

UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE
Faculté de génie
Département de génie électrique et de génie informatique

CONCEPTION ET FABRICATION D'UN
AUTOMATE CELLULAIRE QUANTIQUE
BASÉ SUR UN PROCÉDÉ DE
TRANSISTORS MONOÉLECTRONIQUES
MÉTALLIQUES DAMASCÈNES

Thèse de doctorat
Spécialité : génie électrique

Gabriel DROULERS

Jury : Dominique DROUIN (directeur)
Michel PIORO-LADRIÈRE (co-directeur)
Serge ECOFFEY
Serge CHARLEBOIS
Abdelkader SOUIFI
Malcolm S. CARROLL (Externe)

À mes parents Maria et Alain,
pour leur support inconditionnel.

RÉSUMÉ

Le concept d'automate cellulaire quantique (QCA) introduit en 1993 représente un changement de paradigme dans la microélectronique moderne. Introduite en 1993, cette technologie utilise la position de quelques électrons plutôt que la quantité d'électrons dans un condensateur pour encoder l'information. Ce paradigme réduit grandement la consommation énergétique de ces dispositifs électroniques et pourrait permettre de repousser les limites rencontrées avec les technologies classiques. Plusieurs réalisations expérimentales de ce concept ont été réalisées, mais ne fonctionnent qu'à très basse température (1,5 K).

Les développements réalisés à l'aide du procédé nanodamascène à l'Université de Sherbrooke ont permis de démontrer la faisabilité de fabrication des transistors monoélectroniques fonctionnant à haute température (>400 K). Ces transistors sont sensibles à des variations de la configuration de charges plus faible que la charge d'un électron et peuvent donc servir de détecteurs de charge. Cette fonctionnalité en fait un outil indispensable pour la détection de l'état de sortie d'un circuit QCA.

Les travaux de cette thèse portent sur la combinaison de ces deux technologies avec l'objectif de pouvoir élever la température d'opération des QCA électrostatiques. L'architecture d'une demi-cellule QCA bistable pour l'encodage de l'information binaire et des transistors monoélectroniques comme détecteurs de l'état de charge de la demi-cellule est conçue afin de fabriquer ces deux parties en utilisant le procédé nanodamascène. À terme, la combinaison des deux concepts pourrait donner une technologie compatible avec les technologies actuelles et fonctionnant à haute température.

Le document présente une méthode de simulation innovante permettant d'utiliser la géométrie réelle du dispositif et d'obtenir les caractéristiques électriques en tenant compte des effets parasites. Cette méthode est utilisée pour optimiser le dessin du dispositif, pour corréler les résultats attendus avec les mesures expérimentales, puis pour en extraire certains paramètres comme les résistances tunnel et les permittivités diélectriques des matériaux de barrière tunnel. Une étude démontrant l'impact de l'utilisation de structures sacrificielles pour le polissage mécano chimique a permis d'optimiser leur taille et leur densité pour améliorer l'uniformité du polissage. Les résultats obtenus de jonctions tunnel MIM ont permis d'améliorer la stabilité dans le temps des dispositifs. Finalement, les caractérisations de transistors monoélectroniques individuels et couplés permettent de démontrer le fonctionnement des dispositifs, leur correspondance aux valeurs attendues et la possibilité de les utiliser comme détecteur de charge.

Les résultats présentés dans ces travaux permettent de conclure que tous les éléments nécessaires sont en place pour permettre la fabrication d'une cellule QCA en procédé nanodamascène. Les travaux représentent un premier grand pas vers la démonstration de QCA nanodamascène fonctionnant à haute température.

Mots-clés : Automate cellulaire quantique (QCA), transistor monoélectronique (SET), nanodamascène, barrière tunnel, blocage de Coulomb, détection de charge, Ti, TiO₂.

REMERCIEMENTS

La réalisation de ce projet ambitieux de longue haleine n'aurait pu être possible sans le support scientifique, financier et moral d'un grand nombre de personnes que je veux remercier ici.

D'abord, je veux remercier Dominique de m'avoir fait confiance tout au long de ce projet non sans difficulté. Malgré le peu de résultats obtenus tout au long de ces 6 années, l'optimisme et les encouragements que tu m'as offerts ont été précieux pour garder le cap et persévérer. J'ai beaucoup cheminé à travers toutes ces épreuves et c'est en partie grâce à notre collaboration. Je veux aussi remercier Michel. Chacune de nos rencontres a été très intéressante, autant du point de vue scientifique, que personnel. Ton appui et ton encouragement à ne pas lâcher ont forgé ma persévérance et contribué à l'espoir d'obtenir des résultats qui a finalement payé!

Je veux aussi remercier les organismes subventionnaires FRQNT et CRSNG qui m'ont permis, à travers les bourses de recherche, de vivre une vie décente et de pouvoir m'investir entièrement dans le projet. Je tiens aussi à remercier Abitibi Bowater, aujourd'hui Produits forestiers Résolu, pour leur contribution à la bourse d'excellence que j'ai eu l'honneur de recevoir en 2010.

Je me dois aussi de remercier toutes les personnes ayant contribué à la réalisation du projet, de près ou de loin. Serge E. pour ton appui, tes conseils, les discussions et la réponse aux mille et une questions que j'ai du posé en 6 ans. Merci à toute l'équipe du 3IT, du LNN, du LCSM l'IMDQ et du CCM pour leur collaboration, que ce soit Denis, Caroline, Marie-Josée, Guillaume, Étienne P., Daniel, Christian, Pierre, Damien, Étienne G., Michael, René, Sonia B. et Irène pour la réalisation de demandes de services en fabrication, en caractérisation, en formations sur les équipements ou simplement pour le maintien des infrastructures de haut niveau qui ont permis ces travaux. Merci aussi à Christelle Hauchard et à l'équipe de l'UMI pour l'organisation des colloques et les collaborations développées avec la France et la Belgique.

Un merci tout spécial à tous les collègues en stage, maîtrise, doctorat ou en postdoctorat, présent ou passé, qui ont donné vie au groupe de nanoélectronique et avec qui j'ai beaucoup apprécié travailler et discuter.

Je remercie aussi mes parents Maria et Alain pour leur appui pendant ces longues années de « Quand est-ce que tu finis là?! », mes frères Christian et Frédéric pour leur amour, leur confiance inconditionnelle et le chemin qu'ils m'ont aidé à faire. Merci à mes amis de Saint-Anicet, Ormstown et Victo qui ne m'ont jamais laissé tombés malgré la distance de Sherbrooke.

Finalement, un gros merci spécial à Sonia qui m'a accompagné du début à la fin, qui m'a supporté malgré les moments difficiles que nous avons pu vivre et qui a grandement contribué au cheminement que j'ai fait en tant que scientifique et en tant qu'être humain.

TABLE DES MATIÈRES

1	INTRODUCTION	1
1.1	Motivation	1
1.2	Question de recherche	3
1.3	Objectifs et hypothèses	3
1.4	Plan du document	5
2	ÉTAT DE L'ART	7
2.1	Automate cellulaire quantique	7
2.1.1	Les avantages des QCA	8
2.1.2	Les défis des QCA	11
2.2	Transistors monoélectroniques	15
2.2.1	Principes et premières démonstrations	15
2.2.2	Travaux à l'Université de Sherbrooke	18
2.3	Démonstrations expérimentales de QCA	22
2.3.1	Contrôle par horloge	23
2.3.2	Détection de l'état de sortie	25
2.3.3	Modélisation et simulation	31
2.4	Conclusion	35
3	MODÉLISATION	37
3.1	Modélisation de MIM	37
3.2	Formulation mathématique	38
3.3	Modélisation de QCA	40
3.3.1	Le dispositif QCA	40
3.3.2	Objectifs de la simulation	42
3.3.3	Extraction de capacités par éléments finis	42
3.3.4	Simulation Monte-Carlo (SIMON)	46
3.4	Limites à la miniaturisation	54
3.5	Conclusion	59
4	PROCÉDÉ DE FABRICATION	61
4.1	Infrastructures et méthodes utilisées	61
4.2	Procédé nanodamascène	61
4.3	Photolithographie UV1v4 - Interconnexion	65
4.4	Électrolithographie EBL1 et EBL2	68
4.4.1	Nanofils	69
4.4.2	MIM	70
4.4.3	SET	72
4.4.4	SET avec eBOX	74
4.4.5	QCA	75
4.4.6	Alignements EBL	76

4.4.7	Soulèvement PMMA vs ZEP	77
4.5	Polissage (CMP)	78
4.5.1	Polissage sur échantillons 1 cm x 1 cm	78
4.5.2	<i>Pregates</i>	80
4.5.3	Structures sacrificielles (<i>dummies</i>)	81
4.6	Conclusion	88
5	LE TITANE ET SON OXYDATION	89
5.1	Types de dépôt de titane	89
5.1.1	Évaporation	89
5.1.2	Pulvérisation	90
5.1.3	Caractérisation des dépôts de titane	91
5.2	Variation des paramètres d'oxydation du titane	92
5.2.1	Oxydation au Plasmaline	92
5.2.2	Gravure et oxydation dans l'ICP III-V	97
5.2.3	Oxydation <i>in situ</i> dans l'Intlvac	101
5.3	Conclusion	102
6	STABILITÉ DES JONCTIONS TUNNEL	105
6.1	Nouveaux matériaux	105
6.1.1	Comparaison des propriétés	107
6.1.2	Empilement Cr/Cr ₂ O ₃ /Ti	110
6.2	Barrière anti-diffusion	112
6.2.1	BAD de nitrure de titane pulvérisé	113
6.3	Passivation par Si ₃ N ₄ PECVD	118
6.4	Conclusion	120
7	SET ET DÉTECTION DE CHARGE	123
7.1	Échantillons SET fabriqués	123
7.1.1	Extraction des paramètres de SET	124
7.1.2	Effet du temps d'oxydation	127
7.1.3	Effet de la température	130
7.1.4	Effet de la direction de balayage	132
7.2	Détection de charge	134
7.2.1	Validation des composantes	134
7.2.2	Diagramme de stabilité du double SET	137
7.2.3	Opération en détection de charge	141
7.3	Conclusion	143
8	CONCLUSION	147
8.1	Conclusions générales	147
8.2	Perspectives	149
A	SIMULATEUR MIM	151
A.1	Caractéristiques du programme	151
A.2	Paramètres des simulations	153

A.2.1	Paramètres électriques des nouveaux matériaux	153
A.2.2	Dégradation des barrières (régression)	154
B	CONTRÔLE PAR SCRIPT DE SIMON	155
B.1	Description du fichier « .set »	155
B.2	Description des scripts de simulation	156
C	DÉVELOPPEMENT EN FABRICATION ET CARACTÉRISATION	161
C.1	Généralités antérieures de masques	161
C.1.1	Cellule SET - Masque UV1v2	161
C.1.2	Cellule universelle UV1v3	162
C.1.3	Dessin EBL antérieur (EBLv2 et EBLv3)	164
C.2	Procédé de Photolithographie UV2	165
C.3	Développement de nouveaux matériaux	168
C.3.1	<i>Blanket</i> tungstène (W)	168
C.3.2	<i>Blanket</i> nitrure de titane (TiN)	169
C.3.3	CMP Cr/Cr ₂ O ₃ /Ti	171
C.3.4	BAD de chrome <i>in situ</i> dans l'Intlvac	171
C.3.5	BAD de tungstène pulvérisé	175
D	PROCÉDÉ DE FABRICATION DÉTAILLÉ	177
	LISTE DES RÉFÉRENCES	181

LISTE DES FIGURES

2.1	Relation entre la polarisation de deux cellules QCA adjacentes.	8
2.2	Structures logiques de type QCA.	9
2.3	<i>Edge-driven computation</i>	10
2.4	Puissance dissipée en fonction de la durée d'un cycle d'horloge. Les technologies QCA et CMOS sont comparées.	11
2.5	Diagramme de bandes d'un SET à l'état neutre et sous tension source/drain.	16
2.6	Caractéristique I-V d'une double jonction tunnel.	17
2.7	Conductivité d'un SET en fonction de la tension de grille.	17
2.8	Technique de l'évaporation à angle.	18
2.9	Précédé nanodamascène modifié pour intégrer une grille latérale individuelle.	19
2.10	Schématisation du procédé CMP, calcul de la densité de motif et effets indésirables.	21
2.11	Circuit équivalent et conductance d'un double îlot métallique avec SET de détecteur de charge.	23
2.12	Circuit d'un double îlot avec horloge de contrôle et additionneur partiel avec horloge.	24
2.13	Conductance d'un QPC.	25
2.14	Détection de charge à l'aide de transistors SET.	27
2.15	Mesure simultanée et corrélation croisée de deux SET détecteurs de charge pour un double îlot métallique.	29
2.16	Circuit de transfert des signaux QCA vers les niveaux CMOS.	30
2.17	Additionneur somme conditionnelle à 4 bits.	34
3.1	Schéma illustrant la forme d'une barrière de potentiel en identifiant les deux principaux modes de conduction, par effet tunnel et par émission thermoïonique.	39
3.2	Schéma électrique de la demi-cellule décrite par Orlov et celle des présents travaux.	41
3.3	Maillage typique d'une simulation par élément fini à l'aide de Comsol.	44
3.4	Circuit complet de la demi-cellule QCA défini dans le logiciel SIMON excluant les capacités de couplage parasites par souci de clarté.	47
3.5	Diagramme de stabilité d'un SET basé sur la géométrie de J117Y avec séries de traces en I_D-V_{DS} et I_D-V_G	49
3.6	Diagrammes de stabilité de la demi-cellule QCA sans et avec la tension sur les détecteurs de charge SET.	50
3.7	Traces simulées en fonction du temps de l'opération de la demi-cellule QCA avec horloge.	53
3.8	Comparaison des géométries de demi-cellule QCA avec horloge. La largeur de tranchées est variée de 5 nm à 30 nm.	55
3.9	Température d'opération maximale d'un îlot métallique en considérant $E_C = 10k_B T$ en fonction de la section des jonctions tunnel et du volume de l'îlot.	58

4.1	Procédé nanodamascène pour la fabrication de NW, MIM et demi-cellule QCA.	63
4.2	Masque UV1v4 avec agrandissement de la cellule universelle et de son centre.	66
4.3	Motif UV1 des cellules E3, F4 et C4 avec agrandissement des zones centrales et des zones EBL.	68
4.4	Motifs EBL1 et EBL2 pour les 2 types de nanofils et les MIM incluant les dummies.	70
4.5	Comparaison électrique de jonctions UV-EBL pour deux profondeurs différentes.	71
4.6	Motifs EBL pour les cinq géométries de SET développées. (grilles parallèles, grille en U et double grille).	73
4.7	Motif EBL de deux SET côte-à-côte permettant de valider la détection de charge.	74
4.8	Motifs EBL pour la fabrication de QCA selon deux versions de capacité d'entrée (C_{in}).	75
4.9	Comparaison d'un soulèvement avec PMMA/PMMA et avec ZEP/MMA.	78
4.10	Image SEM recomposée de la zone ayant atteint t_0 lors du polissage et les cellules choisies à partir de ces données.	79
4.11	Comparaison du polissage d'une <i>pregate</i> en motif plein et en peigne.	81
4.12	Dessins des réseaux de <i>dummies</i> lignes et carrés pour l'étude de leur effet sur le CMP.	82
4.13	Effet de la taille et de la densité des <i>dummies</i> carrés sur le CMP.	84
4.14	Effet de la densité des <i>dummies</i> lignes sur le CMP.	85
4.15	Comparaison de l'effet de la forme des <i>dummies</i> (lignes ou carrés) sur le CMP.	86
5.1	Schéma de comparaison de la conformabilité de dépôts par évaporation et pulvérisation.	90
5.2	Concentration des éléments dans les divers types de dépôts de Ti.	91
5.3	Ellipsométrie de l'oxyde de titane sur un dépôt de Ti Sloan oxydé dans le Plasmaline 75 mm.	93
5.4	Concentration des éléments pour divers temps d'oxydation (Plasmaline 75 mm et 100 mm).	94
5.5	Modèle de déconvolution des spectres XPS en profondeur.	95
5.6	XPS haute résolution pour différentes machines de dépôt et conditions d'oxydation.	96
5.7	Épaisseur de l'oxyde III-V en fonction du temps d'oxydation et de la puissance du plateau.	98
5.8	Spectres XPS de surface en fonction des matériaux de support d'échantillon.	99
5.9	Spectres XPS à 0° et 60° montrant la réduction de la contamination en Cl. Comparaison XPS haute résolution du pic de Ti pour différents temps et différents supports d'oxydation.	101
5.10	XPS haute résolution de l'oxyde <i>in situ</i> Intlvac.	102
5.11	Ellipsométrie de l'oxyde Intlvac en fonction du temps d'oxydation.	103

