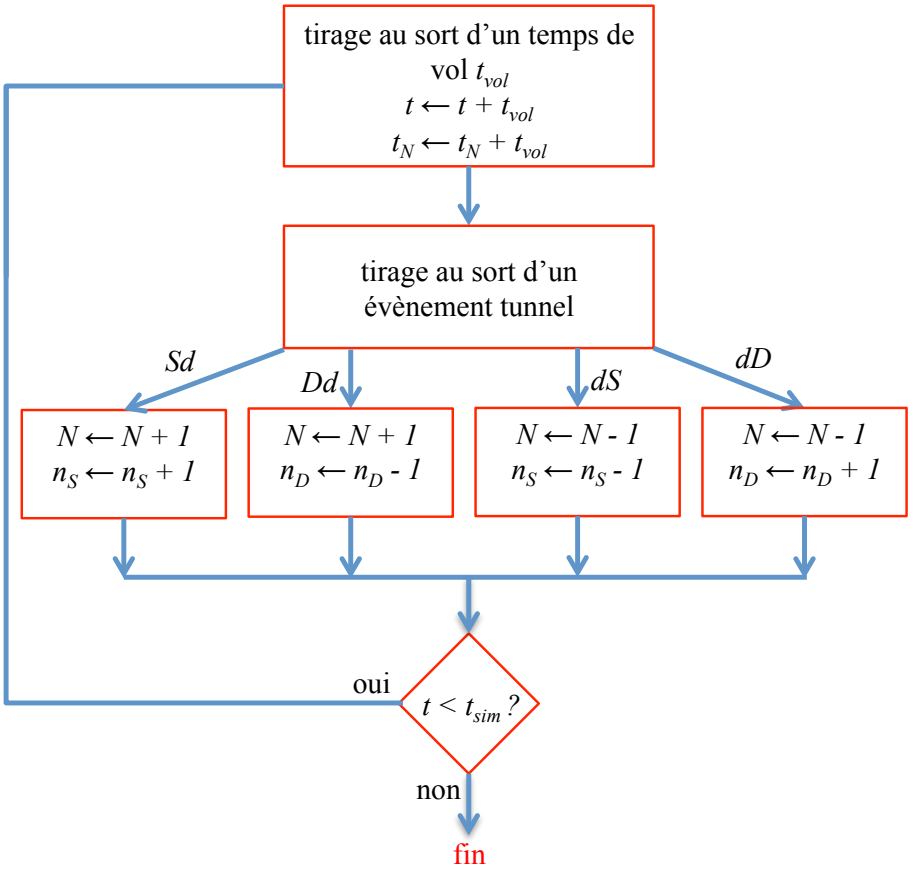


FIGURE 2.9 – Organigramme de résolution de l'algorithme Monte-Carlo.

Pour obtenir le courant, il suffit donc de comptabiliser le nombre de particules n_S ou n_D passées (algébriquement - positif dans le sens source-îlot-drain, négatif sinon) durant un temps t_{tot} dans la jonction source ou drain, respectivement, tout en sachant que leur nombre moyen sera le même en régime stationnaire. Le courant moyen est alors défini comme étant :

$$\langle I \rangle = e\frac{n_S}{t_{tot}} = e\frac{n_D}{t_{tot}} \tag{2.16}$$

Nous pouvons également retrouver la probabilité stationnaire d'avoir n électrons dans l'îlot pour un t_{tot} suffisamment grand, en récupérant le temps t_n durant lequel l'îlot a n électrons en son sein :

$$P(n) = \frac{t_n}{t_{tot}} \tag{2.17}$$

2.2.3.3 Calculs des courants électriques et de chaleur

L'étude de la thermoélectricité dans les SET nécessite la connaissance non seulement des courants électriques, mais aussi des courants de chaleur. Dans notre modèle, la détermination des transferts tunnel se font à énergie constante : il n'y a donc pas de pertes d'énergie dans les oxydes tunnel. Nous allons différencier les courants électrode vers îlot et îlot vers électrode pour bien les définir.

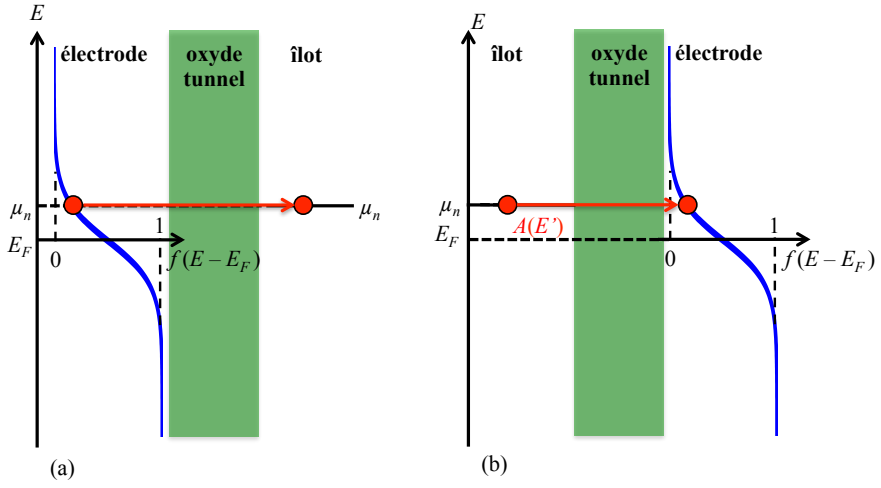


FIGURE 2.10 – Illustration du transfert tunnel (a) électrode vers îlot, (b) îlot vers électrode, avec un îlot à niveaux d'énergie discrets.

Courants électrode vers îlot Le transfert électrode vers îlot est illustré en FIGURE 2.10a. Le nombre d'électrons n_{e^-} traversant la jonction électrode-îlot pour rejoindre le niveau à n électrons par unité de temps est donné par la relation :

$$n_{e^-} = P(n-1)\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) \tag{2.18}$$

Nous considérons $P(n-1)$ et $\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1)$ car lorsque le transfert tunnel vers le niveau avec n électrons se fait lorsque $n-1$ électrons sont dans l'îlot.

Chaque électron rejoignant le niveau n a une charge $\bar{e}$ et une énergie μ_n. Ainsi, en sommant sur les N niveaux d'énergies disponibles, nous obtenons le courant électrique I_{Ld} et le courant de chaleur I^Q_{Ld} :

$$I_{Ld} = \sum_n \bar{e}P(n-1)\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) \tag{2.19}$$

$$I^Q_{Ld} = \sum_n \mu_n P(n-1)\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) \tag{2.20}$$

Courants îlot vers électrode Le transfert îlot vers électrode est illustré en FIGURE 2.10b. Le nombre d'électrons n_{e^-} traversant la jonction électrode-îlot pour rejoindre le niveau n par unité de temps est donné par la relation :

$$n_{e^-} = P(n)\Gamma_{\mathrm{dL}}(n) \tag{2.21}$$

Nous considérons $P(n)$ et $\Gamma_{\mathrm{dL}}(n)$ car le transfert tunnel se fait depuis le niveau à n électrons.

Chaque électron quittant le niveau n a une charge $\bar{e}$ et une énergie μ_n. Ainsi, en sommant sur les N niveaux d'énergie disponibles, nous obtenons le courant électrique I_{dL} et le courant de chaleur I^Q_{dL} :

$$I_{dL} = \sum_n \bar{e}P(n)\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n) \tag{2.22}$$

$$I^Q_{dL} = \sum_n \mu_n P(n)\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n) \tag{2.23}$$

Bilan sur un dispositif Nous considérons que les deux courants (de chaleur et électronique) sont positifs lorsque les électrons vont dans la direction source-drain. Les électrons ayant une charge négative, ces deux courants ont un "sens" différent (voir FIGURE 2.11).

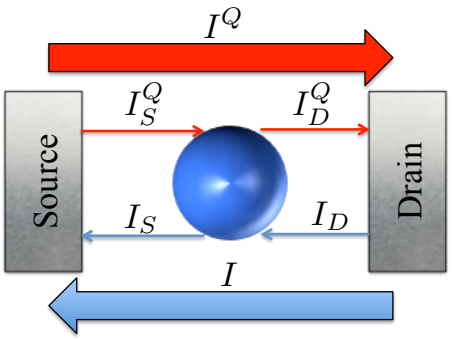


FIGURE 2.11 – Convention de signes des courants électrique et de chaleur.

En régime stationnaire, le courant électrique dans la source et dans le drain sont les mêmes, nous avons donc :

$$I = I_S = I_D = \bar{e}\sum_n P(n)[\Gamma_{\mathrm{dS}}(n) - \Gamma_{Sd}(n)] = \bar{e}\sum_n P(n)[\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n) - \Gamma_{\mathrm{dD}}(n)] \tag{2.24}$$

Pour les courants de chaleur, l'égalité entre les courants source et drain n'est pas évidente. Néanmoins, l'îlot ayant des niveaux d'énergie discrets, un électron arrivant au niveau n repart du niveau n avec la même énergie. Il n'y a donc pas de pertes d'énergie dans l'îlot, ce qui implique un courant de chaleur égal de part et d'autre de l'îlot. Nous vérifierons cette affirmation en section 2.4.3 :

$$\begin{aligned} I^Q &= I_S^Q = \sum_n \mu_n[P(n-1)\Gamma_{Sd}(n-1) - P(n)\Gamma_{\mathrm{dS}}(n)] \\ &= I_D^Q = \sum_n \mu_n[P(n)\Gamma_{\mathrm{dD}}(n) - P(n-1)\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n-1)] \end{aligned} \tag{2.25}$$

2.3 Extension du modèle aux niveaux d'énergie élargis

Dans la section précédente, les niveaux d'énergie dans l'îlot ont été considérés comme discrets. Néanmoins, l'approximation faite dans notre modèle d'un transport séquentiel implique une perte de cohérence de l'électron dans l'îlot. Cette relaxation ne peut avoir lieu que si l'électron subit des interactions dans l'îlot, interactions qui interviennent notamment entre l'îlot et les phonons du nanocristal. Ces collisions ont pour effet d'élargir les niveaux d'énergie, d'où l'effet nommé "*collisional broadening*" [Buttiker 88].

Cet effet n'est pas négligeable dans les nanocristaux [Buttiker 88, Inoshita 97, Král 98, Seebeck 05, Stauber 00]. Audrey Valentin a calculé les fréquences d'interactions électron-phonon dans les nanocristaux silicium étudiés et a démontré que ces fréquences sont bien

supérieures aux fréquences de transfert tunnel, validant ainsi l'hypothèse d'un transport séquentiel, même à faible température [Valentin 08]. L'effet du *collisional broadening* a été ensuite incorporé dans notre modèle afin de simuler le transport électronique dans les structures à deux îlots, où l'interaction électron-phonon permet d'ouvrir une plage en tension réaliste pour laquelle le courant est non nul [Valentin 09a] (voir FIGURE 2.12).

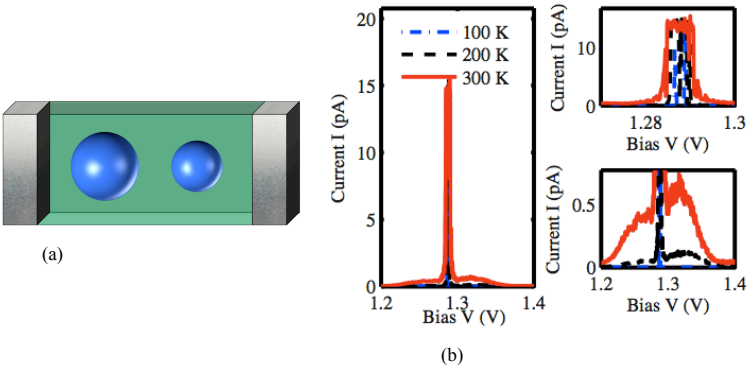


FIGURE 2.12 – (a) Structure à 2 îlots simulée et (b) courant obtenu sur une telle structure à trois températures différentes. Le pic large montre que l'interaction électron-phonon a eu pour effet d'élargir les niveaux d'énergies dans les îlots [Valentin 09a].

Dans cette thèse, l'élargissement des niveaux est pris en compte afin d'obtenir une figure de mérite thermoélectrique ZT finie lors de l'utilisation des SET en dispositif thermoélectrique. En effet, comme nous l'avons dit dans le chapitre précédent, section 1.4, dans le cas de niveaux discrets, il n'y a pas de pertes de chaleur lors du transport électronique, conduisant alors la figure de mérite ZT à tendre vers l'infini. L'élargissement des niveaux, et donc la relaxation des électrons dans l'îlot va inévitablement causer des pertes, que nous quantifierons afin d'obtenir une conductance thermique non nulle.

2.3.1 Fonction spectrale

Pour prendre en compte l'élargissement des niveaux d'énergie dans l'îlot, on considère une fonction spectrale $A(E)$, qui représente, à 2π près, la densité de probabilité que l'électron dans l'îlot ait une énergie comprise entre E et $E + dE$. Dans de nombreux ouvrages, cette fonction est choisie comme Lorentzienne, dans le cadre du formalisme de Landauer

et d'un transport cohérent, c'est-à-dire [Datta 97, Ferry 99].

$$A(E,\mu_i) = \frac{(H/2)^2}{(E-\mu_i)^2 - (H/2)^2} \tag{2.26}$$

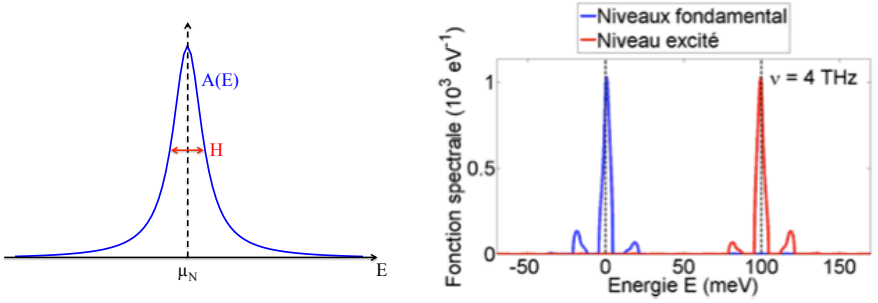
Cette Lorentzienne centrée en μ a une largeur à mi-hauteur H, et est normalisée tel que $\int A(E)dE = 2\pi$. Cette approximation est reprise majoritairement dans les publications traitant de la thermoélectricté dans les boîtes quantiques [Mani 11, Nakpathomkun 10a].

En réalité, les calculs d'Audrey Valentin ont démontré que la fonction spectrale $A(E)$ est plus complexe ; elle est fonction des modes de phonons p dans l'îlot (responsables de cet élargissement) et est donnée par [Valentin 08] :

$$A^p(E,\mu_i) = \frac{-2\mathrm{Im}[\Sigma_p(E)]}{(E-\mu_i-\mathrm{Re}[\Sigma_p(E)])^2 + (\mathrm{Im}[\Sigma_p(E)])^2} \tag{2.27}$$

où $\Sigma_p(E)$ est la self-energy, terme perturbatif associé au couplage électron-phonon.

Cette expression a bien l'allure d'une Lorentzienne (centrée en $\mu + \mathrm{Re}[\Sigma_p(E)]$) mais la dépendance de la self-energy $\Sigma_p(E)$ en énergie fait que la fonction spectrale n'est pas réellement Lorentzienne. Une comparaison entre une courbe Lorentzienne et une fonction spectrale obtenue par les calculs d'Audrey Valentin est présentée FIGURE 2.13. Les fonctions spectrales calculées ont effectivement deux satellites qui n'apparaissent pas sur une Lorentzienne.



(a) Lorentzienne

(b) Calculs Audrey Valentin

FIGURE 2.13 – (a) Courbe Lorentzienne centrée en μ, et (b)Fonctions spectrales obtenues à partir de la self-energy [Valentin 08]

Néanmoins le calcul des fréquences de phonons, des self-energies et des densités spectrales (dépendantes de la température), ainsi que des courants électrique et de chaleur est

très couteux, car ils ajoutent un tirage supplémentaire (tirage au sort du phonon) aux simulations Monte-Carlo dans des calculs pour la thermoélectricité qui nécessitent également de nombreuses simulations à différentes températures. Pour cette raison, nous avons décidé de conserver l'expression d'une fonction spectrale Lorentzienne (2.26), indépendante du niveau d'énergie choisi, dont nous étudierons l'influence de la largeur.

2.3.2 Taux de transferts tunnel

L'élargissement des niveaux est introduit dans le modèle à partir des taux de transfert tunnel. La fonction spectrale $A(E)$ représentant à 2π près la densité de probabilité de trouver l'électron dans l'îlot entre E et $E + dE$, nous pouvons réécrire les expressions 2.8 en incluant ce nouveau terme, et en intégrant sur toutes les énergies :

$$\begin{cases} \Gamma_{\mathrm{Ld}}(n) = & \frac{1}{\hbar}\int |M_L(E,n+1)|^2 \rho_L(E) f_L(E,T) l_{\mathrm{dot}}(n) A(E,\mu_{n+1}) dE \\ \Gamma_{\mathrm{dL}}(n) = & \frac{1}{\hbar}\int |M_L(E,n)|^2 \rho_L(E)(1-f_L(E,T)) g_{\mathrm{dot}}(n) A(E,\mu_n) dE \end{cases} \tag{2.28}$$

2.3.3 Courants électrique et de chaleur

Comme dans la partie précédente 2.2.3.3 dans le cadre de niveaux discrets, nous allons calculer les courants dans deux cas : cas d'un transfert électrode vers îlot, et cas d'un transfert îlot vers électrode.

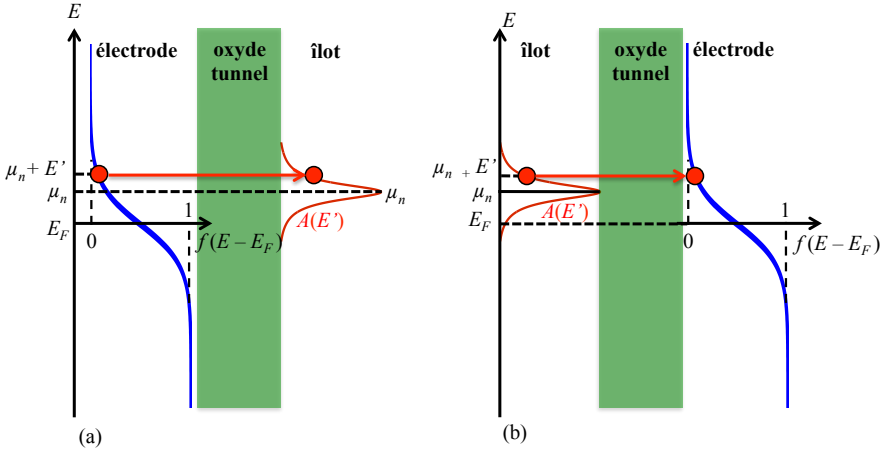


FIGURE 2.14 – Illustration du transfert tunnel (a) électrode vers îlot, (b) îlot vers électrode, avec un îlot à niveaux d'énergie élargis.

Courants électrode vers îlot Le transfert électrode vers îlot est illustré en FIGURE 2.14a. Autour du niveau E', nous pouvons définir la fréquence de transfert tunnel entre $\mu_n + E'$ et $\mu_n + E' + dE'$:

$$d\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) = \frac{1}{\hbar}|M_L(\mu_n + E', n)|^2 \rho_L(\mu_n) f_L(\mu_n + E', T) l_{\mathrm{dot}}(n-1) A(E', \mu_n) dE' \quad (2.29)$$

Chaque électron rejoignant le niveau n via l'énergie $\mu_n + E'$ a une charge $\bar{e}$ et une énergie $\mu_n + E'$. Ainsi, en sommant sur les N niveaux d'énergies disponibles et en intégrant sur l'ensemble des E', nous obtenons le courant électrique I_{Ld} et le courant de chaleur I^Q_{Ld} :

$$\begin{aligned} I_{Ld} &= \sum_n \int_{E'} \bar{e} P(n-1) d\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) \\ &= \sum_n \bar{e} P(n-1) \Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) \quad (2.30) \\ I^Q_{Ld} &= \sum_n \int_{E'} (\mu_n + E') P(n-1) d\Gamma_{\mathrm{Ld}}(n-1) \quad (2.31) \end{aligned}$$

Nous retrouvons donc l'expression (2.19) donnée dans le cas de niveaux discrets pour le courant électronique, à la nuance près que les taux de transfert tunnel à considérer ne sont pas les mêmes. L'énergie $\mu_n + E'$ étant dépendante... de l'énergie, nous ne pouvons donc pas la sortir de l'intégrale et retrouver pour le courant de chaleur une expression similaire au cas discret.

Courants îlot vers électrode Le transfert îlot vers électrode est illustré en FIGURE 2.14b. Autour du niveau E', nous pouvons définir la fréquence de transfert tunnel entre $\mu_n + E'$ et $\mu_n + E' + dE'$:

$$d\Gamma_{\mathrm{dL}}(n) = \frac{1}{\hbar}|M_L(\mu_n + E', n)|^2 \rho_L(\mu_n)(1 - f_L(\mu_n + E', T)) g_{\mathrm{dot}}(n) A(E', \mu_n) dE' \quad (2.32)$$

Chaque électron partant du niveau n via l'énergie $\mu_n + E'$ a une charge $\bar{e}$ et une énergie $\mu_n + E'$. Ainsi, en sommant sur les N niveaux d'énergies disponibles et en intégrant sur

l'ensemble des E', nous obtenons le courant électrique I_{dL} et le courant de chaleur I^Q_{dL} :

$$\begin{aligned} I_{dL} &= \sum_n \int_{E'} \bar{e} P(n) d\Gamma_{\mathrm{dL}}(n) \\ &= \sum_n \bar{e} P(n) \Gamma_{\mathrm{dL}}(n) \end{aligned} \tag{2.33}$$

$$I^Q_{dL} = \sum_n \int_{E'} (\mu_n + E') P(n) d\Gamma_{\mathrm{dL}}(n) \tag{2.34}$$

De la même manière que dans le cas électrode vers îlot, nous retrouvons la formule du cas discret pour le courant électronique, pas pour le courant de chaleur.

Bilan sur un dispositif Les notations de la FIGURE (2.11) sont conservées.

Ainsi, en régime stationnaire, le courant électrique dans la source et dans le drain sont toujours les mêmes, nous avons donc :

$$I = I_S = I_D = \bar{e} \sum_n P(n)[\Gamma_{\mathrm{dS}}(n) - \Gamma_{Sd}(n)] = \bar{e} \sum_n P(n)[\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n) - \Gamma_{\mathrm{dD}}(n)] \tag{2.35}$$

On retrouve l'équation (2.24).

Pour les courants de chaleur, l'égalité entre les courants source et drain n'est plus vérifiée. La relaxation possible de l'électron dans l'îlot entre deux transferts tunnel induit une perte d'énergie au sein de l'îlot. Ainsi, nous pouvons toujours définir deux courants de chaleur dans les barrières d'oxyde I^Q_S et I^Q_D mais ils ne sont plus égaux. On notera I^Q_{dot} la différence entre les deux énergies, qui peut être associées aux pertes par effet conductif dues à l'îlot au sein du dispositif.

$$I^Q_S = \sum_n \int_{E'} (\mu_n + E')[P(n-1) d\Gamma_{Sd}(n-1) - P(n) d\Gamma_{\mathrm{dS}}(n)] \tag{2.36}$$

$$I^Q_D = \sum_n \int_{E'} (\mu_n + E')[P(n) d\Gamma_{\mathrm{dD}}(n) - P(n-1) d\Gamma_{\mathrm{Dd}}(n-1)] \tag{2.37}$$

$$I^Q_{dot} = I^Q_S - I^Q_D \tag{2.38}$$

2.4 Validité du modèle

Au cours de l'élaboration du modèle, nous avons parfois eu à faire des choix entre plusieurs méthodes, comme la détermination des potentiels à mi-barrière V_{0_S} et V_{0_D} pour

les éléments de matrice (dans (2.11) et (2.12)), ou le choix entre l'équation maîtresse ou une méthode Monte-Carlo. Cette section vise à expliquer et justifier ces choix. Nous vérifions également ici l'égalité des courants de chaleur I_S^Q et I_D^Q dans le cas de niveaux discrets (énoncée en (2.25)) et regardons l'effet de l'élargissement des niveaux sur le courant.

2.4.1 Choix du potentiel à mi-barrière V_{0_L}

Le potentiel à mi-barrière d'oxyde V_{0_L}, que l'on peut voir FIGURE 2.7 a été défini dans le cas de la double-jonction tunnel à partir d'une approximation linéaire du potentiel de polarisation ne dépendant que de la tension de drain V_{DS}, proposé par J. Sée dans [Sée 03] :

$$V_{0_S}(\text{Sée}) = \frac{-eV_{DS}}{L + d\left(\frac{\epsilon_{\text{SiO}_2}}{\epsilon_{\text{Si}}} - 1\right)} \frac{h_S}{2} \tag{2.39}$$

$$V_{0_D}(\text{Sée}) = -eV_{DS} + \frac{eV_{DS}}{L + d\left(\frac{\epsilon_{\text{SiO}_2}}{\epsilon_{\text{Si}}} - 1\right)} \frac{h_D}{2} \tag{2.40}$$

Si cette approximation s'avère concluante sur une DTJ, elle est plus discutable dans le cas d'un SET, car le potentiel de polarisation va aussi dépendre de la présence, sur l'axe y, d'un potentiel de grille. Nous avons donc le choix entre une expression analytique ou la récupération du potentiel de polarisation à mi-barrière calculé auparavant par la résolution de Poisson-Schrödinger. Néanmoins, une approximation demeure dans ces deux cas : nous considérons que ce potentiel choisi à mi-barrière sera le même suivant y et z. Cette approximation est d'autant plus forte dans le cas d'un SET, où une grille proche couplée à une tension de grille importante peut entraîner de fortes variations du potentiel de polarisation. Afin de montrer cela, nous avons choisi de comparer le potentiel analytique de J. Sée et deux potentiels de polarisation calculés par Poisson sans charge, pour un y correspondant au centre de l'îlot ($y = 0$) et un autre correspondant à la position du maximum de la densité électronique ($y = y(\max(\Psi^2_{dot}))$, positions repérées sur la FIGURE 2.15a), où on peut penser que la densité de courant sera la plus importante.

Nous voyons en FIGURE 2.15b, la forte influence de la grille sur le potentiel de polarisation pour une tension de grille de 2 V, avec une grille placée à 5 nm. La FIGURE 2.15c indique que cette influence augmente avec la tension de grille et donc nous contraint à choisir entre les deux potentiels récupérés depuis Poisson-Schrödinger. Le potentiel à $y = 0$

est plus facile à récupérer car cela ne nécessite pas d'analyser les résultats sur la fonction d'onde pour déterminer la position $y = y(\Psi^2_{max})$.

Sur la FIGURE 2.16, nous remarquons que la différence entre les courants obtenus pour un V_{pol} choisi à $y = 0$ et un autre à $y = y(max(\Psi^2))$ est faible, alors qu'avec le potentiel analytique la différence est nette. Pour cette raison, nous avons choisi pour le reste des calculs (et donc de ce manuscrit) de considérer les courants correspondants à un V_{pol} récupéré mathématiquement à $y = 0$.

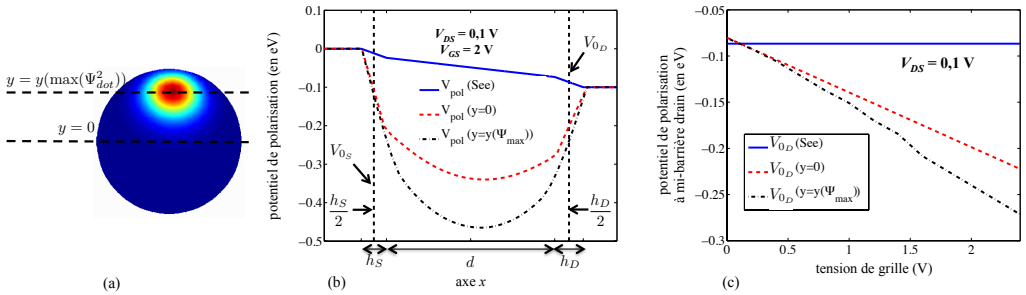


FIGURE 2.15 – (a) Densité électronique dans un îlot et repérage des positions $y = 0$ et $y = y(\max(\Psi^2_{dot}))$ (b) Allure des trois potentiels de polarisation étudiés suivant l'axe x et (c) Évolution des potentiels de polarisation en fonction de la tension de grille.

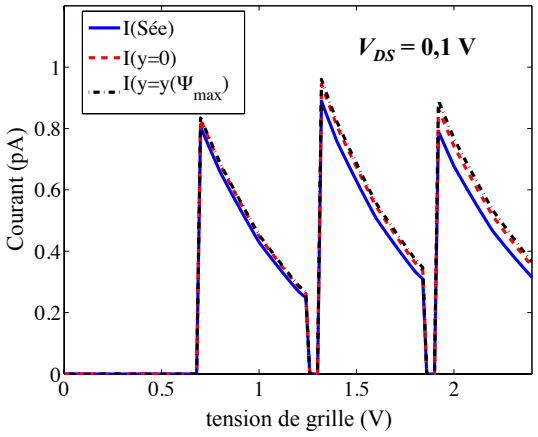


FIGURE 2.16 – Courant obtenu dans un SET pour trois potentiels à mi-barrière en fonction de la tension de grille, à $V_{DS} = 0,1$ V.

2.4.2 Equation maîtresse ou Monte-Carlo ?

Dans la section 2.2.3, nous avons présenté deux moyens de déterminer le courant dans les dispositifs à boites quantiques : l'équation maitresse et la méthode Monte-Carlo. Si

la méthode de l'équation maitresse permet d'obtenir rapidement un courant, la méthode Monte-Carlo présente l'avantage de suivre l'évolution du nombre d'électrons dans l'îlot en fonction du temps, et même l'évolution temporelle du nombre d'électrons passés à travers l'une ou l'autre jonction. Elle est donc très utile pour les calculs de bruit. La FIGURE 2.17 montre que quelle que soit la méthode utilisée, les courants obtenus dans un SET sont les mêmes, les petites fluctuations apparaissant dans la simulation Monte-Carlo pouvant être atténuées en augmentant le temps de simulation.

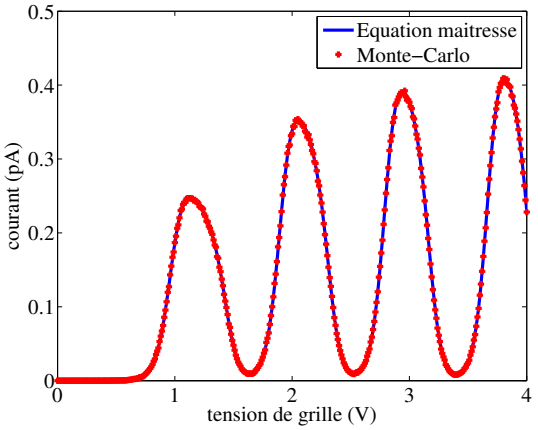


FIGURE 2.17 – Courant électronique calculé par l'équation maitresse et Monte-Carlo en fonction de la tension de grille pour un SET à $T = 100$ K et à $V_{DS} = 50$ mV.

2.4.3 Courants de chaleur sur niveaux discrets

Nous avons vu dans la section 2.2.3.3 et plus particulièrement dans l'expression (2.25) que, dans le cas d'un îlot à niveaux d'énergie discrets, le courant d'énergie passant dans la jonction tunnel source, et celui traversant la jonction drain étaient les mêmes. À l'inverse, nous avons également affirmé que ce n'était pas le cas si les niveaux sont élargis. Nous comparons donc en FIGURE 2.18 les courants de chaleur dans un SET à $T = 100$ K pour les deux électrodes. Nous constatons donc bien que les courants de chaleur source et drain sont les mêmes dans le cas d'îlot à niveaux discrets, tandis qu'une différence existe dans le cas d'îlot à niveaux élargis, différence due à la perte (gain) d'énergie dans l'îlot.

