

# Un modèle de type Drift-Diffusion Quantique pour décrire le transport électronique dans un CNFET

Clément JOURDANA, LJK, Université Joseph Fourier, Grenoble

Paola PIETRA, IMATI-CNR, Pavia (Italie)

Ce travail se rapporte à la modélisation du transport électronique dans des nanostructures fortement confinées (telles que des nanofils ou des nanotubes). Ces structures jouent un rôle de plus en plus important du fait de l'extrême miniaturisation qui caractérise l'évolution des composants électroniques. Par exemple, les transistors à effet de champ faits à partir de nanotubes de carbone (Carbon Nanotube Field Effect Transistors CNFETs) sont de possibles candidats pour remplacer les habituels MOSFETs. Ils devraient permettre de diminuer les temps de réponse et la consommation en énergie tout en assurant un meilleur contrôle des électrons, surpassant ainsi les performances des dispositifs à base de silicium. Comme les phénomènes physiques générés dans ces nouveaux dispositifs sont extrêmement complexes et pas encore parfaitement compris, la simulation numérique s'avère être un outil important pour améliorer leur fonctionnement.

Dans [1], un modèle de drift-diffusion avec masse effective pour des nanofils/nanotubes a été dérivé. A cause du fort confinement, la section transversale de la nanostructure considérée ne contient que quelques atomes. L'hypothèse de structure périodique infinie, utilisée habituellement dans l'approximation de la masse effective, n'est plus justifiée. En moyennant non seulement le potentiel périodique généré par le réseau cristallin mais aussi la dimension transversale, il est possible de définir de nouvelles quantités effectives qui gardent en mémoire l'information atomistique et les effets du confinement. Dans [1], les auteurs analysent comment ces quantités effectives peuvent être intégrées dans un modèle de drift-diffusion.

Cependant, pour des dispositifs ayant une taille caractéristique de l'ordre de quelques nanomètres, il est aussi indispensable de prendre en compte les effets quantiques. Les approches purement quantiques étant généralement complexes et coûteuses, l'usage de modèles macroscopiques quantiques semble être un choix approprié. En étendant au cas quantique le principe de fermeture par minimisation d'entropie de Levermore, Degond et Ringhofer ont dérivé une hiérarchie de modèles macroscopiques quantiques (voir par exemple [2]). Le plus commun est le modèle de drift-diffusion quantique (DDQ) qui est similaire au modèle de drift-diffusion classique avec un terme de correction qui correspond à un potentiel de Bohm.

La nouveauté de notre travail est d'étendre [2] pour dériver un modèle de type DDQ pour les structures fortement confinées. Pour cela, les quantités effectives, déjà utilisées dans [1], sont intégrées dans la définition de l'entropie. Comme ces quantités sont propres à chaque bande d'énergie, des spécificités apparaissent au cours du déroulement du processus asymptotique. Au final, nous obtenons un modèle similaire à [1] doté d'un terme de correction quantique. Afin de tester ce modèle, nous présentons des simulations numériques du système autoconsistant DDQ-Poisson pour un "gate all-around" CNFET. Pour discrétiser l'équation de DDQ, nous utilisons un schéma préservant la positivité de la densité (similairement à [3]). Une méthode itérative de type Gummel permet quant à elle de traiter la forte nonlinéarité provenant du couplage avec l'équation de Poisson. Nous discutons alors numériquement de l'apport du potentiel de Bohm et comparons nos simulations avec celles provenant d'une approche purement quantique.

## Références

- [1] C. JOURDANA AND N. VAUCHELET, *Analysis of a diffusive effective mass model for nanowires*, Kinet. Relat. Models, 4:1121-1142, 2011.
- [2] P. DEGOND AND C. RINGHOFER, *Quantum moment hydrodynamics and the entropy principle*, J. Statist. Phys., 112(3-4):587-628, 2003.
- [3] A. EL AYYADI AND A. JÜNGEL, *Semiconductor simulations using a coupled quantum drift-diffusion Schrödinger-Poisson model*, SIAM J. Appl. Math., 66(2):554-572, 2005.

Clément JOURDANA, Laboratoire Jean Kuntzmann, 51 rue des mathématiques, BP 53, 38041 Grenoble cedex 9, France  
clement.jourdana@imag.fr