6.1	Vieillessement d'une jonction MIM en trois jours.	106
6.2	Simulation de la caractéristique J-V de MIM composées d'un nouveau métal, de son oxyde conjugué et de Ti.	109
6.3	Images AFM d'un dépôt d'îlot en Cr avec pied et Al sans pied.	110
6.4	Vue en coupe d'un dépôt de Cr avec résine ZEP et l'effet de la contrainte.	111
6.5	Comparaison de l'état de la surface du SiO ₂ et de la présence ou non de pieds après soulèvement.	112
6.6	Courbes courant-tension pour divers temps d'oxydation et diverses étapes de CMP.	115
6.7	Caractéristiques électriques d'une MIM en fonction du temps et comparaison à la variation d'un nanofil et à différentes simulations.	116
6.8	Vue en coupe des MIM montrant l'impact de la diffusion de l'oxygène dans la jonction et les solutions fonctionnelles implémentées.	118
6.9	Courbes Id-Vds de MIM Ti/TiO ₂ /Ti et Ti/TiO ₂ /TiN/Ti à divers temps après la passivation (0 à 120 jours).	119
6.10	Courbes Id-Vds de plusieurs MIM Ti/Al ₂ O ₃ /TiN/Ti mesurées sur une période de 48 jours.	120
7.1	Illustration schématique des dimensions d'un SET typique. Diagramme de stabilité d'un SET (diamant de Coulomb) indiquant les relations permettant l'extraction des capacités et énergies de charge du dispositif.	126
7.2	Comparaison de diamants de Coulomb pour des temps d'oxydation de 1 min, 2 min et 5 min mesurés à $T = 1,5$ K sur les échantillons K215T, K215V et K215X respectivement.	128
7.3	(a) AFM du SET-5 après l'étape de soulèvement de l'îlot. (b) Constante diélectrique simulée, ajustée aux diamants de Coulomb expérimentaux en fonction de l'épaisseur d'oxyde mesurée par ellipsométrie.	129
7.4	Effet de la température sur les diamants de Coulomb de deux SET de l'échantillon J117T. Mesures prises à 1,5 K, 3 K et 5 K pour (a-c) le SET-2 et (d-f) le SET-3 respectivement.	131
7.5	Courant dans le SET-5 à divers V_{DS} en fonction de la température. L'encart montre une série de courbes Id-Vds à diverses températures, augmentant du foncé vers le pâle.	132
7.6	Diamants de Coulomb pour le SET-6. Comparaison de la direction de balayage lors de la prise de mesure.	133
7.7	Circuit complet du double SET démonstrateur de la détection de charge. Capacités de jonctions tunnel en rouge, de grilles en vert, de couplage mutuel en jaune, de couplage parasite en orangé et au substrat en brun.	134
7.8	Diamants de Coulomb expérimentaux et simulés dans la région 1 pour le SET-2 et le SET-3 à $T = 50$ mK.	136
7.9	Diagramme de stabilité du SET-3 de l'échantillon K215T en fonction de V_{GL} , la grille du SET-2 (gauche) et V_{GR} la grille du SET-3 (droite).	137
7.10	Diagramme de stabilité combiné des SET-2 et SET-3 couplés et agrandissement d'une zone de croisement des deux SET. Mesures prises à $T = 50$ mK.	139
7.11	Diagramme de stabilité schématique du double SET.	140

7.12	Diagramme de stabilité combiné du double SET et traces en détection de charge pour 5 évènements dans chacun des deux SET, détectés par le SET adjacent.	142
7.13	Impact de la largeur des pics et des transitions en détection de charge contrôlée par la tension source-drain appliquée au SET à détecter.	144
A.1	Description de l'interface développée pour le simulateur MIM.	152
B.1	Séquence globale de simulation pour une demi-cellule QCA avec SET de lecture, du dessin de CAD à l'opération du dispositif.	157
B.2	Flux de données et paramètres pour chacune des configurations programmées de la demi-cellule QCA.	158
B.3	Flux de données, paramètres et courbes à tracer pour chacune des configurations simulées.	159
C.1	Cellule SET UV1v2 pour la fabrication de nanofils, MIM et SET.	162
C.2	Cellule universelle version 1 (UV1v3) pour la fabrication de tout dispositif à 9 contacts ou moins.	163
C.3	Effet de la grandeur de la zone d'EBL sur le CMP : coupure des <i>pregates</i>	164
C.4	Motifs EBL pour la cellule SET (UV1v2) en haut et la cellule universelle version 1 (UV1v3) en bas.	165
C.5	(a) Masque de plots de contacts pour UV1v4 et (b) échantillon terminé avec passivation Si_3N_4 et plots d'or.	166
C.6	Photos du support d'échantillon avec échantillon collé, contacts micro-soudé et agrandissement montrant les micro-soudures sur les plots de contact en Au.	167
C.7	Topographie AFM avant polissage du W et image SEM et AFM après polissage partiel.	169
C.8	Images SEM d'une cellule en cours de polissage CMP avec <i>slurry</i> Allied et CX.	170
C.9	Deux images, AFM et SEM, d'un QCA avec un îlot de Cr après planarisation.	171
C.10	Caractéristique I-V de MIM Ti/TiO ₂ /Cr/Ti, instables et incohérentes.	172
C.11	Images AFM de CMP sur des MIM avec BAD de chrome.	174
C.12	Vieillissement et absence d'effet de grille d'un SET avec BAD de chrome.	174
C.13	Images AFM d'une MIM avec BAD de tungstène avant d'atteindre t_0	175

LISTE DES TABLEAUX

3.1	Matrice de capacités simulée pour l'échantillon J117Y.	45
3.2	Proportion des capacités totales attribuées aux capacités nominales et parasites. Valeurs simulées pour le SET-6 de l'échantillon J117Y.	46
3.3	Dimensions considérées pour la comparaison des géométries simulées (nm). L est la longueur, w_T la largeur et t_{CMP} l'épaisseur de l'îlot.	56
6.1	Comparaison des différents métaux de remplacement du Ti possible pour l'îlot et les électrodes (<i>blanket</i>). Pour référence, la vitesse de polissage v_{CMP} du SiO_2 est 45 nm/min avec la solution Allied et 25 nm/min pour la solution CX94S. Les cases en rouge indiquent les paramètres ne satisfaisant pas aux critères d'intégration.	107
6.2	Travail d'extraction, affinité électronique et constante diélectrique des divers matériaux disponibles.	108
6.3	Paramètres du modèle ajusté pour les 3 MIM de la figure 6.6a.	114
7.1	Paramètres expérimentaux et simulés des SET fonctionnels. ID est l'identifiant utilisé tout au long du chapitre pour référer au différents SET.	125
A.1	Propriétés des métaux reprises du tableau 6.2 et référencées.	153
A.2	Propriétés des isolants reprises du tableau 6.2 et référencées.	153
A.3	Paramètres du modèle ajusté pour la MIM de la figure 6.7a.	154
A.4	Paramètres du modèle ajusté pour la MIM de la figure 6.7c.	154
C.1	Données de fit de 4 MIMs Ti/Cr/ TiO_2 /Ti.	173

LEXIQUE

Terme technique	Définition
<i>Blanket</i>	Dépôt d'une couche mince de matériau sur toute la surface de l'échantillon.
Conformabilité	Propriété d'un dépôt d'épouser plus ou moins bien la forme de l'échantillon, particulièrement les marches verticales.
Courbes I(J)-V	Mesure du courant (densité de courant) d'un dispositif en fonction de la tension appliquée à ses bornes.
Déconvolution	Exercice de modélisation permettant de différencier les différents phénomènes contribuant à une mesure expérimentale afin d'en extraire des paramètres sous-jacents.
Effet tunnel	Conduction électronique où les électrons passent directement à travers une barrière d'isolant grâce à l'étalement de leur fonction d'onde dans et au travers de la barrière.
Ellipsométrie	Mesure par réflexion optique d'un faisceau polarisé permettant l'extraction de l'épaisseur d'une couche de matériau ainsi que ses paramètres optiques.
Gonflement	Rapport entre le volume d'oxyde créé pendant une oxydation et le volume de matériau du substrat converti.
<i>Hopping</i>	Conduction électronique à travers une jonction en passant par effet tunnel de défaut en défaut.
Soulèvement	Procédé utilisant une double couche de résine qui permet de soulever un matériau déposé aux endroits indésirables, défini par une lithographie.
Sous-oxydes	Forme stœchiométrique déficiente en oxygène par rapport à l'oxyde le plus courant (TiO vs TiO ₂).
Stœchiométrie	Rapport entre les différents éléments d'un composé chimique ou d'un matériau. Est dit stœchiométrique lorsque ces rapports sont entiers.
Thermoïonique	Conduction électronique où les électrons acquièrent thermiquement une énergie suffisante pour passer au-dessus de la barrière d'oxyde (par sa bande de conduction).
Vieillessement	Détérioration des caractéristiques d'un dispositif dans le temps.

LISTE DES SYMBOLES

Symbole	Définition
W_T	Largeur d'une tranchée dans laquelle sont encastrés les dispositifs
t_{CMP}	Profondeur d'une tranchée
t_{ox}	Épaisseur du matériau d'une jonction tunnel (oxyde)
ϵ_r	Constante diélectrique d'un matériau
m^*	Masse effective d'un électron dans un matériau donné
ϕ_{0L}	Hauteur de barrière de la jonction tunnel (vue de la gauche)
ϕ_{0R}	Hauteur de barrière de la jonction tunnel (vue de la droite)
Ψ_{ML}	Travail de sortie d'un métal (gauche de la jonction dans le modèle)
Ψ_{MR}	Travail de sortie d'un métal (droite de la jonction dans le modèle)
χ_I	Affinité électronique d'un isolant (oxyde de jonction tunnel)
t_0	Point du polissage CMP où la surface du substrat (SiO_2) est révélée

LISTE DES ACRONYMES

Acronyme	Définition
AFM	Microscopie à Force Atomique (<i>Atomic Force Microscopy</i>)
BAD	Barrière Anti-Diffusion
CMP	Polissage mécano chimique (<i>Chemical-Mechanical Planarization</i>)
EBL	Lithographie par faisceau d'électrons (<i>e-Beam Lithography</i>)
ICP	Plasma couplé par induction (<i>Inductively Coupled Plasma</i>)
SEM	Microscope électronique à balayage (<i>Scanning Electron Microscope</i>)
STM	Microscope à effet tunnel (<i>Scanning Tunnelling Microscope</i>)
MIM	Métal-Isolant-Métal (pour une jonction tunnel)
RTA	Recuit thermique rapide (<i>Rapid Thermal Anneal</i>)
XPS	Spectroscopie des photoélectrons X (<i>X-ray Photo-electron Spectroscopy</i>)

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Motivation

Depuis leur invention dans les années soixante, les circuits intégrés ont été développés et améliorés à une vitesse exponentielle et leur impact sur la vie de tous les jours est indéniable. Cette croissance exponentielle, observée par Gordon Moore en 1965, est depuis devenue un objectif à atteindre pour l'industrie de la microélectronique. Cette *loi de Moore* stipule que le nombre de transistors par puce double tous les deux ans. Des développements importants dans les méthodes de fabrication ont permis au début de suivre ce rythme par la simple réduction de la taille de chaque transistor, apportant ainsi une augmentation de la densité d'intégration de ceux-ci sur une même puce. Cependant, des problèmes ont commencé à apparaître avec la diminution de la taille des transistors. Ces problèmes étaient autant au niveau des méthodes de fabrication, comme la limitation de la lithographie par la diffraction, qu'au niveau du fonctionnement du transistor MOSFET avec les effets de forts champs et de canal court, par exemple. Des solutions ont jusqu'à maintenant été trouvées pour contourner ces problèmes, notamment la réduction de la longueur d'onde utilisée en lithographie par projection ou par immersion ainsi que la diminution des tensions d'opération de 5 V jusqu'à moins d'un volt, le passage technologies de grilles métalliques et oxydes à haute constante diélectrique (*high-k*), l'ajout de contrainte dans le silicium du canal et les architectures de transistors FINFET ou FD-SOI. Aujourd'hui, la diminution de la taille d'un transistor n'est plus seulement une question de fabrication ou de condition d'opération, mais aussi de phénomènes quantiques inévitables aux échelles considérées (sous les 20 nm). De plus, tous ces transistors communiquent entre eux par des interconnexions toujours plus complexes et dissipant une part grandissante et non négligeable de l'énergie de fonctionnement de la puce. À ces densités d'intégration, la puissance générée par un microprocesseur est de plus en plus grande et difficile à gérer.

L'industrie des semiconducteurs, par le biais de l'*International Technology Roadmap for Semiconductors* [ITRS, 2013], cherche donc depuis plusieurs années des solutions alternatives aux traditionnels transistors MOSFET. Le premier axe de solutions envisagées a été de développer de nouvelles architectures et de nouveaux algorithmes permettant de faire plus avec les mêmes transistors. On pense ici principalement à l'ajout de plusieurs coeurs

de calcul sur un même processeur, ce qui permet une meilleure gestion des tâches effectuées par celui-ci. Le deuxième axe de recherche de solutions est basé sur la conception de nouveaux dispositifs, transistors ou autre, permettant de compléter ou même remplacer la technologie actuelle. Le rapport de l'ITRS [2013] mentionne les dispositifs les plus prometteurs aux yeux de l'industrie comme les FET de nanotubes de carbone et de graphène, les transistors moléculaires et les transistors de spins. Bien que les transistors monoélectroniques ne soient plus mentionnés dans l'édition de 2011, la recherche sur ce type de dispositif se poursuit toujours avec plusieurs publications récentes sur le sujet [Arzubiaga *et al.*, 2014; Kim *et al.*, 2012; Maeda *et al.*, 2012; Roche *et al.*, 2012; Shin *et al.*, 2010].

Ce dernier type de transistor a suscité beaucoup d'intérêt dans les dernières années, en particulier à l'Université de Sherbrooke car, depuis son invention à la fin des années 1980, peu de SET ont fonctionné à température ambiante et peu d'entre eux ont été fabriqués par des procédés industrialisables. À l'Université de Sherbrooke, le procédé de fabrication de SET métallique innovateur développé par Dubuc *et al.* [2008] a ouvert une nouvelle voie pour la fabrication de SET fonctionnant à température ambiante et même plus (430 K). Il promet aussi la compatibilité avec les technologies actuelles moyennant quelques modifications au procédé en particulier pour les étapes de lithographie électronique et au soulèvement. Ce procédé permet entre autres de fabriquer des jonctions tunnel de capacité inférieure à l'attofarad, ce qui est nécessaire pour observer le blocage de Coulomb, caractéristique principale des SET, à haute température. La mention de ces travaux dans le rapport de l'ITRS [2007] permet d'envisager des applications commerciales dans un avenir plus rapproché qu'auparavant.

Depuis la démonstration du blocage de Coulomb à température ambiante au milieu des années 90 [Takahashi *et al.*, 1995], beaucoup de chercheurs ont travaillé à la mise au point de différentes architectures utilisant ces dispositifs prometteurs. Différents arrangements calqués sur les transistors FET ont été développés, mais aussi d'autres approches innovatrices comme celle des automates cellulaires *quantiques* (QCA).

Cette approche introduite par Lent *et al.* [1993] et découlant de la théorie des automates cellulaires a l'ambition de faire des calculs en encodage binaire avec seulement quelques électrons par bit, permettant de s'approcher très près de la limite inférieure de dissipation thermique par bit. Cela est rendu possible grâce à un changement de paradigme dans l'implémentation des circuits électroniques. Le paradigme actuel, atteignant sa limite, est basé essentiellement sur le chargement/déchargement de capacités par des courants électriques et contrôlé par des transistors à effet de champ. Le changement d'un état « 1 » à un état « 0 » occasionne un courant et donc le déplacement de plusieurs milliers

d'électrons. Il en résulte une dissipation thermique importante. À l'opposé, le nouveau paradigme est basé sur la position de quelques charges seulement. Le changement d'état ne se fait donc plus avec le déplacement de milliers d'électrons mais seulement quelques-uns et cela se fait à l'intérieur d'une cellule unité (décrite plus loin).

Plusieurs prototypes de QCA électrostatiques ont été réalisés avec succès, mais sans toutefois, fonctionner à température ambiante [Anderson et Bhanja, 2014]. Le procédé de fabrication [Dolan, 1977] de ces prototypes ne permettait pas d'atteindre un contrôle latéral suffisamment bon pour réaliser des jonctions tunnel de la taille requise pour le fonctionnement à température ambiante. Ce procédé ne permet pas non plus une miniaturisation suffisante pour y arriver dans le futur. La recherche dans ce domaine a tout de même continué pour développer des architectures complexes sur cette base et a permis de démontrer en particulier qu'il est possible de faire des *fils binaires* transportant l'information et que ces fils peuvent en croiser d'autres dans le même plan sans s'affecter l'un l'autre [Tougaw et Lent, 1994]. Cette caractéristique particulière permet d'éliminer une grande partie des problèmes d'interconnexion à plusieurs niveaux (complexité, couplage capacitif parasite, vias, difficulté à faire plus d'un étage de CMOS, etc.) actuellement utilisée et donc possède un avantage certain.

1.2 Question de recherche

Vu l'état de la technologie et des récentes avancées faites par le groupe de Dominique Drouin (Directeur), il sera intéressant de voir ce que pourra donner le mariage des principes des QCA avec le procédé développé ici à l'Université de Sherbrooke. La question de recherche guidant ce projet est donc :

Est-il possible d'observer le fonctionnement d'une demi-cellule QCA, incluant des détecteurs de charge SET, fabriquée entièrement avec le procédé nanodamascène développé à l'Université de Sherbrooke ?

1.3 Objectifs et hypothèses

À la lumière de tout ce qui a été réalisé depuis l'introduction du concept de QCA en 1993 et des travaux récents à l'Université de Sherbrooke, l'élément manquant est une cellule QCA électrostatique fonctionnant à haute température et compatible avec la technologie CMOS aussi bien au niveau de l'opération des dispositifs et circuits que des procédés de fabrication.

Le circuit qui sera développé ici est celui introduit par [Orlov *et al.*, 2000] puisqu'il contient les deux îlots nécessaires à l'observation du comportement bistable de la cellule qui devient ici une demi-cellule. Ce circuit intègre aussi un troisième îlot au centre de la cellule contrôlé par une grille supplémentaire et qui permet de réaliser le contrôle par horloge. Le procédé de fabrication qui sera utilisé est celui développé par [Dubuc *et al.*, 2008] et adapté par la suite par [Beaumont *et al.*, 2009] et [Morissette, 2010] pour y intégrer une grille latérale individuelle. Ce procédé est compatible avec les technologies de fabrication CMOS puisqu'il peut être réalisé sur une grande variété de substrats isolants à l'aide de procédés standards de l'industrie de la microélectronique. De plus, l'utilisation du polissage mécano chimique (CMP) permet de réduire les dimensions suffisamment pour augmenter de façon significative la température d'opération des SET et QCA fabriqués.