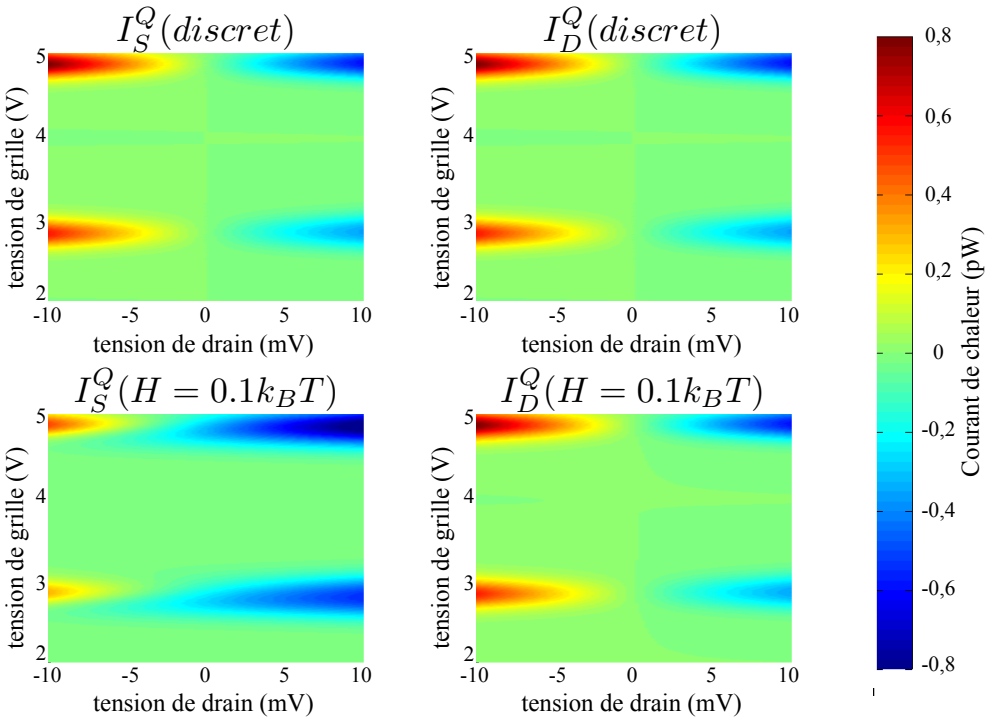
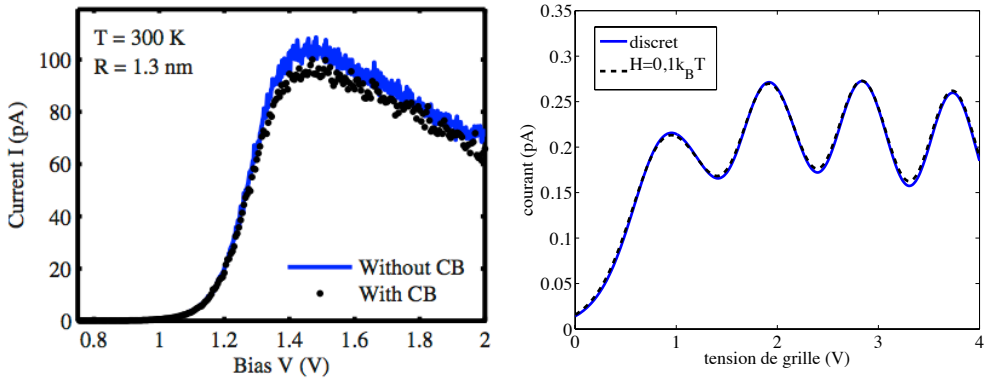


FIGURE 2.18 – Courants de chaleur source et drain en fonction de la tension de drain V_{DS} et de la tension de grille V_{GS}, dans le cas de niveaux discrets ou élargis, à $T = 100$ K.



(a) Double-jonction tunnel (b) Transistor à un électron

FIGURE 2.19 – Courant électronique avec et sans élargissement dans (a) une double jonction tunnel [Valentin 09a] et (b) un SET.

2.4.4 Effet de l'élargissement sur le courant à $\Delta T = 0$

Le courant de chaleur n'est pas le seul touché par l'élargissement des niveaux. Le courant électrique l'est également, car l'expression des taux de transfert tunnel est modifiée. A. Valentin avait calculé le courant dans une double-jonction tunnel constituée d'un îlot de diamètre $d = 2,6$ nm et à $T = 300$ K avec et sans *collisional broadening* (CB) [Valentin 09a](FIGURE 2.19a). Sur la FIGURE 2.19b, nous comparons le courant obtenu dans un même dispositif (îlot $d = 8$ nm et $T = 300$ K) à niveaux discrets et celui dans un dispositif à niveaux élargis, pour un élargissement constant $H = 0,1 k_B T$. Si le courant semble être atténué par l'élargissement des niveaux dans une double-jonction tunnel, il y a peu de différences avec ou sans élargissement pour le SET.

2.5 Conclusion

Nous avons donc présenté les caractéristiques du modèle SENS pour la simulation d'une double-jonction tunnel et d'un SET. Ce modèle se base entièrement sur une description physique des systèmes, rendant compte de la discrétisation des niveaux d'énergie et également de l'évolution des niveaux d'énergie dans l'îlot en fonction du nombre d'électrons dans la boîte, ainsi que des tensions appliquées aux électrodes, en résolvant les équations couplées de Poisson et Schrödinger.

Nous avons indiqué les différences entre la simulation d'une DTJ et d'un SET, en particulier pour la détermination du potentiel de polarisation dû aux électrodes. D'un point de vue pratique, l'ajout d'une grille plus éloignée de l'îlot que les deux autres électrodes a demandé une adaptation du maillage spatial du simulateur pour la résolution des équations de Poisson et Schrödinger. Dans le cadre d'un transport séquentiel, les taux de transfert tunnel sont obtenus par la règle d'or de Fermi, et les éléments de matrice quantifiant la transparence des barrières par le formalisme de Bardeen, l'approximation WKB permettant d'obtenir les fonctions d'onde électroniques aux électrodes. Le courant est ensuite calculé par résolution de l'équation maitresse ou par la méthode Monte-Carlo, selon l'usage souhaité, tandis que les courants de chaleur sont obtenus par l'équation maîtresse.

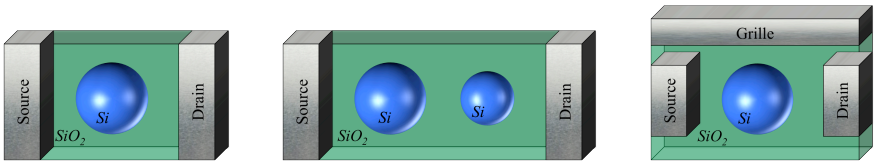
Ce modèle peut également inclure l'élargissement des niveaux par interactions électron-phonon, soit par un calcul complet, dont les détails sont donnés dans [Valentin 08], soit en considérant un élargissement simple Lorentzien. Ce dernier a été choisi dans cette thèse pour des raisons de temps de calculs. L'élargissement des niveaux nous permet notamment d'accéder aux pertes thermiques dues à la relaxation des électrons dans l'îlot, relaxation qui n'a pas lieu dans un niveau discret. La contribution de cet élargissement sera étudiée dans le chapitre consacré à la thermoélectricité dans les SET (chapitre 4).

Nous allons désormais nous intéresser au courant électronique dans les SET obtenus par SENS, en remontant jusqu'à l'analyse des fonctions d'onde obtenues par les équations couplées de Poisson et Schrödinger.

Chapitre 3

Étude du courant dans un SET

Le simulateur SENS a d'abord été développé par J. Sée lors de sa thèse pour la simulation de double-jonctions tunnel à îlots Silicium (FIGURE 3.1a) [Sée 03]. A. Valentin a ajouté un deuxième îlot dans l'oxyde (FIGURE 3.1b) et introduit le couplage entre les deux îlots ainsi que l'effet de l'interaction électron-phonon [Valentin 08]. Ces deux dispositifs à boîtes quantiques silicium ne sont pas étudiés pour être utilisés en tant que tel, mais dans le but de caractériser le transport électronique dans des structures à nanocristaux comme les transistors à un électron (SET) ou les mémoires flash.



(a) double-jonction tunnel [Sée 03]

(b) triple-jonction tunnel [Valentin 08]

(c) transistor à un électron [Cette thèse]

FIGURE 3.1 – Dispositifs simulés à l'aide du simulateur SENS.

Au cours de cette thèse, nous avons simulé un transistor à un électron (FIGURE 3.1c) consistant à contrôler le courant électronique dans l'îlot par la tension de grille. Ce dispositif est pressenti pour des applications en logique, couplé [Mahapatra 05] ou non [Chen 96, Maeda 12] à des composants CMOS, mais également en thermoélectricité [Nakpathomkun 11], et l'application du modèle à ce système permet de crédibiliser notre modèle en simulant un dispositif réel, largement étudié expérimentalement et théoriquement (voir à ce titre le chapitre introduction, section 1.3.2).

3.1 De la fonction d'onde au courant

Le SET étudié dans cette section est constitué d'un îlot sphérique de diamètre $d = 10$ nm, de barrières tunnel source et drain d'épaisseurs respectives $h_S = 1,5$ nm et $h_D = 1,7$ nm, et une épaisseur d'oxyde de grille $h_G = 5$ nm. Les électrodes sont en aluminium.

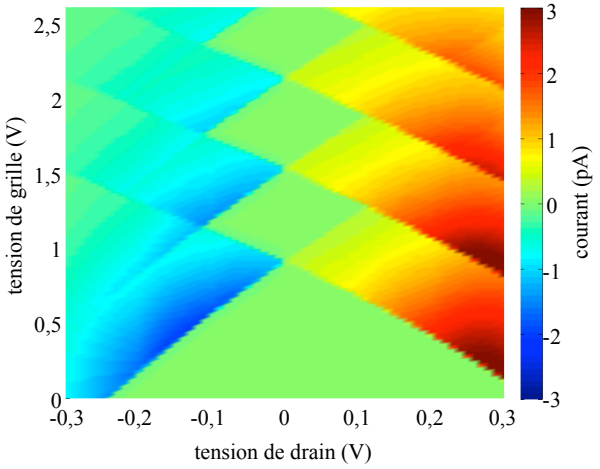


FIGURE 3.2 – Diagramme de stabilité du SET étudié à $T = 4,2$ K.

Le diagramme de stabilité du courant de drain à $T = 4,2$ K est donné en FIGURE 3.2. On observe un diagramme caractéristique en diamants, bien connu des travaux expérimentaux qu'ils soient à îlots métalliques ou semi-conducteurs [Shin 10, Hofheinz 07, Saitoh 04, Kobayashi 08, Wolf 10]. Les diamants représentent les zones de blocage de Coulomb ($I_D = 0$).

Un plan en coupe de ce diagramme à une tension de drain donnée ($V_{DS} = 20$ mV) conduit, en FIGURE 3.3a à une caractéristique courant de drain-tension de grille $I - V_{GS}$ en pics séparés de $\Delta V_{GS} = 0,6$ V, communément appelés oscillations de Coulomb [Shin 10, Hofheinz 07, Saitoh 04, Kobayashi 08].

L'écart entre les pics est lié à une grandeur appelée capacité de grille C_G, par la relation $C_G = e/\Delta V_{GS}$, d'où $C_G = 0,26aF$. [1]

1. Il est nécessaire de noter que cette capacité n'est pas celle du condensateur grille-oxyde-îlot semi-conducteur. La "capacité de grille" définie dépend évidemment des paramètres géométriques du dispositif, mais pas uniquement de l'îlot et de la grille.

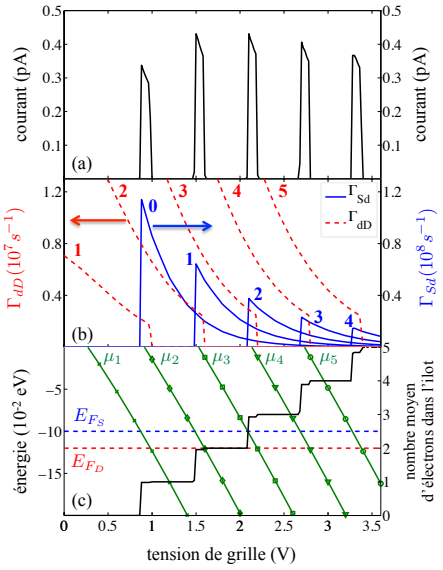


FIGURE 3.3 – (a)Courant de drain, (b) taux de transfert tunnel et (c) potentiels chimiques, niveaux de Fermi des électrodes et nombre moyen d'électrons en fonction de la tension de grille.

3.1.1 Des potentiels chimiques aux pics de courant

Les oscillations de Coulomb sont clairement expliquées par les taux de transfert tunnel (FIGURE 3.3b), et par la position des potentiels chimiques du i^{e} électron dans l'îlot μ_i par rapport aux niveaux de Fermi des électrodes E_{F_S} et E_{F_D} (FIGURE 3.3c) : le potentiel chimique de l'électron sur le 1er niveau μ_1 diminue lorsque la tension de grille augmente. Dès que le potentiel devient inférieur au niveau de Fermi de la source E_{F_S}, un premier électron peut passer de la source à l'îlot : le taux de transfert tunnel $\Gamma_{\mathrm{Sd}}(0)$ augmente brutalement. L'électron peut alors rejoindre l'électrode drain, on a apparition d'un courant, jusqu'à ce que μ_1 soit inférieur au niveau de Fermi du drain E_{F_D}. Le taux de transfert $\Gamma_{\mathrm{dD}}(1)$ devient nul, le SET est mis à l'état OFF et l'électron dans la boîte ne peut plus sortir. C'est pour cela que le nombre moyen d'électrons dans l'îlot lorsque $I = 0$ reste 1 (FIGURE 3.3). Il faut donc attendre que μ_2 soit inférieur à E_{F_S} pour faire passer un 2e électron et retrouver du courant. Ce comportement rejoint celui prévu dans le chapitre introductif, section 1.3.1, dans l'étude du fonctionnement d'un SET à îlot métallique.

3.1.2 À propos de la hauteur des oscillations

La hauteur du n^{e} pic de courant est liée au temps moyen pour que l'électron au n^{e} niveau fasse le trajet source-drain, c'est-à-dire $1/\Gamma_{\text{Sd}}(n-1) + 1/\Gamma_{\text{dD}}(n)$. Dans le SET considéré, l'oxyde source est plus fin que l'oxyde drain, ce qui conduit à un taux de transfert source vers îlot $\Gamma_{\text{Sd}}(n-1)$ un ordre de grandeur plus grand que $\Gamma_{\text{dD}}(n)$, pour les trois premiers pics. L'îlot a donc tendance à être plus longtemps au niveau n qu'au niveau $n-1$ (confirmé en FIGURE 3.3c). Nous pouvons donc négliger le temps $1/\Gamma_{\text{Sd}}(n-1)$, et le courant est contrôlé par le taux de transfert tunnel îlot vers drain $\Gamma_{\text{dD}}(n)$. Ici, nous avons $\Gamma_{\text{dD}}(1) < \Gamma_{\text{dD}}(2) = \Gamma_{\text{dD}}(3)$ à l'endroit de leurs pics de courant respectifs, ce qui donne en FIGURE 3.3a un premier pic moins haut que les deux suivants qui ont la même valeur. Pour les pics suivants, les taux de transfert tunnel sont plus proches, il faut donc considérer l'expression complète $1/\Gamma_{\text{Sd}}(n-1) + 1/\Gamma_{\text{dD}}(n)$ pour déterminer la hauteur des pics. Nous constatons donc une réduction de l'écart entre les taux de transferts d'entrée et de sortie lorsque le nombre d'électrons sur l'îlot augmente. La compréhension de ce phénomène necessite de revenir plus en amont aux termes permettant d'obtenir ces taux.

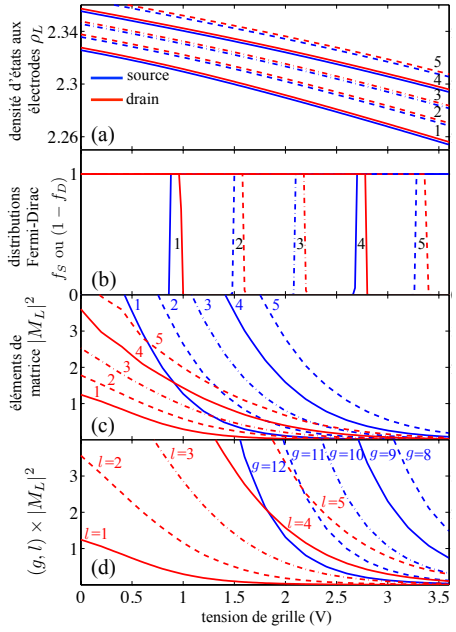


FIGURE 3.4 – (a)densités électroniques dans les électrodes, (b)statistiques de Fermi-Dirac, (c) éléments de matrice et (d) éléments de matrice multipliés par le nombre approprié d'états libres l ou occupés g , à l'énergie μ_n, en fonction de la tension de grille.

3.1.3 Lecture approfondie des taux de transfert tunnel

Le lien entre épaisseurs d'oxyde et taux de transfert tunnel est moins évident qu'il n'y parait et demande une analyse approfondie de l'expression des taux de transfert tunnel, dont l'expression est donnée en (2.8) mais que nous rappelons ici :

$$\begin{cases} \Gamma_{\mathrm{Sd}}(n) = \frac{2\pi}{\hbar}|M_S(\mu_{n+1}, n+1)|^2 \rho_S(\mu_{n+1}) l_{\mathrm{dot}}(n) f_S(\mu_{n+1}, T) \\ \Gamma_{\mathrm{dD}}(n) = \frac{2\pi}{\hbar}\int |M_D(\mu_n, n)|^2 \rho_L(\mu_n) g_{\mathrm{dot}}(n)(1 - f_D(\mu_n, T)) \end{cases} \tag{3.1}$$

Les densités électroniques dans les électrodes ρ_L, les statistiques de Fermi-Dirac f_L, les éléments de matrice $|M_L|^2$ et ces mêmes éléments de matrice pondérés par le nombre approprié d'états libres l_{dot} ou d'états occupés g_{dot} dans l'îlot, sont donnés dans la FIGURE 3.4. Les densités d'états dans les électrodes, pour un même niveau, sont sensiblement les mêmes dans les deux électrodes, et ne peuvent donc pas expliquer ce rapprochement des taux de transfert tunnel. À cette faible température, les statistiques de Fermi-Dirac f_D et f_S (FIGURE 3.4c) ne jouent le rôle que de "laisser-passer", induisant les augmentations ou chutes brutales des taux de transfert tunnel.

Les éléments de matrice quantifient la transparence des barrières en calculant le recouvrement entre la fonction d'onde électronique dans l'îlot et la fonction d'onde de l'électrode source ou drain au milieu des barrières d'oxyde. Comme nous pouvions le prévoir, étant donné que l'oxyde coté source est plus fin que celui coté drain, la barrière source est plus transparente que la barrière drain, et donc, pour un même nombre d'électrons dans l'îlot, on a $|M_S|^2 > |M_D|^2$. Nous remarquons également que la transparence d'une même barrière (source ou drain) est plus importante quand le nombre d'électrons dans l'îlot est grand. À ce stade, ces considérations simples ne permettent pas encore d'expliquer le rapprochement des taux de transfert tunnel observé en FIGURE 3.3b.

Mais si nous remarquons que les courbes des éléments de matrice ont les mêmes allures, chacune d'entre elles est décalée de $\Delta V_{GS} = 0,35$ V par rapport à la précédente, du coté source comme du coté drain. En outre, nous constatons que la décroissance des éléments de matrice est plus rapide du coté source que du coté drain. Étant donné que l'écart entre les courbes de transparence est plus petit que l'écart entre les pics de courant (de 0,6 V),

l'écart entre les taux de transfert tunnel d'entrée et de sortie de l'îlot tend à diminuer d'un pic à l'autre.

Cet effet est encore accentué quand nous les multiplions ces éléments de matrice en FIGURE 3.4d par le nombre approprié d'états libres $l_{\mathrm{dot}}(n-1)$ (dans le cas d'un transfert tunnel électrode source vers îlot) et occupés $g_{\mathrm{dot}}(n)$ (transfert îlot vers drain). Puisqu'au fur et à mesure que l'îlot se remplit, le nombre de places libres l_{dot} diminue, et que le nombre de places occupées g_{dot} augmente, l'écart entre ces éléments de matrice pondérés se réduit quand le nombre d'électrons augmente. Nous verrons lors de l'étude de l'effet de la dimension des barrières tunnel que ces places libres ou occupées dans l'îlot peuvent conduire à des comportements contre-intuitifs.

Nous avons donc expliqué la réduction de l'écart entre les taux de transfert tunnel quand le nombre d'électrons dans l'îlot augmente, mais nous n'avons toujours pas d'explication sur la décroissance de ces taux de transfert tunnel avec la tension de grille. Pour cela, il faut remonter au résultat brut de notre simulation : les fonctions d'onde électroniques.

3.1.4 Des fonctions d'onde dans l'îlot blotties dans l'îlot

Pour remonter plus en amont dans l'étude du courant et des taux de transfert tunnel, il convient donc de jeter un oeil à la cartographie des densités électroniques dans l'îlot, FIGURE 3.5. Nous voyons comment la polarisation de grille influe fortement sur la fonction d'onde et concentre le nuage électronique dans un volume plus petit vers l'oxyde de grille. On peut alors considérer qu'il y a une augmentation de la distance effective entre les électrodes source/drain et le nuage électronique. En conséquence, la densité électronique à mi-barrières source et drain sont des fonctions décroissantes de la tension de grille, comme représenté sur la FIGURE 3.6, ce qui conduit à un comportement similaire des éléments de matrice et des taux de transfert tunnel (voir FIGURE 3.4c et FIGURE 3.3b respectivement).

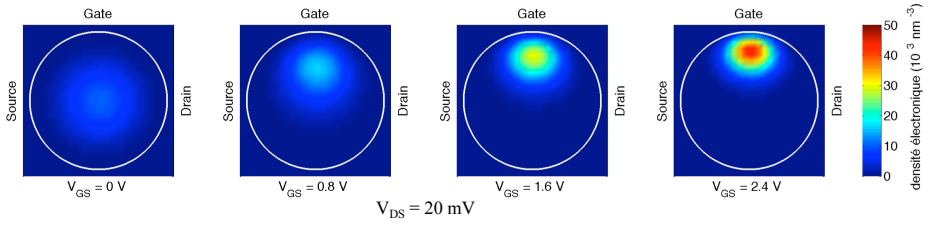


FIGURE 3.5 – Évolution de la densité électronique au sein de l'îlot avec la tension de grille à une tension de drain donnée $V_{DS} = 20$ mV et un électron dans l'îlot.

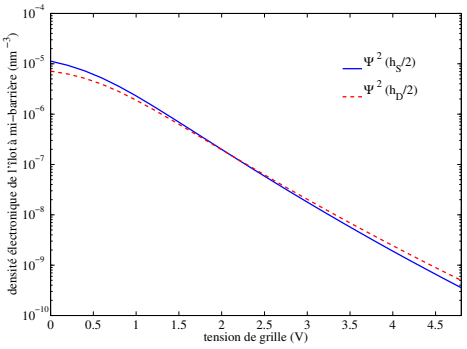


FIGURE 3.6 – Évolution de la densité électronique de l'îlot à mi-barrière source et drain avec la tension de grille.

Quid de la caractéristique $I_D - V_{DS}$? Dans le cas d'une double-jonction tunnel, il a été montré que le déplacement et la localisation de la densité électronique vers le coté drain de l'îlot induit par la tension de drain est responsable du phénomène de résistance différentielle négative [Sée 06a, Sée 03]. Ce décalage de la fonction d'onde avec la tension de drain est également visible dans les SET en FIGURE 3.7, et, les mêmes causes produisent les mêmes effets, nous observons de la résistance différentielle négative sur la caractéristique courant - tension de drain FIGURE 3.8. Le décalage de la fonction d'onde coté drain avec la tension favorise de plus en plus la sortie de l'électron ($\Gamma_{\mathrm{dD}}(n)$) par rapport à son entrée ($\Gamma_{\mathrm{Sd}}(n-1)$). Lorsque $\Gamma_{\mathrm{Sd}}(n-1) < \Gamma_{\mathrm{dD}}(n)$, le courant est contrôlé par Γ_{Sd} qui diminue : nous sommes en zone de résistance différentielle négative.

Le comportement du SET est désormais bien compris, en remontant des caractéristiques courant-tension aux fonctions d'onde. Dans la section suivante, nous analysons l'influence des paramètres géométriques et de la température sur les caractéristiques courant-tension.

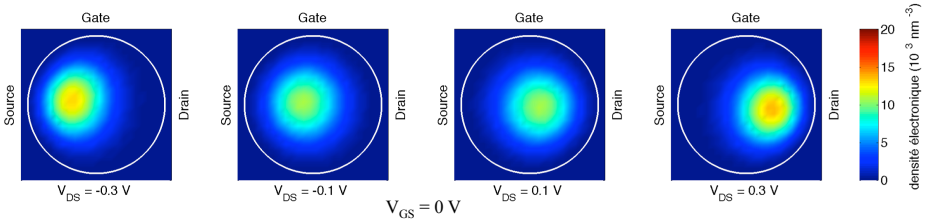


FIGURE 3.7 – Évolution de la densité électronique au sein de l'îlot avec la tension de drain à une tension de grille donnée $V_{GS} = 0$ V et un électron dans l'îlot.

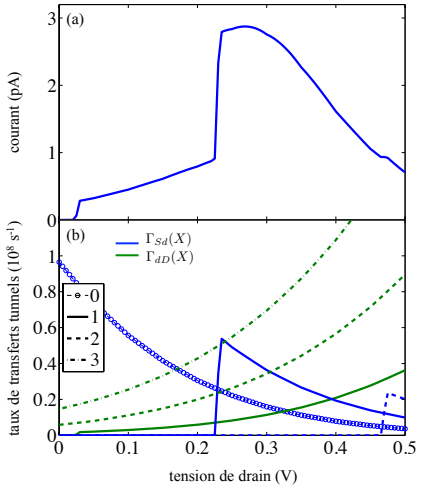


FIGURE 3.8 – (a) Caractéristique courant-tension de drain pour $V_{GS} = 1$ V, et (b) les taux de transfert tunnel en fonction de la tension de drain.

3.2 Influence des paramètres géométriques et de la température

Cette partie est consacrée à l'étude des différents paramètres physiques du SET, permettant ainsi de dégager des contraintes techniques pour obtenir des courants plus importants et des oscillations de Coulomb à température ambiante.

3.2.1 Influence de la taille et de la forme de l'îlot - Surface effective en regard de l'électrode grille

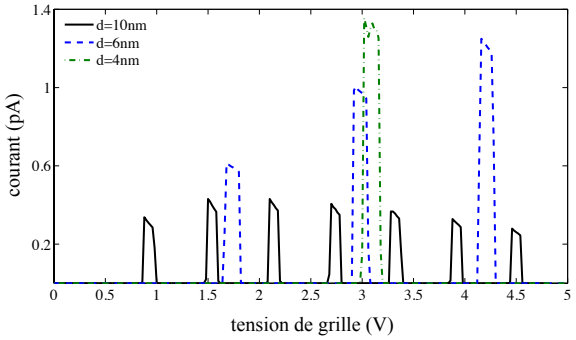


FIGURE 3.9 – Caractéristique courant-tension de grille à $V_{DS} = 20$ mV, $T = 4,2$ K pour trois différents diamètres d'îlot, avec $h_S = 1,5$ nm, $h_D = 1,7$ nm et $h_G = 5$ nm.

Diamètre de l'îlot L'influence du diamètre de l'îlot sur le courant est montré FIGURE 3.9. La première caractéristique remarquable porte sur l'énergie de charge, c'est à dire l'énergie à apporter au dispositif pour voir le premier pic : plus l'îlot est petit, plus l'énergie de charge est grande. Les premiers pics se situent à $0,88$, $1,67$, et $3,01$ V pour des îlots de diamètre $d = 10$, 6, et 4 nm, respectivement. Les écarts entre les pics peuvent être analysés en termes de capacité de grille C_G associée à une énergie e^2/C_G : un petit îlot conduisant à un écart important, donc une capacité de grille faible. En effet, la surface en regard de l'électrode étant plus petite avec la réduction du diamètre de l'îlot, la capacité de grille diminue. Nous obtenons $C_G = 0,08$, $0,13$, et $0,26$ aF pour $d = 4$, 6, et 10 nm, respectivement. La hauteur du premier pic est également corrélée à la taille de l'îlot via la pénétration de la fonction d'onde dans les barrières tunnel. Les densités électroniques pour un électron sur le premier niveau d'énergie, prises à mi-barrière d'oxyde, sont données FIGURE 3.10. Ces densités sont plus élevées lorsque les îlots sont petits, ce qui conduit à des taux de transfert tunnel et des pics de courant plus élevés.

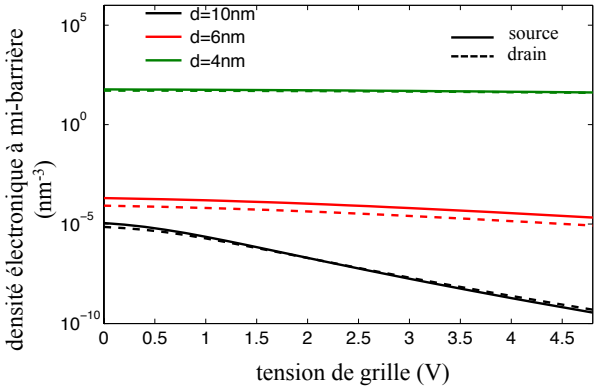


FIGURE 3.10 – Densité électronique pour un électron dans l'îlot, à mi-barrières source et drain, $y = 0$ en fonction de la tension de grille, pour les trois SET étudiés en FIGURE 3.9.

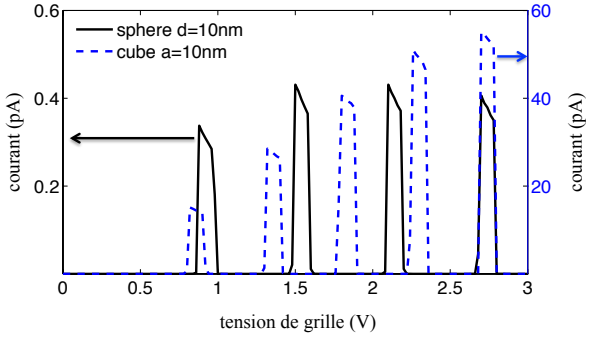


FIGURE 3.11 – Caractéristique courant-tension de grille à $V_{DS} = 20$ mV, $T = 4,2$ K pour deux SET aux formes d'îlots différents, avec $h_S = 1,5$ nm, $h_D = 1,7$ nm et $h_G = 5$ nm.

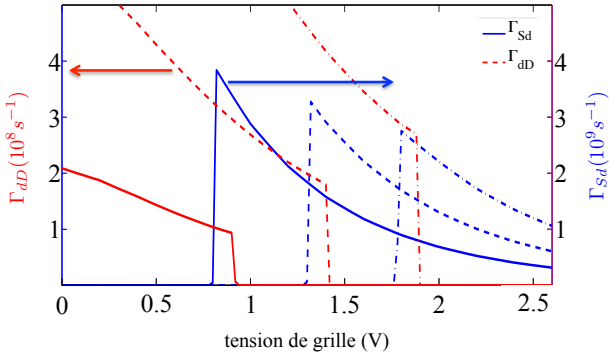


FIGURE 3.12 – Taux de transfert tunnel en fonction de la tension de grille, pour le SET à îlot sphérique.

Géométrie de l'îlot Notre modèle est également en mesure de simuler tout type de forme pour l'îlot. Dans la FIGURE 3.11, les caractéristiques courant-tension sont données pour un îlot sphérique et un cube d'arête égale au diamètre de la sphère, c'est-à-dire 10 nm. Dans l'îlot cubique, la surface effective en regard des électrodes source et drain est beaucoup plus importante, ce qui conduit à des hauteurs de pics de courant deux ordres de grandeur supérieurs à celle de la structure à îlot sphérique. En outre, du fait du déplacement électronique de la fonction d'onde vers l'électrode de grille avec polarisation de grille discuté dans la section précédente (FIGURE 3.5), le transfert tunnel devient plus difficile dans le dispositif à îlot sphérique parce que la distance effective îlot-électrode augmente lorsque l'on s'éloigne du centre. Cet effet n'existe pas dans le dispositif à îlot cubique. Dès lors, lorsque l'on augmente le nombre n d'électrons dans l'îlot, le taux de transfert tunnel $\Gamma_{\mathrm{dD}}(n)$ augmente également, conséquence de l'augmentation du nombre d'états occupés $g_{\mathrm{dot}}(n)$, comme illustré FIGURE 3.12. La hauteur des pics successifs est donc en constante augmentation, contrastant ainsi avec les pics du dispositif à îlot sphérique, qui ont tous même hauteur.

Enfin, nous observons que la distance entre les pics est plus faible dans le dispositif à îlot cubique que dans celui sphérique. Comme dans le cas d'îlot de diamètre plus large, la surface en regard de l'électrode grille est bien plus grande dans le cas cubique ce qui conduit à une plus grande capacité de grille C_G. ($0,34$ contre $0,26$ aF).

