



Objectifs

Fondamental:

- Développer des procédés de fabrication des nano-objets dans une approche bottom-up en s'appuyant sur les mécanismes fondamentaux de la nanostructuration et de l'auto-organisation.
- Comprendre les propriétés électroniques des nanocristaux de Si et de Ge.
- Modélisation des structures et des composants.

Appliqué:

Marché NAND Flash en forte croissance
 ⇒ solution idéale pour les applications qui demandent une large mémoire de stockage, telles que Caméras, Appareil photos, MP3, téléphone portables, clés USB.
Pourquoi les nanodots ? NAND Flash de STM doit répondre à un nombre croissant d'applications : large spectre de densités, différentes tailles de pages, différents packagings.

Tâche 1 : Fabrication des structures et composants

Formation des NCs de Ge sur SiO₂ par démouillage d'une couche amorphe

Expérimentalement

Recuit 30 min 700 °C

Ge amorphe / SiO₂ / Si(100)

Ge NC

$\theta = 120^\circ$
 $r = 11.2$
 $\Delta = 3.10^{17} \times e^{-\theta}$

Calcul

$S_{\text{surface}} = \pi R^2 \sin^2 \theta$
 $S_{\text{goutte}} = 2\pi R^2 (1 - \cos \theta)$
 $V_{\text{goutte}} = \pi R^3 (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) / 3$

Conservation de la matière ⇒ $e \times X = V_{\text{goutte}}$

Minimisation de l'énergie ⇒ $\sigma_{\text{SiO}_2} (S_{\text{interface}} - S_{\text{surface}}) = \sigma_{\text{interface}} S_{\text{interface}} + \sigma_{\text{goutte}} S_{\text{goutte}}$

$R = e \times X / (3(\sin^2 \theta (\sigma_{\text{interface}} + \sigma_{\text{SiO}_2}) + 2\sigma_{\text{goutte}} (1 - \cos \theta)))$

$\sigma_{\text{SiO}_2} (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta)$

$\sigma_{\text{interface}} (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) + 3\sigma_{\text{goutte}} (1 - \cos \theta)$

$\sigma_{\text{SiO}_2} (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) = \sigma_{\text{interface}} (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) + 3\sigma_{\text{goutte}} (1 - \cos \theta)$

$\sigma_{\text{SiO}_2} = \sigma_{\text{interface}} + \frac{3\sigma_{\text{goutte}} (1 - \cos \theta)}{2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta}$

$\sigma_{\text{SiO}_2} = 4.47 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2$

$\sigma_{\text{goutte}} = 1.9 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2$

Surface structurée par FIB

réseau de trous
 $\phi = 20 \text{ nm}$
 pas = 50 nm
 densité = $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

Ge 4nm + recuit

(a) $\phi = 24 \text{ nm}$
 $\phi = 31 \text{ nm}$

(b) $\phi = 47 \text{ nm}$

• NCs ordonnés
 • Taille homogène
 • Effet mécanique
 • Confinement quantique

Tâche 2 : Modélisation Nanostructuration et auto-assemblage

Transition rugueuse cinétique hors équilibre: effet de la croissance

Construction d'un modèle stochastique (macroscopique) à partir de la cinétique d'adatoms (type Monte Carlo cinétique) pour décrire la transition 2D-3D d'une surface cristalline en croissance épitaxiale.

Rugosité de la surface (w)

90 couches
 100 couches

• Périodicité du remplissage

Hétéroépitaxie Ge/Si: instabilité morphologique et formation d'îlots

Modèle non linéaire de diffusion de surface couplée au champ des contraintes; effet de la couche de mouillage sur la dynamique de l'instabilité.

Simulation numérique 1D: formation de structures localisées et coarsening. Les îlots sont séparés par une couche de mouillage. La rugosité w suit une loi de puissance $w \sim t^{1/2}$ en 1D et $w \sim t^{1/3}$ en 2D.

(a) Simulation 2D, évolution de la surface au cours du temps.

(b) Simulation 2D, évolution de la surface au cours du temps.

(c) Simulation 2D, évolution de la surface au cours du temps.

Tâche 3 : Propriétés physiques des nano-composants

Courant de remplissage des boîtes quantiques

Silicium / oxyde tunnel / îlot / oxyde de confinement / Métal

Densité locale d'états calculée avec le formalisme des fonctions de Green.

Mesures AFM-électrique sur nanocristaux

Mesures sur îlots de Ge (80nm) sur Si (1 0 0)

- Observation de la conduction dans les îlots de Ge
- Mise en évidence d'un effet de pointe: conduction préférentielle sur les arêtes

Mesures sur îlots de Ge sur SiO₂

- Conduction latérale sur les îlots de Ge
- Dépendance vis-à-vis de la taille des îlots

Tâche 4 : Modélisation des composants

Simulation TCAD des composants

Simulation dynamique 2D du chargement des mémoires sous ISE-TCAD

Ecriture des cellules par porteurs chauds

Etude de l'évolution du potentiel flottant des NCs le long du canal

Les NCs situés au dessus du pic d'injection CHE reçoivent une charge maximale

V_f vs temps pour les différents NCs

Modèles analytiques et semi-analytiques

Résolution Poisson-Schrödinger sur dot Si par FEM

Utilisation de l'approximation de Hartree pour décrire les fonctions d'ondes électroniques dans l'îlot

Densité électronique vue par un électron dans l'îlot: $\tilde{\rho}_j(\vec{r}) = -q \times \sum_{k=1}^N |\psi(\vec{r}_k)|^2$

Densité électronique globale: $\rho(\vec{r}) = -q \times \sum_{k=1}^N |\psi(\vec{r}_k)|^2$

Densité de probabilité de présence pour un électron dans l'îlot

Diagrammes de bandes d'énergie