L'objectif général de cette thèse est donc : *Concevoir et réaliser le prototype d'une demi-cellule QCA basée sur le procédé nanodamascène incluant un contrôle par horloge et des SET de lecture de l'état de sortie du circuit.*

Cet objectif se divise en plusieurs parties importantes.

1. Développement des outils de simulation pour effectuer la conception aussi bien des dispositifs SET que du circuit de la demi-cellule QCA et pour valider la possibilité de réaliser le dispositif expérimentalement.
2. Validation expérimentale du fonctionnement de transistors SET afin de démontrer la possibilité de réaliser des îlots métalliques et des jonctions tunnel de façon stable et correspondant à la conception.
3. Démontrer le fonctionnement d'un SET en tant que détecteur de charge. Celui-ci est l'élément principal permettant de mesurer l'état de la demi-cellule QCA.
4. Caractériser la demi-cellule QCA telle que conçue pour valider la plateforme technologique de simulation, de conception et de fabrication de cellules QCA.

Les objectifs expérimentaux (2-4) doivent être réalisés dans l'ordre puisque le fonctionnement de chacun dépend de la réalisation de l'objectif précédent. Pour les premières mesures dans chacune des étapes, la caractérisation électrique cryogénique permettra de relâcher les contraintes de fabrication et de démontrer le fonctionnement des dispositifs avant d'optimiser les dimensions pour atteindre des températures d'opération plus élevées.

1.4 Plan du document

Le document est structuré de la façon suivante. Le chapitre 2 passe en revue les différents travaux de la littérature de l'origine du concept de QCA et de SET jusqu'aux plus récents travaux sur l'architecture de circuits logiques en technologie QCA. L'état de l'art des méthodes critiques au procédé nanodamascène comme le CMP y sont aussi décrites afin de bien établir les principes et les limites de ces procédés. Les différentes approches de modélisations utilisées dans la littérature afin de simuler ce type de dispositif sont aussi discutées afin d'établir les bases du choix de modèle.

Le chapitre 3 définit les deux modèles utilisés pour faire la conception des dispositifs et une partie de l'extraction des paramètres. Le premier modèle décrit permet de simuler le courant dans une barrière tunnel. Il est ensuite utilisé pour faire l'ingénierie de la barrière afin d'obtenir des caractéristiques idéales pour la fabrication des SET et de la demi-cellule QCA. Ensuite, une méthodologie de simulation permettant de simuler la matrice complète de capacité des circuits SET et QCA est développée. La matrice est obtenue pour la géométrie réelle d'un dispositif en tenant compte de tous les aspects de la fabrication. La matrice est ensuite transférée dans un logiciel de simulation du blocage de Coulomb pour obtenir les caractéristiques électriques complètes des dispositifs.

Au chapitre 4, le procédé utilisé pour la fabrication des différents dispositifs (nanofils, barrières tunnel, SET et QCA) est décrit. Les développements importants réalisés pour améliorer et optimiser le procédé y sont aussi décrits. En particulier, l'étude détaillée de l'utilisation de structures sacrificielles dans les zones de lithographie par faisceau d'électrons y est donnée.

Dans le chapitre 5, l'étude des matériaux utilisés pour la fabrication c'est-à-dire le Ti et son oxyde est réalisée. Les divers types de dépôt de métal ainsi que plusieurs procédés d'oxydation sont décrits et les avantages et inconvénients de chacun sont donnés. Les épaisseurs de matériaux ainsi que leur qualité et les différents contaminants présents sont décrits ce qui permet alors de déterminer les meilleurs matériaux et les conditions de procédé à utiliser pour la fabrication des dispositifs.

Le chapitre 6 s'attarde à l'étude de la stabilité des barrières tunnel dans le procédé nanodamascène. La caractérisation des instabilités observées a permis de déterminer les causes les plus probables puis de proposer diverses solutions testées par la suite. Les essais réalisés pour tester l'utilisation de matériaux différents sont décrits puis la solution de passiver les échantillons est adoptée pour améliorer la stabilité des jonctions.

Dans le chapitre 7, les résultats de caractérisation des dispositifs SET isolés et de SET couplés par proximité sont présentés. L'extraction complète de tous les paramètres géométriques, des capacités principales et des énergies de charges est donnée pour des températures de mesures à température cryogénique (1,5 K). L'effet de divers paramètres de ces SET sur leurs caractéristiques mesurées est décrit et est corrélé à des simulations de chacun des SET validant la méthode de simulation du chapitre 3. Finalement, un dispositif composé de deux SET juxtaposés est caractérisé. Les mesures, réalisées à 50 mK, permettent d'extraire le couplage des deux SET. Aussi, ce couplage permet d'utiliser l'un des SET comme détecteur de charge et les mesures démontrent la détection du changement de l'état de charge de l'îlot du SET voisin utilisé comme boîte à un électron. Les conditions de mesure en détection de charge pour un circuit QCA sont aussi discutées.

Les travaux réalisés dans cette thèse permettent d'ouvrir sur des recommandations pour les projets futurs et sur les possibilités offertes par la combinaison des concepts QCA et du procédé nanodamascène.

CHAPITRE 2

ÉTAT DE L'ART

2.1 Automate cellulaire quantique

En 1993, [Lent et al.](#) ont introduit un nouveau paradigme d'architecture de calcul [[Lent et al., 1993](#)]. Ce paradigme découle d'une série de développements réalisés dans les années 1980 sur l'étude de systèmes à faible nombre d'électrons émergeant de nouvelles capacités en épitaxie permettant la fabrication de gaz 2D d'électrons par GaAs/AlGaAs. L'étude subséquente du confinement des électrons, du blocage de Coulomb et de la nature quantique de l'électron promet à ce moment de grandes avancées en terme de dispositifs.¹ Par analogie avec l'architecture des automates cellulaires [[Toffoli et Margolus, 1987](#)] du type de *Conway's Game of Life*, [Lent et al.](#) introduit le concept d'automate cellulaire quantique (*Quantum-dot Cellular Automata* - QCA). Un automate cellulaire classique est un arrangement régulier de cellules élémentaires, chacune dans un état particulier défini par l'état de son voisinage et évoluant de génération en génération. Dans le cas particulier de l'électronique, on appelle QCA un arrangement de dispositifs quantiques, interconnectés seulement dans leur proche voisinage, qui permettent d'effectuer un ou plusieurs calculs. Par souci de stabilité, un dispositif ayant seulement deux états stables est favorisé. De plus, la bistabilité permet un encodage binaire des opérations compatible avec la technologie CMOS actuelle.

Une géométrie permettant d'obtenir de telles caractéristiques est de placer 4 îlots de confinement des électrons aux coins d'un carré suffisamment petit pour que les électrons puissent passer d'un îlot à l'autre par effet tunnel lorsque nécessaire. Les états stables de plus faible énergie de la cellule sont calculés en utilisant un modèle d'Hamiltonien quantique, de type Hubbard, permettant de déterminer l'énergie des différentes configurations d'électrons dans la cellule [[Lent et al., 1993](#); [Tougaw et Lent, 1996](#); [Tougaw et al., 1993](#)]. Ces deux états ou polarisations correspondent aux électrons positionnés sur les diagonales du carré. Lorsque les électrons sont dans les coins inférieurs gauche et supérieur droit (comme sur la figure [2.1](#)), la polarisation est définie comme $P = +1$ et dans la diagonale opposée, c'est $P = -1$. Cette polarisation est propagée aux cellules environnantes par la

¹ [[Anderson et Bhanja, 2014](#)] est une référence complète faisant le tour du sujet, de l'histoire du QCA aux orientations actuelles suivi par les chercheurs dans le domaine. Plusieurs idées en sont tirées, ici et dans la conclusion globale de la thèse.

même répulsion électron-électron. On remarque, dans la fonction de transfert intercellule de la figure 2.1, que même une polarisation de seulement 10 % de la cellule P2 est suffisante pour induire une polarisation identique complète de la cellule voisine (P1). C'est la nature non linéaire de l'effet tunnel utilisé ici qui permet cette saturation de l'état de la cellule dans un de ses états stables. Ceci est d'ailleurs une caractéristique importante de cette technologie puisqu'elle apporte un gain et un certain redressement ou correction du signal dans un fil binaire (voir la section suivante).

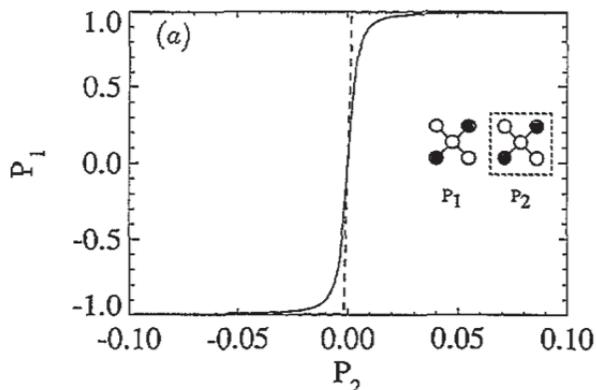


Figure 2.1 Relation entre la polarisation de deux cellules élémentaires adjacentes. [Source : [Lent et al., 1993](#)]

Différents arrangements de cellules élémentaires reproduisant différents dispositifs logiques ont été pensés par [[Lent et al., 1993](#)] et [[Tougaw et Lent, 1994](#)]. Il est en effet possible de fabriquer des « fils binaires » transportant l'information et permettant l'incorporation de coudes et de « T » (figure 2.2). Il est aussi possible de réaliser des croisements planaires en utilisant une version tournée de 45° d'une cellule. Ceci confère au QCA le grand avantage d'être entièrement contenu dans un seul plan et minimise le besoin d'interconnexions complexes dans les couches supérieures. Une porte logique majoritaire, qui peut se comporter comme une porte ET et une porte OU logique, est également réalisable. Ces différents éléments de base permettent ensuite de construire tout autre système logique, par exemple, un additionneur complet.

2.1.1 Les avantages des QCA

Les QCA apportent avec eux un changement de paradigme d'une électronique où le mouvement des électrons (quelques milliers d'électrons à la fois aujourd'hui) sert à l'encodage de l'information, à une électronique où c'est la position de quelques électrons seulement qui permet l'encodage. On passe donc d'un fonctionnement où l'on charge (décharge) une capacité en utilisant le courant de drain d'un ou plusieurs transistors (*voltage state logic* -

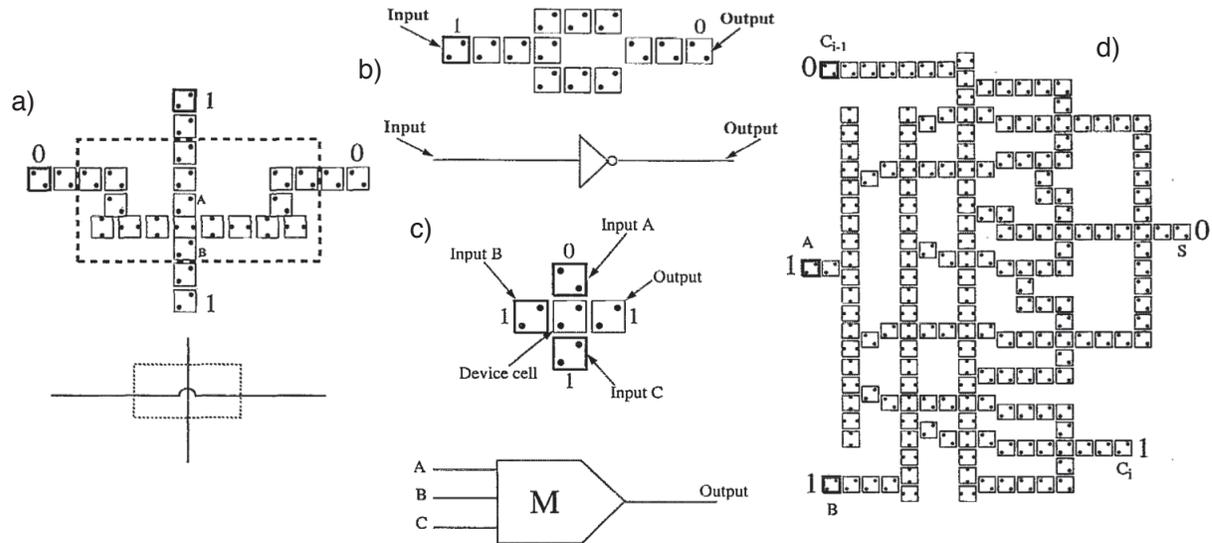


Figure 2.2 Divers arrangements de cellules élémentaires pour fabriquer des structures logiques. Un croisement de (a) fils binaires, (b) un inverseur, (c) une porte majoritaire et (d) un additionneur complet. [Source : Tougaw et Lent, 1994]

VSL) à un fonctionnement où l'on déplace un électron d'un filot à un autre par effet tunnel (*charge state logic* - CSL).

Plusieurs avantages découlent de ce nouveau paradigme qu'est le QCA. Le premier est l'utilisation des états fondamentaux des cellules élémentaires pour encoder l'information (*Computing with the ground state*). Comme dans la technologie CMOS, le maintien de l'état fondamental ne requiert aucun apport d'énergie extérieur, en plus d'être relativement stable. Cette stabilité de l'état fondamental peut donc être utilisée comme mémoire puisqu'une fois préparée, la cellule reste en principe dans l'état fondamental indéfiniment. Il n'est cependant pas trivial d'utiliser une cellule QCA comme point mémoire puisque de faibles changements de l'environnement peuvent détruire l'état. Aussi, les dispositifs logiques étant la plupart du temps utilisés en mode dynamique et à des fréquences très élevées, le faible nombre d'électrons (1 ou 2) impliqué dans le changement d'état d'une cellule rend la consommation dynamique du QCA très faible, au contraire de celle des MOSFET. Un deuxième avantage est que la communication entre cellules adjacentes se fait par répulsion coulombienne. À l'intérieur de l'automate, ce ne sont pas les charges, mais bien l'information elle-même qui se déplace. Ceci élimine le besoin de contrôler individuellement chacune des cellules élémentaires internes (*Edge-driven computation*, figure 2.3). Cela implique aussi que l'énergie est apportée aux cellules élémentaires d'entrée seulement et le système, n'étant plus dans son état fondamental, relaxe jusqu'à celui-ci. Il est donc

ensuite possible de lire le résultat en sortie. Ce fonctionnement permet un apport minimal d'énergie pour effectuer les calculs et minimise les connexions aux cellules internes au QCA. Considérant qu'un QCA n'est composé que de quelques bits d'entrée pour plusieurs dizaines de cellules internes, l'efficacité énergétique d'un dispositif de ce type devient substantielle.

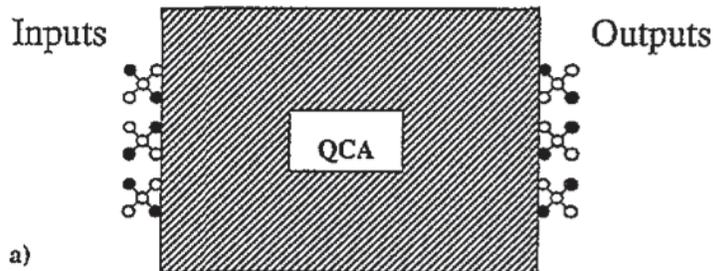


Figure 2.3 Schéma d'un QCA représentant le *Edge-driven computation*. Les bits d'entrée (*input*) sont à gauche et la lecture s'effectue à droite par les bits de sortie (*output*). [Source : [Lent et al., 1993](#)]

La technologie QCA a aussi des avantages en termes de taille, de fréquence et surtout, en termes de dissipation d'énergie. À ce niveau, d'importants travaux ont été réalisés sur le calcul de la dissipation dans divers régimes d'opération. En particulier, en utilisant le modèle de Hubbard, [[Timler et Lent, 2002](#)] ont étudié la question de la plage d'opération d'un circuit QCA en termes de puissance et de fréquence d'opération de l'horloge. La région hachurée dans la figure 2.4 correspond à la plage d'opération de QCA, en prenant en compte une application de type QCA moléculaire (voir section 2.1.2). E_k est l'énergie reliée à deux cellules QCA voisines ayant des états différents. Les points A, B, C et D de la figure correspondent quant à eux à des nœuds technologiques CMOS prévu par la feuille de route de l'ITRS lors de la publication de l'article (2001). Les points A et B sont les prédictions haute performance pour les années 2001 et 2014 tandis que les points C et D correspondent aux transistors de 30 et 20 nm de longueur de grille développés par Intel en 2001. Le point E est ajouté à la figure de [[Timler et Lent, 2002](#)] en se basant sur les technologies actuelles (2015) les plus récentes d'Intel². La dissipation qui pourra être atteinte en pratique dépendra de l'implémentation choisie et devra aussi inclure la dissipation des circuits de contrôle de l'horloge³ et de correction d'erreur ainsi que des signaux d'entrée et de sortie non pris en compte dans cette étude. On voit cependant que dans la plupart des cas, les QCA offrent beaucoup d'avantages qui, à long terme, pourront nous offrir des solutions intéressantes pour améliorer les performances des dispositifs électroniques.

² [Processeur Intel Core i7-5960X](#) en technologie 22 nm à 8 coeurs (2,6 milliard de transistors) ayant une fréquence d'opération de base de 3 GHz et une dissipation totale de 140 W.