3.2.2 Influence des épaisseurs d'oxyde - États libres et occupés dans l'îlot

Épaisseur d'oxyde de grille L'effet de l'épaisseur d'oxyde de grille est relativement trivial. Tous les paramètres égaux par ailleurs, une augmentation de l'épaisseur d'oxyde de grille entraîne une réduction de la capacité de grille et, par conséquent, une plus grande distance entre les pics des caractéristiques $I_D - V_{GS}$, comme on le voit sur la FIGURE 3.13. Bien que le comportement du dispositif reste inchangé (même intensité de courant pour un même pic), quand la grille est plus éloignée, une plus grande variation de la tension de grille est nécessaire pour atteindre un même niveau de charge dans l'îlot.

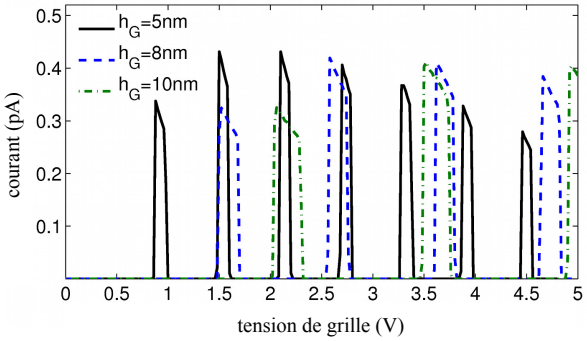


FIGURE 3.13 – Caractéristique courant-tension de grille à $V_{DS} = 20$ mV, $T = 4,2$ K pour trois SET aux épaisseurs d'oxyde de grille différentes, avec $d = 10$ nm, $h_S = 1,5$ nm, et $h_D = 1,7$ nm.

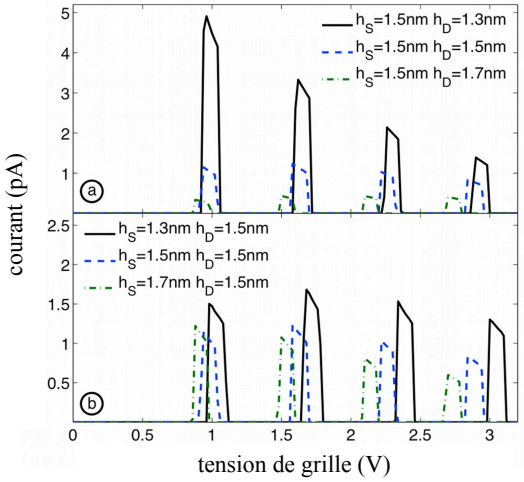


FIGURE 3.14 – Caractéristique courant-tension de grille pour trois SET avec différentes épaisseurs d'oxyde (a) source et (b) drain, à $V_{DS} = 20$ mV, $T = 4,2$ K, avec $d = 10$ nm et $h_G = 5$ nm.

Épaisseur d'oxyde de source et de drain Les effets des épaisseurs source et drain sont représentés FIGURE 3.14. La réduction de l'un de ces paramètres devrait induire a priori des énergies de chargements plus faibles, une distance réduite entre les pics (conséquence de capacités plus grandes) et des pics de courant plus élevées. En effet, on observe en FIGURE 3.14a qu'une diminution de l'épaisseur d'oxyde coté drain augmente notablement le courant. Cet effet est nettement moins prononcé pour une même réduction de l'épaisseur de l'oxyde de source (voir FIGURE 3.14b).

Un coup d'oeil sur les taux de transfert tunnel pour des épaisseurs d'oxyde de source différentes donnés en FIGURE 3.15 permet de voir que pour le premier électron sur le niveau, le taux de transfert tunnel à travers la barrière de source $\Gamma_{\mathrm{Sd}}(0)$, de $1,7$ nm d'épaisseur, est supérieur au taux de transfert tunnel îlot vers drain $\Gamma_{\mathrm{dD}}(1)$ dans une barrière drain pourtant plus fine $(1,5$ nm$)$! (FIGURE 3.15c)

Comme nous l'avons mentionné précédemment en section 3.1, ce comportement surprenant peut en réalité être expliqué en considérant le nombre d'états disponibles l_{dot} ou occupés g_{dot} dans l'îlot lors du transfert tunnel.

La transparence des barrières $|M_L|^2$ pour différents nombres d'électrons dans l'îlot, ainsi que ces mêmes transparences multipliées par le nombre approprié d'états libres ou occupés sont présentées sur la FIGURE 3.16 pour le dispositif de barrière tunnel source et drain de $1,7$ nm et $1,5$ nm respectivement. Pour le premier niveau, la transparence de la barrière drain $|M_D|^2$ est bien entendu plus élevée que celle de la source $|M_S|^2$; mais $|M_D|^2$ est

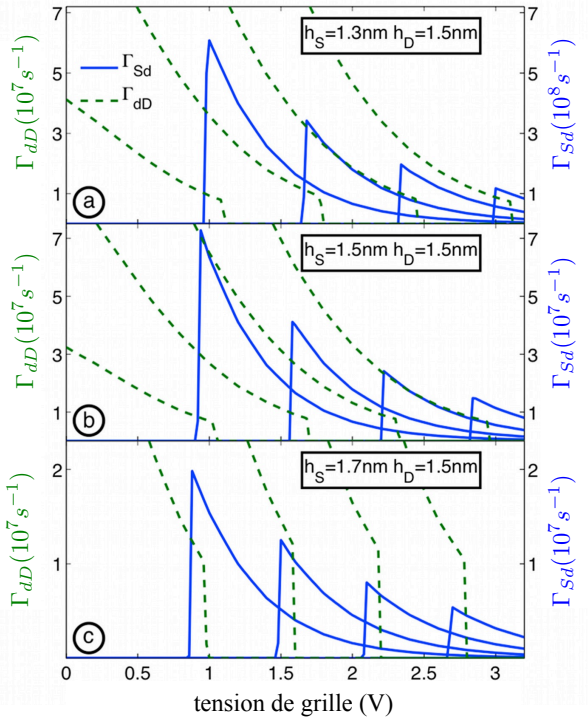


FIGURE 3.15 – Taux de transfert tunnel pour les trois SET à épaisseurs d'oxyde drain variable étudiés FIGURE 3.14b. Pour des raisons de clarté, l'échelle n'est pas la même pour Γ_{Sd} et Γ_{dD} .

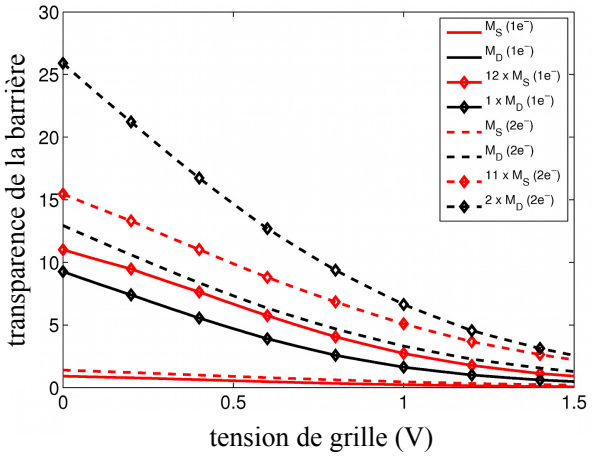


FIGURE 3.16 – Transparence des barrières, et transparence multipliée par le nombre adéquat d'états libres ou occupés dans l'îlot, pour $V_{DS} = 20$ mV, $T = 4,2$ K, avec $d = 10$ nm, $h_S = 1,7$ nm, $h_D = 1,5$ nm, et $h_G = 5$ nm.

seulement multiplié par le nombre d'états occupés $g_{\text{dot}} = 1$, tandis que $|M_S|^2$ est multiplié par le nombre d'états libres $l_{\text{dot}} = 12$ (car aucun électron n'est dans l'îlot lors du transfert source vers îlot, et le niveau est 12 fois dégénéré). Ainsi, à l'endroit du premier pic, le transfert tunnel le plus rapide est celui de source vers îlot. Comme le nombre d'états libres (occupés) diminue (augmente) avec le nombre d'électrons dans l'îlot, un comportement plus intuitif est observé pour les pics suivants. Cette description permet aussi d'expliquer que, pour le dispositif symétrique (même épaisseur d'oxyde tunnel), les taux de transfert tunnel source vers îlot et îlot vers drain donnés FIGURE 3.15b sont différents.

Donc, pour conclure, nous devons garder à l'esprit que la contribution des états libres et occupés sur le niveau fondamental 12 fois dégénéré de l'îlot renforce la transparence de l'oxyde source. On peut donc considérer l'électrode source comme étant "plus proche" qu'elle ne l'est, alors que l'oxyde drain n'est pas touché par cet effet. En augmentant le nombre d'électrons dans l'îlot, l'électrode source "s'éloigne" puisque le nombre d'états libres diminue, tandis que l'électrode drain "se rapproche", par l'augmentation du nombre d'états occupés [2].

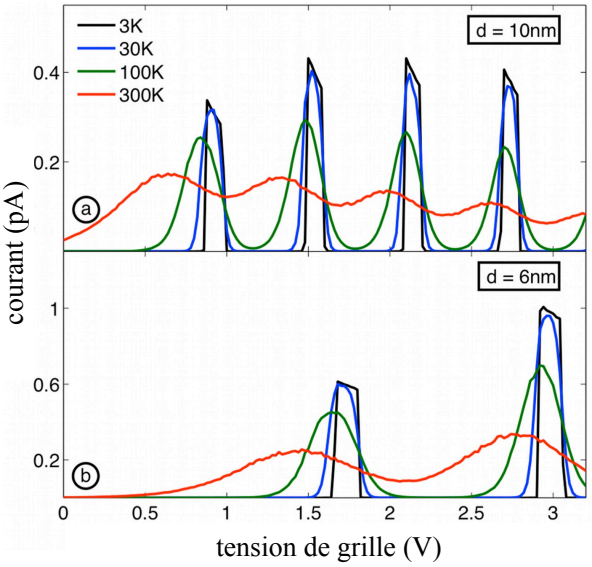


FIGURE 3.17 – Caractéristique courant-tension de grille à différentes températures pour deux SET d'îlots de diamètres différents, pour $V_{DS} = 20$ mV avec $h_S = 1,5$ nm, $h_D = 1,7$ nm, et $h_G = 5$ nm.

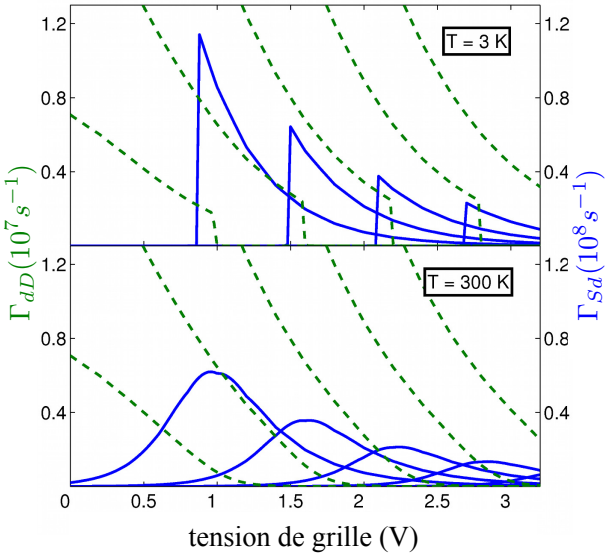


FIGURE 3.18 – Taux de transfert tunnel à basse température et à température ambiante pour $V_{DS} = 20$ mV avec $d = 10$ nm, $h_S = 1,5$ nm, $h_D = 1,7$ nm, et $h_G = 5$ nm.

3.2.3 Influence de la température

Les caractéristiques $I_D - V_{GS}$ du SET étudié en section 3.1 sont présentées FIGURE 3.17 à des températures différentes sur la plage $[4,2 - 300\ K]$ et pour deux diamètres de l'îlot. Dans le modèle, l'effet de la température est pris en compte dans les distributions de Fermi-Dirac $f_L(\mu_n, T)$ des électrodes, dans le calcul des taux de transferts tunnel (2.8). Comme prévu, pour les deux dispositifs, lorsque l'on augmente la température, les pics de courant sont lissés, ce qui conduit à des pics très larges à température ambiante. Pour l'îlot de 10 nm, l'effet du blocage de Coulomb disparaît même, tandis qu'il semble survivre dans l'îlot de 6 nm jusqu'à une polarisation de grille de $0,5$ V. Dans le cas d'un diamètre autour de 2 nm, il a été montré expérimentalement que de fortes oscillations de Coulomb sont toujours visibles à température ambiante [Shin 10]. Le comportement du courant avec la température est entièrement lié aux lissages des taux de transfert tunnel, comme nous le montre la FIGURE 3.18.

3.2.4 Conclusion

Notre modèle permet de décrire efficacement le comportement d'un transistor à un électron, quelque soit la température, la forme de l'îlot et l'épaisseur des barrières tunnel. On peut ainsi retrouver les diagrammes en diamants et les oscillations de Coulomb, caractéristiques classiquement observées sur les SET expérimentaux. Ce modèle nous permet également d'expliquer précisément la position et l'intensité relative des pics de courant à partir des énergies et des fonctions d'onde obtenues par l'algorithme Poisson-Schrödinger. La surface en regard de l'électrode de grille ainsi que le nombre d'états libres ou occupés dans l'îlot sont deux paramètres importants dans la détermination du courant dans les SET.

L'adaptabilité du modèle SENS à de nombreux dispositifs (trois dispositifs élémentaires ont déjà été simulés dans l'équipe- double-jonction tunnel, triple-jonction tunnel et SET) pourrait permettre à l'avenir de simuler d'autres dispositifs, tels que les SET à double îlot, qui au lieu de caractéristiques en diamants présentent des caractéristiques en "nid

2. Dans ces expressions, les guillemets s'imposent, car il n'y a bien entendu pas de rapprochement ou d'éloignement physique de l'électrode !

d'abeilles", ou à plus grande échelle en incluant les nanocristaux à la place d'une grille flottante dans une mémoire flash, ou encore dans une cellule photovoltaïque.

Le simulateur SENS pourrait donc servir de base à l'élaboration et la validation d'un modèle macroscopique plus compact, où des couches de nanocristaux seraient en jeu dans un dispositif.

Nous allons désormais étudier les transistors à un électron utilisés en tant que module thermoélectrique, une de ses applications les plus prometteuses.

Chapitre 4

Application du SET à la thermoélectricité

Nous avons vu dans le premier chapitre, section 1.4, que les dispositifs à boîtes quantiques ont *a priori* un bon potentiel en tant que dispositifs thermoélectriques, en particulier grâce aux niveaux d'énergies discrets, ou au moins très fins, sur lesquels les transferts électroniques se font à énergie constante. On considère alors que le transport de chaleur dans le dispositif est entièrement advectif (c'est-à-dire, par déplacement macroscopique des charges), puisqu'aucun échange d'énergie ne se fait dans l'îlot. L'intérêt de ces dispositifs devient alors clair en rappelant la définition de la figure de mérite :

$$ZT = \frac{G_e \alpha^2 T}{K} \tag{4.1}$$

où G_e est la conductance électronique, α le coefficient Seebeck et $K = K_e + K_p$, la conductance thermique, comprenant la conductance thermique due aux électrons K_e et celle due aux phonons K_p. La conductance thermique due aux électrons K_e dans le cas de niveaux discrets est nulle, augmentant ainsi la figure de mérite.

Toutes ces données nécessaires au calcul de la figure de mérite, à l'exception de la conductance thermique des phonons, peuvent être calculées à partir des courants de charge et de chaleur pour des tensions et des températures données, accessibles dans notre modèle. Jusqu'à présent nous avons uniquement étudié les dispositifs à une même température, mais nous pouvons tout à fait imposer deux températures différentes aux électrodes, via les statistiques de Fermi-Dirac dans (2.8). Dans le cadre d'une réponse linéaire, le formalisme d'Onsager-Callen définit le courant électrique I et le courant de chaleur I^Q par les relations,

avec la convention de signe donnée FIGURE 4.1 [Callen 48, Onsager 31] :

$$I = \alpha G_e \Delta T + G_e V_{DS} \tag{4.2}$$

$$I^Q = \alpha I T - K \Delta T \tag{4.3}$$

On peut tirer de ces relations - donc de nos simulations - les paramètres thermoélectriques :

$$G_e = \left(\frac{dI}{dV_{DS}}\right)_{\Delta T=0} \tag{4.4}$$

$$\alpha = \frac{1}{G_e}\left(\frac{dI}{d\Delta T}\right)_{V_{DS}=0} = -\left(\frac{V_{DS}}{\Delta T}\right)_{I=0} \tag{4.5}$$

$$K = -\left(\frac{I^Q}{\Delta T}\right)_{I=0} \tag{4.6}$$

Si la conductance électronique au sein des dispositifs à un électron reste relativement faible, celle thermique – par les électrons, et cette précision est importante – est quasiment nulle. La figure de mérite pourrait atteindre des valeurs intéressantes, à condition que les niveaux soient suffisamment fins, c'est-à-dire que la conductance thermique soit suffisamment faible, et que la géométrie du dispositif permette une conductance électrique suffisamment grande. En raison du blocage de Coulomb, le fonctionnement thermoélectrique en générateur (c'est à dire autour de $V_{DS} = 0$) ne peut pas être possible dans une double-jonction tunnel. Par contre, dans les SET, il existe des valeurs de V_{GS} telles que $(\Delta I/\Delta V_{DS})_{\Delta T=0} \neq 0$ au voisinage de $V_{DS} = 0$ V. C'est donc aux alentours de ces tensions de grille qu'il conviendra de considérer l'étude du SET comme générateur thermoélectrique.

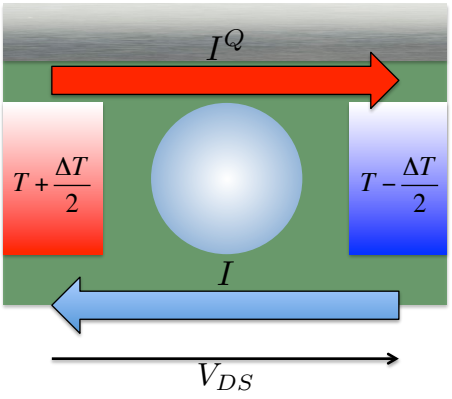


FIGURE 4.1 – Schéma du SET simulé, températures aux deux électrodes source (chaude) et drain (froide) et convention de signe pour le calcul des courants et des tensions.

Nous avons vu dans les chapitres précédents que la température du dispositif était prise en compte dans notre simulateur, au niveau du calcul des taux de transfert tunnel (2.8), dans les statistiques de Fermi-Dirac liées aux électrodes. Pour visualiser les effets thermoélectriques dans les SETs, nous avons donc fixé une température différente aux électrodes source et drain. Lors de cette étude, nous avons considéré une température moyenne T, tandis que les électrodes source et drain ont été mises à $T + \Delta T/2$ et $T - \Delta T/2$ respectivement, avec ΔT positif. Cette configuration est illustrée dans la FIGURE 4.1.

Lors de l'étude du courant dans un SET, faite dans le chapitre 3, des épaisseurs d'oxydes ainsi qu'un îlot de taille réduite, cubique dans un cas idéal, permettent d'atteindre des courants importants. Mais nous savons qu'expérimentalement les îlots sphériques sont les plus fréquents. Le SET choisi pour cette étude est donc constitué d'un îlot sphérique de diamètre de $4,4$ nm, avec des oxydes source, drain et grille d'épaisseurs respectives $1,2$ nm, $1,5$ nm et 5 nm. Ces épaisseurs sont fines, ce qui devrait conduire à des conductances électriques assez fortes. L'étude est faite autour d'une température moyenne $T = 100$ K. Ces calculs sont faits pour différents élargissements des niveaux d'énergie – conduisant ainsi à des figures de mérites finies.

Le choix d'un îlot de diamètre $4,4$ nm a été motivé par le fait que nous disposions dans l'équipe des données concernant les modes de phonons dans un îlot de telle dimension, grâce aux calculs réalisés par Audrey Valentin [Valentin 08]. Néanmoins, pour des raisons pratiques (temps de calcul) les densités spectrales obtenues n'ont pas été utilisées. Nous avons donc pris l'approximation de niveaux élargis en Lorentzienne, de mi-hauteur H écrits en fonction de $k_B T$ (expression de la fonction spectrale donnée en (2.26)). Cette approximation sera discutée lors de l'étude des coefficients Seebeck.

Dans un premier temps, cette étude se concentrera sur le numérateur de la figure de mérite ZT, en étudiant le coefficient Seebeck ainsi que le facteur de puissance $f = G_e \alpha^2$. Une application du SET en tant qu'étalon pour le coefficient Seebeck sera proposée.

Nous nous intéresserons ensuite aux courants de chaleur, qui nous mèneront aux conductances thermiques, aux figures de mérite ZT, ainsi qu'au rendement du SET en tant que générateur thermoélectrique. N'ayant pas accès aux conductances thermiques dues aux phonons, nous nous contenterons donc de calculer des ZT « électroniques ». Ces figures

de mérite seront alors relativisées en intégrant une contribution des phonons basée sur la valeur de la conductance thermique dans la silice massive.

4.1 Conductance électronique, coefficient Seebeck et facteur de puissance

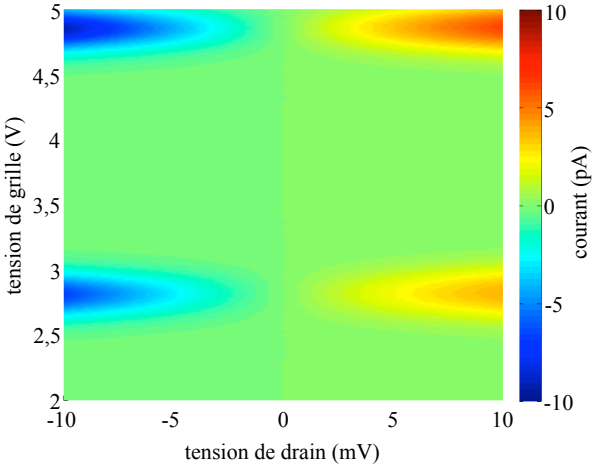


FIGURE 4.2 – Diagramme de stabilité du SET étudié, à température moyenne $T = 100$ K et une différence de température entre les deux électrodes $\Delta T = 5$ K.

Le courant obtenu pour le SET étudié est donné en FIGURE 4.2. Nous nous sommes volontairement placés à des tensions de drain faibles, afin d'avoir un maximum de points calculés autour de $V_{DS} = 0$ V, où l'on détermine la conductance électronique G_e, quand $\Delta T = 0$. On retrouve donc un "zoom" sur les diamants vus au chapitre précédent.

Afin que ce SET présente des figures de mérite intéressantes, il faut donc se placer autour des tensions de grille où la conductance électronique est maximum à une tension de drain nulle, et donc où le blocage de Coulomb disparait. La conductance électronique, et le coefficient Seebeck peuvent être obtenus à partir de ces diagrammes.

4.1.1 Determination de la conductance électronique et du coefficient Seebeck

Les expressions permettant de déterminer la conductance électronique G_e et le coefficient Seebeck α sont donnés en (4.4) et (4.5). Il y a deux expressions du coefficient Seebeck,

l'une, obtenue par le formalisme d'Onsager-Callen $\alpha_{OC} = G_e^{-1}(dI/d\Delta T)_{V_{DS}=0}$, et l'autre, qui traduit directement l'effet Seebeck, c'est-à-dire la création d'une différence de potentiel induite par une différence de température en circuit ouvert : $\alpha_S = -(V_{DS}/\Delta T)_{I=0}$.

Ces calculs sont fait dans l'approximation d'un régime linéaire, c'est-à-dire d'une conductance indépendante de la tension de drain, et d'un coefficient Seebeck indépendant du gradient de température. La caractéristique courant-tension à $T = 100$ K donnée FIGURE 4.3 pour une tension de grille $V_{GS} = 2,67$ V (correspondante du premier pic du facteur de puissance, on le verra plus tard) confirme l'hypothèse linéaire pour la conductance. Cette figure démontre également la présence d'un courant non nul à $V_{DS} = 0$, ouvrant ainsi la possibilité d'utiliser le SET en mode générateur, réfrigérateur ou pompe à chaleur, toujours de manière linéaire. Le coefficient Seebeck "par méthode Seebeck" α_S peut alors être déterminé, en notant V_{oc} (oc pour *open-circuit*) la tension à laquelle le courant est nul ; on a alors $\alpha_S = V_{\mathrm{oc}}/\Delta T$.

Pour comprendre l'augmentation du courant par l'application d'un différentiel de température, il faut regarder les taux de transfert tunnel à cette même tension de grille donnés en FIGURE 4.4. Nous l'avons vu au chapitre précédent, les taux de transfert tunnel sont intimement liés aux courants. Dans le chapitre 2, nous avons vu que l'influence de la température est prise en compte dans les taux de transfert tunnel via les distributions de Fermi-Dirac aux électrodes (équation (2.8)). Pour fixer les idées, nous avons schématisé en FIGURE 4.5 les diagrammes de bande avec les distributions de Fermi aux électrodes avec et sans différentiel de température, à $V_{DS} = 0$ V. À $V_{GS} = 2,67$ V, les niveaux aux électrodes L $E_{F_L} < \mu_1$, et pour $\Delta T > 0$, $f_L(T + \Delta T/2) > f_L(T) > f_L(T - \Delta T/2)$. On obtient donc $\Gamma_{\mathrm{Sd}}(T + \Delta T/2) > \Gamma_{\mathrm{Sd}}(T)$ et $\Gamma_{\mathrm{dD}}(T - \Delta T/2) > \Gamma_{\mathrm{dD}}(T)$. Les deux fréquences de passage du chaud vers le froid augmentent. Suivant le même raisonnement, les taux de transfert du froid vers le chaud diminuent. Il est donc tout naturel que le courant augmente, et on obtient donc un courant non nul bien que l'on soit à $V_{DS} = 0$ V.

L'indépendance du coefficient Seebeck par rapport au gradient de température est démontré par la FIGURE 4.6, pour deux tensions de grille, même dans le cas d'un élargissement des niveaux d'énergies de $H = 0,1k_BT$. Les hypothèses de linéarité étant vérifiées, nous pouvons désormais nous intéresser aux performances thermoélectriques du SET.

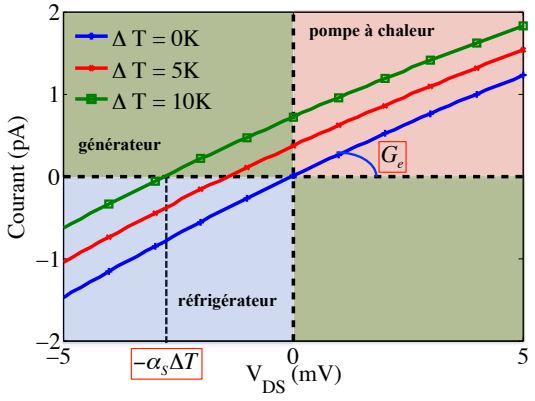


FIGURE 4.3 – Caractéristiques courant-tension de drain pour 3 gradients de température, à $V_{GS} = 2,67$ V.

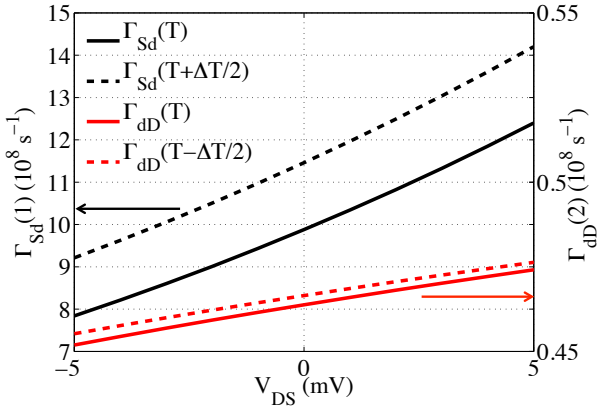


FIGURE 4.4 – Taux de transfert tunnel d'entrée (Γ_{Sd}) et de sortie (Γ_{dD}) en fonction de la tension de grille pour $\Delta T = 0$ K et $\Delta T = 10$ K, à $V_{GS} = 2,67$ V.

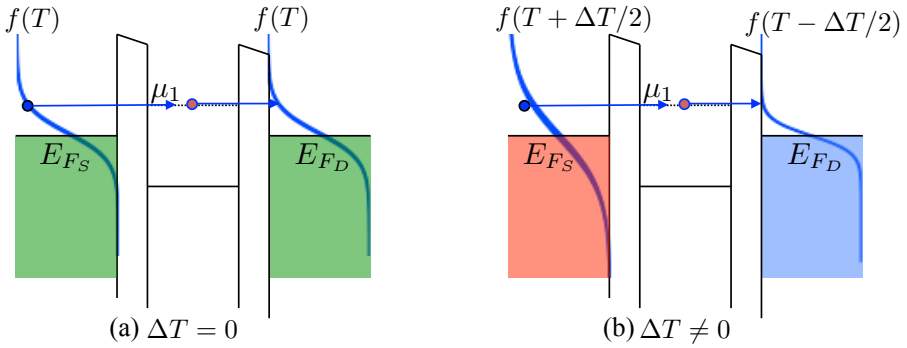


FIGURE 4.5 – Diagramme en bandes et distribution de Fermi-Dirac, à $V_{DS} = 0$ V, dans les cas (a) $\Delta T = 0$ et (b)$\Delta T \neq 0$.

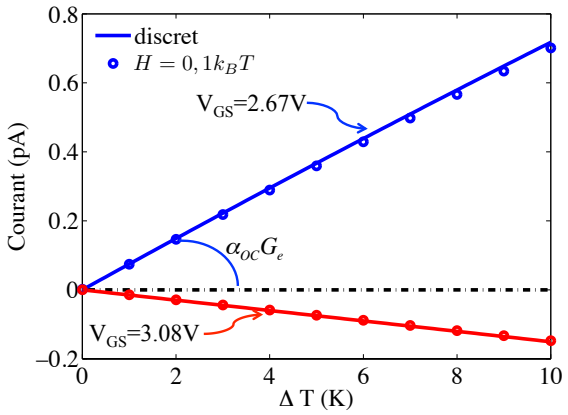


FIGURE 4.6 – Courant à $V_{DS} = 0$ V en fonction du gradient de température aux électrodes autour de 100 K, pour deux tensions de grilles.

4.1.2 Facteur de puissance

La conductance G_e, le coefficient Seebeck α et le facteur de puissance $G_e\alpha^2$ ont été calculés en fonction de la tension de grille et sont présentés pour différents élargissement de niveaux d'énergies en FIGURE 4.7

L'évolution de G_e montre deux pics qui correspondent évidemment aux tensions de grille où les niveaux d'énergie dans l'îlot μ_i et le niveau de Fermi des électrodes E_{F_L} sont alignés, même si le maximum se trouve avant l'alignement des niveaux d'énergie.

Le coefficient Seebeck décroit linéairement avec la tension de grille autour du niveau μ_1 et atteint 0 lorsque $\mu_i = E_{F_L}$. Il bascule ensuite brutalement de valeurs négatives à positives, ce qui est caractéristique de l'activation du niveau d'énergie correspondant au passage du deuxième électron. Ces oscillations avaient été prévues par Beenakker [Beenakker 92]. L'élargissement des niveaux a pour conséquence d'activer plus rapidement le passage d'un électron sur le deuxième niveau, réduisant ainsi la plage de tension sur laquelle le coefficient Seebeck est linéaire.

La valeur du coefficient Seebeck, entre 0 et 1 mV/K à 100 K situe le SET dans les très bons dispositifs à pouvoir thermoélectrique, puisque l'un des matériaux les plus courants de la thermoélectricité, le tellurure de bismuth(III), affiche un coefficient Seebeck de 870 μV/K

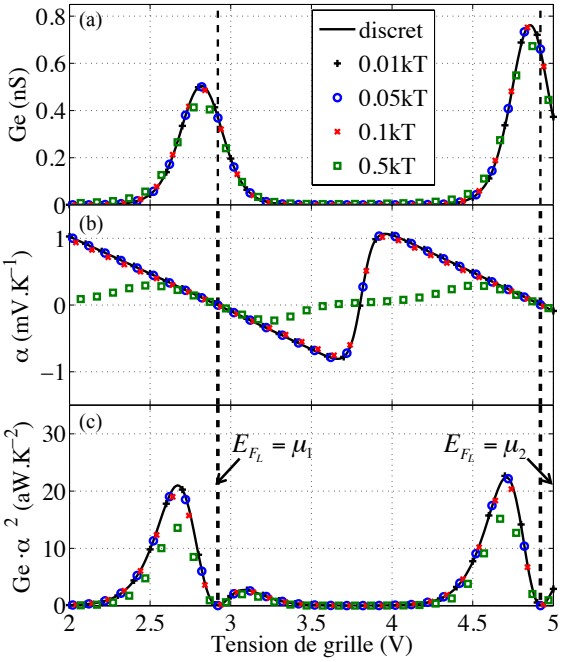


FIGURE 4.7 – (a) Conductance électronique, (b) coefficient Seebeck et (c) facteur de puissance en fonction de la tension de grille, pour 5 élargissements de niveaux dans l'îlot.