³ Le fonctionnement et la nécessité d'une horloge sont discutés plus en détail à la section 2.3.1 (p.23).

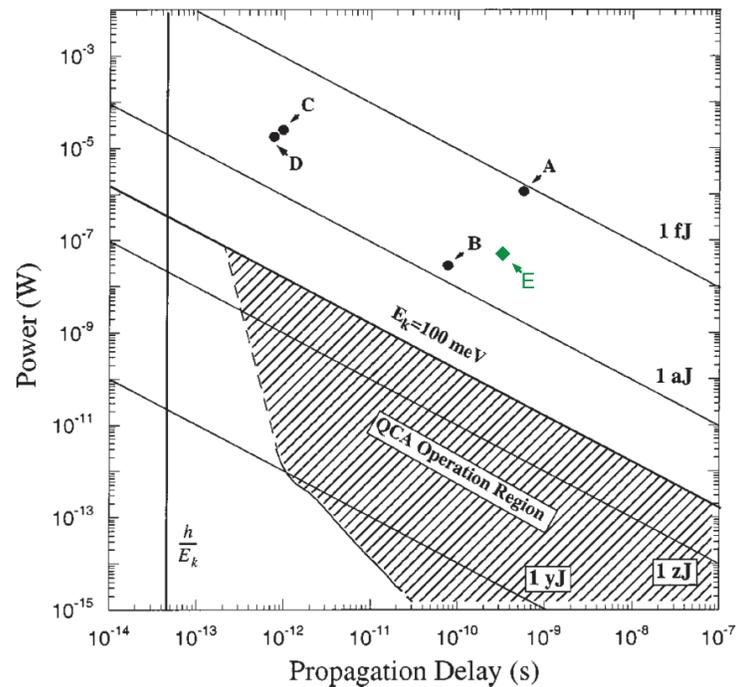


Figure 2.4 Puissance dissipée en fonction de la durée d'un cycle d'horloge. Les technologies QCA et CMOS sont comparées. La région hachurée correspond à la région d'opération possible des QCA considérant une horloge abrupte (limite supérieure) et quasi adiabatique (limite inférieure). La droite verticale (h/E_k) correspond à la limite théorique de la fréquence d'opération. Les points A et B correspondent aux prévisions de l'ITRS 2001 et 2014 respectivement tandis que les points C et D correspondent aux transistors des noeuds 20 et 30 nm fabriqués en 2001. Le point E ajouté correspond à la technologie la plus récente d'Intel (Core i7-5960X). [Source : [Timler et Lent, 2002](#)]

2.1.2 Les défis des QCA

Malgré les avantages mentionnés dans la section précédente, plusieurs défis doivent être relevés pour arriver à fabriquer des dispositifs QCA fonctionnels. Comme le montre [[Lent et al., 1993](#)], il est important que l'uniformité des îlots dans une cellule élémentaire soit adéquate. Par exemple, si l'un des îlots a une capacité différente des autres, ceci pourrait induire une séparation de l'énergie des deux niveaux fondamentaux de la cellule et bloquer la cellule dans l'une des deux polarisations. Ceci fait ressortir l'uniformité à l'intérieur d'une cellule comme un défi majeur dans la fabrication d'une cellule élémentaire. Cependant, puisque chaque cellule ne communique avec ses voisines que par interaction électrostatique, il n'est pas nécessaire qu'elles soient exactement identiques, ce qui limite la contrainte d'uniformité à la cellule individuelle. Il faut donc, pour chaque implémentation d'un QCA, définir les marges d'erreur en fonction des conditions d'opération, c'est-à-dire des tensions nécessaires pour propager correctement l'information d'une cellule à l'autre.

Dans leur article de 1995, [Tougaw et Lent](#) discutent de l'effet de charges parasites dans l'environnement d'une cellule. Par des calculs d'énergie, ils déterminent théoriquement la zone autour d'une cellule à l'intérieur de laquelle une charge parasite a pour effet de bloquer la cellule en question dans une polarisation donnée et interrompt ainsi le transfert d'un bit d'un bout à l'autre du fil binaire. La distance à laquelle ceci se produit est environ une fois la distance intercellulaire. Ceci indique en fait qu'une charge parasite a le même effet que les électrons d'une cellule voisine et il faut donc porter une attention particulière aux procédés utilisés pour limiter leur présence. Dans des travaux connexes de [[Lent et Tougaw, 1997](#)], on mentionne aussi certains problèmes potentiels reliés à des états métastables dans un système plus complexe comportant plusieurs cellules. Cette problématique et une des solutions envisagées sont discutées à la section [2.3 p.22](#).

Comme mentionné au chapitre [1](#), l'implémentation de la technologie QCA devra être compatible avec la technologie CMOS actuelle puisqu'elle possède la capacité de commander tous les périphériques nécessaires (moniteur, mémoire, disque dur, antenne, etc.), ce que les nouvelles approches à très faible consommation énergétique ne peuvent généralement pas faire. Plusieurs méthodes de fabrication de cellules élémentaires QCA ont été développées depuis l'apparition du concept. La plupart ont le potentiel de fonctionner indépendamment sur une puce, mais peu d'entre elles peuvent satisfaire pleinement le critère de compatibilité CMOS dans l'état actuel de leur développement.

L'une des méthodes les plus connues pour fabriquer des îlots quantiques est certainement celle utilisée par [[Perez-Martinez et al., 2007](#)]. Un gaz d'électron à deux dimensions confiné à l'interface GaAs/AlGaAs est contrôlé par des électrodes de surface permettant de repousser les électrons du gaz pour former un dispositif. Ce groupe a donc fabriqué quatre îlots avec des jonctions tunnel contrôlables de façon à former une cellule QCA élémentaire. Le contrôle qu'il est possible d'exercer sur les dimensions des îlots et des jonctions permet d'étudier en détail le fonctionnement d'une cellule QCA. Cette méthode est cependant impraticable à grande échelle sous cette forme. Le contrôle électrostatique de chacun des îlots à l'aide de plusieurs électrodes rend le dessin complexe à réaliser. La température cryogénique est aussi nécessaire à cette application puisque la création du gaz d'électrons à deux dimensions ne se produit pas à température ambiante.

Un concept de QCA dont les cellules sont faites de molécules uniques ayant les propriétés voulues c'est-à-dire 4 îlots, 2 électrons excédentaires, couplage tunnel entre les îlots, a aussi été développé [[Lent, 2000](#)]. Les travaux dans ce vaste domaine de la chimie moléculaire ont été poursuivis par plusieurs dont [[Jin, 2006](#)]. Ici, une seule molécule sert de cellule élémentaire, ce qui pourrait permettre d'atteindre, à terme, les densités d'intégration ultimes.

Les molécules étudiées présentent deux ou quatre groupements partiellement chargés qui peuvent agir comme une cellule élémentaire QCA. Cependant cette approche en est encore au stade théorique. Des caractérisations électriques et des simulations ont été réalisées sur différentes molécules⁴ afin de démontrer leur potentiel pour la fabrication de QCA, mais aujourd'hui, aucun dispositif QCA fonctionnel n'a été démontré. Beaucoup de développement reste à faire pour intégrer cette technologie. Par exemple, l'encapsulation et la durabilité de ces dispositifs sont des défis considérables. Dans le même ordre d'idée, des comportements de type QCA ont aussi été observés dans le graphène pour certains motifs particuliers [Wang et Liu, 2011]. Cette démonstration théorique montre que deux coudes dans une bande de graphène permettent de confiner un électron excédentaire à l'un des deux coudes. Cette méthode semble intéressante, mais des défis considérables sont à prévoir. On peut penser à la façon de charger la bande avec un seul électron supplémentaire, le contrôle de la lithographie nécessaire pour obtenir le bon arrangement d'atomes dans les coudes ainsi que l'encapsulation. Ce dernier défi est l'un des plus grands pour l'électronique moléculaire, quel que soit le paradigme utilisé, puisque l'encapsulation ne doit pas détruire les propriétés des molécules fonctionnelles attachées à la surface de la puce. L'interconnexion de ces dispositifs ou réseaux de dispositifs (molécules) à des électrodes macroscopiques reste aussi un défi de taille.

Les QCA magnétiques, démontrés par [Cowburn et Welland, 2000], fonctionnent par la magnétisation de nanoaimants. Leur forme allongée crée une anisotropie qui favorise deux polarisations opposées selon le côté long de l'aimant. C'est l'interaction magnétique entre les aimants placés côte à côte qui permet de propager l'information. Des travaux considérables ont depuis été réalisés dans cette avenue [Imre *et al.*, 2006; Lambson *et al.*, 2011] qui constitue l'une des trois plus prometteuses pour les QCA. La terminologie utilisée pour ce type de QCA est maintenant la logique nano magnétique (*NanoMagnetic Logic* - NML). Leur avantage principal est que la magnétisation peut être stable à température ambiante. Cependant, comme le magnétisme est en jeu, il faut utiliser des courants pour faire changer l'état des entrées et pour gérer les signaux d'horloge. L'intégration de dispositifs permettant la génération de ces signaux d'horloge n'est pas simple et ajoute à la dissipation du système. Aussi, l'interface entre signaux magnétiques et électriques doit être faite afin de pouvoir utiliser la technologie NML en cohabitation avec les technologies standard CMOS [Liu *et al.*, 2013].

Le groupe de R. Wolkow [Haider *et al.*, 2009] a développé depuis le début des années 2000 une méthode aujourd'hui prometteuse pour la fabrication de QCA atomiques sur

⁴Voir [Qi *et al.*, 2003] ou [Arima *et al.*, 2012] par exemple.

silicium (*Atomic Silicon Quantum Dots* - ASiQDs). Leur méthode consiste à créer des liaisons pendantes sur une surface de silicium cristallin à l'aide d'un microscope à effet tunnel (STM). Cette surface est préparée en terminant les liaisons avec de l'hydrogène et à l'aide de la pointe du STM, un courant suffisamment intense permet d'éjecter l'un des atomes d'hydrogène, libérant la liaison pendante du silicium sous-jacent. L'ordre élevé du réseau cristallin de silicium permet de contrôler de façon robuste la position des liaisons pendantes, de sorte à créer une cellule QCA à 4 atomes artificiels (liaisons pendantes). De plus, l'ajustement adéquat du positionnement de ces atomes artificiels permet de les charger d'électrons supplémentaires, en l'occurrence ici, deux, et donc d'éliminer le besoin d'ajouter une électrode supplémentaire pour contrôler le chargement de la cellule. L'espacement plus grand entre les cellules par rapport à celui entre les atomes artificiels dans la cellule permet d'isoler chaque cellule de ces voisines et garantit que l'information se propage seulement par l'interaction électrostatique. Ces cellules, ayant la taille ultime, sont très robustes à température ambiante et même jusqu'à 200 °C [Anderson et Bhanja, 2014]. Depuis les débuts de cette méthode, plusieurs obstacles ont été contournés permettant aujourd'hui la fabrication de circuits à plus grande échelle tels que des additionneurs et ayant un niveau de défaut près des niveaux industriels. La compagnie fondée à partir du développement de ces techniques, Quantum Silicon Incorporated, montre que le concept est intéressant et prometteur. Il y a cependant beaucoup d'autres défis à relever avant la commercialisation de ce type de dispositif. Notamment, l'encapsulation demande de protéger la surface en y ajoutant un matériau isolant du monde extérieur. Elle ne doit cependant pas avoir d'impact sur la liaison pendante au cœur de la cellule. Aussi, la fabrication d'un additionneur (100 cellules) prend environ 1 minute à fabriquer, ce qui, à l'échelle de plusieurs milliards de cellules, prendrait un temps démesuré. Il y a donc du travail à faire dans cette avenue malgré les avantages considérables qu'elle semble apporter.

La dernière méthode de fabrication consiste à utiliser le blocage de Coulomb dans des îlots métalliques ou semiconducteurs définis directement par des géométries de matériaux configurées pour confiner les électrons et obtenir les états bistables nécessaires au fonctionnement d'un QCA. Cette méthode a déjà été utilisée par le groupe de [Lent *et al.*, 1993] pour en démontrer le fonctionnement. Cette méthode a aussi été utilisée fréquemment pour fabriquer des transistors monoélectroniques (SET). Différentes variantes de cette méthode existent mais peu d'entre elles sont utilisables à grande échelle et compatibles avec la technologie CMOS. Les plus intéressantes seront décrites dans la prochaine section.

Un dernier défi à l'implémentation de QCA est que les circuits réalisés devront pouvoir être caractérisés. Il faut donc trouver une façon de lire l'état des cellules de sortie du dispositif.

Puisque l'état est défini par la position des électrons dans la cellule, il faut être capable de détecter des charges uniques. Le SET s'avère être un détecteur de charge à sensibilité très élevée et suffisante pour les besoins des QCA. En effet, tel que démontré par [Lafarge *et al.*, 1991], il est possible de mesurer l'état de charge ou les changements d'état de charge dans un point quantique à l'aide d'un SET couplé capacitivement à celui-ci. Pour mesurer les variations de potentiel induites sur l'îlot de mesure, le SET de mesure est placé sur le flanc d'un pic de Coulomb (figure 2.7) pour que sa conductivité montre de grandes variations pour de petites variations de tension induites. L'utilisation de détecteurs de charge SET à la sortie de circuits QCA est donc tout indiquée. La section suivante détaille le fonctionnement et la fabrication de SET.

2.2 Transistors monoélectroniques

2.2.1 Principes et premières démonstrations

Des années 1950 à 1980, plusieurs travaux ont eu pour sujet les anomalies de conduction dans des films métalliques ultraminces [par exemple : Kulik et Shekhter, 1975]. Des études plus poussées ont permis d'attribuer ces effets au blocage de Coulomb. Dans sa revue de 1999, Likharev résume et explique ce phénomène. Dans un îlot conducteur initialement neutre, l'ajout d'un seul électron peut créer un champ électrique suffisamment grand pour bloquer l'apport d'un nouvel électron sur ce même îlot. Le champ électrique étant inversement proportionnel à la dimension de l'îlot, ce phénomène devient important pour des dimensions nanométriques.

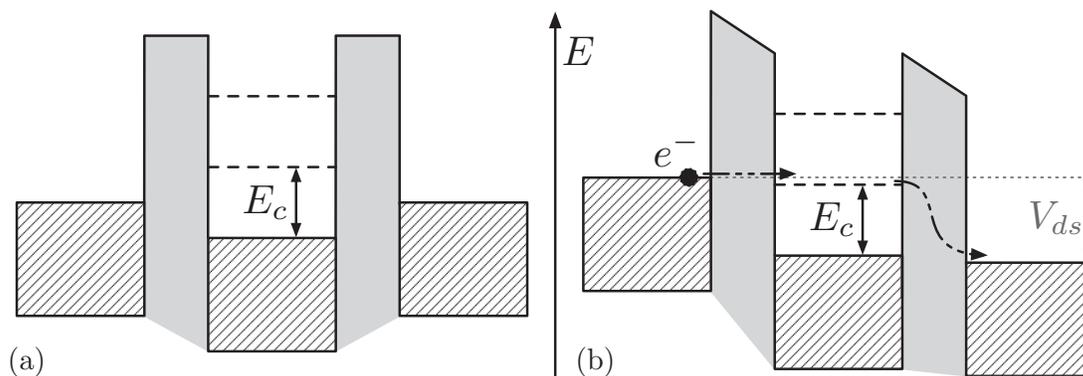
Plus précisément, on utilise l'énergie de charge de l'îlot conducteur comme mesure du blocage. L'énergie requise pour ajouter un seul électron à un îlot est donnée par l'équation 2.1

$$E_C = e^2/C_\Sigma \quad (2.1)$$

où C_Σ est la capacité totale de l'îlot et e la charge élémentaire. Cette énergie peut être vue comme un *gap*⁵ autour du niveau de Fermi de l'îlot. Dans le cas particulier d'un îlot relié à des électrodes (source et drain) par des jonctions tunnel symétriques, ce gap est centré sur le niveau de Fermi de l'îlot (figure 2.5a). L'énergie requise pour faire passer l'électron d'une électrode à l'îlot est par conséquent $E_C/2$. En augmentant la différence de potentiel V_{DS} entre les deux électrodes (source/drain), on modifie la structure de bandes jusqu'à ce

⁵Gamme d'énergies inaccessibles aux électrons dans le diagramme de bande au-dessus du niveau de Fermi.

que les électrons puissent passer par effet tunnel sur l'îlot (figure 2.5b) ce qui augmente l'énergie de l'îlot de e^2/C_Σ bloquant le transfert d'un autre électron jusqu'à ce que V_{DS} augmente de cette valeur ou bien que l'électron sorte de l'îlot par la deuxième jonction tunnel. Le flot d'électrons dans un transistor monoélectronique se produit donc électron par électron.



La caractéristique non linéaire obtenue pour un tel dispositif (figure 2.6) montre un courant nul jusqu'à ce que V_{DS} soit plus grand que l'énergie de charge de l'îlot E_C . En ajoutant une troisième électrode près de l'îlot (grille), il est possible de contrôler indépendamment la conductivité du transistor en modifiant le potentiel de l'îlot. À V_{DS} constant et inférieur à E_C , on peut donc faire passer l'îlot de l'état bloqué à l'état passant. La conductivité en fonction de la tension de la grille est donnée à la figure 2.7 pour deux sections de jonction différentes. La fréquence à laquelle apparaissent les pics de conduction correspond à la taille du *gap* de coulomb (E_C).