à 327 K [Tan 05]. Des coefficients du même ordre de grandeur que dans le SET ont été calculés dans des rubans de graphène nanostructurés [Mazzamuto 11a].

Pour avoir un facteur de puissance maximum, il faut donc trouver un compromis entre une conductance forte (autour de $\mu_i = E_{F_L}$) et un fort coefficient Seebeck (nul à $\mu_i = E_{F_L}$). Ainsi, le premier pic du facteur de puissance se trouve à $V_{GS} = 2,67$ V, tandis que le maximum de conductance est à $V_{DS} = 2,82$ V. Après que le facteur de puissance tombe à zéro pour $\mu_i = E_{F_L}$, un pic secondaire apparaît, correspondant à un coefficient Seebeck de nouveau non négligeable, et à une conductance électronique faible mais non nulle. La même situation se retrouve à hauteur du deuxième niveau d'énergie, pour un pic plus important, conséquence d'une conductance électronique plus grande. Ce facteur de puissance est seulement de l'ordre de la vingtaine d'attowatt par kelvin carré, la faute à une conductance électrique très faible. Mais il faut relativiser cette faible valeur en la rapportant aux dimensions du système. En effet, le courant circule au travers une surface que l'on peut

considérer comme l'aire du disque de l'îlot considéré, c'est-à-dire $S = 15$ nm^2, et dès lors le facteur de puissance par unité de surface a une valeur raisonnable de $1,3$ W.m^{-2}.K^{-2}.

Nous allons maintenant tirer profit de la linéarité des coefficients Seebeck, à niveau faiblement élargi, pour présenter une application possible du SET en tant qu'étalon pour la thermoélectricité.

4.1.3 Le SET comme étalon thermoélectrique

Le coefficient Seebeck est une grandeur cruciale dans l'étude d'un dispositif thermoélectrique. Devant le grand intérêt porté vers cette application, il devient important d'avoir à disposition des appareils de mesure de cette grandeur, à l'échelle nanoscopique idéalement. Jusqu'à présent les étalons ont une précision de ± 10 μV/K, ou jusqu'à 10% de la valeur des coefficients Seebeck [Lu 09]. Les dispositifs à boîtes quantiques ont des coefficients de Seebeck qui sont linéaires, et qui ne dépendent pas du matériau, mais seulement de la température moyenne du dispositif et de l'écart $(\mu_i - E_{F_L})$ entre le niveau d'énergie dans l'îlot μ_i et le niveau de Fermi des électrodes à $V_{DS} = 0$ V [Beenakker 92, Svensson 12]. Ainsi, comme le suggère [Mani 11], les dispositifs à un électron seraient d'excellents candidats comme étalons intrinsèques, indépendants du matériau et à échelle nanoscopique pour le coefficient Seebeck.

Le "Seebeck idéal" est défini comme :

$$\alpha_{idéal} = \frac{\mu_i - E_{F_L}}{eT} \tag{4.7}$$

où e est la charge élémentaire d'un électron.

Nous avons donc tracé en FIGURE 4.8 le Seebeck obtenu pour plusieurs élargissements en fonction du "Seebeck idéal". Nous voyons que sur l'intervalle $[-1$ mV, 1mV$]$, et pour des élargissements allants jusqu'à $H = 0,05 k_B T$, le coefficient Seebeck se comporte bel et bien comme le "Seebeck idéal". Nous avons donc montré avec notre modèle, en simulant un dispositif à boîte quantique réaliste, que le SET pourrait effectivement être un bon "standard" pour le coefficient Seebeck. À condition d'être dans le cas d'élargissements inférieurs à $H = 0,05 k_B T$, qui sont, nous allons le voir tout de suite, loin d'être incohérents.

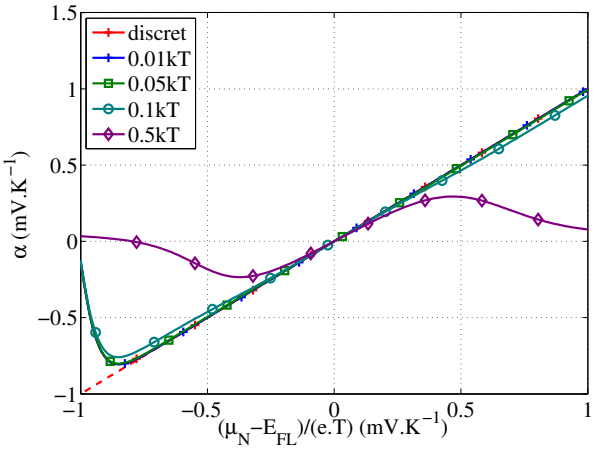


FIGURE 4.8 – Coefficient Seebeck en fonction du "Seebeck idéal" pour 5 élargissements de niveaux.

4.1.4 Limite à l'approximation de l'élargissement des niveaux

L'introduction dans le modèle d'un élargissement de niveau Lorentzien au lieu des fonctions spectrales calculées par Audrey Valentin [Valentin 08] à partir d'un calcul complet des interactions électron-phonon a été motivée par la nécessité de calculs rapides par l'équation maitresse, et donc d'éviter un calcul Monte-Carlo nécessitant un tirage au sort de mode de phonons à chaque nouveau passage d'électrons (voir également dans le chapitre modèle, section 2.3). Néanmoins, à partir des calculs complets réalisés par Audrey Valentin, nous avons pu récupérer les modes de phonons les plus susceptibles d'être activés à $T = 100$ K. Les fonctions spectrales (non-Lorentziennes) correspondant à ces modes présentent un pic central de largeur à mi-hauteur entre $H = 0,001 k_B T$ et $0,05 k_B T$.

Dès lors, considérer des élargissements plus importants dans l'îlot revient à chauffer artificiellement l'îlot ! Dans ce qui suit, nous allons considérer un système à deux réservoirs (chaud - source et froid - drain), et calculer les transferts électroniques et thermiques entre ces deux électrodes. Dans le cas de niveaux plus élargis, il serait alors plus juste de considérer que nous sommes dans un système à trois réservoirs, avec l'îlot en tant que réservoir intermédiaire qui peut perdre ou gagner de l'énergie par la relaxation des électrons en son sein. Cela a des conséquences remarquables dans la détermination des coefficients Seebeck.

Nous avons dit dans la partie précédente qu'il y avait deux manières de calculer le coefficient Seebeck, soit par "Onsager-Callen", soit par "Seebeck". Les deux méthodes doivent donner les mêmes résultats, mais également être indépendantes du gradient de température. Ainsi, en FIGURE 4.9, nous montrons le coefficient Seebeck calculé par les deux méthodes, pour trois gradients de température différents, dans le cas d'un niveau d'énergie réaliste $H = 0,01k_BT$, et dans le cas d'un "îlot chauffé", $H = 0,1k_BT$. Nous remarquons

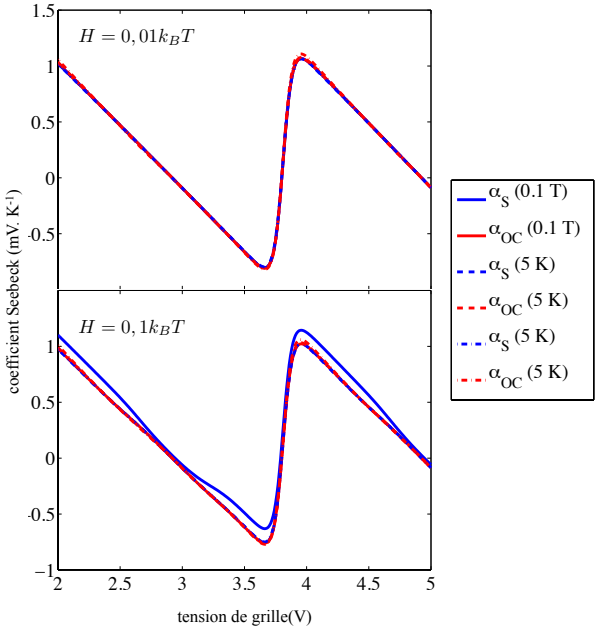


FIGURE 4.9 – Coefficients Seebeck obtenus par la méthode Onsager-Callen α_{OC} et Seebeck α_S en fonction de la tension de drain, pour 3 gradients de température et deux élargissements.

donc que si les coefficients Seebeck correspondent pour l'élargissement réaliste, le coefficient calculé par la méthode "Seebeck" pour un élargissement de $H = 0,1k_BT$ et $\Delta T = 0,1$ K ne s'accordent plus. Plus étonnant encore, lorsque nous regardons les caractéristiques $I - V_{DS}$ à $V_{GS} = 3,66$ V, $H = 0,1k_BT$ pour $\Delta T = 0$ K et $\Delta T = 0,1$ K, en FIGURE 4.10 nous remarquons pour $V_{DS} = 0$ et $\Delta T = 0$ K, que le courant est très faible mais pas nul!!! Cette anomalie peut donc être expliquée par la présence d'un différentiel de température, non pas entre les deux électrodes, mais entre l'îlot et les électrodes ($T_{îlot} > T_{élec}$), qui induit ce courant dans le dispositif. On peut donc considérer une expression "corrigée" du calcul

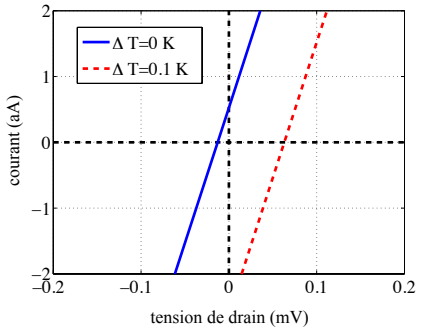


FIGURE 4.10 – Caractéristiques courant-tension de drain à $V_{GS} = 3,66$ V, pour un élargissement $H = 0,1k_BT$, avec et sans gradient de température aux électrodes.

par la méthode de Seebeck, prenant en compte ce courant à $\Delta T = 0$ K :

$$\alpha_S = -\frac{(V_{DS})_{I=0,\Delta T} - (V_{DS})_{I=0,\Delta T=0}}{\Delta T} \tag{4.8}$$

En retraçant les coefficients Seebeck de la FIGURE 4.9b en incluant la correction dans la méthode Seebeck, les coefficients correspondent tous (FIGURE 4.11). Le choix de l'élargis-

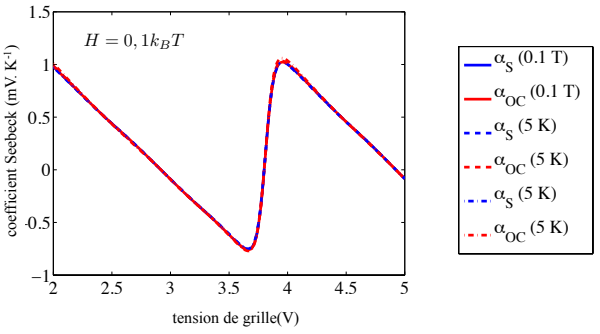


FIGURE 4.11 – Coefficient Seebeck "corrigé" en fonction de la tension de grille, à un élargissement $H = 0,1k_BT$, pour trois différences de température aux électrodes.

sement des niveaux n'est donc pas anodin, et les calculs développés en amont par Audrey Valentin, à défaut d'être utilisés pour des calculs longs, doivent servir de référence. Dans le reste de l'étude, nous nous contenterons donc d'étudier des élargissements réalistes, c'est-à-dire $0,05k_BT$ et $0,01k_BT$.

4.2 Conductance thermique, figure de mérite et rendement

L'étude d'un dispositif en générateur thermoélectrique nécessite de calculer un courant de chaleur I^Q_{CHAUD}, qui correspond à la puissance retirée à la source chaude quand un électron quitte le réservoir. S'il le quitte à l'énergie $\mu_N + E'$ (en reprenant les notations de la section 2.3.3 qui calculait des flux de chaleur dans une jonction tunnel), la chaleur retirée au réservoir chaud vaut $\mu_N + E' - E_{F_S}$. Ainsi le courant de chaleur est défini, en reprenant toujours les notations du chapitre destiné au modèle (chapitre 2) :

$$I^Q_{CHAUD} = \sum_n \int_{E'} (\mu_n + E' - E_{F_S})[P(n-1)d\Gamma_{\mathrm{Sd}}(n-1) - P(n)d\Gamma_{dS}(n)] \tag{4.9}$$

Le formalisme d'Onsager-Callen donne ce courant "chaud" également en fonction des grandeurs utiles à la thermoélectricité (voir (4.3)). Le terme $\alpha T I$ est le terme advectif (transfert thermique associé à un mouvement macroscopique) tandis que le terme $-K\Delta T$ est un terme conductif (pertes thermiques). Dans notre modèle, ce dernier est appelé I^Q_{dot}, défini en (2.38). Ainsi, la conductance thermique peut-être déterminée en calculant :

$$K_e = -\left(\frac{I^Q_{CHAUD}}{\Delta T}\right)_{I=0} = -\frac{I^Q_{dot}}{\Delta T} \tag{4.10}$$

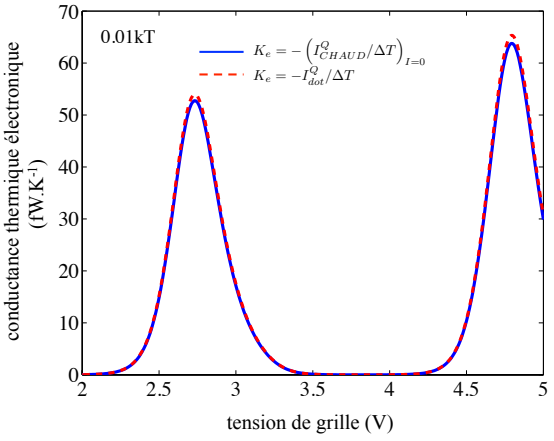


FIGURE 4.12 – Conductance thermique des électrons déterminée par deux méthodes de calcul en fonction de la tension de grille, pour $\Delta T = 5$ K, et un élargissement $H = 0,01 k_B T$.

Nous avons tracé en FIGURE 4.12 la conductance thermique dans le cas d'un îlot avec un élargissement $H = 0,1k_BT$, par les deux méthodes de calculs, et pour deux différences de température. Si ces courbes confirment bien l'équivalence des deux méthodes de détermination des pertes thermiques, on constate que la conductance thermique dépend du gradient de température : elle semble diminuer avec une augmentation du différentiel de température. Nous devons donc déterminer le ZT à une température et une différence de température aux électrodes données. Dans le reste de ce chapitre nous considérerons donc les calculs à $T = 100$ K et $\Delta T = 5$ K. La conductance thermique est très faible, de l'ordre du femtowatt par Kelvin, bien qu'il faille encore la relativiser par rapport aux dimensions du systèmes, comme dans le cas du calcul du facteur de puissance. Ainsi, on obtient une puissance perdue par différentiel de température et par unité de surface, assez élevée, autour de 30 $\mathrm{W.K^{-1}.m^{-2}}$.

4.2.1 De grandes figures de mérite dans des îlots de petits élargissements

Les figures de mérite que l'on pourrait qualifier d'électronique $ZT_{élec}$, étant donné que nous ne considérons que la conductance thermique des électrons, sont tracées en compagnie du facteur de puissance calculé précédemment et de la conductance thermique électronique pour deux élargissements réalistes ($H = 0,01k_BT$ et $H = 0,05k_BT$) en FIGURE 4.13.

Les figures de mérite obtenues pour des élargissements correspondant à la température de l'îlot ont des valeurs très intéressantes : tandis qu'on évalue à 2 la valeur du ZT (à 300 K) pour pouvoir rivaliser sur le marché, ils atteignent ici des valeurs proches de 100 pour un faible élargissement, 3 pour un élargissement un peu plus élevé ($0,05k_BT$), la conductance thermique augmentant avec l'élargissement (augmentation des pertes dans l'îlot, donc l'électron peut plus "relaxer").

Mais une bonne figure de mérite n'est qu'un premier indicateur pour envisager un dispositif thermoélectrique. Il faut, comme tout moteur thermique, pouvoir fournir une puissance importante, en limitant les pertes (donc augmenter le rendement). La difficulté est de trouver un bon compromis entre ces deux caractéristiques

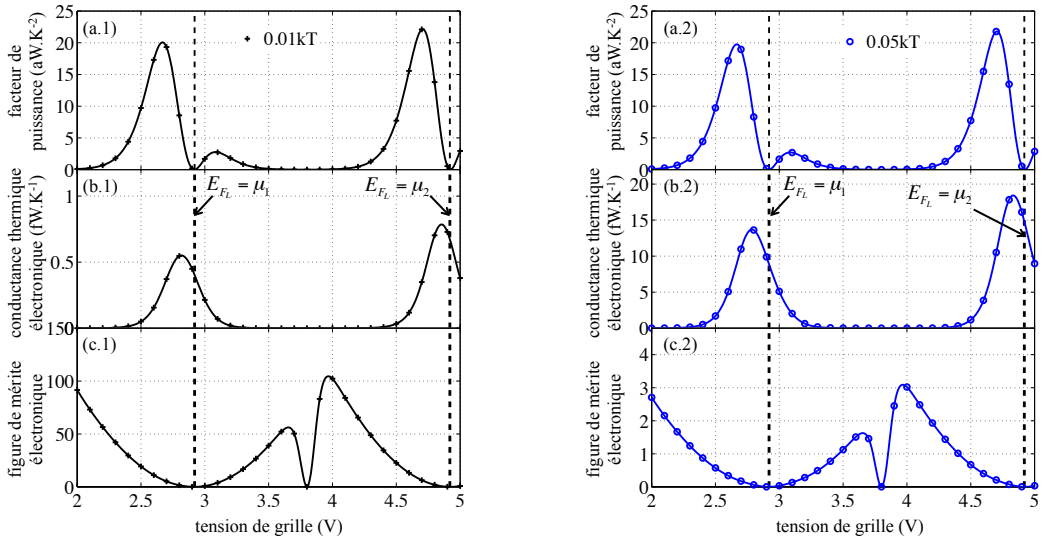


FIGURE 4.13 – (a) Facteur de puissance, (b) conductance thermique des électrons et (c) figure de mérite électronique en fonction de la tension de grille, pour 2 élargissements.

4.2.2 Le difficile compromis entre puissance et rendement

En utilisant la convention de signe de la FIGURE 4.1, la puissance fournie par le générateur est $P = -I \cdot V_{DS}$, et le rendement thermodynamique est alors donné par la relation $\eta = P/I^Q_{CHAUD}$. Afin de minimiser les pertes, ce rendement doit s'approcher du rendement maximal d'une machine de Carnot, c'est-à-dire :

$$\eta_C = \frac{\Delta T}{T_{CHAUD}} = \frac{\Delta T}{T + \Delta T/2} \tag{4.11}$$

Le SET fonctionne en générateur lorsque P est positif, c'est à dire lorsque I et V_{DS} sont de signes opposés. Ainsi, dans la FIGURE 4.14, nous avons tracé la puissance et le rendement normalisé par le rendement de Carnot, lorsque la puissance est positive, pour un élargissement de $0,01 k_B T$, et une différence de température de $\Delta T = 5$ K. Les courbes rejoignent celles obtenues par Nakpathomkun *et al.* dans le cadre d'un transport cohérent entre les deux électrodes [Nakpathomkun 10b].

Les puissances maximales se situent à $V_{GS} = 2,67$ V et 4,71 V, qui correspondent aux pics du facteur de puissance vus FIGURE 4.7. Elles se situent à une tension de drain $V_{\mathrm{oc}}/2$ afin de maximiser le produit $-I \times V_{DS}$ (P étant nul à $V_{DS} = 0$ et V_{oc}). Une nouvelle fois, les faibles valeurs de puissance (0,14 fW à puissance maximum) sont à relativiser, avec nos

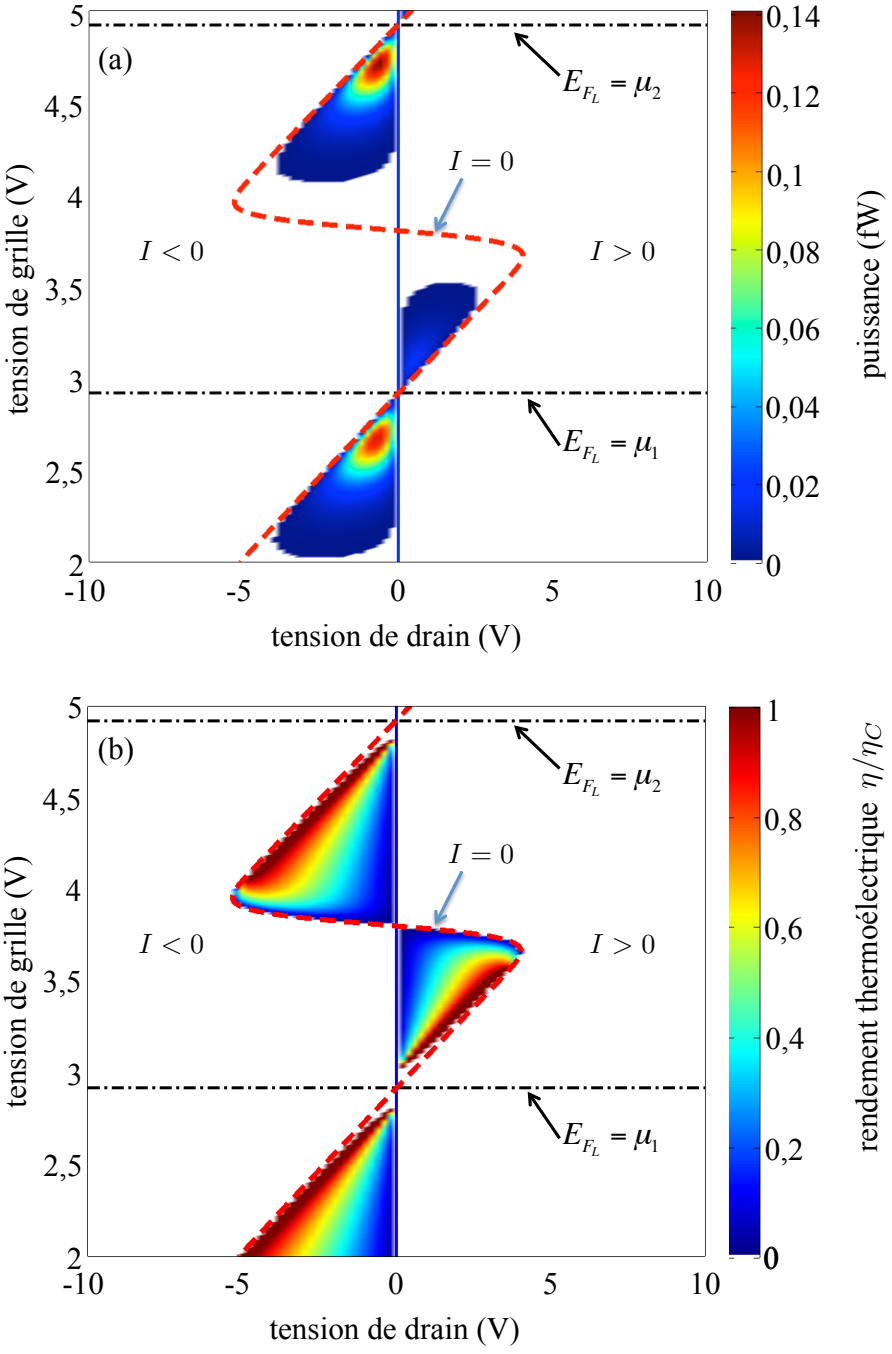


FIGURE 4.14 – Puissance et rendement normalisé en fonction des tensions de drain et de grille, pour $H = 0,01 k_B T$ et $\Delta T = 5$ V.

dimensions, elles correspondent à une puissance par surface d'environ 10 W.m^{-2}, ce qui reste loin d'être compétitif avec le photovoltaïque, par exemple (autour de 100 W.m^{-2}).

Le rendement est maximum pour des tensions V_{DS} proches de $I = 0$, où la puissance est nulle. Effectivement, lorsque le courant est nul, et puisque le niveau est extrêmement fin, le transport est quasi-réversible (même courant de source à drain que de drain à source), et donc se rapproche du rendement d'une machine de Carnot. Mais la puissance est nulle à ce point. Les rendements sont néanmoins intéressants au maximum de puissance (78% du rendement de Carnot), ce qui reste la principale caractéristique d'un générateur.

Les SET fournissent donc une puissance par unité de surface raisonnable, pour des rendements satisfaisants. Mais nos calculs oublient une composante pourtant essentielle : la contribution des phonons.

4.2.3 La mauvaise influence des phonons

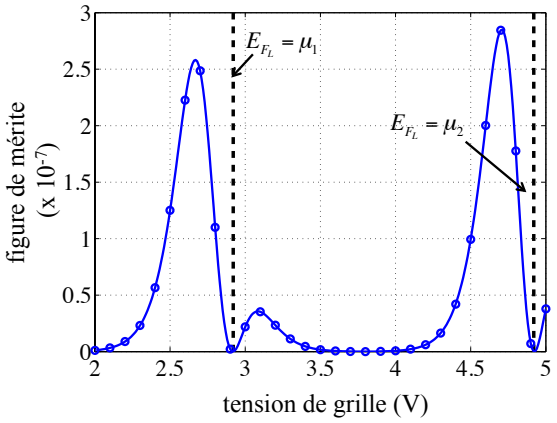


FIGURE 4.15 – Figure de mérite calculée en incluant la conductivité thermique des phonons, en fonction de la tension de grille pour un élargissement $H = 0,01 k_B T$, à $\Delta T = 5$ K.

Les SET à îlots silicium seraient donc d'excellents candidats en tant que générateur thermoélectriques ? Pas vraiment, car il ne faut pas oublier que nous n'avons considéré ici que la conductance thermique électronique, c'est à dire liée aux pertes dues à la relaxation de l'électron dans l'îlot. Une autre source de conductance thermique est la capacité des phonons à transmettre la chaleur, et ce même lorsque aucun courant ne circule dans le dispositif, autrement dit, la conductance thermique due à la vibration du réseau cristallin. N'ayant

pas accès à cette donnée dans notre dispositif, nous avons pris la valeur de la conductivité thermique dans la silice : $\kappa_p = 1,36$ W.m^{-1}.K^{-1} [Burzo 03], que nous multiplions par le rapport entre la surface effective de transfert, que nous pouvons considérer comme un disque de diamètre $d = 4,4$ nm, et l'épaisseur totale d'oxyde tunnel $e_{oxyde} = 2,7$ nm. Nous obtenons donc une conductivité thermique par les phonons de $K_p = 7,7$ nW.K^{-1}, soit 6 ordres de grandeurs supérieurs à la conductivité thermique électronique dans le dispositif à îlot d'élargissement ($H = 0,01k_BT$, FIGURE 4.13b.1). Le ZT alors obtenu et tracé en FIGURE 4.15 devient beaucoup trop faible, de l'ordre de 10^{-7}.

4.3 Conclusion

Nous avons vu que notre simulateur SENS était à même de simuler le SET en tant que dispositif thermoélectrique, grâce à la prise en compte de températures différentes entre les deux électrodes, dans le cadre d'un transport séquentiel tandis que les modèles actuels sur la thermoélectricité se basent sur le formalisme de Landauer, et donc un transport cohérent [Hoffmann 07, Mani 11, Nakpathomkun 10b, Svensson 12]. Nous avons également introduit l'effet d'un élargissement, dans l'approximation d'une fonction spectrale lorentzienne, insisté sur la nécessité d'avoir auparavant calculé les modes de phonons dans de tels nanocristaux, sous peine de proposer des élargissements non physiques.

En se basant sur la linéarité du coefficient Seebeck sur la plage de [-1mV 1mV] pour des élargissements réalistes, nous proposons une application du SET en tant qu'étalon pour les coefficients Seebeck, et ce indépendamment du matériau constituant ces SETs, la linéarité ne dépendant que des niveaux d'énergies dans l'îlot et de la différence de potentiel calculée aux électrodes.

Enfin, en vue de l'application du SET en tant que générateur thermoélectrique, l'introduction de l'élargissement conduit à des figures de mérite très intéressantes (autour de 150), mais à faible puissance (10 W.m^{-2}), en ne prenant en compte que le transfert thermique par les électrons. Toutefois, ces figures de mérite sont lourdement dégradées par la contribution de la conductance thermique des phonons dans la silice. Les dispositifs à boites quantiques auraient donc un avenir intéressant dans la thermoélectricité à condition

de trouver des moyens de limiter la conductivité thermique. Une perspective interessante pourrait être l'étude des SET à base de nanofils, tels que ceux proposés par [Hofheinz 07], les nanofils silicium à dopage variable montrant une réduction de la conductivité thermique [Boukai 08, Hochbaum 08].

Chapitre 5

Bruit de grenaille dans les dispositifs à un électron

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons explorer, grâce à notre modèle permettant de comprendre et de suivre l'évolution des évènements tunnels, les caractéristiques du bruit de grenaille dans les dispositifs à un électron, en revenant à la structure de base, c'est à dire la double jonction tunnel (DTJ), que nous retrouvons en FIGURE 5.1.

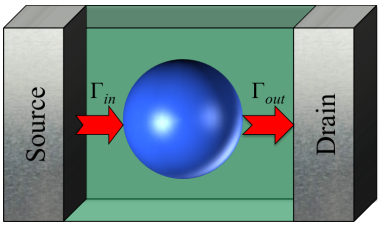


FIGURE 5.1 – Schéma d'une double jonction tunnel, avec les deux seuls taux de transfert tunnel Γ_{in} et Γ_{out}) impliqués lors du transport à $T = 0K$.

Dans les travaux théoriques traitant du bruit de grenaille dans les dispositifs à un électron, deux méthodes dominent :

– le formalisme de Korotkov [Korotkov 94] qui opère, dans le cadre de la théorie orthodoxe mais pouvant très bien s'adapter à notre modèle, une transformation de Fourier sur l'équation maîtresse pour parvenir à une expression générale de la densité spectrale de bruit [Kafanov 09, Nguyen 05, Sánchez 09].

– la méthode connue sous le nom de "Full-counting statistics (FCS)" (statistiques de comptage complet) développée par Levitov et Lesovik [Levitov 96], qui consiste à évaluer les fonctions de distribution de probabilité du nombre d'électrons transférés aux contacts durant un certain temps. Ces distributions de probabilité contiennent toute l'information sur les courants dans chaque jonction, leurs fluctuations et corrélations. Bagrets et Nazarov ont étendu la théorie pour proposer une approche générale de la FCS dans le cadre du blocage de Coulomb [Bagrets 03]. Cette approche a été utilisée avec succès pour modéliser les données expérimentales des mesures résolues en temps du transport d'électrons dans un SET [Gustavsson 06a]. Cependant, bien que ces méthodes soient puissantes pour donner des résultats quantitatifs, l'origine physique du comportement du bruit est dissimulée sous le formalisme mathématique – parfois lourd – associé à la théorie. À cet égard, notre approche Monte-Carlo, décrivant les évènements tunnel au fil du temps, offre un support "visuel" intéressant.

Nous nous sommes donc attachés, au delà de la seule présentation de ces caractéristiques, à comprendre et à expliquer le bruit, d'une manière simple et pédagogique, autant que possible, en s'appuyant sur les données brutes de la simulation Monte-Carlo (les évènements tunnel au cours du temps) ainsi que sur les taux de transfert tunnel, véritables indicateurs du bruit de grenaille.

Ainsi, nous présentons dans un premier temps le courant et le facteur de Fano obtenu dans une DTJ qui présente à la fois du bruit sous-Poissonien et du bruit super Poissonien. Dans une seconde partie, nous réduisons le nombre d'électrons pouvant entrer dans notre îlot à 1 ou 2, de manière à fournir des interprétations claires du comportement du bruit de grenaille, en limitant les transferts tunnel.

Pour clarifier davantage cette interprétation, les DTJ seront étudiées à température nulle, afin que les caractéristiques du bruit de grenaille ne se noient pas dans le bruit thermique. L'approximation d'un transport purement séquentiel de notre modèle devient dès lors contestable, car à température nulle, aucun mode de phonon n'est activé dans l'îlot, ne permettant pas la relaxation de l'électron par interaction électron-phonon. Néanmoins, d'autres mécanismes, telle l'interaction avec les défauts à l'interface Si/SiO_2 peuvent en-

gendrer une décohérence de la fonction d'onde de l'électron, rendant le transport séquentiel. Egalement, nous pouvons considérer que le bruit de grenaille et le bruit thermique sont indépendants, de telle sorte qu'à une température donnée, la puissance du bruit est la somme des contributions du bruit de grenaille (bruit obtenu à $T = 0$ K) et du bruit thermique.

Dans le cas d'un transport cohérent, le dispositif devrait se comporter de manière similaire à une RTD, dont les caractéristiques du bruit ont été maintes fois étudiées.

5.2 Courant et bruit dans une Double Jonction Tunnel

Nous avons vu dans le chapitre Modèle qu'à partir des taux de transfert tunnel, deux méthodes s'offraient à nous pour obtenir le courant dans nos dispositifs : l'équation maîtresse et un algorithme Monte-Carlo. Par ces deux méthodes, nous pouvons également atteindre les caractéristiques de deuxième ordre, c'est à dire les fluctuations de courant et donc le bruit dans les dispositifs.

Korotkov a donc utilisé l'équation maîtresse pour obtenir une fonction analytique dépendante seulement des taux de transfert tunnel ainsi que du courant obtenu. A $T = 0$ K et à tension positive, les taux de transfert tunnel îlot vers source et drain vers îlot deviennent nuls, et on considérera seulement les taux de transferts source vers îlot Γ_{in} (au lieu de Γ_{Sd} dans le reste du manuscrit) et îlot vers drain Γ_{out} (au lieu de Γ_{dD}). L'expression obtenue dans [Korotkov 94] devient alors :

$$F = 1 - \frac{2e}{\langle I \rangle} \sum_{N,M} \left(\Gamma_{\text{in}}(M) - \frac{\langle I \rangle}{e} \right) \left(\mathbf{\Gamma}^{-1} \right)_{N,M} \left(\Gamma_{\text{in}}(N-1) P(N-1) - \frac{\langle I \rangle}{e} P(N) \right) \quad (5.1)$$

Où, pour rappel, $P(N)$ est la probabilité de trouver N électrons dans l'îlot en régime stationnaire et la matrice $\mathbf{\Gamma}$ est définie comme telle (avec la notation actuelle) :

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} -\Gamma_{tot}(0) & \Gamma_{\text{out}}(1) & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \cdot \\ 0 & \Gamma_{\text{in}}(N-2) & -\Gamma_{tot}(N-1) & \Gamma_{\text{out}}(N) & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & \Gamma_{\text{in}}(N-1) & -\Gamma_{tot}(N) & \Gamma_{\text{out}}(N+1) & \cdot & \cdot \\ \cdot & & \cdot & \Gamma_{\text{in}}(N) & -\Gamma_{tot}(N+1) & \Gamma_{\text{out}}(N+2) & \cdot \\ \cdot & & & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \Gamma_{\text{in}}(N_{max}-1) & -\Gamma_{tot}(N_{max}) \end{pmatrix}$$

avec $\Gamma_{tot}(N) = \Gamma_{\text{in}}(N) + \Gamma_{\text{out}}(N)$, $\Gamma_{\text{out}}(0) = 0$ et $\Gamma_{\text{in}}(N_{max}) = 0$.

Or il est important de noter que la somme des colonnes de cette matrice est nulle, donc que la matrice $\mathbf{\Gamma}$ n'est pas inversible. Dès lors, l'inverse $\mathbf{\Gamma}^{-1}$ de l'équation 5.1 est en réalité la pseudo inverse de Moore-Penrose [Moore 20, Penrose 55] de la matrice, qui est déterminée numériquement, c'est à dire la matrice telle que $\mathbf{\Gamma}\mathbf{\Gamma}^{-1}\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}$.

Pour atteindre le facteur de Fano avec notre méthode Monte-Carlo, nous répétons la simulation présentée dans le chapitre consacré au simulateur SENS (FIGURE 2.9) un grand nombre de fois N_{sim}, avec un temps de simulation t_{sim} suffisamment grand pour considérer une fréquence quasi-nulle et un régime stationnaire. Dans chacune de ces simulations, nous comptons le nombre d'électrons n_S (ou n_D) passés dans la jonction tunnel source (ou drain) durant t_{sim}. On obtient alors le facteur de Fano en faisant le rapport entre la variance et la moyenne du nombre d'électrons passés.

$$F = \frac{\text{Var}(n_S)_{N_{\text{sim}}}}{\langle n_S \rangle_{N_{\text{sim}}}} \tag{5.2}$$

Cette méthode est illustrée en FIGURE 5.2. À noter que nous pouvons également en extraire le courant, qui n'est autre que le nombre moyen de charges passées dans la source (ou le drain) durant t_{sim} :

$$\langle I \rangle = \frac{e\langle n_S \rangle_{N_{\text{sim}}}}{t_{\text{sim}}} \tag{5.3}$$

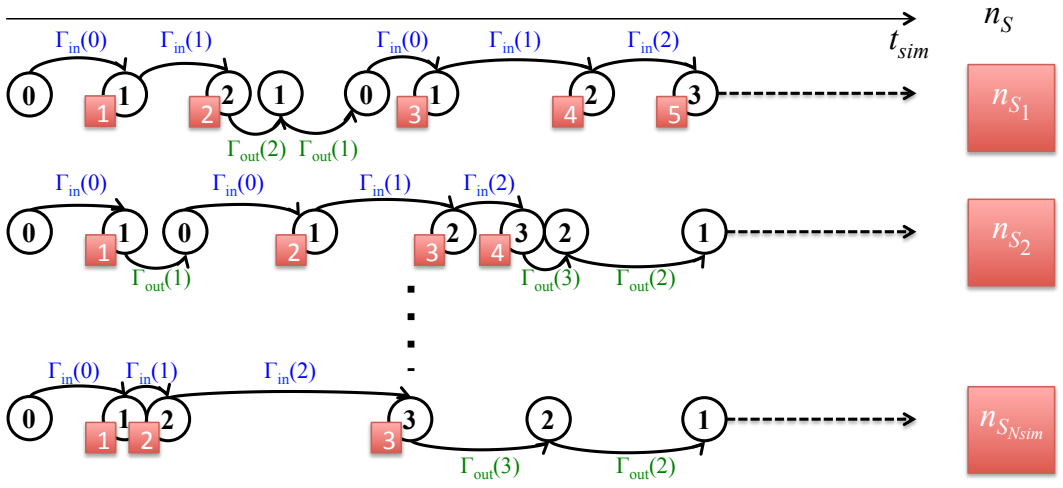


FIGURE 5.2 – Illustration de la méthode utilisée pour obtenir le facteur de Fano par la méthode Monte-Carlo, avec l'algorithme répété N_{sim} fois, et le nombre n_{S_i} d'électrons passés dans la source durant t_{sim} dans la i-ème simulation.

La DTJ considérée lors des parties 5.2, 5.3 et 5.4, constituée d'un îlot sphérique de 10 nm, a été choisie de manière à obtenir du blocage de Coulomb "classique" avec une résistance différentielle positive dans les premiers paliers, puis de la résistance différentielle négative. Ainsi, la barrière drain a été choisie bien plus épaisse que la barrière source (1,7 nm contre 1,2 nm, respectivement), afin de limiter l'effet du déplacement de la fonction d'onde vers le drain avec la tension.

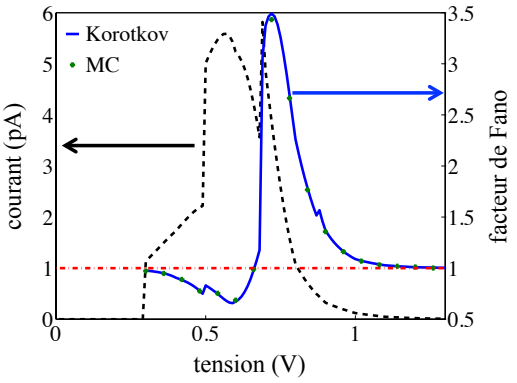


FIGURE 5.3 – Courant et facteur de Fano, ce dernier calculé par Korotkov et Monte-Carlo, en fonction de la tension appliquée.

Le courant et le facteur de Fano obtenus par les deux méthodes sus-citées sont montrés dans la FIGURE 5.3.

Nous voyons clairement la première marche de Coulomb, le courant augmente ensuite dans la deuxième marche, avant de chuter et passer en régime de résistance différentielle négative. Ce régime devient très fort dans le troisième palier, à tel point que les quatrièmes et cinquièmes marches sont indiscernables.

Dans les deux premiers paliers, le facteur de Fano est sous-Poissonien. Il décroit tout d'abord jusqu'à $F = 0,66$ à $V_{DS} = 0,59$ V, et augmente rapidement pour devenir super-Poissonien dans le troisième palier. Il atteint sa valeur maximum $F = 3,5$ à $V = 0,72$ V avant de chuter et tendre vers un bruit Poissonien.

On voit également que les deux méthodes sont parfaitement équivalentes. Mais si la méthode Korotkov est rapide, la méthode Monte-Carlo permet d'obtenir les statistiques détaillées du comptage du passage stochastique des électrons dans la jonction source.

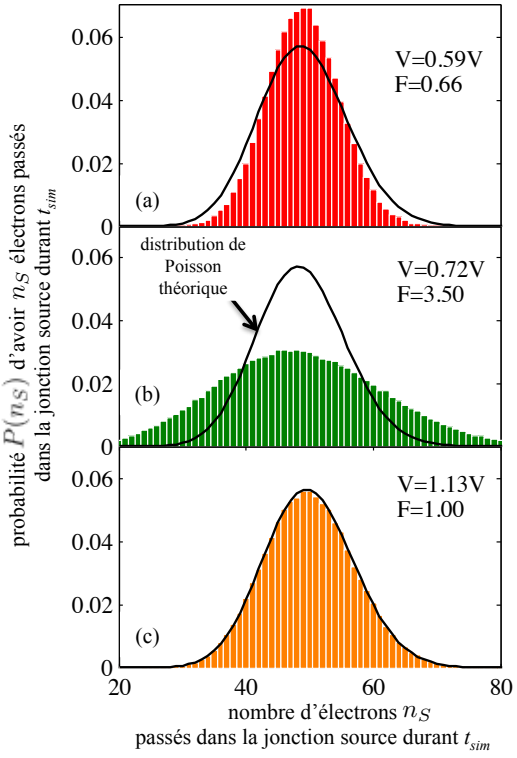


FIGURE 5.4 – Distribution statistique du nombre d'électrons n_S traversant la jonction tunnel source durant t_{sim}, correspondante à un nombre moyen de 50, pour trois tensions particulières. La statistique est basées sur 2×10^5 simulations Monte-Carlo (histogramme) et est comparée à la distribution de Poisson correspondante à 50 électrons (ligne).

Ainsi, sur la FIGURE 5.4, nous voyons qu'à partir d'un simple traitement des données des simulations Monte-Carlo, nous pouvons observer directement si le bruit est sous, super ou Poissonien en comparant la distribution statistique du nombre d'électrons passant dans la jonction source, et la courbe Poissonienne théorique correspondante au même nombre moyen d'électrons passés $\langle n_S \rangle$, c'est-à-dire :

$$P(n_S = k) = \frac{\langle N \rangle^k}{k!} \mathrm{e}^{-\langle N \rangle} \tag{5.4}$$

Lors d'un processus Poissonien, la variance et la moyenne sont égales, donc $F = 1$, tel que nous le voyons sur la FIGURE 5.4c, lorsque la courbe théorique Poissonienne épouse parfaitement la distribution statistique obtenue en Monte-Carlo. Ainsi, une distribution plus étroite que la courbe Poisonnienne (FIGURE 5.4a) a une variance plus faible, et donc le facteur de Fano est plus faible, et le bruit est sous-Poissonien. De la même manière,

une distribution plus large que la courbe théorique a une variance plus grande (FIGURE 5.4b), ce qui correspond donc à un facteur de Fano $F > 1$. La FIGURE 5.4 confirme donc le comportement obtenu dans la FIGURE 5.3. Dans les deux parties suivantes, nous allons expliquer les différents aspects de ce comportement en regard des taux de transfert tunnel, en étudiant deux cas simplifiés. Tout d'abord, nous allons limiter le nombre d'états possibles dans l'îlot à 2 (un électron ou aucun), puis à un système à trois états (0, 1 ou 2 électrons dans l'îlot).

5.3 Bruit sous-Poissonien dans les processus à deux états

Nous avons donc limité la simulation à un processus à deux états, c'est à dire en fixant $\Gamma_{\text{in}}(N \geqslant 1) = 0$. Dans ce cas, une expression analytique simple a été donnée par Hershfield *et al.* [Hershfield 93], et peut être déduite de l'équation (5.1), en limitant N à 0 et 1 :

$$F = (\Gamma_{\text{in}}(0)^2 + \Gamma_{\text{out}}(1)^2)/(\Gamma_{\text{in}}(0) + \Gamma_{\text{out}}(1))^2 \tag{5.5}$$

Sur la FIGURE 5.5, le facteur de Fano, mis en regard des taux de transferts tunnel montre un bruit toujours sous-Poissonien, ce qui confirme les observations faites dans des systèmes à deux états [Hershfield 93, Choi 12, Birk 95]. La figure permet également de confirmer que le minimum du facteur de Fano de $0,5$ est obtenu quand les taux de transfert d'entrée et de sortie de l'îlot sont égaux, c'est-à-dire que $\Gamma_{\text{in}}(0) = \Gamma_{\text{out}}(1) = \Gamma$, comme prédit par l'expression (5.5). À l'inverse, le bruit tend à être Poissonien quand l'un des taux de transferts devient négligeable devant l'autre. Nous allons étudier en détails les deux cas limites ($F = 1$ et $F = 0,5$) pour comprendre ce comportement.

5.3.1 Cas minimum de sous-Poissonien $\Gamma_{\text{in}}(0) = \Gamma_{\text{out}}(1) = \Gamma$ $(F = 0,5)$

Pour comprendre cette réduction du bruit, nous pouvons comparer l'évolution du nombre d'électrons $\langle n_S \rangle$ passant dans la jonction source, quand les taux de transferts sont égaux, c'est-à-dire $\Gamma_{\text{in}} = \Gamma_{\text{out}} = \Gamma$, à une distribution de Poisson, comparaison schématisée sur la FIGURE 5.6.

Étant donné que chaque évènement tunnel suit un processus de Poisson, nous voyons que l'évolution du système suit un processus de Poisson de paramètre Γ^{-1}, mais dont nous

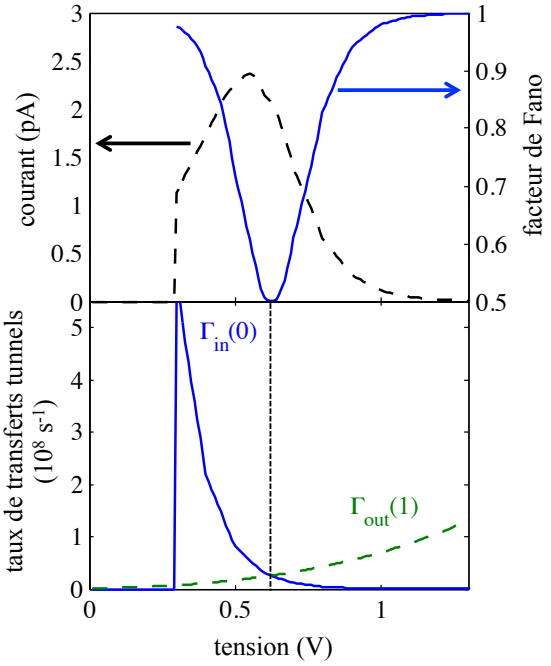


FIGURE 5.5 – Courant, facteur de Fano et taux de transfert tunnel en fonction de la tension, dans un système à deux états.

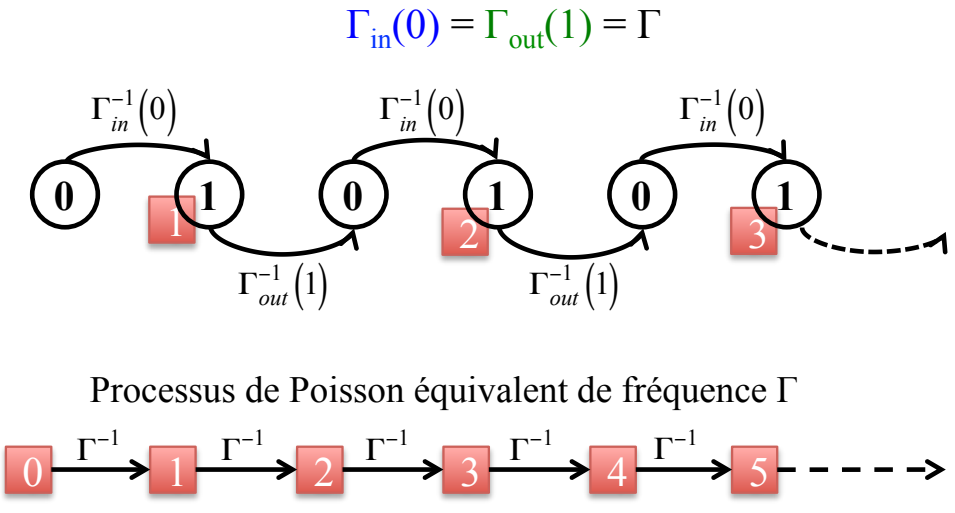


FIGURE 5.6 – Évolution temporelle du nombre d'électrons dans la boîte (cercles) et du nombre d'électrons n_S passés dans la jonction source (carrés) dans un cas de taux de transfert tunnel égaux, en regard d'un processus de Poisson de fréquence Γ.

ne comptons en réalité qu'un événement sur deux (le passage de l'électron dans la jonction source). Dans le processus de Poisson de paramètre Γ, la moyenne et la variance du nombre d'évènements n_S sur une durée t_{sim} sont les mêmes et $\langle n_S \rangle = \text{Var}(n_S) = \Gamma t_{\text{sim}}$. Puisque nous comptons un événement tunnel sur deux dans notre système, nous avons une moyenne $\langle n_S \rangle = \Gamma t\text{sim}/2$. La variance de ce processus peut être calculée en utilisant la formule de la variance d'une transformation affine $\text{Var}(aX + b) = a^2\text{Var}(X)$. Ici, $\text{Var}(X/2) = \text{Var}(X)/4$ d'où $\text{Var}(n_S) = \Gamma t_{\text{sim}}/4$. Le facteur de Fano résultant en appliquant (5.2) est donc :

$$F = \frac{\text{Var}(n_S)_{N_{\text{sim}}}}{\langle n_S \rangle_{N_{\text{sim}}}} = \frac{1}{2}$$

5.3.2 Cas Poissonien $\Gamma_{\text{out}}(1) \gg \Gamma_{\text{in}}(0)$ (ou l'inverse, $F = 1$)

De la même manière, nous pouvons comparer un processus de Poisson avec le transport électronique dans une DTJ à deux états avec des taux de transfert tunnel asymétriques, comme schématisé en FIGURE 5.7.

Nous voyons donc immédiatement que l'évolution de n_S est commandée par Γ_{in}, et nous retrouvons un processus Poissonien de paramètre Γ_{in}, et donc un facteur de Fano $F = 1$.

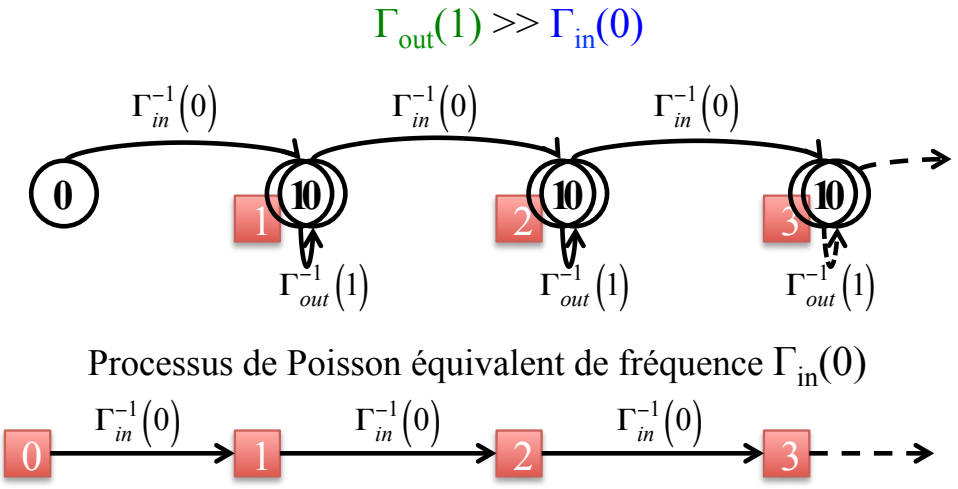


FIGURE 5.7 – Évolution temporelle du nombre d'électrons dans la boîte (cercles) et du nombre d'électrons n_S passés dans la jonction source (carrés) dans un cas $\Gamma_{\text{out}}(1) \gg \Gamma_{\text{in}}(0)$, en regard d'un processus de Poisson de fréquence égale au plus petit des taux de transfert tunnel.

Nous avons donc vu une explication simple du bruit Poissonien et du bruit sous-Poissonien, à partir d'un système à deux états. Pour voir, et tenter de comprendre le bruit super-Poissonien, il faut augmenter le nombre d'états à 3.

5.4 Apparition de bruit super-Poissonien dans les processus à trois états

Nous réduisons désormais le système à trois états, c'est à dire que l'îlot ne peut maintenant contenir que 0, 1 ou 2 électrons. L'ajout d'un état augmente considérablement le nombre de séquences pouvant être empruntées sur un temps donné, chaque séquence représentant l'évolution du nombre d'électrons (états) dans l'îlot.

Dans le processus à deux états, décrit précédemment, cette séquence était unique (0-1-0-1-0-1...), et une comparaison entre les deux taux de transfert tunnel impliqués suffisait à conclure sur le bruit (plutôt sous-Poissonien ou Poissonien). Dans un processus à trois états, les séquences possibles deviennent multiples. Ainsi nous pourrions avoir :

- des séquences "simples" à deux états : 0-1-0-1-0-1 ou 1-2-1-2-1-2
- des séquences combinant ces deux états : 0-1-0-1-2-1-2-1-0-1...

Ainsi, selon la séquence suivie, le nombre d'électrons passés dans une jonction durant un temps donné peut varier énormément (et donc le bruit augmenter – voire devenir super-Poissonien). La comparaison entre les deux taux de transfert tunnel impliqués sur l'unique séquence, telle que nous l'avons faite pour le processus à deux états, ne suffit donc plus pour analyser le bruit de grenaille. Une analyse des différentes séquences possibles est nécessaire.

Pour caractériser une séquence, nous pouvons les séparer en différents chemins que nous appellerons "chemins de base". Un chemin de base représente une suite d'évènements élémentaires (passage d'un état à un autre) entre deux passages successifs au travers d'une même jonction. Ici nous choisissons la jonction source. Il y a quatre chemins de base : (0-)1-0-1, (1-)2-1-2, (0-)1-2, (1-)2-1-0-1. Le premier état est mis entre parenthèses car il représente l'état précédant le passage du premier électron.

Un découpage d'une séquence quelconque à trois états en "chemins de base" est illustré en FIGURE 5.8. Les nombres de chemins de base obtenus sont $N_{0101} = 2$, $N_{1212} = 3$,

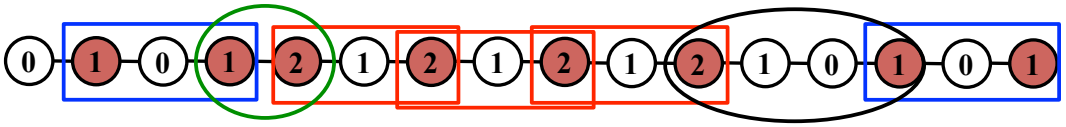


FIGURE 5.8 – Découpage en chemins de base d'une séquence donnée. Les états rouges représentent les états suivant le passage d'un électron.

$N_{012} = 1$, $N_{12101} = 1$. On remarque que les chemins 0-1-2 et 1-2-1-0-1 sont des chemins "passerelles" d'une séquence à deux états à une autre (0-1-2 pour passer du 0-1-0-1 au 1-2-1-2, 1-2-1-0-1 pour l'inverse), ainsi le nombre de chemins N_{012} et N_{12101} sont égaux, à un trajet près (si un seul passage d'une séquence à l'autre se fait). Le nombre total de passages dans la jonction source est la somme du nombre de ces chemins de bases, auquel on ajoute le premier passage non comptabilisé : $n_S = N_{0101} + N_{1212} + N_{12101} + N_{012} + 1$

Comme illustré en FIGURE 5.9, chaque passage d'un état à un autre est conditionné par les taux de transfert tunnel. Nous voyons donc qu'à chaque passage dans l'état 1, le système a le choix entre en faire entrer un 2e ou faire sortir l'électron (vers l'état 0). C'est ici un élément clé de l'analyse du bruit de grenaille dans le dispositif.

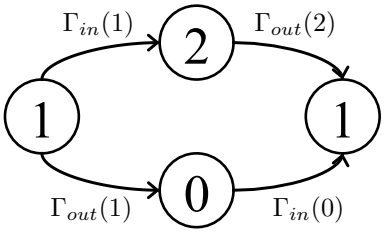


FIGURE 5.9 – Description schématique des transitions possibles entre deux passages à l'état 1.

Ce sont donc dans un premier temps les taux de transfert $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(1)$ qui nous renseigneront sur les chemins les plus empruntés lors des séquences :

- Si $\Gamma_{\text{in}}(1) > \Gamma_{\text{out}}(1)$, alors l'entrée d'un deuxième électron est favorisée : le chemin (1)-2-1-2 sera le plus emprunté.
- Si $\Gamma_{\text{in}}(1) < \Gamma_{\text{out}}(1)$, alors la sortie de l'électron est favorisée : le chemin (0)-1-0-1 sera le plus emprunté.

Si une des deux composantes $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(1)$ est vraiment fortement négligeable devant l'autre, nous pouvons ensuite déterminer, en comparant les temps de passages sur un trajet

donné, si ces chemins majoritaires sont plutôt Poissoniens ou sous-Poissoniens, tel que nous l'avons fait pour les processus à deux états.

Si, à l'inverse, ces deux taux de transfert sont assez proches pour que des chemins passerelles (0)-1-2 et (1)-2-1-0-1, voire même l'autre chemin "simple" à deux états, apparaissent, la simple considération des temps de passage sur le trajet majoritaire ne suffit pas à conclure sur le comportement du bruit. Si de grandes divergences dans les temps caractéristiques τ_{chemin} du chemin préférentiel et des chemins parasites existent (c'est-à-dire, les temps caractéristiques entre deux évènements "passage dans la jonction source" suivant ces chemins), alors le bruit augmente, au point même, parfois, de devenir super-Poissonien. Les temps caractéristiques des chemins de base (c'est-à-dire les temps moyens entre deux passages dans la jonction tunnel source) sont définis comme :

$$\tau_{(0)101} = \tau_{1\to0} + \tau_{0\to1} = (\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1))^{-1} + \Gamma_{\text{in}}^{-1}(0) \tag{5.6}$$

$$\tau_{(1)212} = \tau_{2\to1} + \tau_{1\to2} = \Gamma_{\text{out}}^{-1}(2) + (\Gamma_{\text{out}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1))^{-1} \tag{5.7}$$

$$\tau_{(0)12} = \tau_{1\to2} = (\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1))^{-1} \tag{5.8}$$

$$\tau_{(1)2101} = \tau_{2\to1} + \tau_{1\to0} + \tau_{0\to1} = \Gamma_{\text{out}}^{-1}(2) + (\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1))^{-1} + \Gamma_{\text{in}}^{-1}(0) \tag{5.9}$$

On ne compte pas le temps de la première transition qui amène le premier électron mais uniquement le temps des suivantes qui mènent jusqu'au deuxième passage d'un électron dans la jonction.

Des expressions (5.6) à (5.9), on peut déduire que le chemin (0)-1-2 est plus rapide que les autres chemins, et que le chemin (1)-2-1-0-1 est plus lent. Selon la rapidité ou la lenteur des autres transitions tunnel impliquées, le chemin (0)-1-2 est donc largement plus rapide ou du même ordre de grandeur que le chemin principal, et le chemin (1)-2-1-0-1 beaucoup plus lent ou du même ordre de grandeur que le chemin principal. Mais la contribution de ces deux chemins à l'augmentation du bruit n'est pas de même ampleur.

– Si (1)-2-1-0-1 est beaucoup plus lent que le chemin principal, alors son influence sur le bruit est importante. Un exemple est donné en FIGURE 5.10, où une séquence "pure" est comparée à une séquence à un chemin parasite, avec $\tau_{(1)2101} = 5\tau_{(1)212}$. Nous voyons que lorsque le chemin 12101 est emprunté, le nombre d'électrons passant dans une jonction source pendant un temps donné diminue (de 9 électrons à 6).

Ainsi, suivant le nombre de chemins parasites empruntés sur une séquence, le nombre d'électrons varie grandement, augmentant ainsi le bruit.

– Si (0)-1-2 est bien plus rapide que le chemin principal, alors son influence sur le bruit sera moindre. Ce faible effet est illustré FIGURE 5.11, où on observe que le nombre de passages est le même dans les deux cas, malgré $\tau_{(0)12} < \tau_{(1)212}$.

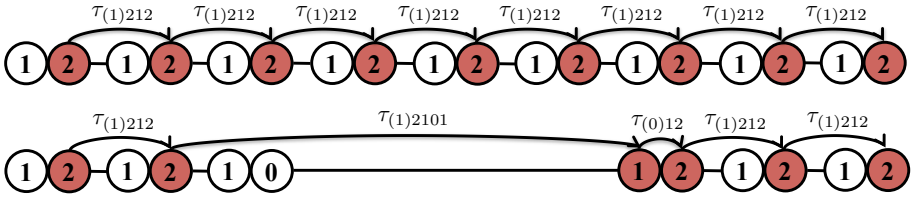


FIGURE 5.10 – Comparaison de deux séquences, l'une pure 1-2-1-2, l'autre comprenant un chemin parasite, avec $\tau_{(1)2101} = 5\tau_{(1)212}$. Les cercles rouges indiquent les états suivant un passage dans la jonction source.

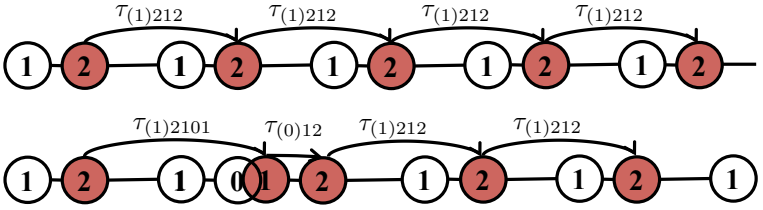


FIGURE 5.11 – Comparaison de deux séquences, l'une pure 1-2-1-2, l'autre comprenant un chemin parasite, avec $\tau_{(0)12} < \tau_{(1)212}$ et $\tau_{(1)2101} \simeq \tau_{(1)212}$. Les cercles rouges indiquent les états suivant un passage dans la jonction source.

Pour illustrer ces effets et fixer les idées, nous avons choisi de simuler trois cas fictifs, pour lesquels nous avons fixé trois taux de transfert tunnel à des valeurs constantes, en faisant varier le quatrième. Pour chaque cas, nous allons suivre la même méthode pour expliquer le comportement du facteur de Fano :

1. Comparer les taux de transfert tunnel $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(1)$ pour déterminer si 0-1-0-1 ou 1-2-1-2 est le chemin principal. A partir la formule de Hershfield (5.5), appliquée à ces chemins, nous déterminons les facteur de Fano de chemins "purs", c'est à dire le facteur de Fano obtenu si seul ce chemin à deux états était emprunté durant les séquences. Nous pouvons ainsi déterminer si ce chemin a un comportement plutôt Poissonien ou sous-Poissonien. Dans la formule de Hershfield, les taux de transfert $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(1)$ doivent être remplacés par $\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1)$, car les temps de vols

(temps où l'îlot reste dans le même état) sont fonction de la somme des taux de transfert tunnel à partir de cet état. Les facteurs de Fano des chemins "purs" sont donc donnés par :

$$F_{0101} = \frac{(\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1))^2 + \Gamma_{\text{in}}(0)^2}{(\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1) + \Gamma_{\text{in}}(0))^2} \text{ pour le chemin 0-1-0-1} \tag{5.10}$$

$$F_{1212} = \frac{(\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1))^2 + \Gamma_{\text{out}}(2)^2}{(\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(2))^2} \text{ pour le chemin 1-2-1-2} \tag{5.11}$$

2. Suivre l'évolution de la proportion du nombre de chemins "parasites" (0-1-2 et 1-2-1-0-1, voire l'autre chemin à deux états). Si ceux-ci ne sont pas négligeables, alors il faut comparer les temps caractéristiques des chemins "parasites" avec celui du chemin principal, et ainsi conclure sur l'évolution du bruit de grenaille

5.4.1 1er cas : $\Gamma_{\text{in}}(0) = 10^7 s^{-1}$, $\Gamma_{\text{in}}(1) = 10^8$ s^{-1} et $\Gamma_{\text{out}}(2) = 10^9$ s^{-1}, $\Gamma_{\text{out}}(1)$ variable

En utilisant les résultats de la FIGURE 5.12, nous pouvons expliquer le comportement du facteur de Fano résultant :

$\Gamma_{\text{out}}(1) < 10^6 s^{-1}$ $\Gamma_{\text{out}}(1) \ll \Gamma_{\text{in}}(1)$, donc le chemin 1-2-1-2 est le chemin préférentiel, et celui-ci a un transport plutôt Poissonien : $F = 0,8$ d'après (5.11) car l'écart entre $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(2)$ n'est "seulement" que d'un facteur 10. Les chemins parasites sont encore trop négligeables pour influer sur le bruit, qui reste donc autour de $F = 0,8$.