Pour observer le blocage de Coulomb, l'énergie de charge E_C doit être plus grande que l'énergie thermique, $k_B T$, du système. Dans la revue de [Likharev, 1999], le critère fixé est $E_C \geq x k_B T$ avec $x = 10$, quoique cette valeur peut être plus faible ou plus élevée dépendant de la technologie utilisée ou de l'application visée, le plus grand étant le mieux. L'énergie de charge dépendant seulement de la capacité de l'îlot et celle-ci doit être inférieure à l'attofarad pour observer le blocage de Coulomb à température ambiante. Des techniques de nanofabrication avancées sont donc nécessaires, mais n'étaient pas disponibles dans les années suivant les premières publications sur le blocage de Coulomb. En 1977, Dolan a développé une technique de photolithographie utilisant une déposition à angle de couches minces métalliques pour fabriquer des jonctions Josephson de taille inférieure au micron. Cette technique (dite « évaporation à angle ») a été reprise plus tard pour fabriquer les

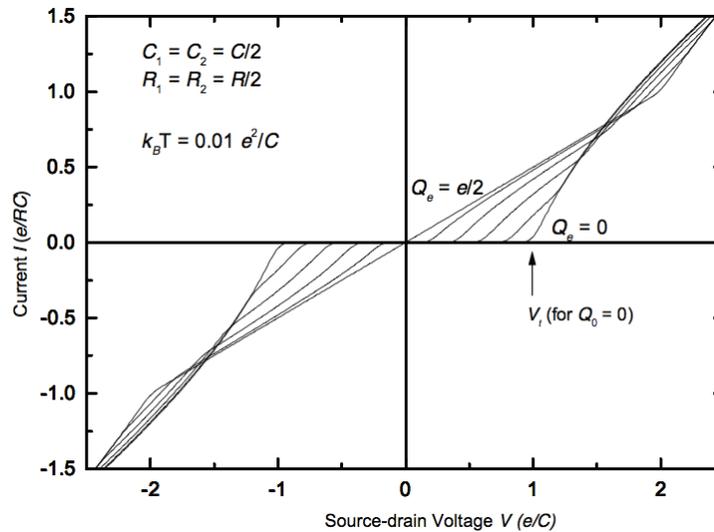


Figure 2.6 Caractéristique I-V d'une double jonction tunnel. V_t est la tension de seuil correspondant à l'énergie de charge E_C et Q_e correspond à la tension de grille appliquée. [Source : Likharev, 1999]

premiers SET en laboratoires [Fulton et Dolan, 1987] ainsi que la plupart des prototypes de QCA du groupe de l'université Notre-Dame [Orlov *et al.*, 2004].

Par cette technique (figure 2.8), un motif est fait dans une résine composée de deux couches. L'ouverture dans la couche inférieure est plus grande que pour la couche supérieure, ce qui crée un motif suspendu. On procède ensuite à la déposition d'un métal à un angle donné, ensuite à l'oxydation *in situ* puis à l'évaporation d'une deuxième couche métallique à un angle différent. Le recouvrement des deux couches forme la jonction métal-isolant-métal (MIM). On procède ensuite au soulèvement des résines et des couches de métal pour ne garder que le métal déposé dans les motifs. La précision de cette méthode ne permet

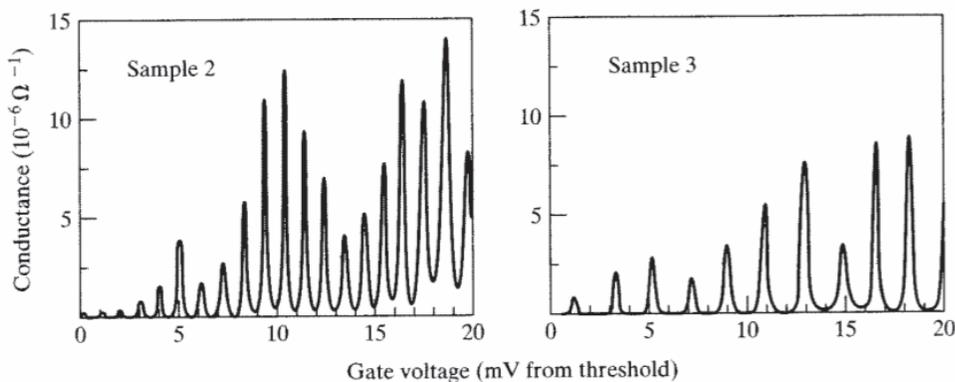


Figure 2.7 Conductivité de deux SET ayant des sections de jonction différentes (gauche > droite) en fonction de la tension de grille au-dessus de la tension de seuil [Source : Hanson, 2008].

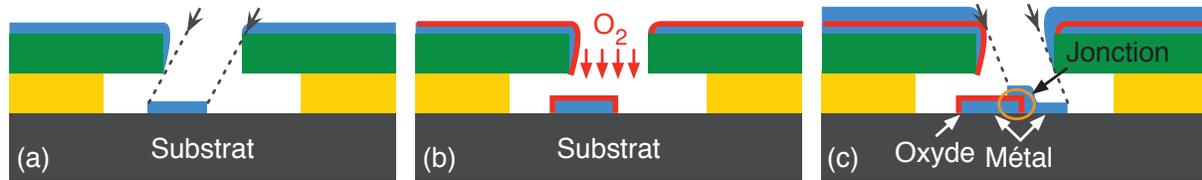


Figure 2.8 Technique d'évaporation à angle. a) Déposition de la première couche métallique, b) oxydation *in situ* et c) dépôt de la deuxième couche métallique. La jonction est encadrée en c).

cependant pas d'atteindre des capacités de jonction suffisamment faible pour observer le blocage de Coulomb à température ambiante.

Une autre technique plus récente consiste en l'utilisation d'une pointe de microscope à force atomique (AFM) en contact avec la surface d'un échantillon conducteur et d'y appliquer une tension en présence d'humidité [Matsumoto *et al.*, 1996]. Ceci permet d'oxyder localement le conducteur et de former des jonctions tunnel et des îlots à l'endroit désiré. Dans une technique similaire, la pointe d'AFM peut être utilisée pour déplacer des nanocristaux déposés sur la surface d'un échantillon vers l'espace entre deux électrodes de façon à les utiliser comme îlots. Cependant, comme mentionnée précédemment, l'utilisation d'AFM ou de STM est impraticable à grande échelle.

Dans les dernières années, une technique adaptée à partir d'un procédé CMOS standard a été développée. En oxydant un nanofil en silicium (SOI), des îlots sont créés aux endroits où le nanofil est plus étroit, ce qui crée des jonctions tunnel lorsque le tout est bien contrôlé. On ne peut cependant pas, en général, contrôler la position des jonctions tunnel et le nombre d'îlots créés. Il est donc difficile de fabriquer des QCA avec cette approche, mais des SET à plusieurs îlots peuvent être fabriqués avec cette méthode [Shin *et al.*, 2010].

Jusqu'à aujourd'hui, seules quelques démonstrations de SET fonctionnant à température ambiante ont été démontrées [voir par exemple les travaux de Roche *et al.*, 2012; Shirakashi *et al.*, 1997], même si plusieurs matériaux et procédés de fabrication ont été développés. Dans le cas des QCA électroniques, aucune démonstration de fonctionnement n'a été faite à température ambiante ou même à température plus grande que 4 K.

2.2.2 Travaux à l'Université de Sherbrooke

En 2007, à l'Université de Sherbrooke, Dubuc *et al.* ont développé un procédé de fabrication de SET qui permet d'atteindre des températures d'opération jusqu'à 433 K. La citation de ces travaux dans le rapport de 2007 de l'ITRS porte l'attention de l'industrie sur les

SET, qui ne considérait pas cette technologie du fait de leur température d'opération trop basse pour être utilisable à grande échelle et montre aussi l'importance de ces travaux.

Ce procédé dit *nanodamascène* est une combinaison d'électrolithographie (EBL) et de planarisation mécano chimique (CMP) qui permet la fabrication de jonctions tunnel ayant une capacité inférieure à l'attofarad. Une tranchée est d'abord réalisée par EBL dans une couche de SiO_2 . Perpendiculairement, on dépose ensuite une ligne métallique par soulèvement puis elle est oxydée et tout l'échantillon est finalement recouvert de métal. La dernière étape consiste à polir la surface jusqu'à ce qu'il ne reste que le métal dans la tranchée et qu'il soit assez mince. Le résultat est une tranchée composée de deux électrodes et un îlot métalliques isolés par deux jonctions tunnel faites de l'oxyde métallique. Avec un contrôle de la planarisation, il a été possible d'obtenir une épaisseur résiduelle du métal dans la tranchée d'environ 2 nm et donc des capacités d'une épaisseur de 2 nm aussi. Les capacités obtenues dans ces travaux sont de l'ordre du dixième d'attofarad ce qui permet d'observer le blocage de Coulomb à des températures supérieures à 400 K.

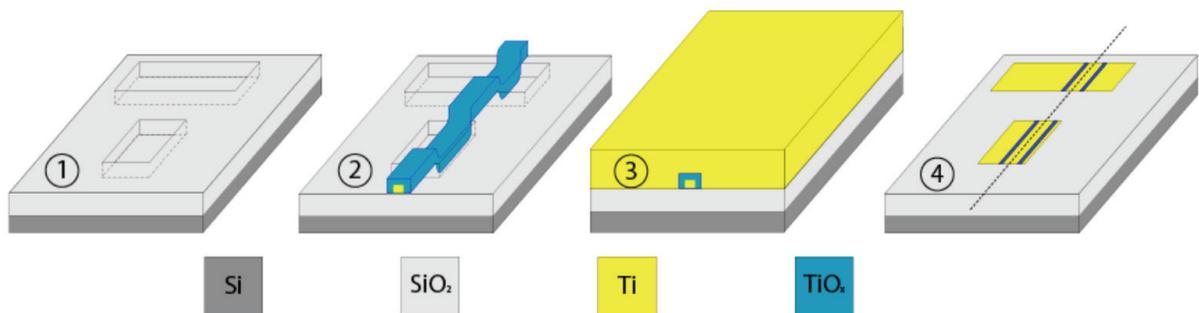


Figure 2.9 Précédé nanodamascène modifié pour intégrer une grille latérale individuelle. ① gravure de la tranchée et de la boîte de grille, ② dépôt de l'îlot métallique et oxydation, ③ métallisation globale et ④ planarisation mécano chimiques (CMP).

Les matériaux utilisés pour la démonstration sont le titane et son oxyde conjugué, le TiO_2 . Le Ti est un métal suffisamment dur pour bien résister aux rudes conditions de l'étape de planarisation mécano chimique. Aussi, le TiO_2 a une permittivité diélectrique de $\epsilon_r \sim 3,5$ lorsqu'obtenu à basse température. De plus, la hauteur de barrière pour l'interface Ti/TiO_2 est d'environ $\phi_0 \sim 0,3$ eV, ce qui diminue la résistance des jonctions tunnel et augmente le courant I_{ON} du dispositif. Cependant, ces SET utilisent le substrat comme grille, ce qui n'est utile que pour la preuve de concept. [Beaumont *et al.*, 2009], [Morissette, 2010] et plusieurs autres membres du même groupe de recherche ont apporté plusieurs modifications au procédé de façon à le rendre plus compatible avec les procédés industriels de microfabrication. La lithographie directe dans le SiO_2 a été remplacée par une

lithographie dans une résine organique électrosensible afin de réduire les temps d'écriture et une grille individuelle a été ajoutée au dispositif pour un adressage unique de chaque SET (procédé de la figure 2.9). Des travaux sont aussi en cours pour remplacer l'étape de soulèvement de l'îlot métallique par une étape de dépôt suivit d'une gravure plasma. Les travaux actuels du groupe visent aussi l'intégration 3D sur puces CMOS de façon à démontrer la compatibilité et l'applicabilité de ce procédé à plus grande échelle et pour servir de complément au CMOS, en particulier pour pallier au problème de la dissipation de chaleur.

CMP

La planarisation mécano chimique (CMP) est l'étape clé du procédé nanodamascène décrit précédemment et développé à l'Université de Sherbrooke. Ce procédé, permettant l'aplanissement de puces, a commencé à être utilisé dans l'industrie des semiconducteurs vers la fin des années 1980 [Oliver *et al.*, 2004]. Utilisé pour le polissage du verre et des tranches de silicium, le CMP a permis, au début, de faciliter la fabrication d'interconnexions multinationnelles. En effet, la superposition de plusieurs niveaux d'interconnexions sur une même puce crée une topographie qui cause des problèmes dans les étapes de fabrication subséquentes. L'uniformité de l'étalement de la résine et la profondeur de champ (résolution) de la lithographie sont affectées par une surface non uniforme et augmentent les difficultés de fabrication. La planarisation CMP a permis de planariser les puces entre les niveaux d'interconnexion afin d'améliorer les performances des procédés de fin de ligne (*Back End Of Line* - BEOL).

L'avènement subséquent d'outils et de procédés plus performants a permis d'utiliser la planarisation pour développer de nouvelles méthodes de fabrication pour la miniaturisation incessante des transistors. Parmi ces nouveaux procédés, le nanodamascène permet d'isoler des tranchées peu profondes et très fines, ouvrant ainsi la porte à la fabrication de transistors monoélectroniques (SET) tels que décrits plus haut.

Le procédé schématisé à la figure 2.10a est réalisé en fixant l'échantillon à une tête de planarisation, dans l'encoche prévue à la taille de l'échantillon. Cette tête, à l'envers, est ensuite posée avec une pression contrôlée sur un tapis de planarisation d'une dureté choisie pour le matériau principal à polir. Le plateau et la tête sont mis en rotation et une solution de planarisation (*slurry*) contenant des nanoparticules est injectée à un débit contrôlé sur le plateau. L'action chimique de la solution combinée à l'action mécanique de la rotation des composantes et des nanoparticules permet de polir l'échantillon. Le fonctionnement de la planarisation CMP est schématisé à la figure 2.10a. L'utilité principale de cette

étape est de planariser la surface de l'échantillon pour enlever les irrégularités. Dans le cas du procédé nanodamascène, cela sert aussi à déconnecter les différentes électrodes des dispositifs.

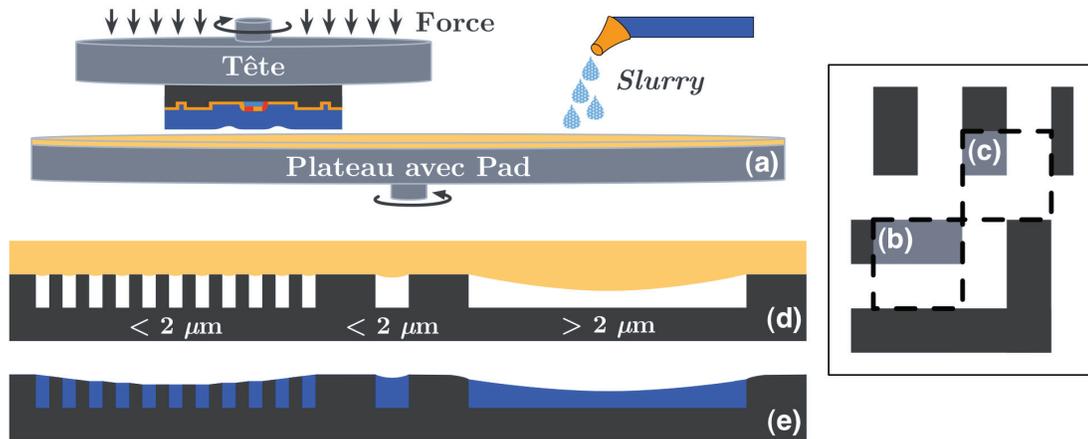


Figure 2.10 (a) Schématisation du procédé CMP. Calcul de la densité de motifs par une fenêtre de densité (pointillé) et donnant 50 % en (b) et 25 % en (c). (d-e) Impact de la dureté de la surface de polissage sur la planarisation de motifs de densité et de taille différentes.

La difficulté du CMP est qu'en général, plusieurs matériaux différents sont polis en même temps. Ceci nécessite de contrôler non seulement la vitesse de planarisation, mais aussi la sélectivité soit le rapport des vitesses des différents matériaux. [Guilmain *et al.*, 2013] discutent des paramètres importants pour avoir un bon contrôle de la planarisation. Le dépôt de titane, par sa conformabilité, sa densité et sa pureté, influence sa vitesse de planarisation et surtout celle près des reliefs importants. La solution de planarisation utilisée influence aussi la vitesse à laquelle les matériaux se polissent et donc la sélectivité. La dureté de la surface de polissage peut créer des inégalités de planarisation entre des motifs de densité différente comme le montre les schémas de la figure 2.10d et 2.10e. Le dessin des motifs doit donc être pris en compte pour obtenir une bonne planarité de l'échantillon après la planarisation. Trois effets jouent un rôle dans l'uniformité locale de la planarisation : l'érosion, les effets de coins et l'abrasion. L'érosion est le creusage de structures en réseau lorsque le matériau interstitiel a un taux de polissage plus grand. La pression sur les piliers de cette structure est à ce moment plus grande et donc le polissage est accéléré (partie de gauche de la figure 2.10e. L'effet de coin est, quant à lui, directement relié à la différence de pression entre les deux côtés d'une interface entre deux matériaux à vitesse de polissage différente. Cet effet cause l'arrondissement des coins des structures les plus solides comme le montre la partie droite de la figure 2.10e. L'effet de coin peut aussi s'ajouter à l'érosion pour amplifier la différence de polissage dans les structures en réseau.

L'abrasion est le creusage de structures de grande taille (typiquement $> 5 \mu\text{m}$) lorsque le matériau dans la structure se polit plus rapidement (partie de droite de la figure 2.10e). On cherche donc à réaliser des dessins de masques contenant une densité uniforme de structures suffisamment petites pour obtenir une uniformité du polissage adéquate [Oliver *et al.*, 2004].

2.3 Démonstrations expérimentales de QCA

Comme il a été mentionné plus haut, les SET sont nécessaires à la lecture de l'état d'un QCA. Les travaux réalisés à l'Université de Sherbrooke sont donc prometteurs en terme d'intégration avec des QCA. Il est alors intéressant de voir comment ce procédé peut être adapté pour fabriquer les jonctions tunnel requises pour la réalisation d'un circuit QCA. Avant de détailler les démonstrations faites jusqu'à maintenant, il est important de préciser une chose. La cellule unité décrite au début du chapitre est constituée de 4 îlots chargés de deux électrons. En pratique, les propriétés propres au QCA, c'est-à-dire la bistabilité d'une cellule et l'interaction d'une cellule avec ses voisines, peuvent aussi être obtenues avec une demi-cellule, c'est-à-dire deux îlots et un électron excédentaire. Une demi-cellule est plus simple à fabriquer et possède les mêmes propriétés qu'une cellule complète à l'exception de l'inversion de l'information à toutes les demi-cellules.

Dans la littérature, la demi-cellule est d'ailleurs le point de départ des démonstrations expérimentales. [Amlani *et al.*, 1997]⁶ ont déterminé le diagramme de charge d'un dispositif à deux îlots de SET en série (double îlot - DI) par des mesures de sa conductance en fonction des tensions des grilles individuelles. Ils ont aussi réalisé cette mesure en utilisant un SET indépendant couplé à chaque îlot. Ces deux mesures ont donné une symétrie hexagonale comme celle montrée sur la figure 2.11. Les coordonnées (n_1, n_2) représentent la charge moyenne sur chacun des deux îlots. Le point majeur de ce travail est qu'il est possible de contrôler l'état de charge des îlots en modifiant la tension des grilles du DI, notamment en les variant dans la direction III de la figure 2.11 (pour passer de (0,1) à (1,0)) et aussi de lire cet état par des SET de sortie. Il est donc possible de fabriquer des cellules QCA en n'utilisant que des îlots métalliques et des jonctions tunnel comme pour un SET, pour l'entrée, le cœur et la sortie.

[Bernstein *et al.*, 1999] ont ensuite refait le même type de mesures sur un dispositif similaire contenant un DI supplémentaire couplé capacitivement au premier. Ils ont montré que lorsque les tensions de grille du deuxième DI sont ajustées pour le placer près du point de

⁶Une caractérisation similaire a été faite avant par [Blick *et al.*, 1996] dans le système AlGaAs/GaAs.

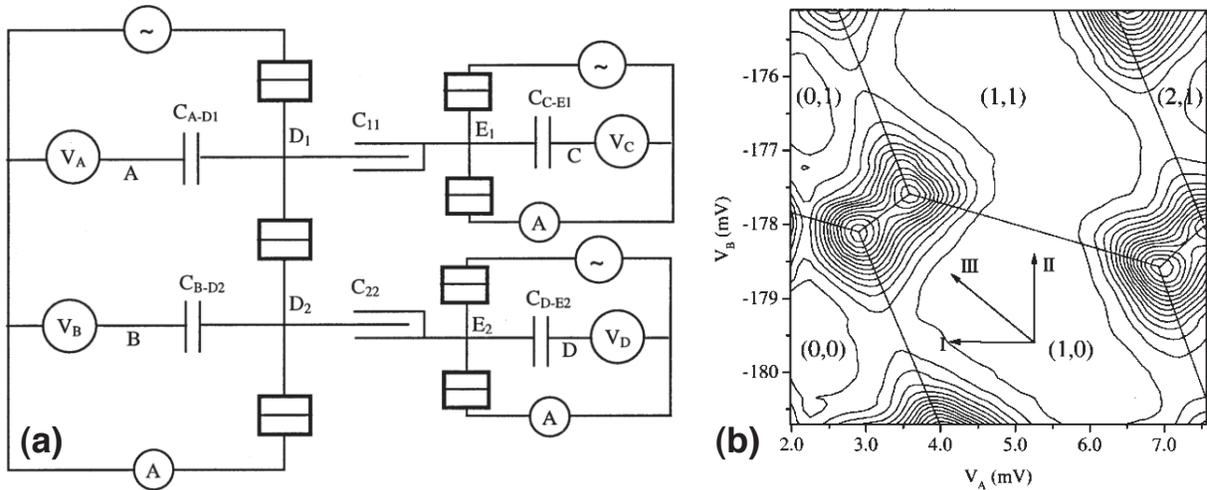


Figure 2.11 (a) Circuit équivalent du double îlot (demi-cellule QCA) étudié par [Amlani *et al.*](#). (b) Conductance du double îlot en fonction des tensions V_A et V_B des deux grilles correspondantes. (n_1, n_2) donne la charge sur les îlots correspondants (resp. D_1 et D_2). [Source : [Amlani *et al.*, 1997](#)]

scelle sur la direction III de la figure 2.11, ce DI réagit au changement d'état de charge du DI d'entrée. Ceci confirme donc qu'une cellule QCA telle qu'imaginée par [Lent *et al.*, 1993](#) peut être fabriquée. Ces mesures ont aussi été réalisées par [Amlani *et al.*, 2000](#), mais sans apport de courant au DI. Ce changement modifie les états de charge accessibles puisque le DI est initialement neutre et n'est pas chargé avec un électron. On prend plutôt un électron d'un îlot et on le déplace dans le deuxième îlot à l'aide des grilles de contrôle. Les états « $0 \rightarrow (0,1)$ » et « $1 \rightarrow (1,0)$ » sont donc remplacés par les états « $0 \rightarrow (-1,1)$ » et « $1 \rightarrow (1,-1)$ ».

2.3.1 Contrôle par horloge

En 1997, [Lent et Tougaw](#) ont publié un travail théorique considérable sur l'utilisation à plus grande échelle de QCA. Ils ont entre autres discuté de la problématique des états métastables possibles dans des circuits plus complexes, c'est-à-dire qu'une fois que l'état d'entrée est appliqué, le système relaxe vers son état fondamental et peut passer plus ou moins de temps dans des états intermédiaires. Or, il est possible que certains de ces états aient des temps de vie très longs (par rapport à la vitesse de calcul de la cellule), ce qui peut produire de mauvais résultats en sortie.

Ils proposent donc de développer une méthode pour contrôler graduellement le flux d'information, dans un QCA comprenant un grand nombre de cellules (complexité élevée), par une horloge qui activerait différents étages internes en séquence. Un premier DI com-

prenant ce principe a été fabriqué par [Orlov *et al.*, 2000] (figure 2.12a). Le principe utilisé repose sur un principe d'îlots isolés des contacts de polarisation comme suggéré par [Am-lani *et al.*, 2000] et sur l'ajout d'un troisième îlot entre les deux premiers. Cet îlot étant contrôlé par la grille centrale, il peut permettre ou bloquer tout transfert d'électron dans la cellule dépendant de la tension de la grille (on utilisera le terme horloge par la suite, comme pour une bascule JK). La figure 2.12b montre schématiquement l'arrangement des niveaux d'énergie dans les trois îlots et illustre les différents états possibles pour la cellule, soit nul, actif ou bloqué.

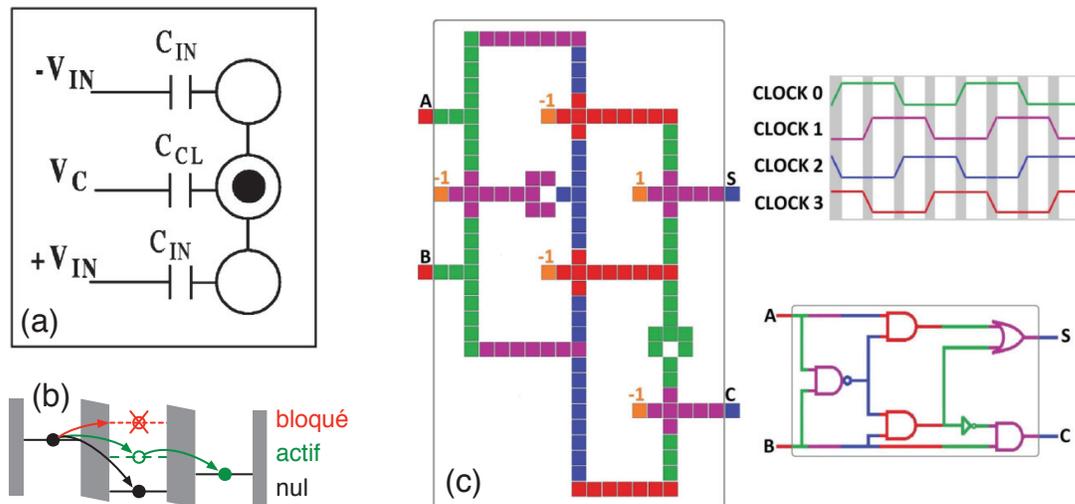


Figure 2.12 (a) Circuit d'un double îlot avec îlot horloge de contrôle. [Source : Orlov *et al.*, 2000] (b) Fonctionnement schématisé de la demi-cellule avec l'îlot horloge. (c) Additionneur partiel avec horloge de type Landauer. Les couleurs représentent les différentes phases de l'horloge. Il faut donc 2 cycles complets pour passer l'information de l'entrée à la sortie. [Source : Ercan et Anderson, 2011]

Depuis ces travaux, plusieurs publications ont traité de la modélisation de cellule unique ainsi que l'interaction intercellule. Les travaux récents de [Ercan et Anderson, 2011] montrent un exemple de circuit complexe avec les différentes phases de l'horloge et à quelles cellules elles s'appliquent. La figure 2.12c représente un demi-additionneur⁷ avec les différentes phases de l'horloge nécessaire à son fonctionnement, soit neutre (bas), active (montant et descendant) et bloquée (haut). La phase neutre permet de découpler la section précédente de la section suivante du circuit, la phase bloquée permet de fixer les valeurs des cellules afin de bien polariser la section suivante et la phase active permet le changement d'état des cellules. Cette dernière est la phase où le calcul se fait.

⁷ Un demi-additionneur est un circuit ne prenant pas de retenue en entrée (2 bits), par opposition à l'additionneur complet qui prend 3 bits en entrée.

Le problème qui subsiste jusqu'à maintenant est que la plupart de ces démonstrations ont été réalisées en utilisant la méthode de [Dolan, 1977] et donc à des températures inférieures à 4 K. On peut alors se demander si l'utilisation du procédé nanodamascène permettrait de fabriquer une cellule QCA fonctionnant à plus haute température.

2.3.2 Détection de l'état de sortie

Afin de déterminer l'état de la cellule de sortie du circuit QCA, il est nécessaire de détecter sa configuration de charge. La première publication liée à la détection de charges à sensibilité suffisante pour détecter un seul électron est la méthode dite *quantum point contact* (QPC). Les publications de deux groupes coïncident au début de 1988 [voir : van Wees *et al.*, 1988; Wharam *et al.*, 1988] et décrivent la formation de jonctions étroites dans un gaz d'électron à deux dimensions dans la structure épitaxiale GaAs/AlGaAs.

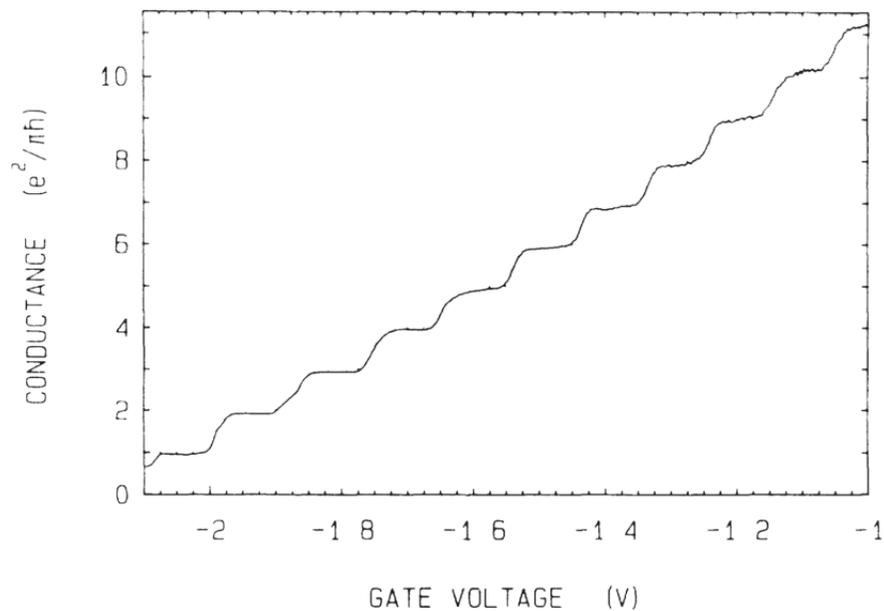


Figure 2.13 Conductance d'un QPC en unités de $e^2/\pi\hbar$ [van Wees *et al.*, 1988].

Les constriction décrites par ces deux groupes montrent une conductance dépendant fortement de leur largeur. De plus, la conductance varie par paliers dont l'écart est $e^2/\pi\hbar$ (figure 2.13). La sensibilité de ces dispositifs est suffisante pour détecter la présence de charges uniques puisque la présence d'un électron près de la constriction peut en changer électrostatiquement la largeur [Field *et al.*, 1993]. Ceci implique une différence détectable dans la conductance du QPC, qui peut ensuite être interprétée par la présence de la charge ou non. Cette méthode de lecture de charge est très utilisée dans le domaine des points quantiques réalisés à l'aide de GaAs/AlGaAs. L'application d'un potentiel négatif sur deux

électrodes de surface en proximité permet d'appauvrir le gaz d'électrons et éventuellement de le fermer suffisamment pour observer la quantification de la conductance.

Ce type de dispositif peut être réalisé dans d'autres systèmes semi-conducteurs comme le silicium. Une architecture créant un gaz d'électron comme un transistor à effet de champ peut être converti en QPC par l'ajout d'électrodes supplémentaires permettant d'appauvrir le canal pour en diminuer la largeur. Le concept de QPC est cependant difficile à intégrer dans un système de matériaux isolants et métalliques comme dans le cas du procédé nanodamascène. Les SET métalliques sont de meilleurs candidats pour la détection de charge dans ce contexte.

[Likharev, 1987] a été le premier à décrire en détail le fonctionnement d'un électromètre SET.

[Lafarge *et al.*, 1991] ont ensuite fabriqué une « boîte à un électron » adjacente à un SET en utilisant la méthode développée par [Dolan, 1977] et démontré la détection de charge unique dans ce système. La boîte à un électron est dans ce cas un îlot métallique en blocage de Coulomb connecté à une électrode par une jonction tunnel. La variation du potentiel d'une grille couplée capacitivement permet de varier le potentiel de l'îlot jusqu'à permettre le transfert par effet tunnel d'un électron sur cet îlot. La charge sur l'îlot est mesurée à l'aide d'un SET dont l'îlot est couplé lui aussi capacitivement à l'îlot de la boîte à un électron. [Lafarge *et al.*, 1991; Likharev, 1987] décrivent comment il est possible d'observer des oscillations correspondant à l'ajout de charges uniques dans la boîte adjacente. En polarisant le SET dans un état où son gain est grand, c'est-à-dire au milieu de la pente montante ou descendante d'un de ses pics de conduction, la transconductance du SET est maximale et un petit changement dans la charge d'un îlot adjacent cause une grande variation du potentiel de l'îlot et donc du courant dans le SET. La figure 2.14 montre le circuit équivalent qu'ils ont utilisé et le résultat obtenu pour la charge sur les jonctions tunnel. Les oscillations en dents de scie sont données pour l'état normal et supraconducteur. Les sauts dans la trace correspondent à la modification du nombre de charges dans l'îlot d'un électron.

La détection de ces signaux n'est pas simple puisque les différences de courant restent faibles et à température finie, les systèmes peuvent générer beaucoup de bruit. Plusieurs expérimentations et démonstrations réalisées par le groupe de l'Université Notre-Dame sur l'introduction et la preuve de concept du principe même des QCA ont été réalisées. Leur technique de mesure consiste généralement à coupler capacitivement des SET aux îlots métalliques aussi fabriqués par la méthode de [Dolan, 1977]. Leurs mesures de la

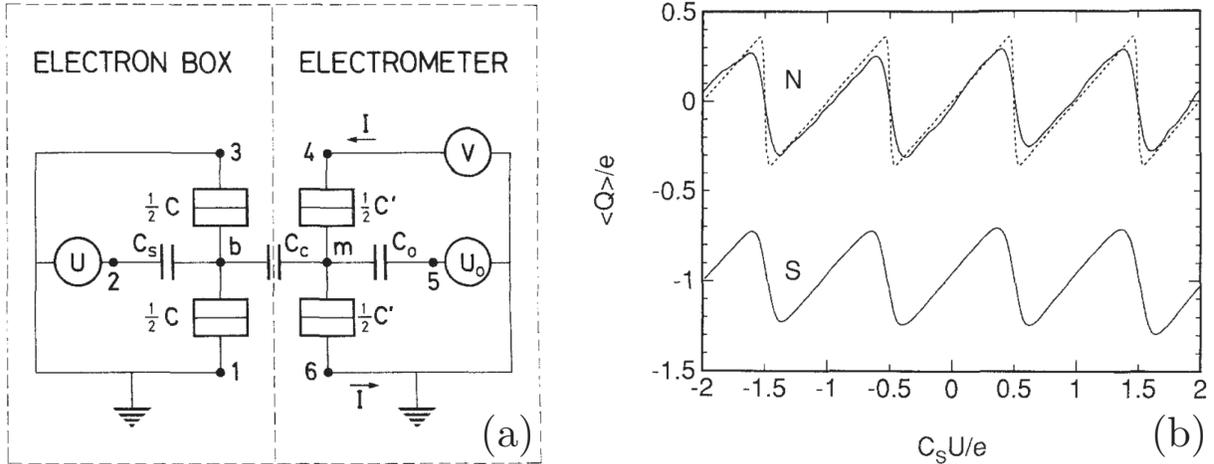


Figure 2.14 (a) Circuit équivalent du dispositif utilisé par [Lafarge *et al.*, 1991] pour détecter le nombre d'électrons dans une boîte à un électron. (b) Charge sur une jonction tunnel de la boîte en fonction de la tension de grille appliquée.

conductance des SET en fonction de la position des électrons dans les îlots adjacents sont généralement effectuées à l'aide de techniques de détection synchrone qui permettent un très grand rapport signal sur bruit. Cette technique permet, par la modulation du signal d'entrée, l'extraction de la réponse à la même fréquence et le rejet de tous autres signaux à des fréquences autres que la modulation de référence. Ceci permet d'effectuer des mesures à faible bruit, mais ne peut pas être implémenté à grande échelle dans un circuit intégré de par la complexité de cette mesure.