10^6 s^{-1} $< \Gamma_{\text{out}}(1) < 10^7 s^{-1}$ Le chemin 1-2-1-2 est toujours préférentiel avec un transport Poissonien $F = 0,8$. La probabilité des chemins parasites augmente, et les temps des chemins sont :$\tau_{(1)212} = 10^{-8}s$, et $\tau_{(1)2101} = 10^{-7}s$. Donc si un chemin parasite apparaît sur une séquence, alors le passage d'un électron dure 10 fois plus longtemps que le passage d'un électron "via" le chemin 1-2-1-2 (voir l'exemple FIGURE 5.10). Cette séquence a donc 10 évènements tunnels en moins par rapport à une séquence "pure". Comme la probabilité de chemins parasites augmente avec $\Gamma_{\text{out}}(1)$, alors le bruit augmente, et devient même super-Poissonien($F_{\max}$ =5)

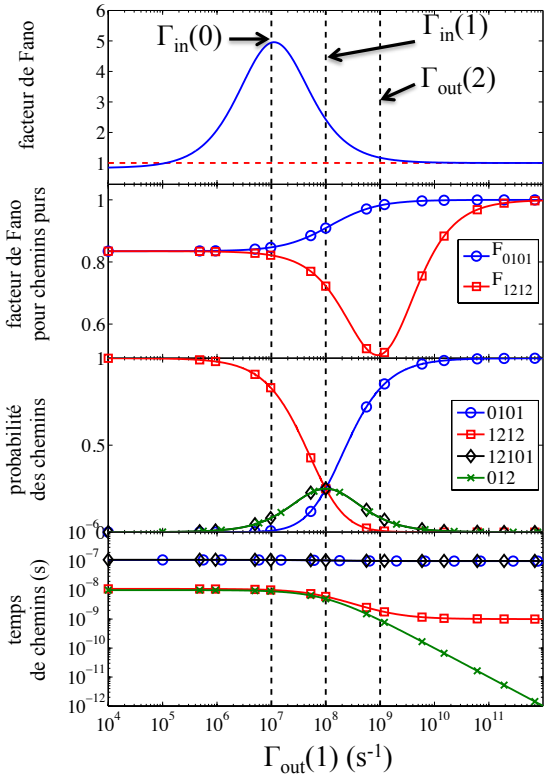


FIGURE 5.12 – Facteur de Fano total, facteur de Fano "purs" des chemins à deux états, probabilité des chemins et temps caractéristiques des chemins en fonction de $\Gamma_{\text{out}}(1)$, pour $\Gamma_{\text{in}}(0)$, $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(2)$ fixés.

10^7 s^{-1} < $\Gamma_{\text{out}}(1)$ < $10^8 s^{-1}$ Nous sommes dans la même situation que sur l'intervalle précédent, avec 1-2-1-2 comme chemin préférentiel et une probabilité d'avoir des chemins parasites qui augmente, avec les mêmes temps caractéristiques. Néanmoins, on constate que le chemin 1-2-1-2 "pur" a un facteur de Fano qui diminue, car $\Gamma_{\text{in}}(1) + \Gamma_{\text{out}}(1)$ se rapproche de $\Gamma_{\text{out}}(2)$. L'augmentation du facteur de Fano est donc stoppée, et le bruit se met à redescendre, tout en restant super-Poissonien (par la contribution des chemins parasites).

10^8 s^{-1} < $\Gamma_{\text{out}}(1)$ 0-1-0-1 est désormais le chemin préférentiel, avec un facteur de Fano pur augmentant pour aller vers 1. La contribution des chemins parasites est de moins en moins importante, et leurs effets sur le bruit sont moins marqués que lorsque le chemin

1-2-1-2 était préférentiel. En effet, le temps caractéristique du chemin 0-1-0-1 est $\tau_{(0)101} = \tau_{(1)2101} = 10^{-7}s$, ainsi le passage par un chemin parasite n'a que peu d'influence sur le bruit. Le facteur de Fano diminue donc pour tendre vers la valeur du Fano "pur" du chemin 0-1-0-1, c'est à dire $F = 1$.

5.4.2 2e cas : $\Gamma_{in}(0) = 10^7 s^{-1}$, $\Gamma_{out}(1) = 10^7$ s^{-1} et $\Gamma_{out}(2) = 10^8$ s^{-1}, $\Gamma_{in}(1)$ variable

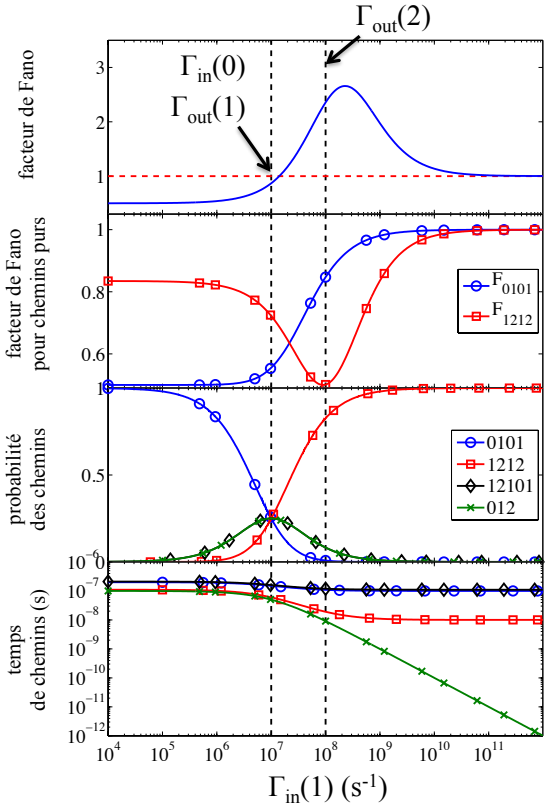


FIGURE 5.13 – Facteur de Fano total, facteur de Fano "purs" des chemins à deux états, probabilité des chemins et temps caractéristiques des chemins en fonction de $\Gamma_{in}(1)$, pour $\Gamma_{in}(0)$, $\Gamma_{out}(1)$ et $\Gamma_{out}(2)$ fixés.

$\Gamma_{in}(1) < 10^7 s^{-1}$ 0-1-0-1 est le chemin majoritaire, et malgré l'augmentation du nombre de chemins parasites, ceux-ci ont des temps caractéristiques proches ($\tau_{(0)101} = \tau_{(1)2101} =$

$2 \times 10^{-7} s^{-1}$), donc le bruit n'augmente (presque) pas, et F reste proche du facteur de Fano "pur" du chemin 0-1-0-1, c'est à dire $F = 0,5$.

10^7 s^{-1} $< \Gamma_{in}(1) < 2 \times 10^8 s^{-1}$ (maximum super-Poissonien) Le chemin majoritaire est désormais le 1-2-1-2, avec une grande contribution des chemins "parasites". De plus, le temps caractéristique de 1-2-1-2 diminue ($\tau_{(1)212}$ de $10^{-7} s^{-1}$ à $10^{-8} s^{-1}$) tandis que le temps du 1-2-1-0-1 demeure à la même valeur $\tau_{(1)2101} = 2 \times 10^{-7} s^{-1}$. Le chemin 1-2-1-0-1 devient donc 2 à 20 fois plus lent que le chemin principal : le bruit augmente donc jusqu'à atteindre son maximum.

2×10^8 s^{-1} $< \Gamma_{in}(1)$ Les trajets parasites deviennent de moins en moins probables, le facteur de Fano tend donc vers celui du 1-2-1-2 pur, donc diminue pour atteindre $F = 1$.

5.4.3 3e cas : $\Gamma_{in}(0) = 10^8 s^{-1}$, $\Gamma_{in}(1) = 10^9$ s^{-1} et $\Gamma_{out}(1) = 10^9$ s^{-1}, $\Gamma_{out}(2)$ variable

Ce cas, donné en FIGURE 5.14, est particulier car $\Gamma_{in}(1) = \Gamma_{out}(1)$: les quatre chemins de bases sont tous équiprobables. Il n'y a pas de chemin préférentiel, et le bruit dépend uniquement de la différence entre les temps de chemins :

$\Gamma_{out}(2) < 10^7 s^{-1}$ Nous avons $\tau_{(1)212} = \tau_{(1)2101} \gg \tau_{(0)101} \gg \tau_{(0)12}$. Les chemins (1)212 et (1)2101 sont donc très lents comparés aux deux autres chemins, et (0)101 est également lent comparé à (0)12. Ces disparités dans les temps de chemins équiprobables a pour effet de maximiser le bruit ($F = 3$).

$10^7 s^{-1} < \Gamma_{out}(2) < 10^9 s^{-1}$ Les temps caractéristiques des chemins se rapprochent pour arriver à $\tau 12101 = \tau 0101 = \tau 1212 \gg \tau 012$. La séquence (0)12 plus rapide n'ayant que peu d'influence sur le bruit, celui-ci tend vers du Poissonien.

$10^9 s^{-1} < \Gamma_{out}(2)$ Nous avons $\tau_{(1)2101} = \tau_{(0)101} \gg \tau_{(0)12} = \tau_{(1)212}$: l'écart entre les temps est grand, mais les séquences sont deux à deux aussi rapide, et l'écart entre les deux

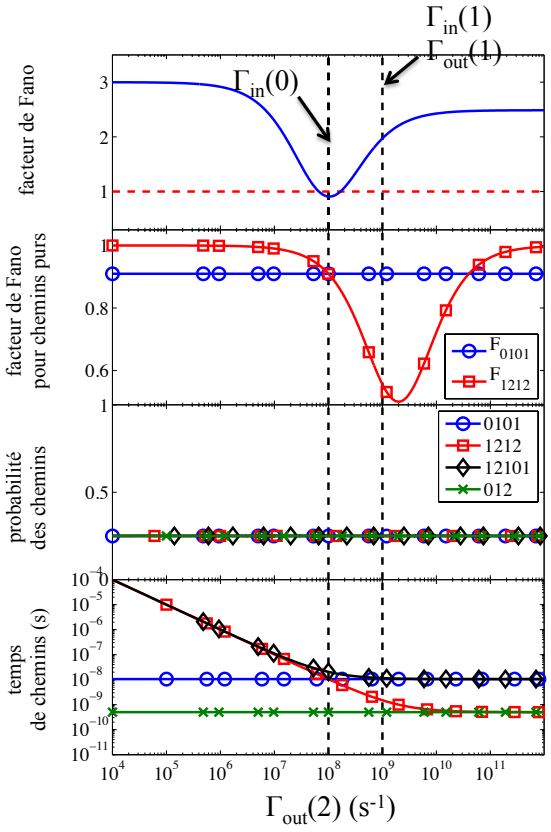


FIGURE 5.14 – Facteur de Fano total, facteur de Fano "purs" des chemins à deux états, probabilité des chemins et temps caractéristiques des chemins en fonction de $\Gamma_{\text{out}}(2)$, pour $\Gamma_{\text{in}}(0)$, $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(1)$ fixés.

valeurs des temps caractéristiques est moins important que dans le cas $\Gamma_{\text{out}}(2) < 10^7 s^{-1}$: le bruit est super-Poissonien mais plus faible que dans le cas sus-cité ($F = 2,5$).

Conclusion Notre méthode d'explication du bruit de grenaille pour ces trois cas s'est avérée robuste et cohérente, bien que les compromis à trouver parfois entre un facteur de Fano "pur" du chemin principal diminuant et un nombre de chemins parasites aux temps caractéristiques différents demeurent subtils. Nous allons donc désormais étudier le bruit de grenaille dans la double jonction tunnel simulée, limitée à trois états.

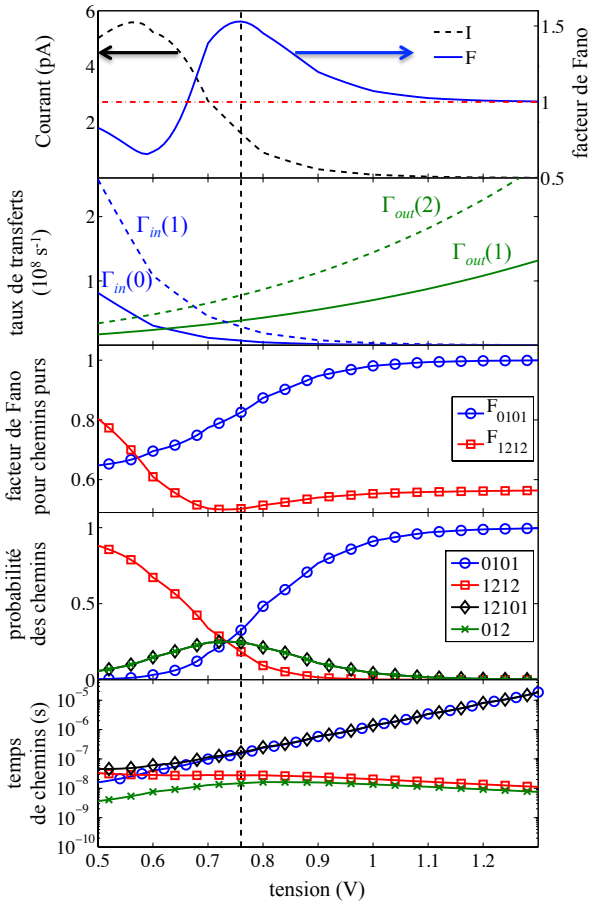


FIGURE 5.15 – Facteur de Fano total, taux de transfert tunnel, facteur de Fano "purs" des chemins à deux états, probabilité des chemins et temps caractéristiques des chemins en fonction de la tension dans le dispositif étudié.

5.4.4 Cas du dispositif d'étude à trois états

Le bruit de grenaille à trois états, mis en regard avec les taux de transfert tunnel, les facteurs de Fano purs, les probabilités des 4 chemins ainsi que les temps de ces chemins sont montrés en FIGURE 5.15.

Sur ces figures, nous avons volontairement réduit la plage en tension aux endroits où nous avons effectivement des processus à trois états ($\Gamma_{\text{in}}(1) \neq 0$) afin d'en augmenter la lisibilité. La lecture et l'explication du bruit de grenaille est plus difficile que dans les trois cas précédents : effectivement, les taux de transfert tunnel varient lentement et le bruit n'excède pas $F = 1,53$.

De 0,5 V à 0,6 V $\Gamma_{\text{in}}(1) \gg \Gamma_{\text{out}}(1)$: le chemin 1-2-1-2 est préférentiel, et son facteur de Fano "pur" diminue pour tendre vers $F = 0,5$ car $\Gamma_{\text{in}}(1)$ et $\Gamma_{\text{out}}(2)$ se rapprochent. Les chemins 0-1-2 et 1-2-1-0-1 ne sont pas négligeables (de 5 à 15%) mais le temps caractéristique du chemin 1-2-1-0-1 est proche de celui du chemin 1-2-1-2 ($\tau_{(1)2101}$ de $4 \times 10^{-8}s$ à $6 \times 10^{-8}s$ et $\tau_{(1)212} = 3 \times 10^{-8}s$), et celui de 0-1-2 petit devant 1-2-1-2. Ces chemins influent donc peu sur le bruit, et le facteur de Fano "suit" le facteur de Fano du chemin 1-2-1-2 pur.

De 0,6 V à 0,74 V ($\Gamma_{\text{in}}(1) = \Gamma_{\text{out}}(1)$) Le chemin 1-2-1-2 est toujours préférentiel, et son bruit "pur" continue de diminuer pour tendre vers $F = 0,5$. Cependant, les chemins "parasites" sont de plus en plus importants (de 15% à 25%), et $\tau_{(1)2101} = \tau_{(0)101}$ augmente (de $6 \times 10^{-8}s$ à $10^{-7}s$) lorsque $\tau_{(1)212}$ reste autour de $10^{-8}s$. L'influence des chemins parasites sur le bruit est donc plus forte, et le bruit augmente.

De 0,74 V à 0,76 V (pic de Super-Poissonien) $\Gamma_{\text{in}}(1)$ est légèrement inférieur à $\Gamma_{\text{out}}(1)$: le chemin 0-1-0-1 est très légèrement préférentiel, et d'un transport "pur" sous-Poissonien prioritaire (1-2-1-2), nous passons à un transport "pur" du chemin préférentiel (0-1-0-1) plutôt Poissonien ($F = 0,8$). Les chemins "parasites" sont toujours très présents, et les temps caractéristiques se différencient toujours davantage. Le bruit continue donc à augmenter pour atteindre son maximum.

À partir de 0,76 V Le chemin 0-1-0-1 devient de plus en plus privilégié et les chemins parasites sont de moins en moins probables. De plus, le chemin parasite 1-2-1-0-1 a le même temps caractéristique que le chemin 0-1-0-1 et le chemin 0-1-2 devient de plus en plus rapide. Leur influence sur le bruit est limitée, et le bruit, bien que restant super-Poissonien, tend vers le bruit du chemin préférentiel, c'est-à-dire $F = 1$.

5.4.5 Conclusion

Nous avons donc décrit avec succès le comportement du bruit dans un système à trois états, qui comporte du bruit super-Poissonien. Nous avons vu que la première condition

à une augmentation du bruit était l'augmentation du nombre d'états accessibles, ce qui augmente le nombre de séquences pouvant être empruntées. Nous allons vérifier cette affirmation en étudiant différentes configurations de double-jonction tunnel, en modifiant la taille de l'îlot et l'épaisseur des barrières, augmentant ou diminuant ainsi le nombre d'états accessibles.

5.5 Bruit de grenaille pour différentes géométries et SET

Dans cette section, nous allons faire varier les paramètres géométriques d'une double-jonction tunnel afin de pouvoir dessiner quelques tendances dans les cas où la recherche de la minimisation ou l'augmentation du bruit dans ces dispositifs pourrait être recherchée. Le dispositif principal de ce mémoire, le SET, est également étudié en fin de section.

5.5.1 Influence de la géométrie de l'îlot

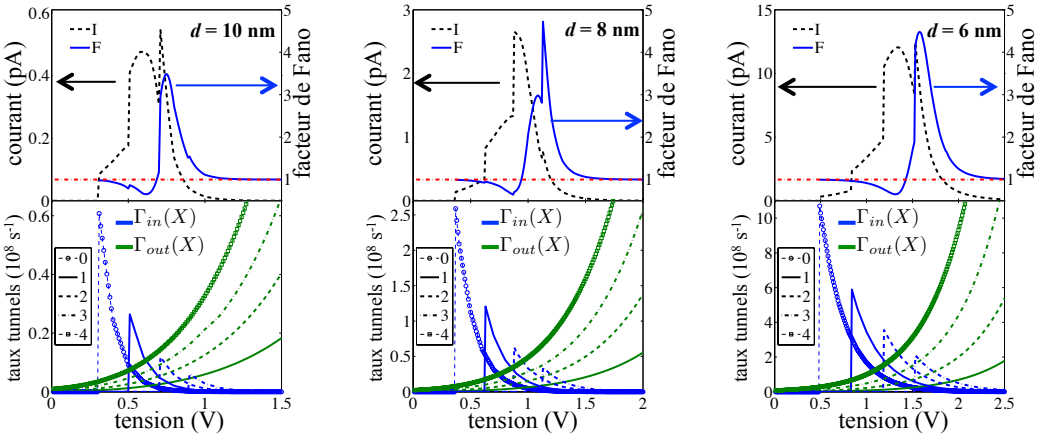


FIGURE 5.16 – Courants, facteurs de Fano et taux de transfert tunnel en fonction de la tension pour 3 DTJ à îlots sphériques de diamètres différents, avec $h_S = 1,2$ nm, $h_D = 1,8$ nm et $h_G = 5$ nm.

Les FIGURE 5.16 et FIGURE 5.17 ne donnent pas de tendance nette (réduction ou augmentation du bruit) en fonction de la taille ou de la géométrie propre de l'îlot. Si le courant ainsi que l'écart entre les paliers augmentent avec une réduction du diamètre de l'îlot, le maximum de bruit super-Poissonien se produit toujours aux alentours du 4e palier

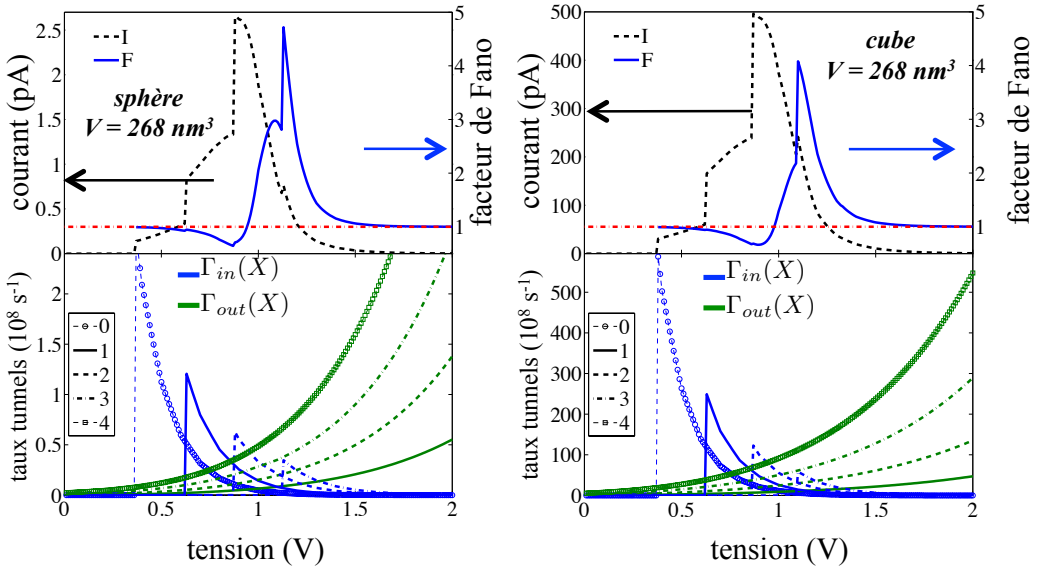


FIGURE 5.17 – Courants, facteurs de Fano et taux de transfert tunnel en fonction de la tension pour deux îlots, sphérique et cubique, de même volume, correspondant à un îlot sphérique de $d = 8$ nm. Les épaisseurs d'oxyde sont fixées à $h_S = 1,2$ nm, $h_D = 1,8$ nm et $h_G = 5$ nm.

(sauf dans le cas d'un îlot de diamètre 10 nm, où le maximum de bruit est au 3e palier). La largeur des paliers dans deux DTJ à îlot de même volume sont les mêmes, et malgré une augmentation drastique du courant dans le cas d'un îlot carré (conséquence d'une surface en regard des électrodes bien plus grande), le bruit a plutôt une tendance à diminuer (légèrement) en passant d'un îlot sphérique à un îlot cubique.

Les épaisseurs d'oxyde étant les mêmes sur ces dispositifs, l'écart relatif entre les taux de transfert tunnel (grandeur élémentaire de l'explication du bruit) reste à peu près le même. La taille de l'îlot ne constituerait donc pas une contrainte technologique pour des dispositifs utilisant le bruit des DTJ.

5.5.2 Influence de l'épaisseur des barrières

Les FIGURE 5.18 et FIGURE 5.19 montrent l'importance cruciale de la dissymétrie des barrières d'oxyde tunnel sur le bruit, et même davantage : pour un même écart d'épaisseur entre source et drain, nous obtenons la même allure pour le courant (évidemment plus fort dans le cas d'électrodes plus proches de l'îlot), et surtout, exactement la même courbe pour

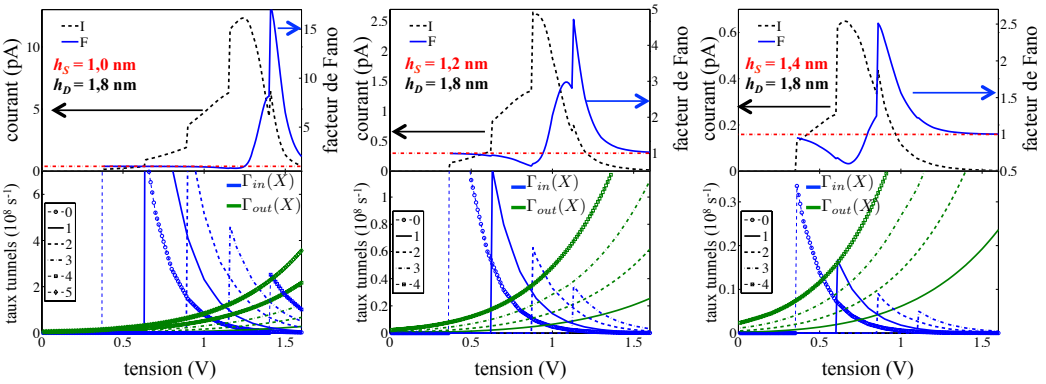


FIGURE 5.18 – Courants, facteurs de Fano et taux de transfert tunnel en fonction de la tension pour trois DTJ à îlot de même dimension, pour trois largeurs d'oxyde source, avec $d = 8$ nm, $h_D = 1,8$ nm et $h_G = 5$ nm.

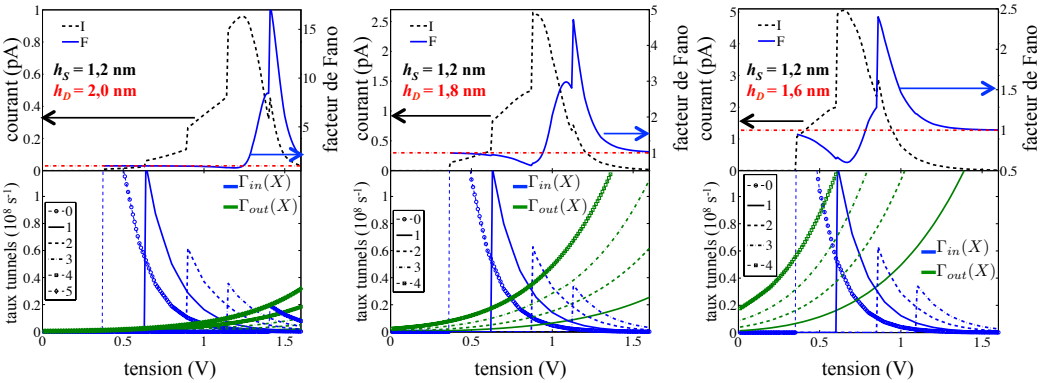


FIGURE 5.19 – Courants, facteurs de Fano et taux de transfert tunnel en fonction de la tension pour trois DTJ à îlot de même dimension, pour trois largeurs d'oxyde drain avec $d = 8$ nm, $h_S = 1,2$ nm et $h_G = 5$ nm.

le facteur de Fano. La contrainte technologique pour obtenir un facteur de Fano est plus faible qu'on ne pourrait le croire, puisqu'elle ne concerne pas la taille ou la géométrie de l'îlot, mais seulement les épaisseurs d'oxyde tunnel. Néanmoins un courant fort (c'est-à-dire, des îlots petits et des épaisseurs d'oxyde fines) peut être recherché en parallèle.

Ainsi, nous remarquons que plus l'écart d'épaisseur entre les barrières d'oxyde augmente, plus le bruit est fort, comme on peut le constater pour les cas où l'écart est de 0,8 nm ($h_S = 1,2$ nm ; $h_D = 2,0$ nm et $h_S = 1,0$ nm ; $h_D = 1,8$ nm) avec un facteur de Fano atteignant $F = 17$.

En effet, une grande dissymétrie implique que la zone de résistance différentielle négative se situe à des tensions plus hautes, et nous attendons le 5e palier pour la voir dans les cas $h_S = 1,2$ nm ; $h_D = 2,0$ nm et $h_S = 1,0$ nm ; $h_D = 1,8$ nm.

Les taux de transfert tunnel sont donc proches pour le 5e niveau d'énergie ($\Gamma_{\text{in}}(4) \simeq \Gamma_{\text{out}}(4)$), c'est-à-dire, dans un système à six états. On a vu que plus le nombre d'états

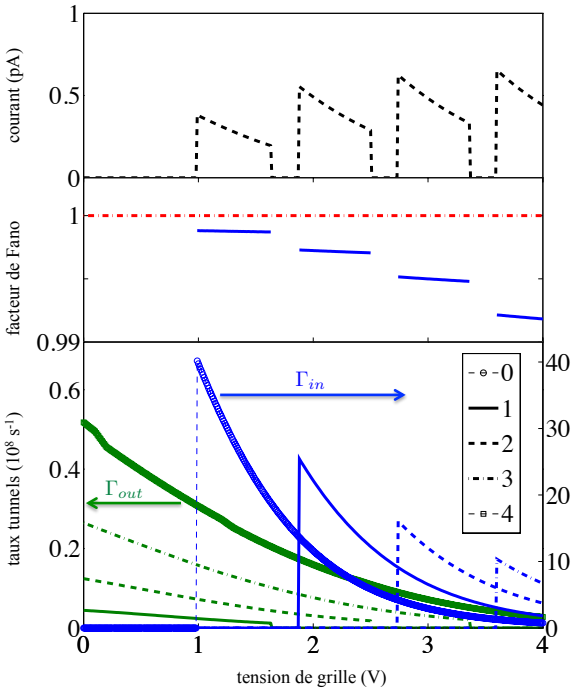


FIGURE 5.20 – Courants, facteurs de Fano et taux de transfert tunnel en fonction de la tension de grille pour un SET avec un îlot de paramètres $d = 8nm$, $h_S = 1,2nm$, $h_D = 1,3nm$, $h_G = 5nm$.

possibles était haut, plus le bruit pouvait atteindre de fortes valeurs, comme on l'observe ici.

5.5.3 Bruit de grenaille dans un SET

La première partie de cette thèse étant consacrée au SET, nous avons également cherché à calculer le bruit dans cette structure, donné en FIGURE 5.20. En fonctionnement classique (c'est à dire pour les oscillations de Coulomb), l'évolution du bruit est sans surprise : dans un pic de courant, les électrons ne circulent que sur un niveau d'énergie. Ainsi le nombre d'états dans l'îlot est limité à 2, et donc, à du bruit Poissonien ou sous-Poissonien. Le tracé des taux de transfert tunnel nous indique dans ce cas que, pour les quatre premiers niveaux considérés, on a toujours : $\Gamma_{\text{in}}(n-1) \gg \Gamma_{\text{out}}(n)$. Le bruit demeure donc Poissonien ($F \simeq 1$) et décroit néanmoins, conséquence du rapprochement des taux de transfert tunnel. Le SET en fonctionnement normal (c'est-à-dire en faisant varier la tension de grille V_{GS}), ne présente donc pas d'intérêt particulier dans l'étude du bruit de grenaille.

5.6 Conclusion

En utilisant les résultats du simulateur SENS, dont on a montré la capacité à déterminer le bruit de grenaille, par la méthode de Korotkov et la méthode Monte-Carlo, nous avons réussi à expliquer de manière simple et intuitive, le comportement du bruit dans les double-jonctions tunnel, à partir des taux de transfert tunnel, en se détachant de tout formalisme mathématique. Devant la complexité d'étudier un système à plusieurs états, nous nous sommes limités à l'étude du système à deux états (0 ou 1 électron dans la boîte) pour expliquer un bruit Poissonien ou sous-Poissonien, et à un système à trois états pour expliquer le bruit super-Poissonien. Nous avons démontré que l'augmentation du nombre de séquences possibles (suite d'évènements tunnels) due à des taux de transfert tunnel d'entrée et de sorties proches sur un niveau ($\Gamma_{\text{in}}(n) \simeq \Gamma_{\text{out}}(n)$), combinée à une grande dissymétrie des temps des chemins de base, était responsable du bruit super-Poissonien.

L'étude de l'influence des paramètres géométriques nous a renseignés sur la contrainte technologique imposée sur les dispositifs dans le cadre d'une utilisation du bruit de grenaille.

Si un bruit fort est souhaité, une grande dissymétrie des épaisseurs de barrières source et drain (avec une barrière drain plus épaisse que la barrière source) est nécessaire, sans plus de contraintes sur la taille de l'îlot ou sa géométrie. Cette observation pourrait avoir une conséquence non négligeable sur les applications pouvant être faites de dispositifs double-jonction tunnel. Si le bruit dans les dispositifs à un électron est encore un simple objet d'étude théorique, la résurgence d'un domaine tel que celui de la résonance stochastique, initié par Gaines en 1969 [Gaines 69] dans les architectures neuronales [Misra 10] tirant profit du bruit, ou encore le besoin de miniaturisation des circuits de génération de nombres aléatoires pourraient pousser les chercheurs à s'intéresser de plus près au bruit dans les dispositifs à boîtes quantiques.

Conclusion générale

Les transistors à un électron (SET) sont à la croisée des chemins. Alors qu'ils restaient souvent cantonnés à des recherches amont, les dernières réalisations expérimentales ont permis d'obtenir des oscillations de Coulomb à température ambiante, dans des processus reproductibles et compatibles avec la technologie silicium, ce qui doit permettre de voir déboucher quelques applications sur le marché de l'électronique.

En outre, depuis 1993 et les articles fondateurs de Hicks et Dresselhaus sur l'étude de la thermoélectricité dans les systèmes à faible dimensionnalité [Hicks 93a, Hicks 93b], une nouvelle application potentielle du SET en tant que module thermoélectrique a élargi le champ des possibles utilisations de ces transistors. En effet, le caractère (quasi-) discret de la densité d'états électronique dans les nanocristaux réduit fortement les pertes thermiques par relaxation de l'électron qui dégradent habituellement les performances thermoélectriques dans les composants traditionnels.

Devant cet avenir prometteur, la nécessité d'avoir à disposition des modèles physiques capables de simuler les SET à partir de paramètres physiques tels que l'épaisseur des barrières ou la taille de l'îlot, tout en prenant en compte l'effet de la température, et qui plus est, d'une différence de température aux électrodes, semble très claire.

Ce travail de thèse avait donc pour objectif de développer un simulateur pour les SET, basé sur le simulateur SENS (Single-Electron Nanodevice Simulation) de l'équipe, qui ne permettait de modéliser jusqu'à présent que des double- ou triple-jonctions tunnel. Les caractéristiques de ce simulateur sont (i) le calcul des fonctions d'onde électroniques individuelles de chaque électron pour chaque tension de drain et de grille, par la résolution des équations couplées de Poisson et Schrödinger et (ii) la détermination des taux de transfert

tunnel dépendant des tensions et du nombre d'électrons dans l'îlot, par la règle d'or de Fermi, et le formalisme de Bardeen. Au delà de l'ajout d'une grille et donc la définition d'un maillage différent suivant l'axe îlot-grille dans la simulation, il a fallu s'interroger sur la détermination du potentiel à mi-barrière d'oxyde pour le calcul des éléments de matrice. Celle-ci ne pouvait plus se faire de manière purement analytique du fait de l'influence électrostatique de la grille. Par ailleurs, dans le but de calculer les propriétés thermoélectriques dans les SET, et en particulier la conductance thermique une expression de l'élargissement des niveaux d'énergie dans l'îlot par interactions électron-phonon était nécessaire. Ces élargissements, dépendant des modes de phonons, avait été calculés par Audrey Valentin [Valentin 09b]. Mais le calcul complet des courants est très long, un mode de phonon étant tiré au sort à chaque nouvel électron dans l'îlot. Nous avons donc employé une expression simplifiée d'un élargissement Lorentzien des niveaux.

À partir des résultats obtenus par ce modèle, nous avons pu expliquer le comportement du courant. De la forte localisation de la fonction d'onde vers l'électrode de grille jusqu'aux taux de transfert tunnel, chaque caractéristique (hauteur relative, position, allure) des oscillations de Coulomb a pu être éclaircie. L'étude de l'influence de chaque paramètre a été réalisée. Cela a permis de constater l'importance cruciale de la dégénérescence des niveaux dans le silicium conséquence des 6 vallées Δ, dissymétrisant l'influence des épaisseurs de barrière tunnel. Ainsi, pour un faible nombre d'électrons, la transparence de la barrière source se trouve renforcée par le nombre d'états libres dans l'îlot, par rapport à celle de la barrière drain qui dépend du nombre d'états occupés. La taille de l'îlot est également importante, puisque notre modèle confirme évidemment que pour conserver du blocage de Coulomb à température ambiante, des îlots de diamètre inférieur à environ 4 nm sont nécessaires.

Le modèle a été ensuite utilisé pour simuler le SET en tant que dispositif thermoélectrique en appliquant une différence de température aux électrodes source et drain. Le SET donne de forts coefficients Seebeck (autour de 1 $\mathrm{mV.K^{-1}}$), linéaires sur une grande plage de tension de grille (de -1 à 1 mV). Nous avons donc présenté une application du SET comme étalon du coefficient Seebeck. Nous avons ensuite évalué la pertinence de l'utilisation d'un SET en tant que générateur thermoélectrique, en prenant en compte l'élargissement des

niveaux d'énergie dans l'îlot. Nous avons montré que si nous ne prenons en compte que le transport électronique dans les SET, ceux-ci font office d'excellents postulants comme dispositif thermoélectrique, avec des ZT pouvant aller de 3 jusqu'à 150 (à $T = 100$ K) pour des élargissements réalistes, alors que des ZT de 2 à 300 K (donc, théoriquement plus faibles à 100 K) sont nécessaires pour être compétitifs. Mais la puissance qu'ils fourniraient est hélas trop basse pour concurrencer d'autres convertisseurs d'énergie (10 $\mathrm{mV.m^{-2}}$ pour les SET contre 100 $\mathrm{mV.m^{-2}}$ pour les cellules photovoltaïques). Et il y a pire encore : les principaux vecteurs de pertes thermiques dans les semi-conducteurs ne sont pas les électrons, mais les phonons ! Et nous avons constaté qu'en ajoutant une contribution empirique des phonons, basée sur la conductivité thermique du silicium, les figures de mérite s'écroulaient. Le SET ne peut donc pas en tant que tel, c'est à dire un îlot silicium enrobé de silice, être utilisé comme module thermoélectrique.

Enfin, l'étude du bruit dans les double-jonctions tunnel a permis d'élaborer une approche simple pour expliquer le comportement du bruit à partir des taux de transfert tunnel, permettant notamment de mieux cerner le bruit super-Poissonien. Nous avons ainsi remarqué que plus les taux de transferts (entrée ou sortie) sont proches pour un même nombre d'électrons dans l'îlot, plus le bruit a des chances d'augmenter, conséquence directe de l'équiprobabilité de l'arrivée ou du départ d'un nouvel électron, à condition que les temps de retour au niveau « initial » soient différents. L'étude du bruit se base donc entièrement sur une comparaison des taux de transferts tunnels sur un niveau donné. Ainsi, nous avons démontré que le bruit ne dépendait que de l'écart d'épaisseur de barrière entre l'oxyde source et l'oxyde drain : une grande différence entraînant un bruit plus important. La contrainte technologique porte donc uniquement sur un contrôle de l'épaisseur des barrières dans le cas d'une utilisation du bruit des double-jonction tunnel.

Intéressons nous désormais à l'avenir. Celui du simulateur SENS tout d'abord, et des simulations de dispositifs à un électron en général.

Quelles directions et quelles utilisations pour SENS ?

Le modèle SENS a passé une étape supérieure avec ce travail de thèse, étant désormais capable de simuler un dispositif dont les dernières réalisations technologiques poussent à

l'optimisme vis-à-vis d'une utilisation future. Néanmoins, les SET expérimentaux n'ont pas l'apparence idéale que nous leur donnons dans ce modèle, d'un îlot sphérique, et de barrières d'oxyde parfaitement définies. Prenons exemple sur les SET à base de nanofils, réalisés au CEA LETI, et présentés dans le contexte de l'étude [Hofheinz 06a, Hofheinz 06b, Hofheinz 07]. Le profil de la bande de conduction donné en FIGURE 5.21 n'est pas triangulaire au niveau des barrières. La prise en compte de tels profils dans le simulateur SENS est donc une voie à explorer, tout en n'oubliant pas de reconsidérer l'hypothèse d'un transport séquentiel, moins certaine. Plus généralement, s'approcher de la géométrie des SET expérimentaux est un défi majeur pour ce simulateur.

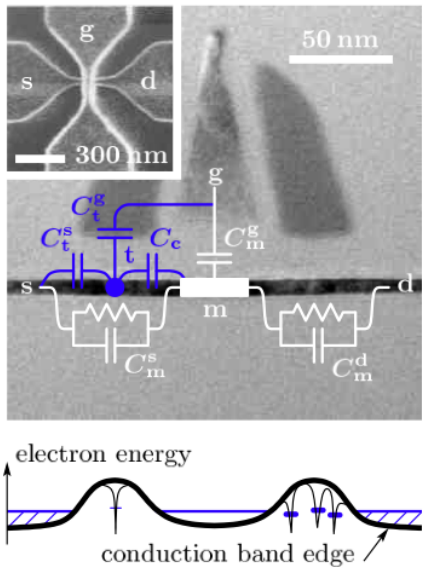


FIGURE 5.21 – Vues TEM d'un SET à base de nanofil silicium développé au CEA LETI. Le circuit électrique équivalent, et l'allure de la bande de conduction, en présence de défauts, sont donnés [Hofheinz 06a].

Une seconde grille, en regard de la première et afin de tester le SET pour des applications logiques, pourrait également être intégrée au modèle [Maeda 12]. L'ajout d'un deuxième îlot dans l'oxyde tunnel, utilisant le calcul des interactions électrons-phonons d'Audrey Valentin permettrait de simuler un SET à double îlots, présentant une caractéristique en « nids d'abeille » [van der Wiel 02]. Jusqu'ici cantonné à l'étude de dispositifs à base de silicium, rien n'empêche dans le code de SENS l'étude d'autres SET à base d'îlots semi-

conducteurs, où on pourrait apprécier l'effet de la discrétisation des niveaux d'énergie, que nous n'avons pas pu voir dans le silicium, le niveau fondamental étant 12 fois dégénéré.

La résolution des équations de Poisson et Schrödinger est relativement longue (de l'ordre d'une semaine pour 7 points de polarisation de drain, 20 points de polarisation de grille et 5 électrons dans l'îlot), ce simulateur n'est donc pas adapté au calcul de mobilité électronique dans des matrices de nanocristaux, utilisées notamment dans les cellules photovoltaïques de 3e génération [Conibeer 07]. Si des modèles existent (par exemple MACAO, se basant sur la probabilité de transfert tunnel par la théorie de Marcus [Lepage 12]), ils nécessitent néanmoins un "garde fou" permettant d'indiquer les états électroniques dans un îlot de taille connue. Le simulateur SENS s'inscrirait parfaitement dans ce rôle.

Pour les mêmes raisons, SENS n'est pas adapté à l'étude du fonctionnement d'un circuit à base de SET. Mais les caractéristiques du SET (capacités, résistances) déduites des résultats du simulateur serviraient de base à l'élaboration des schémas électriques équivalents.

Les SET comme modules thermoélectriques : une fausse mauvaise idée ?

La chute du facteur de mérite due à la contribution des phonons dans le SET étudié nous a conduit à abandonner l'idée d'utiliser un tel SET en tant que générateur thermoélectrique. Mais l'espoir d'utiliser les SET comme dispositif thermoélectrique n'est pas vain : les nanofils silicium, à une certaine taille et un dopage particulier, présentent des figures de mérite intéressantes, autour de $ZT = 2$ à 200 K [Boukai 08]. Nous avons évoqué juste au dessus les SET développé à base de nanofils... Un compromis pourrait donc être trouvé entre un dopage dans un nanofil qui permet la réduction des pertes thermiques, et un SET qui serait formé à partir de ce nanofil, profitant ainsi du niveau discret dans son îlot.

Le bruit dans les dispositifs à un électron : quelles applications ?

Le bruit de grenaille a été étudié, et compris, à $T = 0$ K. Pour des températures non nulles, ce bruit est accompagné du bruit thermique, que le simulateur serait également à même de simuler. Les applications potentielles du bruit dans les dispositifs à un électron ne semblent pas *a priori* foisonnantes. Néanmoins, des générateurs de nombres aléatoires

basés sur le bruit, pour des applications de cryptographie par exemple, voient le jour [Taylor 11, Petrie 00]. La résonance stochastique d'un réseau de dispositifs à un électron a même été utilisée pour leur application dans un réseau de neurones artificiels [Oya 07]. L'utilisation de la résonance stochastique dans des circuits inspirés de réseaux neuronaux étant un sujet en pleine émergence, le bruit de grenaille, au coeur même du fonctionnement des dispositifs à un électron (car il est la conséquence de la granularité de la charge), pourrait bien se faire une place dans cette "nouvelle" électronique.

Annexes

Annexe A

Fonctions d'onde dans les électrodes métalliques dans l'approximation WKB

Pour obtenir l'élément de matrice M_L nécessaire au calcul des fréquences de transition, il faut calculer les fonctions d'onde des électrodes, en particulier leur valeur au milieu de la barrière tunnel. Cette partie reprend les calculs effectués par J. Sée dans le cadre de sa thèse pour les double-jonctions tunnel [Sée 03] , en les adaptant aux notations utilisées dans cette thèse.

A.1 Electrode source

Nous avons vu dans le chapitre 2 que le système Métal-Isolant-Si-Metal-Isolant est décomposé en trois parties, et la fonction d'onde de l'électrode source doit être déterminée dans le système présenté FIGURE A.1. Afin de localiser les états dans l'électrode, nous lui donnons une largeur L_S dans la direction S (axe MISiIM), avant de faire tendre cette largeur vers l'infini. Les largeurs L_y et L_z sont elles directement supposées infinies, ce qui est une approximation assez forte dans le cas des SET qui sont simulés, contrairement aux simulations des DTJ, car les électrodes sont réduites dans la direction y (direction îlot-grille).

Pour calculer la fonction d'onde dans l'électrode, il faut résoudre l'équation de Schrödinger dont l'Hamiltonien $\hat{H_S}$ peut être décomposé en trois hamiltoniens ne dépendant

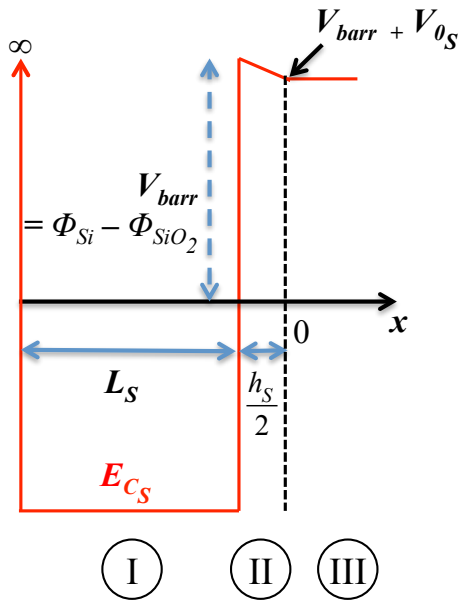


FIGURE A.1 – Diagramme en énergie du sous-système dans lequel la fonction électronique dans la source Ψ_S est déterminée.

chacun que d'une variable d'espace :

$$\hat{H_S}\Psi_S = (\hat{H_x} + \hat{H_y} + \hat{H_z})\Psi_S = E_S\Psi_S \tag{A.1}$$

Ces hamiltoniens commutant, on peut décomposer (A.1) en trois équations de Schrödinger séparées :

$$\begin{cases} \hat{H_x}\Psi_x = E_x\Psi_x \\ \hat{H_y}\Psi_y = E_y\Psi_y \\ \hat{H_z}\Psi_z = E_z\Psi_z \end{cases} \tag{A.2}$$

avec

$$\begin{cases} \Psi_S = \Psi_x \cdot \Psi_y \cdot \Psi_z \\ E_S = E_x + E_y + E_z \end{cases} \tag{A.3}$$

Le transport électronique se faisant suivant l'axe $(0x)$, l'hypothèse faite dans les directions $(0y)$ et $(0z)$ est que les quantités de mouvement des électrons sont négligeables, et par conséquent les énergies E_y et E_z sont considérées comme nulles, et leurs fonctions d'ondes associées Ψ_y et Ψ_z constantes et égales à l'unité (le coefficient de normalisation étant porté uniquement par Ψ_x) :

$$\begin{cases} \Psi_y = \Psi_z = 1 \Rightarrow \Psi_S = \Psi_x \\ E_z = E_y = 0 \Rightarrow E_S = E_x \end{cases} \tag{A.4}$$

Une nouvelle fois, la réduction des dimensions des électrodes suivant l'axe $(0y)$ dans les SET rend cette approximation discutable. Mais en considérant qu'il n'y a pas de transport de charges suivant l'axe $(0y)$ (i.e, dans l'oxyde de grille), elle conserve une certaine cohérence.

Il reste donc plus qu'à déterminer Ψ_x et E_x. Pour cela, nous séparons le sous-système en trois parties dans lesquelles nous allons résoudre les équations de Schrödinger :

- Ⓘ : le puits de potentiel correspondant à l'électrode $-L_S - h_S/2 \leq x \leq -h_S/2$
- Ⓘⓘ : la barrière triangulaire due à la polarisation dans l'oxyde : $-h_S/2 \leq x \leq 0$
- Ⓘⓘⓘ : la barrière ajoutée lors de la décomposition en trois sous-systèmes $x \geq 0$

Équation de Schrödinger dans la zone Ⓘ

$$\hat{H}_I \Psi_I = E\Psi_I \tag{A.5}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_{C_S}\right)\Psi_I = E\Psi_I \tag{A.6}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_{C_S})\right)\Psi_I = 0 \tag{A.7}$$

sachant que : $\Psi(-L_S - h_S/2) = 0$ et en posant :

$$k_S = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_{C_S})} \tag{A.8}$$

La solution de cette équation est :

$$\boxed{\Psi_I(x) = A_S \sin\left(k_S\left(x + L_S + \frac{h_S}{2}\right)\right)} \tag{A.9}$$

Équation de Schrödinger dans la zone Ⓘⓘ

Dans cette zone, nous sommes en présence d'une barrière triangulaire : les fonctions d'onde sont déterminées à l'aide de l'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) (voir [Sée 06b, Sée 03])

Ainsi nous avons directement :

$$\Psi_{II}(x) = \Psi_S\left(-\frac{h_S}{2}\right)\exp\left(-\sqrt{\frac{2m_{SiO_2}}{\hbar^2}}\int_{-h_S/2}^{x}\sqrt{V(x') - E}dE\right) \tag{A.10}$$

or, $\Psi(-h_S/2) = A_S \sin(k_S L_S)$, $V(x) = \frac{2V_{0_S}}{h_S}x + V_{barr} + V_{0_S}$, et en posant

$$\alpha_S = \sqrt{\frac{2m_{SiO_2}}{\hbar^2}(V_{barr} + V_{0_S} - E)} \tag{A.11}$$

, L'équation (A.10) devient :

$$\begin{aligned}\Psi_{II}(x) =& A_S \sin(k_S L_S) \\ &\times \exp\left(-\alpha_S \frac{h_S}{3V_{0_S}} \frac{1}{\sqrt{V_{barr} + V_{0_S} - E}} \left[\left(\frac{2V_{0_S}}{h_S}x + V_{barr} + V_{0_S} - E\right)^{3/2} - (V_{barr} - E)^{3/2}\right]\right)\end{aligned} \tag{A.12}$$

Équation de Schrödinger dans la zone (III)

$$\hat{H}_{III}\Psi_{III} = E\Psi_{III} \tag{A.13}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{SiO_2}}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{0_S} + V_{barr}\right)\Psi_{III} = E\Psi_{III} \tag{A.14}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m_{SiO_2}}{\hbar^2}(V_{0_S} + V_{barr} - E)\right)\Psi_{III} = 0 \tag{A.15}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \alpha_S^2\right)\Psi_{III} = 0 \tag{A.16}$$

La solution de cette équation est $\Psi_{III}(x) = \Psi_S(0)\exp(-\alpha_S x)$, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned}\Psi_{III}(x) =& A_S \sin(k_S L_S) \\ &\times \exp\left(-\alpha_S \frac{h_S(V_{barr} + V_{0_S} - E)}{3V_{0_S}}\left[1 - \left(1 - \frac{V_{0_S}}{V_{barr} + V_{0_S} - E}\right)^{3/2}\right]\right)\exp\left(-\alpha_S x\right)\end{aligned} \tag{A.17}$$

Condition de continuité

La condition de continuité de $1/m\vec{\nabla}\Psi_S$ impose :

$$\frac{1}{m_e}\frac{\partial \Psi_I}{\partial x}\left(\frac{-h_S}{2}\right) = \frac{1}{m_{SiO_2}}\frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x}\left(\frac{-h_S}{2}\right) \tag{A.18}$$

ce qui conduit après quelques développements et simplifications à la relation :

$$\sin^2(k_S L_S) = \frac{k_S^2}{k_S^2 + \frac{m_e^2}{m_{SiO_2}^2}\alpha_S\left|1 - \frac{V_{0_S}}{V_{barr} + V_{0_S} - E}\right|} \tag{A.19}$$

Condition de normalisation

La constante A_S est déterminée à partir de la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$\iiint_{espace} |\Psi_S(x,y,z)|^2 = 1 \tag{A.20}$$

On a $\int \Psi_S(y)dy = L_y$, et $\int \Psi_S(z)dz = L_z$, et lorsque l'on fait tendre L_S vers l'infini on obtient :

$$\lim_{L_S \to +\infty} \int_{-(L_S+h_S/2)}^{+\infty} |\Psi_S(x)|^2 dx = \frac{|A_S|^2 L_S}{2} \tag{A.21}$$

Nous trouvons donc une condition sur $|A_S|^2$:

$$|A_S|^2 = \frac{2}{L_S L_y L_z} = \frac{2}{\Omega_S} \tag{A.22}$$

où Ω_S est le volume de l'électrode source.

Élément de matrice M_S

En regroupant toutes ces équations, nous pouvons déterminer l'élément de matrice (au carré), avec ici la position du milieu de la barrière d'oxyde drain fixée en $x = 0$:

$$\begin{aligned} |M_S|^2 =& \left(\frac{\hbar^2}{m_{SiO_2}}\right)^2 \frac{2}{\Omega_S} \frac{k_S^2}{k_S^2 + \frac{m_e^2}{m_{SiO_2}^2}\alpha_S^2 \left|1 - \frac{V_{0_S}}{V_{barr}+V_{0_S}-E}\right|} \\ & \times \exp\left(-2\alpha_S \frac{h_S(V_{barr}+V_{0_S}-E)}{3V_{0_S}} \left[1 - \left(1 - \frac{V_{0_S}}{V_{barr}+V_{0_S}-E}\right)^{3/2}\right]\right) \\ & \times \left| \iint_{S_{barr}} (\vec{\nabla}\Psi_{dot}(0,x,y) + \alpha_S \Psi_{dot}(0,x,y)) dydz \right|^2 \end{aligned} \tag{A.23}$$

A.2 Électrode drain

La méthode pour obtenir l'élément de matrice dans l'électrode drain est sensiblement la même, à l'exception que la fonction d'onde est en croissance exponentielle le long de l'axe $(0x)$. Nous séparons donc le sous-système en trois parties, comme illustré FigureA.2.

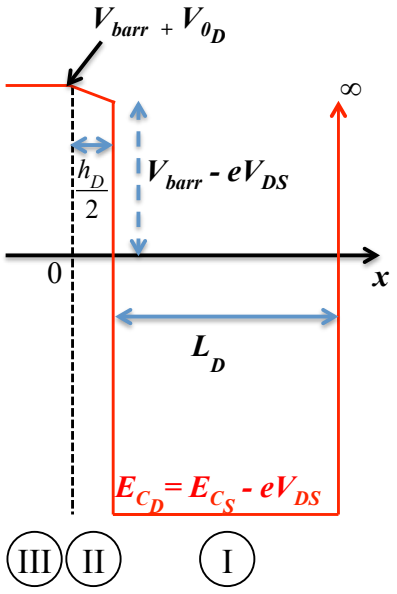


FIGURE A.2 – Diagramme en énergie du sous-système dans lequel la fonction électronique dans le drain Ψ_D est déterminée.

Par des calculs similaires nous pouvons déterminer les fonctions d'onde dans les différentes zones, ainsi nous avons

$$\Psi_I(x) = A_D \sin\left(k_D\left(-x + L_D + \frac{h_D}{2}\right)\right) \tag{A.24}$$

$$\begin{aligned}\Psi_{II}(x) =& A_D \sin(k_D L_D) \\ &\times \exp\left(-\alpha_D \frac{h_D}{3(V_{0_D}+eV)} \frac{1}{\sqrt{V_{barr}+V_{0_D}-E}} \left[\begin{array}{r} \left(-\frac{2(V_{0_D}+eV)}{h_D}x + V_{barr} + V_{0_D} - E\right)^{3/2} \\ -(V_{barr}-eV-E)^{3/2} \end{array}\right]\right)\end{aligned} \tag{A.25}$$

$$\begin{aligned}\Psi_{III}(x) =& A_D \sin(k_D L_D) \\ &\times \exp\left(-\alpha_S \frac{h_D(V_{barr}+V_{0_D}-E)}{3(V_{0_D}+eV)}\left[1-\left(1-\frac{V_{0_D}+eV}{V_{barr}+V_{0_D}-E}\right)^{3/2}\right]\right)\exp\left(\alpha_D x\right)\end{aligned} \tag{A.26}$$

avec :

$$k_D = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(E - E_{C_D})} \qquad \alpha_D = \sqrt{\frac{2m_{SiO_2}}{\hbar^2}(V_{barr}+V_{0_D}-E)} \tag{A.27}$$

$$\sin^2(k_D L_D) = \frac{k_D^2}{k_D^2 + \frac{m_e^2}{m_{SiO_2}^2}\alpha_D\left|1 - \frac{V_{0_D}+eV}{V_{barr}+V_{0_D}-E}\right|}, \qquad |A_D|^2 = \frac{2}{\Omega_D} \tag{A.28}$$

Élement de matrice M_D

On peut donc définir l'élément de matrice (au carré) entre le drain et l'îlot :

$$\begin{aligned}|M_D|^2 =& \left(\frac{\hbar^2}{m_{SiO_2}}\right)^2 \frac{2}{\Omega_D} \frac{k_D^2}{k_D^2 + \frac{m_e^2}{m_{SiO_2}^2}\alpha_D^2 \left|1 - \frac{V_{0_D} + eV}{V_{barr} + V_{0_D} - E}\right|} \\ & \times \exp\left(-2\alpha_D \frac{h_D(V_{barr} + V_{0_D} - E)}{3(V_{0_D} + eV)} \left[1 - \left(1 - \frac{V_{0_D} + eV}{V_{barr} + V_{0_D} - E}\right)^{3/2}\right]\right) \\ & \times \left| \iint_{S_{barr}} (\vec{\nabla}\Psi_{dot}(0,x,y) - \alpha_D \Psi_{dot}(0,x,y)) dydz \right|^2 \end{aligned} \tag{A.29}$$

Bibliographie

[Aleshkin 06] V.Y. Aleshkin, L. Reggiani & M. Rosini. *Comparative analysis of sequential and coherent tunneling models in resonant diodes.* Physical Review B, vol. 73, no. 16, page 165320, 2006. 33

[Angus 07] S.J. Angus, A.J. Ferguson, A.S. Dzurak & R.G. Clark. *Gate-defined quantum dots in intrinsic silicon.* Nano letters, vol. 7, no. 7, pages 2051–2055, 2007. 26

[Apertet 12] Y. Apertet, H. Ouerdane, C. Goupil & P. Lecoeur. *Thermoelectric internal current loops inside inhomogeneous systems.* Physical Review B, vol. 85, no. 3, page 033201, 2012. 30

[Aureau 10] D. Aureau, Y. Varin, K. Roodenko, O. Seitz, O. Pluchery & YJ Chabal. *Controlled Deposition of Gold Nanoparticles on Well-Defined Organic Monolayer Grafted on Silicon Surfaces.* The Journal of Physical Chemistry C, vol. 114, no. 33, pages 14180–14186, 2010. 38

[Averin 86] DV Averin & KK Likharev. *Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions.* Journal of low temperature physics, vol. 62, no. 3, pages 345–373, 1986. 20

[Bagrets 03] DA Bagrets & Y.V. Nazarov. *Full counting statistics of charge transfer in Coulomb blockade systems.* Physical Review B, vol. 67, no. 8, page 085316, 2003. 104

[Bardeen 61] J. Bardeen. *Tunnelling from a many-particle point of view.* Physical Review Letters, vol. 6, no. 2, pages 57–59, 1961. 45

[Beenakker 92] CWJ Beenakker & AAM Staring. *Theory of the thermopower of a quantum dot.* Physical Review B, vol. 46, no. 15, page 9667, 1992. 26, 89, 91

[Bell 08] L.E. Bell. *Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems.* Science, vol. 321, no. 5895, pages 1457–1461, 2008. 29

[Birk 95] H. Birk, MJM De Jong & C. Schönenberger. *Shot-noise suppression in the single-electron tunneling regime.* Physical review letters, vol. 75, no. 8, pages 1610–1613, 1995. 33, 34, 109

[Blanter 00] Y.M. Blanter & M. Büttiker. *Shot noise in mesoscopic conductors.* Physics Reports, vol. 336, no. 1, pages 1–166, 2000. 32

[Blanter 05] Y.M. Blanter. *Recent advances in studies of current noise.* arXiv preprint cond-mat/0511478, 2005. 32

[Boukai 08] A.I. Boukai, Y. Bunimovich, J. Tahir-Kheli, J.K. Yu, W.A. Goddard Iii & J.R. Heath. *Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials.* Nature, vol. 451, no. 7175, pages 168–171, 2008. 29, 101, 133

[Brus 83] LE Brus. *A simple model for the ionization potential, electron affinity, and aqueous redox potentials of small semiconductor crystallites.* The Journal of chemical physics, vol. 79, page 5566, 1983. 12

[Burzo 03] M.G. Burzo, P.L. Komarov & P.E. Raad. *Thermal transport properties of gold-covered thin-film silicon dioxide.* Components and Packaging Technologies, IEEE Transactions on, vol. 26, no. 1, pages 80–88, 2003. 100

[Buttiker 88] M. Buttiker. *Coherent and sequential tunneling in series barriers.* IBM Journal of Research and Development, vol. 32, no. 1, pages 63–75, 1988. 31, 53

[Callen 48] H.B. Callen. *The application of Onsager's reciprocal relations to thermoelectric, thermomagnetic, and galvanomagnetic effects.* Physical Review, vol. 73, no. 11, page 1349, 1948. 84

[Chen 96] RH Chen, AN Korotkov & KK Likharev. *Single-electron transistor logic.* Applied Physics Letters, vol. 68, no. 14, pages 1954–1956, 1996. 65

[Choi 12] T. Choi, T. Ihn, S. Schon & K. Ensslin. *Counting statistics in an InAs nanowire quantum dot with a vertically coupled charge detector.* Applied Physics Letters, vol. 100, no. 7, pages 072110–072110, 2012. 34, 109

[Conibeer 07] G. Conibeer. *Third-generation photovoltaics.* Materials Today, vol. 10, no. 11, pages 42–50, 2007. 133

[Cordan 00] AS Cordan, Y. Leroy, A. Goltzené, A. Pépin, C. Vieu, M. Mejias & H. Launois. *Temperature behavior of multiple tunnel junction devices based on disordered dot arrays.* Journal of Applied Physics, vol. 87, no. 1, page 345, 2000. 37

[Dan 10] S.S. Dan & S. Mahapatra. *Analysis of Energy Quantization Effects on Single-Electron Transistor Circuits.* IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. 9, no. 1, pages 38–45, 2010. 38

[Datta 97] S. Datta. Electronic transport in mesoscopic systems. Cambridge university press, 1997. 55

[de Jong 97] MJM de Jong & CWJ Beenakker. *Shot noise in mesoscopic systems.* Mesoscopic electron transport, no. 345, page 225, 1997. 32

[de Sousa 02] J. S. de Sousa, A. V. Thean, J. P. Leburton & V. N. Freire. *Three-dimensional self-consistent simulation of the charging time response in silicon nanocrystal flash memories.* Journal of Applied Physics, vol. 92, no. 10, pages 6182–6187, 2002. 38