Un autre effet noté dans l'article de [Lafarge *et al.*, 1991] et mentionné aussi par [Orlov *et al.*, 2004] est le couplage parasite entre les signaux d'entrée des dispositifs et les SET de lecture. Ce couplage n'est pas généralement pris en compte directement dans les modèles simplifiés. Aussi, le principal effet de ce couplage est l'équivalent d'une grille supplémentaire qui varie en fonction des entrées. Ceci introduit une légère déviation dans la mesure des signaux, car cette tension supplémentaire modifie le point d'opération du SET de lecture. Les deux publications mentionnent que cet effet peut être corrigé par la superposition d'une petite tension proportionnelle aux entrées sur les grilles des SET de lecture. Le facteur de proportionnalité est relié à la capacité entre l'îlot concerné et les électrodes d'entrée, tel que décrit par [Brenner, 2004] et donné par $\beta = -C_i/C_G$ où C_i est la capacité couplant le signal de l'entrée i au set ayant une capacité C_G . La tension appliquée sur la grille du SET est donc :

$$V_G(V_i) = \beta V_i + V_{G0} = -\frac{C_i}{C_G} V_i + V_{G0} \quad (3.1)$$

avec V_{G0} , la tension d'opération du SET. Cette compensation, faite pour chacune des entrées variées pendant la mesure, s'additionne pour garder le SET dans les conditions d'opération optimales définies par V_{G0} (sans signaux d'entrée). L'inverse de la matrice de capacité du circuit complet incluant capacités parasites permet de trouver la contribution de chacune des grilles.

Détection de charge différentielle

Avec un SET comme détecteur de charge, il reste tout de même que la mesure doit permettre de discerner l'état de la cellule par la position de la charge dans la dernière cellule. Ceci peut, de prime abord, être réalisé en positionnant un SET près d'un des îlots de la cellule de sortie. Cependant, dans ce cas-ci, la cellule ou demi-cellule de sortie comporte trois îlots puisqu'elle contient un îlot pour l'opération de l'horloge. Il pourrait alors être difficile de différencier le changement de position de l'électron vers l'îlot central ou vers l'un des deux autres îlots. Aussi, le SET étant très sensible aux charges du QCA, il l'est aussi nécessairement aux charges parasites et aux défauts chargés de son environnement. Ces deux effets peuvent diminuer significativement la fiabilité de la lecture de l'état de la cellule. Il est donc nécessaire d'utiliser une méthode plus robuste qui diminuerait les détections non désirées.

Deux méthodes permettant de satisfaire à ces critères de détection ont déjà été présentées [Brenner, 2004; Brenner *et al.*, 2003]. La première, plus simple et plus directe est l'utilisation de deux SET placés de façon symétrique par rapport à la cellule à lire. Dans l'état neutre de la cellule, les deux SET sont positionnés dans un état de transconductance maximale, c'est-à-dire dans la pente d'un pic de blocage de Coulomb. Lors de l'activation de la cellule, l'électron passera de l'îlot central (état neutre) à l'un des deux îlots latéraux (état actif). En prenant soin de compenser les effets des grilles de contrôle du QCA sur les SET, l'un d'eux verra une augmentation de la charge à proximité de son îlot et l'autre une diminution. La variation opposée de la conductance des deux SET confirme donc qu'un électron s'est bien déplacé au sein de la demi-cellule.

La deuxième méthode développée [Buehler *et al.*, 2004] pousse le traitement un peu plus loin en proposant une méthode permettant la comparaison directe des mesures réalisées par les deux SET individuellement. Cette méthode multiplie la dérivée de la conductance des deux SET pour arriver à une fonction rejetant les états parasites et amplifiant les états cohérents entre les deux dispositifs. La figure 2.15 montre la réalisation expérimentale à haute fréquence (RF) de ces principes. Deux SET servant de détecteur de charge sont placés à proximité de deux îlots couplés par une seule jonction tunnel agissant comme

une demi-cellule QCA sans horloge. Une grille permet de changer l'état de la cellule en forçant le déplacement d'un électron d'un îlot à l'autre. Les courbes du haut de la figure montrent les signaux de SET mesurés en fonction du temps et le signal d'horloge appliqué à la grille de contrôle des îlots QCA. Les SET répondent indépendamment à ce signal en détectant un changement dans la charge des îlots. Dans la région centrale, on peut voir que des événements parasites (défauts à deux niveaux probablement) sont détectés seulement par le SET 2. La méthode de corrélation croisée est donc appliquée en prenant la dérivée des deux signaux des SET (bas de la figure) et en les multipliant ensemble. Les signaux parasites détectés par le SET 2 sont donc éliminés puisque multipliés par une dérivée pratiquement nulle du SET 1 et donc le signal de corrélation est non nul seulement lorsque les deux SET détectent un événement.

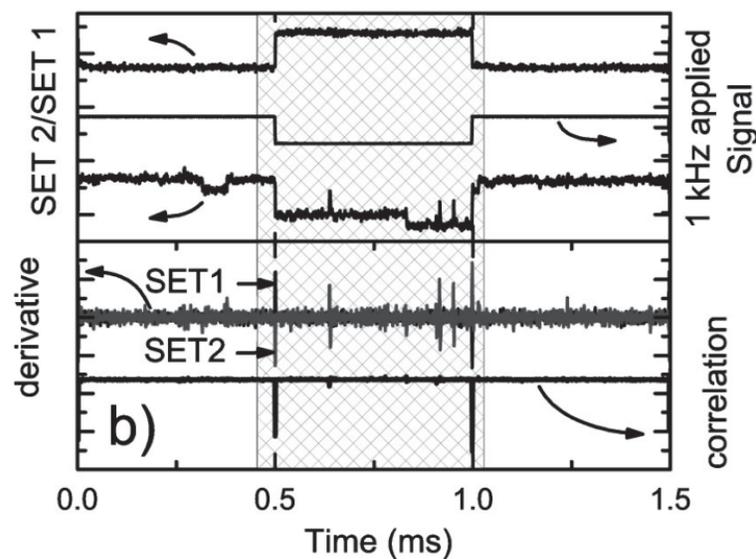


Figure 2.15 (Haut) Mesure simultanée du courant de deux SET (RF) détecteurs de charge pour un double îlot. L'onde carrée induit un déplacement des électrons dans le double îlot. (Bas) Dérivée des signaux des deux SET avec la multiplication des dérivées pour donner la corrélation croisée rejetant les signaux parasites. Tirée de [Buehler *et al.*, 2004].

Conversion des signaux de SET vers CMOS

Comme on vient de le voir, la détection de charge réalisée à l'aide de SET est relativement simple à réaliser. Avec les bons équipements et techniques, on parvient à détecter les faibles signaux générés. Cependant, pour intégrer ces technologies de façon hybride avec des circuits CMOS gérant les périphériques et la communication entre ordinateurs, il faut amplifier ces signaux directement et ensuite être capable de les convertir en niveaux logiques CMOS.

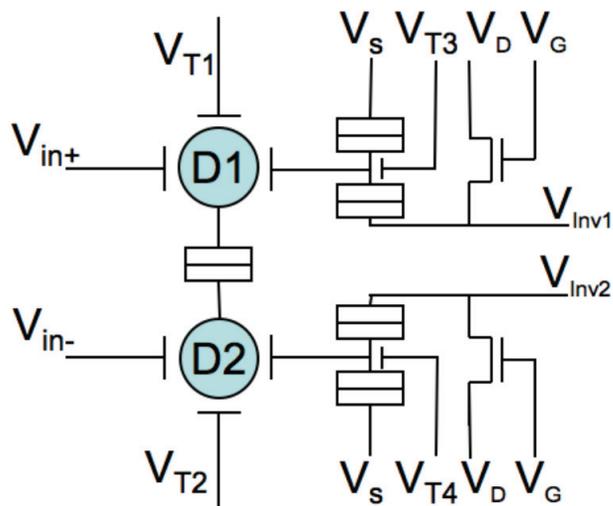


Figure 2.16 Circuit de transfert des signaux QCA vers les niveaux CMOS. Les V_{T_j} sont des grilles définissant les points d'opération du double îlot (T1 et T2) et des SET de lecture (T3 et T4). [Source : [Prager et al., 2009](#)]

La première démonstration (partielle) à cet effet a été réalisée par [[Prager et al., 2009](#)]. L'objectif de ces travaux est d'intégrer sur une même puce toute la circuiterie permettant l'entrée de niveaux logiques CMOS dans une cellule QCA, la lecture de l'état de la cellule par l'utilisation de SET et la conversion subséquente des signaux SET en niveaux logiques CMOS. Dans le cas particulier de cette étude, les SET et QCA sont fabriqués par la méthode de [[Dolan, 1977](#)] et ne fonctionnent donc qu'à température cryogénique. Le travail présenté en 2009 décrit le circuit complet utilisé (figure 2.16) et détaille principalement la fabrication et la validation d'un comparateur CMOS fonctionnant à température cryogénique.

Le circuit utilisé, mais non encore démontré correspond à celui de la figure 2.16. Les signaux d'entrée sont amenés à des niveaux adéquats pour le QCA par des diviseurs de tension capacitifs ($\rightarrow V_{in+}$ et V_{in-}). Cela permet le changement ou non de l'état de la demi-cellule QCA qui est lu ensuite par les deux SET couplés aux îlots D1 et D2. Les tensions V_{T_j} sont des tensions qui permettent d'ajuster les points d'opération des dispositifs monoélectroniques pour obtenir le fonctionnement voulu. Afin d'obtenir la tension V_{DS} requise pour le bon fonctionnement des SET, ils sont placés en série avec un transistor MOS utilisé comme diviseur de potentiel. La tension de sortie de ce diviseur sera ici proportionnelle au courant du SET qui dépend à son tour du nombre de charges sur l'îlot correspondant du QCA. Ces deux niveaux de tension V_{inv1} et V_{inv2} sont ensuite amenés à un comparateur CMOS. Ce comparateur est un amplificateur différentiel à plusieurs étages permettant de mesurer des différences de tension en entrée allant jusqu'à 5 mV et

de générer les niveaux logiques CMOS, c'est-à-dire les niveaux des alimentations (0 V et V_{dd}) selon que l'une des entrées est plus grande ou plus petite que l'autre.

Il est évident que la technologie utilisée (CMOS 2 μm) pour cette démonstration n'est pas récente ni adéquate pour l'intégration à grande échelle, mais sert plutôt de démonstration de sa faisabilité. Des circuits en technologies plus récentes (90 nm, [Baishnab et Talukdar, 2010]) ont été démontrés avec des résultats pouvant aller jusqu'à une précision sur l'entrée différentielle allant jusqu'à 0,2 mV DC. Il semble donc possible de bien lire l'état des SET de sortie du QCA à l'aide de comparateurs CMOS.

2.3.3 Modélisation et simulation

Tel que mentionné par [Averin et Likharev, 1991], pour développer et faire la conception de dispositifs monoélectroniques uniques ou à plus grande échelle, le développement de logiciels et d'algorithmes de simulations sera nécessaire. Il y a présentement plusieurs approches pour simuler ce genre de dispositif, la plupart étant basées sur la théorie « orthodoxe » de [Likharev, 1987, 1999]. La théorie utilise la règle d'or de Fermi pour déterminer le taux de passage (Γ_j^\pm) d'électrons par effet tunnel au travers d'une jonction en fonction de la différence d'énergie engendrée par ce transfert de charge (ΔF_j^\pm), la température (T) et la résistance tunnel de la jonction (R_j) :

$$\Gamma_j^\pm(R_j, \Delta F_j^\pm) = \frac{1}{R_j e} \left[\frac{-\Delta F_j^\pm}{1 - \exp(\beta \Delta F_j^\pm)} \right], \quad (3.2)$$

où e est la charge électronique et $\beta = 1/k_B T$ avec k_B , la constante de Boltzmann. Connaissant ces taux de transfert, on peut utiliser l'équation pilote matricielle [Cordan et Goltzené, 1999] :

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \Gamma \mathbf{P}, \quad (3.3)$$

où Γ est la matrice des taux de transfert et \mathbf{P} le vecteur de probabilité. Dans le cas particulier de l'équilibre thermodynamique, la variation de la probabilité dans le temps est nulle et il est donc possible de résoudre l'équation pour trouver la probabilité de chacun des états du système. Pour le cas particulier d'un SET, on peut calculer le courant du transistor par l'équation suivante :

$$I = e \sum_N P(N) [\Gamma_1^+(N) - \Gamma_1^-(N)] \quad (3.4)$$

Même si la plupart des simulateurs développés jusqu'à maintenant sont basés sur la solution de ces équations matricielles, il y a tout de même plusieurs approches pour les résoudre numériquement. La première est une solution par la méthode Monte-Carlo, où la probabilité de chacun des événements tunnel possible est calculée et ensuite l'algorithme choisit une transition au hasard mais pondérée par sa probabilité et fait avancer le système du temps requis pour que la transition se produise. Cette opération est itérée plusieurs fois jusqu'à ce qu'une précision suffisante soit atteinte. Cette méthode représente bien la nature aléatoire des transitions électroniques d'un tel circuit. Une autre méthode est la solution directe des équations maîtresses à l'aide de l'équation pilote, telle que montrée précédemment (équation 3.3). Contrairement à la méthode Monte-Carlo, elle calcule directement l'état le plus stable sans passer par le régime transitoire. Il faut cependant connaître tous les états significatifs du circuit afin de calculer leur énergie et les probabilités de transitions. Le grand avantage de la méthode Monte-Carlo est qu'aucune connaissance des états significatifs n'est requise pour procéder à la simulation puisque la nature statistique de la méthode favorisera les transitions les plus probables. De même, l'inconvénient principal de la méthode de solution par les équations maîtresses est la nécessité d'inclure beaucoup plus d'états que nécessaire puisqu'il n'y a aucun moyen a priori de connaître les états significatifs que le système occupera au cours de la simulation [Wasshuber *et al.*, 1997]. Le résultat est qu'en général, la méthode Monte-Carlo demande moins de temps de simulation et sa précision peut être améliorée par l'augmentation du nombre d'événements à simuler.

Plusieurs simulateurs utilisent l'une ou l'autre ou une combinaison des deux méthodes. On peut mentionner en particulier les travaux menant aux modèles MIB de [Mahapatra *et al.*, 2002] et SENECA de [Fonseca *et al.*, 1995], basés sur la solution par les équations maîtresses. D'autres travaux portant sur la méthode Monte-Carlo ont mené aux algorithmes de MOSES [Chen, 1996], SECS [Zardalidis et Karafyllidis, 2008] et SIMON [Wasshuber *et al.*, 1997] par exemple. SIMON utilise une combinaison des deux méthodes pour pallier aux problèmes des transitions plus rares comme le *cotunneling* qui sont mieux gérés par les équations maîtresses. Il n'est cependant pas nécessaire de tenir compte de ces événements rares puisqu'ils ne contribuent pas significativement à la solution dans la plupart des cas [Averin et Likharev, 1991; Kulik et Shekhter, 1975].

Une autre méthode utilise un algorithme dit génétique permettant de trouver très rapidement l'état le plus stable d'un système [Karafyllidis, 1998]. Cette méthode, intéressante pour des applications futures à plus grande échelle, fonctionne par l'évolution artificielle d'un ensemble restreint d'états du système. La probabilité de chaque état est la fonction de « survie » qui permet de déterminer sa probabilité de survie jusqu'à la prochaine généra-

tion. Elle ne permet cependant pas de déterminer le comportement transitoire (en fonction du temps) du système, mais il y a probablement moyen de combiner cette méthode pour simuler des circuits plus complexes et obtenir plus d'informations sur celui-ci.

Une approche plus avancée en terme d'intégration est l'utilisation de modèle complet spécifique à un dispositif de type SPICE ou autre. Ces modèles cherchent à représenter le comportement du dispositif comme une boîte noire qu'on connecte à d'autres boîtes pour former un circuit complexe. Cette méthode (aussi appelée *macromodeling*) ne fonctionne que sur des dispositifs particuliers et ne s'adapte pas à des circuits quelconques. En général, les modèles s'arrêtent à la modélisation de transistors monoélectroniques. On peut mentionner ici les modèles réalisés par [Yu et Hwang, 1999], [Uchida *et al.*, 2000], [Wang et Porod, 2000] et [Zhang *et al.*, 2005]. Un modèle compact de SET et un modèle de mémoire monoélectronique (SEM) ont été développés par [Xuan *et al.*, 2012] et [Bounouar *et al.*, 2012].