[Deleruyelle 04] D. Deleruyelle, C. Le Royer, B. DeSalvo, G. Le Carval, M. Gely, T. Baron, J. L. Autran & S. Deleonibus. *A new memory*

concept : the nano-multiple-tunnel-junction memory with embedded Si nano-crystals. Microelectronic Engineering, vol. 72, no. 1-4, pages 399 – 404, Apr. 2004. 19

[Do 06] V.N. Do, P. Dollfus & V. Lien Nguyen. *Transport and noise in resonant tunneling diode using self-consistent Green's function calculation.* Journal of applied physics, vol. 100, no. 9, pages 093705–093705, 2006. 33

[Dubuc 07] C. Dubuc, J. Beauvais & D. Drouin. *Single-electron transistors with wide operating temperature range.* Applied physics letters, vol. 90, no. 11, pages 113104–113104, 2007. 24, 25

[Efros 75] AL Efros & BI Shklovskii. *Coulomb gap and low temperature conductivity of disordered systems.* Journal of Physics C Solid State Physics, vol. 8, pages L49–L51, 1975. 31

[Ekimov 81] AI Ekimov & AA Onushchenko. *Quantum size effect in three-dimensional microscopic semiconductor crystals.* Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, vol. 34, page 345, 1981. 12

[Elzerman 04] JM Elzerman, R. Hanson, L.H.W. Van Beveren, B. Witkamp, LMK Vandersypen & L.P. Kouwenhoven. *Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot.* Nature, vol. 430, no. 6998, pages 431–435, 2004. 26

[Ferry 99] D. Ferry & S.M. Goodnick. Transport in nanostructures, volume 6. Cambridge University Press, 1999. 55

[Fiori 05] G. Fiori, M.G. Pala & G. Iannaccone. *Three-dimensional simulation of realistic single electron transistors.* Nanotechnology, IEEE Transactions on, vol. 4, no. 4, pages 415–421, 2005. 39

[Fujiwara 06] A. Fujiwara, H. Inokawa, K. Yamazaki, H. Namatsu, Y. Takahashi, N.M. Zimmerman & S.B. Martin. *Single electron tunneling transistor with tunable barriers using silicon nanowire metal-*

oxide-semiconductor field-effect transistor. Applied physics letters, vol. 88, no. 5, pages 053121–053121, 2006. 26

[Gaines 69] BR Gaines. *Stochastic computing systems*. Advances in Information Systems Science, vol. 2, no. 2, pages 37–172, 1969. 128

[Gattobigio 02] M. Gattobigio, G. Iannaccone & M. Macucci. *Enhancement and suppression of shot noise in capacitively coupled metallic double dots*. Physical Review B, vol. 65, no. 11, page 115337, 2002. 34

[Gustavsson 06a] S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simovič, R. Schleser, T. Ihn, P. Studerus, K. Ensslin, DC Driscoll & AC Gossard. *Counting statistics of single electron transport in a quantum dot*. Physical review letters, vol. 96, no. 7, page 76605, 2006. 104

[Gustavsson 06b] S. Gustavsson, R. Leturcq, B. Simovič, R. Schleser, P. Studerus, T. Ihn, K. Ensslin, DC Driscoll & AC Gossard. *Counting statistics and super-Poissonian noise in a quantum dot : Time-resolved measurements of electron transport*. Physical Review B, vol. 74, no. 19, page 195305, 2006. 34

[Harman 02] TC Harman, PJ Taylor, MP Walsh & BE LaForge. *Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices*. Science, vol. 297, no. 5590, pages 2229–2232, 2002. 29, 31

[Heikes 61] R.R. Heikes & R.W. Ure. Thermoelectricity : science and engineering. Interscience Publishers New York, 1961. 29

[Hershfield 93] S. Hershfield, J.H. Davies, P. Hyldgaard, C.J. Stanton & J.W. Wilkins. *Zero-frequency current noise for the double-tunnel-junction Coulomb blockade*. Physical Review B, vol. 47, no. 4, page 1967, 1993. 33, 34, 109

[Hicks 93a] LD Hicks & MS Dresselhaus. *Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit*. Physical Review B, vol. 47, no. 19, page 12727, 1993. 29, 129

[Hicks 93b] LD Hicks & MS Dresselhaus. *Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor.* Physical review. B, Condensed matter, vol. 47, no. 24, page 16631, 1993. 29, 129

[Hochbaum 08] A.I. Hochbaum, R. Chen, R.D. Delgado, W. Liang, E.C. Garnett, M. Najarian, A. Majumdar & P. Yang. *Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires.* Nature, vol. 451, no. 7175, pages 163–167, 2008. 29, 101

[Hoffmann 07] EA Hoffmann, N. Nakpathomkun, AI Persson, H. Linke, HA Nilsson & L. Samuelson. *Quantum-dot thermometry.* Applied Physics Letters, vol. 91, no. 25, pages 252114–252114, 2007. 100

[Hofheinz 06a] M. Hofheinz, X. Jehl, M. Sanquer, G. Molas, M. Vinet & S. Deleonibus. *Individual charge traps in silicon nanowires.* The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems, vol. 54, no. 3, pages 299–307, 2006. 25, 132

[Hofheinz 06b] M. Hofheinz, X. Jehl, M. Sanquer, G. Molas, M. Vinet & S. Deleonibus. *Simple and controlled single electron transistor based on doping modulation in silicon nanowires.* Applied physics letters, vol. 89, no. 14, pages 143504–143504, 2006. 25, 132

[Hofheinz 07] M. Hofheinz, X. Jehl, M. Sanquer, G. Molas, M. Vinet & S. Deleonibus. *Capacitance enhancement in Coulomb blockade tunnel barriers.* Phys. Rev. B, vol. 75, no. 23, page 235301, Jun. 2007. 25, 66, 101, 132

[Humbert 12] C. Humbert, O. Pluchery, E. Lacaze, A. Tadjeddine & B. Busson. *A multiscale description of molecular adsorption on gold nanoparticles by nonlinear optical spectroscopy.* Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 14, no. 1, pages 280–289, 2012. 38

[Humphrey 05] T.E. Humphrey & H. Linke. *Quantum, cyclic, and particle-exchange heat engines.* Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures, vol. 29, pages 390 – 398, 2005. 28

[Inoshita 96] T. Inoshita & H. Sakaki. *Electron-phonon interaction and the so-called phonon bottleneck effect in semiconductor quantum dots.* Physica B : Condensed Matter, vol. 227, no. 1, pages 373–377, 1996. 31

[Inoshita 97] T. Inoshita & H. Sakaki. *Density of states and phonon-induced relaxation of electrons in semiconductor quantum dots.* Physical Review B, vol. 56, no. 8, pages 4355–4358, 1997. 31, 53

[Jouvet 12] N. Jouvet, MA Bounouar, S. Ecoffey, C. Nauenheim, A. Beaumont, S. Monfray, A. Ruediger, F. Calmon, A. Souifi & D. Drouin. *Recent Developments on 3d Integration of Metallic Set onto CMOS Process for Memory Application.* International Journal of Nanoscience, vol. 11, page 40024, 2012. 38

[Kafanov 09] S. Kafanov & P. Delsing. *Measurement of the shot noise in a single-electron transistor.* Physical Review B, vol. 80, no. 15, page 155320, 2009. 103

[Kastner 93] M.A. Kastner. *Artificial atoms.* Physics Today, page 25, 1993. 12

[Klimov 00] VI Klimov, AA Mikhailovsky, S. Xu, A. Malko, JA Hollingsworth, CA Leatherdale, H.J. Eisler & MG Bawendi. *Optical gain and stimulated emission in nanocrystal quantum dots.* Science, vol. 290, no. 5490, pages 314–317, 2000. 13

[Kobayashi 07] Masaharu Kobayashi & Toshiro Hiramoto. *Large Coulomb-Blockade Oscillations and Negative Differential Conductance in Silicon Single-Electron Transistors with [100]- and [110]-Directed Channels at Room Temperature.* Japanese Journal of Applied Physics, vol. 46, no. 1, pages 24–27, 2007. 24

[Kobayashi 08] Masaharu Kobayashi, Kousuke Miyaji & Toshiro Hiramoto. *On the Origin of Negative Differential Conductance in Ultranarrow-Wire-Channel Silicon Single-Electron and Single-Hole Transistors.* Japanese Journal of Applied Physics, vol. 47, no. 3, pages 1813–1817, 2008. 66

[Korotkov 94] AN Korotkov. *Intrinsic noise of the single-electron transistor.* Physical Review B, vol. 49, pages 66433–10392, 1994. 103, 105

[Král 98] K. Král & Z. Khás. *Electron self-energy in quantum dots.* Physical Review B, vol. 57, no. 4, pages 2061–2064, 1998. 31, 53

[Kuznetsov 98] VV Kuznetsov, EE Mendez, JD Bruno & JT Pham. *Shot noise enhancement in resonant-tunneling structures in a magnetic field.* Physical Review B, vol. 58, no. 16, pages 10159–10162, 1998. 33

[Lee 08] Sejoon Lee, Kousuke Miyaji, Masaharu Kobayashi & Toshiro Hiramoto. *Extremely high flexibilities of Coulomb blockade and negative differential conductance oscillations in room-temperature-operating silicon single hole transistor.* Applied Physics Letters, vol. 92, no. 7, page 073502, 2008. 24

[Lepage 12] Hadrien Lepage. *Modélisation de solides à nanocristaux de silicium.* PhD thesis, Institut National des sciences appliquées - Lyon, 2012. 133

[Levitov 96] L.S. Levitov, H. Lee & G.B. Lesovik. *Electron counting statistics and coherent states of electric current.* Journal of Mathematical Physics, vol. 37, pages 4845–4866, 1996. 104

[Li 11] Dongzhe Li. La caractérisation stm et modélisation de structure à blocage de coulomb. Master's thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2011. 38

[Likharev 87] K. Likharev. *Single-electron transistors : Electrostatic analogs of the DC SQUIDS.* Magnetics, IEEE Transactions on, vol. 23, no. 2, pages 1142–1145, 1987. 20

[Likharev 99] K.K. Likharev. *Single-electron devices and their applications.* Proceedings of the IEEE, vol. 87, no. 4, pages 606–632, 1999. 20, 37

[Loss 98] Daniel Loss & David P. DiVincenzo. *Quantum computation with quantum dots.* Phys. Rev. A, vol. 57, pages 120–126, Jan 1998. 13

[Lu 09] ZQ Lu, N.D. Lowhorn, W. Wong-Ng, W. Zhang, M. Otani, E.E. Thomas, M.L. Green & T.N. Tran. *Statistical Analysis of a Round-Robin Measurement Survey of Two Candidate Materials for a Seebeck Coefficient Standard Reference Material.* Rapport technique, DTIC Document, 2009. 91

[Maeda 12] K. Maeda, N. Okabayashi, S. Kano, S. Takeshita, D. Tanaka, M. Sakamoto, T. Teranishi & Y. Majima. *Logic Operations of Chemically Assembled Single-Electron Transistor.* ACS nano, vol. 6, no. 3, pages 2798–2803, 2012. 26, 65, 132

[Mahapatra 05] S. Mahapatra & A.M. Ionescu. *Realization of multiple valued logic and memory by hybrid SETMOS architecture.* Nanotechnology, IEEE Transactions on, vol. 4, no. 6, pages 705–714, 2005. 65

[Mani 11] P. Mani, N. Nakpathomkun, E.A. Hoffmann & H. Linke. *A Nanoscale Standard for the Seebeck Coefficient.* Nano letters, vol. 11, no. 11, pages 4679–4681, 2011. 55, 91, 100

[Mazzamuto 11a] F. Mazzamuto. *Etude théorique des propriétés thermiques et thermoélectriques des nanorubans de graphene.* PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2011. 30, 90

[Mazzamuto 11b] F. Mazzamuto, J. Saint-Martin, V.H. Nguyen, Y. Apertet, C. Chassat & P. Dollfus. *Nanostructuration of Graphene Nanoribbons for thermoelectric applications.* In Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), 2011 International Conference on, pages 223–226. IEEE, 2011. 30

[Misra 10] Janardan Misra & Indranil Saha. *Artificial neural networks in hardware : A survey of two decades of progress.* Neurocomputing, vol. 74, no. 1â,Ç¨“3, pages 239 – 255, 2010. <ce :title>Artificial Brains</ce :title>. 128

[Molas 06] G. Molas, D. Deleruyelle, B. De Salvo, G. Ghibaudo, M. GelyGely, L. Perniola, D. Lafond & S. Deleonibus. *Degradation of floating-gate memory reliability by few electron phenomena.* Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 53, no. 10, pages 2610–2619, 2006. 18

[Moore 20] E.H. Moore. *On the reciprocal of the general algebraic matrix.* Bull. Amer. Math. Soc, vol. 26, pages 394–395, 1920. 106

[Nakpathomkun 10a] N. Nakpathomkun, H.Q. Xu & H. Linke. *Thermoelectric efficiency at maximum power in low-dimensional systems.* Physical Review B, vol. 82, no. 23, page 235428, 2010. 55

[Nakpathomkun 10b] N. Nakpathomkun, H.Q. Xu & H. Linke. *Thermoelectric efficiency at maximum power in low-dimensional systems.* Physical Review B, vol. 82, no. 23, page 235428, 2010. 97, 100

[Nakpathomkun 11] N. Nakpathomkun. *Thermoelectric properties of quantum dots and other low-dimensional systems.* PhD thesis, University of Oregon, 2011. 26, 65

[Nauen 04] A. Nauen, F. Hohls, J. Könemann & R. J. Haug. *Shot noise in resonant tunneling through a zero-dimensional state with a complex energy spectrum.* Phys. Rev. B, vol. 69, page 113316, Mar 2004. 33

[Nguyen 05] V.H. Nguyen, V.L. Nguyen & P. Dollfus. *Shot noise in metallic double dot structures with a negative differential conductance.* Applied Physics Letters, vol. 87, no. 12, pages 123107–123107, 2005. 34, 103

[Nguyen 06] V.H. Nguyen & V.L. Nguyen. *Super-Poissonian noise in a Coulomb-blockade metallic quantum dot structure.* Physical Review B, vol. 73, no. 16, page 165327, 2006. 34

[Ohba 02] R. Ohba, N. Sugiyama, K. Uchida, J. Koga & A. Toriumi. *Nonvolatile Si quantum memory with self-aligned doubly-stacked dots.* Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 49, no. 8, pages 1392–1398, 2002. 19

[Onsager 31] L. Onsager. *Reciprocal relations in irreversible processes. I.* Physical Review, vol. 37, no. 4, page 405, 1931. 84

[Oriols 04] X. Oriols, A. Trois & G. Blouin. *Self-consistent simulation of quantum shot noise in nanoscale electron devices.* Applied physics letters, vol. 85, no. 16, pages 3596–3598, 2004. 33

[Oya 07] T. Oya, T. Asai & Y. Amemiya. *Stochastic resonance in an ensemble of single-electron neuromorphic devices and its application to competitive neural networks.* Chaos, Solitons & Fractals, vol. 32, no. 2, pages 855–861, 2007. 134

[Palun 00] L. Palun. *Etude prospective sur les dispositifs silicium à blocage de Coulomb dans une perspective d'application à la microélectronique.* PhD thesis, Université Joseph Fourier - Grenoble I, France, 2000. 20

[Paquez 10] Xavier Paquez. *Dépôt de couches minces nanocomposites à base de nanocristaux de silicium pour des cellules photovoltaïques à haut rendement.* PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2010. 13

[Penrose 55] R. Penrose. *A generalized inverse for matrices.* In Proc. Cambridge Philos. Soc, volume 51, page C655. Cambridge Univ Press, 1955. 106

[Petrie 00] C.S. Petrie & J.A. Connelly. *A noise-based IC random number generator for applications in cryptography.* Circuits and Systems

I : Fundamental Theory and Applications, IEEE Transactions on, vol. 47, no. 5, pages 615–621, 2000. 134

[Royer 03] C. Le Royer. *Modélisation et simulation des effets mono-électroniques dans les nanodispositifs : application aux mémoires à peu d'électrons et à la logique à base de SET (Single-Electron Transistor).* PhD thesis, Université Joseph Fourier - Grenoble I, 2003. 37

[Safonov 03] SS Safonov, AK Savchenko, DA Bagrets, ON Jouravlev, Y.V. Nazarov, EH Linfield & DA Ritchie. *Enhanced shot noise in resonant tunneling via interacting localized states.* Physical review letters, vol. 91, no. 13, page 136801, 2003. 33

[Saitoh 04] Masumi Saitoh & Toshiro Hiramoto. *Room-Temperature Observation of Negative Differential Conductance Due to Large Quantum Level Spacing in Silicon Single-Electron Transistor.* Japanese Journal of Applied Physics, vol. 43, no. 2A, pages L210–L213, Jan. 2004. 24, 66

[Sánchez 09] D. Sánchez. *Magnetoasymmetric current fluctuations of single-electron tunneling.* Physical Review B, vol. 79, no. 4, page 045305, 2009. 103

[Scholze 00] A. Scholze, A. Schenk & W. Fichtner. *Single-electron device simulation.* Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 47, no. 10, pages 1811–1818, 2000. 39

[Schottky 18] Walter Schottky. *Über spontane Stromschwankungen in verschiedenen Elektrizitätsleitern.* Annalen der Physik, vol. 362, pages 541–567, 1918. 31

[Sée 02a] J. Sée, P. Dollfus & S. Galdin. *Comparison between a sp^3d^5 tight-binding and an effective-mass description of silicon quantum dots.* Physical Review B, vol. 66, no. 19, page 193307, 2002. 40

[Sée 02b] J. Sée, P. Dollfus & S. Galdin. *Comparison of a density functional theory and a Hartree treatment of silicon quantum dot.* Journal of applied physics, vol. 92, no. 6, pages 3141–3146, 2002. 40

[Sée 03] J. Sée. *Théorie du blocage de Coulomb appliquée aux nanostructures semi-conductrices : modélisation des dispositifs à nanocristaux de silicium.* PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2003. 35, 38, 39, 45, 48, 59, 65, 71, 137, 139

[Sée 06a] J. Sée, P. Dollfus & S. Galdin. *Theoretical investigation of negative differential conductance regime of silicon nanocrystal single-electron devices.* Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 53, no. 5, pages 1268–1273, 2006. 71

[Sée 06b] J. Sée, P. Dollfus, S. Galdin & P. Hesto. *From wave-functions to current-voltage characteristics : overview of a Coulomb blockade device simulator using fundamental physical parameters.* Journal of Computational Electronics, vol. 5, no. 1, pages 35–48, 2006. 139

[Seebeck 05] J. Seebeck, T. R. Nielsen, P. Gartner & F. Jahnke. *Polarons in semiconductor quantum dots and their role in the quantum kinetics of carrier relaxation.* Phys. Rev. B, vol. 71, page 125327, Mar 2005. 31, 53

[Shin 10] S. J. Shin, C. S. Jung, B. J. Park, T. K. Yoon, J. J. Lee, S. J. Kim, J. B. Choi, Y. Takahashi & D. G. Hasko. *Si-based ultrasmall multiswitching single-electron transistor operating at room-temperature.* Applied Physics Letters, vol. 97, no. 10, page 103101, 2010. 24, 66, 80

[Snyder 08] G.J. Snyder & E.S. Toberer. *Complex thermoelectric materials.* Nature materials, vol. 7, no. 2, pages 105–114, 2008. 29

[Song 03] W. Song, EE Mendez, V. Kuznetsov & B. Nielsen. *Shot noise in negative-differential-conductance devices.* Applied physics letters, vol. 82, no. 10, pages 1568–1570, 2003. 33

[Stauber 00] T. Stauber, R. Zimmermann & H. Castella. *Electron-phonon interaction in quantum dots : A solvable model.* Physical Review B, vol. 62, no. 11, page 7336, 2000. 31, 53

[Svensson 12] S.F. Svensson, AI Persson, EA Hoffmann, N. Nakpathomkun, HA Nilsson, HQ Xu, L. Samuelson & H. Linke. *Lineshape of the thermopower of quantum dots.* New Journal of Physics, vol. 14, no. 3, page 033041, 2012. 91, 100

[Takahashi 02] Y. Takahashi, Y. Ono, A. Fujiwara & H. Inokawa. *Silicon single-electron devices.* Journal of Physics : Condensed Matter, vol. 14, no. 39, page R995, 2002. 20

[Talapin 10] D.V. Talapin, J.S. Lee, M.V. Kovalenko, E.V. Shevchenko*et al.* *Prospects of colloidal nanocrystals for electronic and optoelectronic applications.* Chemical reviews, vol. 110, no. 1, page 389, 2010. 11, 12

[Tan 05] J. Tan, K. Kalantar-Zadeh, W. Wlodarski, S. Bhargava, D. Akolekar, A. Holland & G. Rosengarten. *Thermoelectric properties of bismuth telluride thin films deposited by radio frequency magnetron sputtering.* In Microtechnologies for the New Millennium 2005, pages 711–718. International Society for Optics and Photonics, 2005. 90

[Taylor 11] G. Taylor & G. Cox. *Behind intel's new random-number generator.* IEEE Spectr., pages 32–35, 2011. 134

[Thielmann 05] A. Thielmann, M.H. Hettler, J. König & G. Schön. *Super-Poissonian noise, negative differential conductance, and relaxation effects in transport through molecules, quantum dots, and nanotubes.* Physical Review B, vol. 71, no. 4, page 045341, 2005. 34

[Tiwari 95] S. Tiwari, F. Rana, K. Chan, H. Hanafi, W. Chan & D. Buchanan. *Volatile and non-volatile memories in silicon with nano-crystal storage.* In Electron Devices Meeting, 1995., International, pages 521–524. IEEE, 1995. 18

[Trauzettel 07] B. Trauzettel, D.V. Bulaev, D. Loss & G. Burkard. *Spin qubits in graphene quantum dots.* Nature Physics, vol. 3, no. 3, pages 192–196, 2007. 13

[Uchida 00] Ken Uchida, Kazuya Matsuzawa, Junji Koga, Ryuji Ohba, Shin ichi Takagi & Akira Toriumi. *Analytical Single-Electron Transistor (SET) Model for Design and Analysis of Realistic SET Circuits.* Jpn. J. Appl. Phys., vol. 39, no. Part 1, No. 4B, pages 2321–2324, 2000. 37

[Valentin 08] A. Valentin. *Modélisation de l'effet tunnel à un électron dans les dispositifs à nanocristaux semiconducteurs : effet tunnel à un électron assisté par phonon.* PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2008. 31, 35, 39, 40, 43, 54, 55, 64, 65, 85, 92

[Valentin 09a] A. Valentin, S. Galdin-Retailleau & P. Dollfus. *Phonon effect on single-electron transport in two-dot semiconductor devices.* Journal of Applied Physics, vol. 106, no. 4, pages 044501–044501, 2009. 54, 62, 63

[Valentin 09b] Audrey Valentin, Sylvie Galdin-Retailleau & Philippe Dollfus. *Phonon effect on single-electron transport in two-dot semiconductor devices.* Journal of Applied Physics, vol. 106, no. 4, page 044501, 2009. 130

[van der Wiel 02] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha & L. P. Kouwenhoven. *Electron transport through double quantum dots.* Rev. Mod. Phys., vol. 75, no. 1, pages 1–22, Dec 2002. 26, 132

[Venkatasubramanian 01] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O'Quinn*et al.* *Thin-film thermoelectric devices with*

high room-temperature figures of merit. Nature, vol. 413, no. 6856, page 597, 2001. 29, 31

[Wasshuber 97] C. Wasshuber. *About single-electron devices and circuits.* PhD thesis, Technischen Universität Wien - Wien, 1997. 37

[Wolf 10] C.R. Wolf, K. Thonke & R. Sauer. *Single-electron transistors based on self-assembled silicon-on-insulator quantum dots.* Applied Physics Letters, vol. 96, no. 14, page 142108, 2010. 66

[Zhou 12] Xin Zhou & Koji Ishibashi. *Single charge detection in capacitively coupled integrated single electron transistors based on single-walled carbon nanotubes.* Applied Physics Letters, vol. 101, no. 12, page 123506, 2012. 26

Publications de l'auteur

Articles dans des revues avec comité de lecture

- **Talbo V.**, Galdin-Retailleau S., Valentin A., Dollfus P., Physical simulation of Silicon nanocrystal-based single-electron transistors, **IEEE transactions on electron devices** 58, 3286 (2011).
- **Talbo V.**, Querlioz D., Retailleau S., Dollfus P., Sub- and super-Poissonian noise in Si quantum dots using fully self-consistent 3D simulation, **Fluctuation and Noise Letters** 11, 1242006 (2012).

Conférences avec actes

- **Talbo V.**, Saint-Martin J., Apertet Y., Querlioz D., Galdin-Retailleau S., Dollfus P., Thermoelectric conversion in Silicon quantum-dots, 6th European Thermal Sciences Conference (**EUROTHERM 2012**), 04-07 septembre 2012, Poitiers, France (acte à paraître dans Journal of Physics : Conference Series).
- **Talbo V.**, Galdin-Retailleau S., Querlioz D., Dollfus P., Shot noise behavior in single-electron quantum dot-based structures, 15th International Workshop on Computational Electronics (**IWCE**), 22-25 mai 2012, Madison, USA. `http://dx.doi.org/10.1109/IWCE.2012.6242828`.
- **Talbo V.**, Modélisation auto-cohérente de transistors à un électron à îlot de Silicium, 14èmes Journées Nationales du Réseau Doctoral en Micro-nanoélectronique (**JNRDM**), 23-25 juin 2011, Cachan, France. (ISSN : 1774-0290).

- **Talbo V.**, Modélisation physique de dispositifs mono-électronique à îlot de Silicium, 13èmes Journées Nationales du Réseau Doctoral en Micro-nanoélectronique (**JNRDM**), 07-09 juin 2011, Montpellier, France. (ISSN : 1774-0290).
- **Talbo V.**, Valentin A., Galdin-Retailleau S., Dollfus P., Fully self-consistent simulation of silicon nanocrystal-based single-electron transistor, 14th International Workshop on Computational Electronics (**IWCE**), 27-29 octobre 2012, Pise, Italie. `http://dx.doi.org/10.1109/IWCE.2010.5677994`.

Conférences sans actes

- **Talbo V.**, Saint-Martin J., Apertet Y., Querlioz D., Retailleau S., Dollfus P., Numerical investigation on the thermoelectric properties of a Si-based Single-electron Transistor (SET), 31st International & 10th European Conference on Thermoelectrics, 09-12 juillet 2012, Aalborg, Danemark.
- **Talbo V.**, Galdin-Retailleau S., Dollfus P., Sub- and super-Poissonian noise in Si quantum dots using fully self-consistent 3D simulation, **6th International Conference on Unsolved Problems on Noise**, 20-24 février 2012, Kolkata, Inde.
- **Talbo V.**, Valentin A., Retailleau S., Dollfus P., Fully self-consistent simulation of silicon quantum dot-based single-electron transistor, **Quantum Dot France 2011**, 16-17 juin 2011, Toulouse, France.

Séminaires

- **Talbo V.**, Vers une électronique à un électron, **20ème Colloque Alain Bouyssy** « Jeunes Chercheurs en Physique », 09 février 2012, Orsay, France.
- **Talbo V.**, Étude théorique du transport électronique dans les boîtes quantiques Silicium : Courant et bruit de grenaille, **Séminaire Doctorants IEF**, 11 avril 2012, Orsay, France.

ABSTRACT

Theoretical study of electronic transport in semiconductor quantum dot-based nanodevices

After a continuous reduction which has begun 50 years ago, the feature size of electronic devices has now reached the nanometer scale, opening the door to quantum phenomena. The final stage of this miniaturization, the quantum dot, in which the electrons are confined in all three directions of space, has remarkable properties, such as an increase of the bandgap between the conduction band and the valence band, and the discretization of energy levels. Another consequence of confinement, the strong electron-electron interaction occurring in the dot induces a significant charging energy which may prevent an electron entering the dot if an external energy is not provided to the system. This charge blocking is called Coulomb blockade. The single electron transistor (SET), the elementary device taking advantage of Coulomb blockade, is slated for some applications, such as the realization of digital functions or charge sensors. Among the areas concerned, the thermoelectricity, i.e., the possibility of creating an electrical current from a temperature gradient, is very interested in single-electron devices due to their discrete energy levels which lead to a very low thermal conductivity.

This thesis presents the simulator SENS (Single-Electron Nanodevice Simulation) developed in the team and the part I have developed specifically for the simulation of SET. It is based on a 3D solver of Poisson and Schrödinger coupled equations, necessary for the determination of the wave functions in the case of silicon, and dependent on voltages applied to the electrodes. Tunnel transfer rates are then calculated by Fermi's golden rule. In-depth study of the current in the SETs gives access to diamond stability diagrams, and demonstrates the importance of parameters such as dot size, tunnel the barriers thicknesses, the temperature and the number of electrons occupying the dot. The study of the electron current and the heat flow in the presence of a temperature difference at the electrodes of an SET is also made to consider the suitability of the use of an SET as thermoelectric generator, but also as a standard for determining the Seebeck coefficient.

Finally, a study of shot noise in double-tunnel junction (SET without the gate) is made, demonstrating the strong link between tunnel transfer rate and shot noise. In particular, according to the evolution of in- and out – tunnel transfer rates, for a number of electrons in the dot greater than 2, it is possible to observe a significant increase in noise, which becomes super-Poissonian. The study of the influence of geometrical parameters shows that the shot noise depends mainly on the difference of the tunnel barrier thicknesses.

Keywords. Coulomb blockade, Quantum dot, Physical simulation, Shot noise, Single-electron transistor, Thermoelectricity.

RÉSUMÉ

Étude théorique du transport électronique dans les nanodispositifs à boîtes quantiques semiconductrices

La miniaturisation des composants, qui s'est engagée depuis l'avènement de l'électronique il y a plus de 50 ans, atteint aujourd'hui la dimension nanométrique, ouvrant la porte aux phénomènes quantiques. Ultime étape de cette miniaturisation, la boîte quantique, dans laquelle les électrons sont confinés dans les trois directions de l'espace, présente des propriétés remarquables, telles que l'augmentation du gap entre la bande de conduction et la bande de valence, ou la discrétisation des niveaux d'énergies. Autre conséquence du confinement, la forte interaction électron-électron régnant au sein de la boîte conduit à une énergie de charge importante, susceptible de bloquer l'entrée d'un électron dans la boîte sans apport d'énergie extérieur. Ce phénomène de blocage des charges est appelé blocage de Coulomb. Le transistor à un électron (SET), dispositif élémentaire tirant profit de ce phénomène, est pressenti pour quelques applications, comme la réalisation de fonctions logiques ou la détection de charge. Parmi les domaines concernés, la thermoélectricité, c'est-à-dire la possibilité de créer du courant électrique à partir d'une différence de température, s'intéresse de près aux dispositifs à un électron en raison de leurs niveaux d'énergie discrets qui conduisent à une très faible conductivité thermique.

Ce travail présente le simulateur SENS (Single-Electron Nanodevice Simulation) développé dans l'équipe, et dont j'ai réalisé la partie destinée à la simulation du SET. Il s'appuie sur la résolution des équations couplées de Poisson et Schrödinger, nécessaire à la détermination des fonctions d'onde dans la boîte de silicium, elles-mêmes dépendantes des tensions appliquées aux électrodes. Les fréquences de transition tunnel sont ensuite calculées par la règle d'or de Fermi. L'étude approfondie du courant dans les SET permet d'extraire des diagrammes de stabilité en diamant, et démontre l'importance de paramètres tels que la taille de l'îlot, la dimension des barrières tunnel, la température et le nombre d'électrons occupant la boîte. L'étude du courant électronique et du courant de chaleur en présence d'une différence de température aux électrodes du SET est également faite pour juger de la pertinence de l'utilisation d'un SET en tant que générateur thermoélectrique, mais aussi comme étalon pour déterminer le coefficient Seebeck.

Enfin, une étude du bruit de grenaille dans la double-jonction tunnel (SET sans la grille) est faite, démontrant le fort lien entre taux de transfert tunnel et bruit. En particulier, selon l'évolution des taux des transferts tunnel d'entrée et de sortie de l'îlot, pour un nombre d'électrons supérieur 2, il est possible d'observer une augmentation importante du bruit, qui devient alors super-Poissonien. L'étude de l'influence des paramètres géométriques démontre que le bruit de grenaille dépend essentiellement de la différence des épaisseurs de barrière tunnel.

Mots clés. Blocage de Coulomb, Bruit de grenaille, Poisson-Schrödinger, Thermoélectricité, Transistors à un électron.