On peut souligner aussi le développement de logiciels spécifiques aux QCA. Dès 1993, Lent *et al.* ont développé un Hamiltonien permettant le calcul des états stables d'une cellule. Ce modèle a été par la suite repris par plusieurs afin de simuler à plus grande échelle les circuits QCA complexes. En particulier, le simulateur *QCADesigner*, développé par [Walus *et al.*, 2004] et *QCAPro*, développé par [Srivastava *et al.*, 2011] permet de simuler rapidement la fonctionnalité d'un circuit plus complexe comprenant un grand nombre de cellules. Ce modèle n'est cependant pas basé sur une technologie réelle puisqu'il n'y a pas eu de démonstration de cellule unité ou de circuit simple utilisable à grande échelle. Ce manque de données expérimentales n'arrête cependant pas les chercheurs puisque plusieurs publications ont été faites avec comme thème le développement de circuits complexes et l'analyse de différentes architectures pour des additionneurs, mémoires, multiplicateurs. Souvent, ces travaux tentent aussi de faire une analyse de différents styles d'horloge et essaient de déterminer les taux d'erreur et l'énergie consommée par de tels circuits. À titre d'exemple, mentionnons ici les travaux de [Cho et Swartzlander, 2006], [Hänninen et Takala, 2007] et [Hashemi et Navi, 2015]. On peut voir un exemple d'additionneur somme conditionnelle à 4 bits à la figure 2.17. [Cho et Swartzlander, 2006] donne aussi des conceptions d'additionneur somme conditionnelle à 8, 16, 32 et 64 bits. Ces logiciels sont nécessaires à un développement plus efficace de dispositifs utiles. L'optimisation par simulation permet de sauver temps et argent principalement à cause des délais relativement longs de fabrication des prototypes.

Afin de réaliser ces simulations en pratique, les énergies du système doivent être calculées (équation 3.2). La différence d'énergie entre deux états représentée par ΔF_j^\pm peut être

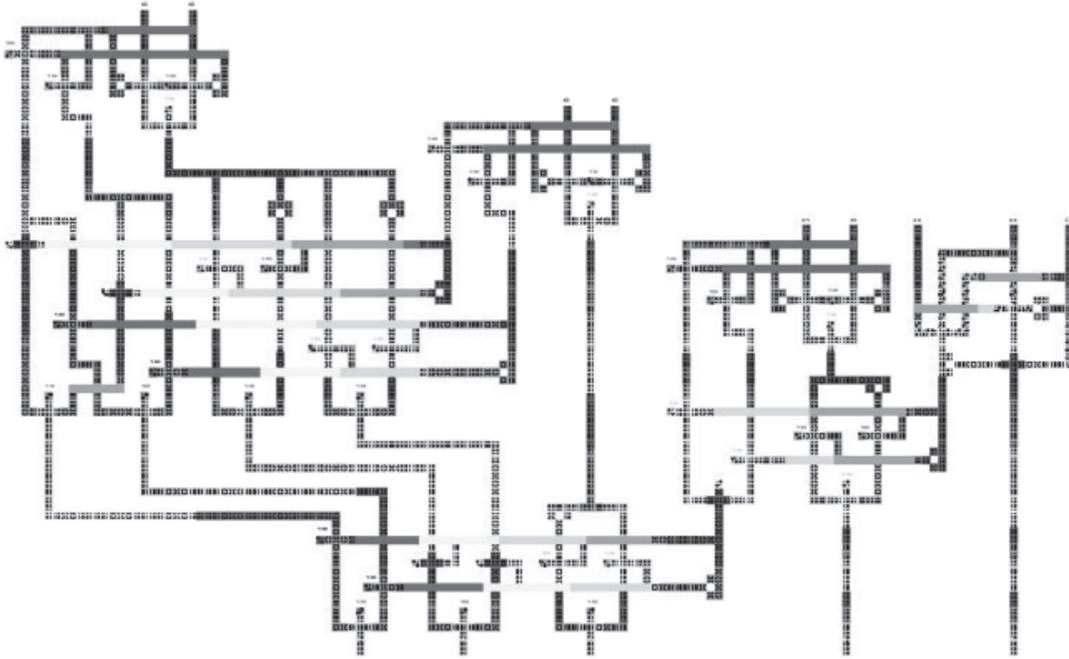


Figure 2.17 Additionneur somme conditionnelle à 4 bits. Les niveaux de gris indiquent les phases d'horloges. [Source : Cho et Swartzlander, 2006]

calculée à l'aide de la somme des énergies électrostatiques de chacune des capacités du circuit.

$$E_{\Sigma} = \sum_{i,j} \frac{1}{2} C_{i,j} (V_j - V_i)^2, \quad (3.5)$$

où $V_{i(j)}$ est le potentiel de chacun des flots ou électrodes et $C_{i,j}$ la capacité entre les électrodes ou flots i et j . Il est donc nécessaire de connaître la matrice de capacité \mathbf{C} du circuit afin de pouvoir simuler le comportement d'un dispositif avec l'un des simulateurs mentionné plus haut.

Pour des géométries simples, on peut estimer les capacités en utilisant le modèle plaques parallèles donnant la capacité comme

$$C = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r S}{d}, \quad (3.6)$$

où ε_0 est la permittivité du vide ($8,85 \times 10^{-12}$), ε_r est la permittivité relative du matériau isolant remplissant le volume entre les plaques puis S et d sont la section des plaques et la distance entre celles-ci. Ce modèle n'est cependant valide que dans l'approximation où la distance entre les plaques est beaucoup plus petite que leur dimension ($d \ll \sim \sqrt{S}$). Dans le cas de SET et de QCA fabriqués en procédé nanodamascène, cette approximation

ne tient plus puisque la distance entre l'îlot et la grille peut être de quelques dizaines de nanomètres alors que les dimensions de l'îlot lui-même sont aussi de cet ordre.

À ce point, il faut donc utiliser une méthode plus complète pour obtenir les capacités dans un système complexe comme le QCA et dans le régime de dimensions utilisé. Les travaux de [Thorbeck *et al.*, 2012] démontrent expérimentalement la limite du modèle plaques parallèles et utilisent plutôt un logiciel calculant les capacités à partir d'une solution numérique à l'équation de Poisson (équation 3.1 et 3.2). FastCap [Nabors et White, 1991, 1992] est un simulateur permettant l'extraction de la matrice complète de capacité à partir de la géométrie des conducteurs dans un ou plusieurs diélectriques. L'avantage de FastCap est que la discrétisation de la géométrie est faite seulement sur les sources de champ électrique, ce qui réduit la taille des systèmes d'équations à résoudre. L'inconvénient principal de ce logiciel est que la géométrie et la discrétisation doivent être réalisées dans un logiciel indépendant puis ensuite importée dans FastCap.

Comsol MultiPhysics[®] est un logiciel de simulation par éléments finis intégrant des outils de dessin 3D et de discrétisation (voir la section 3.3) L'inconvénient peut être que la simulation soit plus lente pour de grandes géométries.

2.4 Conclusion

À la lumière des travaux présentés dans ce chapitre, un choix éclairé peut être fait concernant les divers aspects de ce projet. Pour la réalisation d'un prototype de QCA pouvant fonctionner à haute température et compatible avec les technologies actuelles, l'approche des îlots métalliques a été retenue parmi celles déjà démontrées. Plusieurs prototypes ont permis de démontrer les caractéristiques et le fonctionnement des éléments de base du concept de QCA, mais sans chercher à améliorer leur température d'opération. La possibilité de fabriquer des dispositifs SET métalliques fonctionnant à haute température ainsi que l'expertise développée à l'Université de Sherbrooke avec le procédé nanodamascène rendent le choix des QCA métalliques intéressants. Ces SET peuvent aussi servir de détecteur de charge rendant la fabrication d'un circuit QCA complet (entrées, cœur et lecture de la sortie) entièrement intégrée par l'utilisation d'un même procédé pour toutes les parties. Cela permettrait aussi à première vue d'améliorer de façon significative la température d'opération de ce type de dispositif.

Dans le chapitre suivant, les travaux de modélisation permettant de valider l'approche choisie sont détaillés. D'abord, puisque la jonction tunnel est l'élément central de chacun des dispositifs envisagés, un modèle de simulation du courant dans ces jonctions est décrit.

Ensuite, une plateforme de simulation de circuits complets et arbitraires est détaillée. À cet effet, les logiciels de simulation Comsol et SIMON permettent de partir directement d'un dessin pensé pour un procédé précis et d'en obtenir toutes les caractéristiques électriques.

CHAPITRE 3

MODÉLISATION

La modélisation de dispositifs par diverses méthodes numériques fait aujourd’hui partie intégrante du processus de recherche et développement. En particulier, dans le domaine de la nanoélectronique il est important d’avoir des modèles décrivant adéquatement les dispositifs pour ensuite pouvoir simuler des circuits complexes qui engendreraient autrement des coûts prohibitifs si on devait les fabriquer. Ces modèles permettent aussi de valider notre compréhension des phénomènes en jeu dans les dispositifs en comparant théorie et expérience. Une fois validés, les modèles peuvent être utilisés pour extraire certains paramètres du dispositif afin d’en ajuster les propriétés pour la fabrication à grande échelle ou inclure des paramètres d’autres matériaux pour prédire et valider leurs performances.

Dans le présent chapitre, deux modèles sont développés. Le premier permet de simuler le fonctionnement d’une jonction tunnel unique et d’en extraire éventuellement les paramètres, tandis que le deuxième permet de reproduire le fonctionnement d’une demi-cellule QCA en tenant compte de la géométrie réelle du dispositif fabriqué et de la détection de l’état de sortie par des SET.

3.1 Modélisation de MIM

La jonction tunnel Métal-Isolant-Métal (MIM) est au cœur des dispositifs monoélectronique développés par le groupe de l’Université de Sherbrooke. La compréhension des phénomènes en jeu dans ces dispositifs passe donc par l’étude détaillée du comportement en tension d’une MIM. Dans les chapitres suivants, un procédé de fabrication de jonctions tunnel MIM uniques par nanodamascène est développé, puis une étude détaillée de l’oxyde de titane la composant est réalisée. La dégradation des propriétés de cette jonction est aussi étudiée et des méthodes et matériaux alternatifs sont proposés. Afin de comprendre les modes de conduction et d’estimer les paramètres physiques des MIM, un modèle théorique est nécessaire. Un code Matlab permettant de calculer le courant à travers une jonction tunnel quelconque et à toutes les températures a été développé par M. Guilmain dans le cadre de ses travaux de thèse [Guilmain, 2013]. Ce modèle est décrit brièvement ici afin d’en rappeler les équations et paramètres importants. L’interface utilisateur développée pour ce code permet l’entrée de tous les paramètres en jeu dans la simulation puis de

visualiser la forme de la jonction dans le plan $E(x)$. Le courant, la densité de courant ou la résistance tunnel en fonction de la différence de potentiel appliquée sur la jonction peuvent ensuite être calculés, visualisés et enregistrés.

3.2 Formulation mathématique

Deux modes de conduction principaux sont considérés dans le modèle, la conduction par effet tunnel et par effet thermoïonique. L'effet tunnel est le passage d'un électron à travers une barrière de potentiel tel qu'illustré dans le schéma de la figure 3.1. Pour avoir la possibilité de le faire, un état de position et d'énergie doit être disponible de l'autre côté de la barrière. En utilisant l'approximation de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB), on peut résoudre approximativement l'équation de Schrödinger pour trouver la probabilité $D(E_x)$ qu'un électron traverse la barrière par effet tunnel en fonction de son énergie :

$$D(E_x) = \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m(V(x) - E_x)} dx\right), \quad (2.1)$$

où h est la constante de Planck, m est la masse de l'électron, E_x est son énergie dans la direction traversant la jonction, x_0 et x_1 sont les limites gauche et droite de la jonction tel qu'indiqué dans la figure 3.1, et $V(x)$ est le potentiel dans la région de la barrière, c'est-à-dire la forme de la barrière. Le potentiel idéal est indiqué par le trait plein rouge sur la figure, mais la force image réduit l'épaisseur effective de la jonction [Simmons, 1963a,b]. Le potentiel de la jonction tenant compte de cette force image est représentée par le trait semi-pointillé et donné par¹ :

$$V(x) = \phi_1 + \Delta\phi \frac{x}{t_{\text{ox}}} - \frac{eVx}{t_{\text{ox}}} - 1,15\lambda \frac{t_{\text{ox}}^2}{x(t_{\text{ox}} - x)}, \quad \lambda = \frac{e^2 \ln 2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_r t_{\text{ox}}} \quad (2.2)$$

où $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$ est la différence de hauteur de barrière entre les deux côtés de la jonction et V est le potentiel appliqué au côté droit de la jonction. Le premier terme est la hauteur de la barrière du métal de gauche à l'isolant, le deuxième prend en compte l'asymétrie créée par une jonction formée de deux métaux différents, le troisième est l'abaissement de la barrière par l'application de la différence de potentiel V entre les deux électrodes, puis le dernier est la forme hyperbolique approximant la force image [Simmons, 1963b]. Le nombre d'électrons total traversant la barrière et donnant la densité de courant est ensuite calculé en fonction de la distribution de ceux-ci en énergie de chaque côté de la jonction

¹ La définition donnée par [Simmons, 1963b], $\lambda = e^2 \ln 2 / (8\pi\epsilon_0\epsilon_r t_{\text{ox}})$ était erronée d'un facteur 2 et a été corrigée plus tard [Simmons, 1964] pour donner la définition de l'équation 2.2.

et des niveaux disponibles de chaque côté aussi :

$$J_{\text{Tn}} = \frac{4\pi(m^*)^2 e}{h^3} \int_0^{E_m} D(E_x) dE_x \int_0^\infty [f(E) - f(E + eV)] dE_T \quad (2.3)$$

avec m^* la masse effective de l'électron dans le matériau de jonction, E_m l'énergie correspondant au maximum de la barrière et $f(E)$ et $f(E + eV)$ les distributions de Fermi-Dirac pour les électrons autour du niveau de Fermi de chacune des électrodes de la MIM. Ces distributions sont représentées dans la figure 3.1 par N_{eL} et N_{eR} , le nombre d'électrons moyen en fonction de l'énergie de ces électrons. Le chevauchement de la distribution des électrons en énergie de chaque côté de la jonction est la plage d'énergie où l'effet tunnel se produit puisque des électrons sont présents d'un côté et des états d'énergie sont disponibles de l'autre.

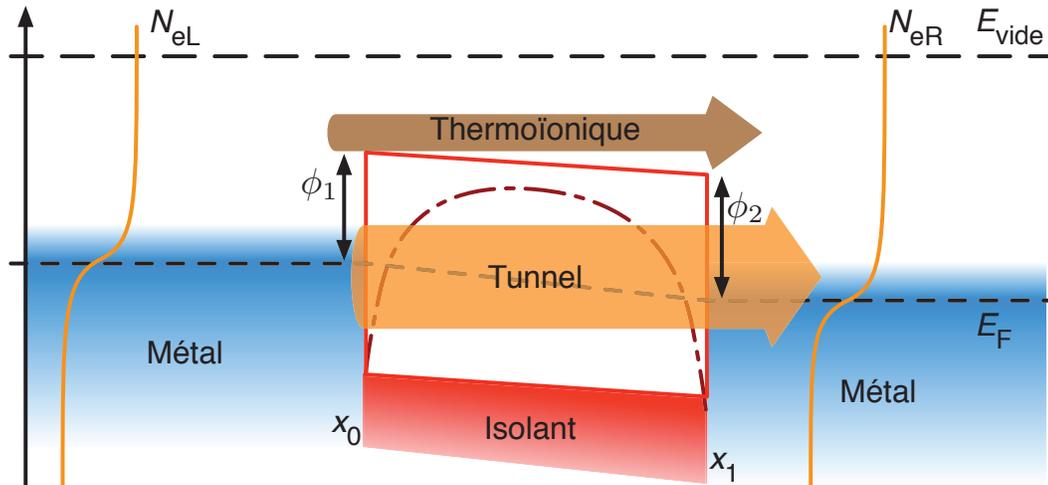


Figure 3.1 Schéma énergie-position d'une jonction tunnel MIM. L'énergie de Fermi ainsi que l'énergie du vide sont indiquées en pointillé. La jonction est asymétrique avec ϕ_1 et ϕ_2 , les hauteurs de barrière métal-isolant des deux cotés de la jonction. L'effet tunnel et l'émission thermoionique sont indiqués par les flèches larges. La distribution de Fermi-Dirac est représentée par la courbe jaune dans chaque région métallique.

Bien que l'effet de la température soit pris en compte par l'entremise des distributions de Fermi-Dirac dans le calcul du courant tunnel, lorsque la barrière tunnel est basse et que la température est élevée, il faut tenir compte des électrons qui ont suffisamment d'énergie pour passer directement dans la bande de conduction de l'isolant. Ce courant thermoionique se calcule aisément à l'aide de la relation de Richardson-Dushman [Simmons, 1964] :

$$J_{\text{Th}} = AT^2 e^{-\phi/k_B T}, \quad A = \frac{4\pi m e k_B^2}{h^3} \quad (2.4)$$

où ϕ est la hauteur maximale de la barrière. La densité de courant thermoïonique s'ajoute à la densité de courant tunnel pour donner la densité de courant totale $J = J_{\text{Tn}} + J_{\text{Th}}$. Pour obtenir le courant total, on multiplie cette densité par la section de la jonction :

$$I = J \times S = J \times w_{\text{T}} \times t_{\text{CMP}} \quad (2.5)$$

La résistance tunnel est obtenue par la loi d'Ohm $V = RI$.

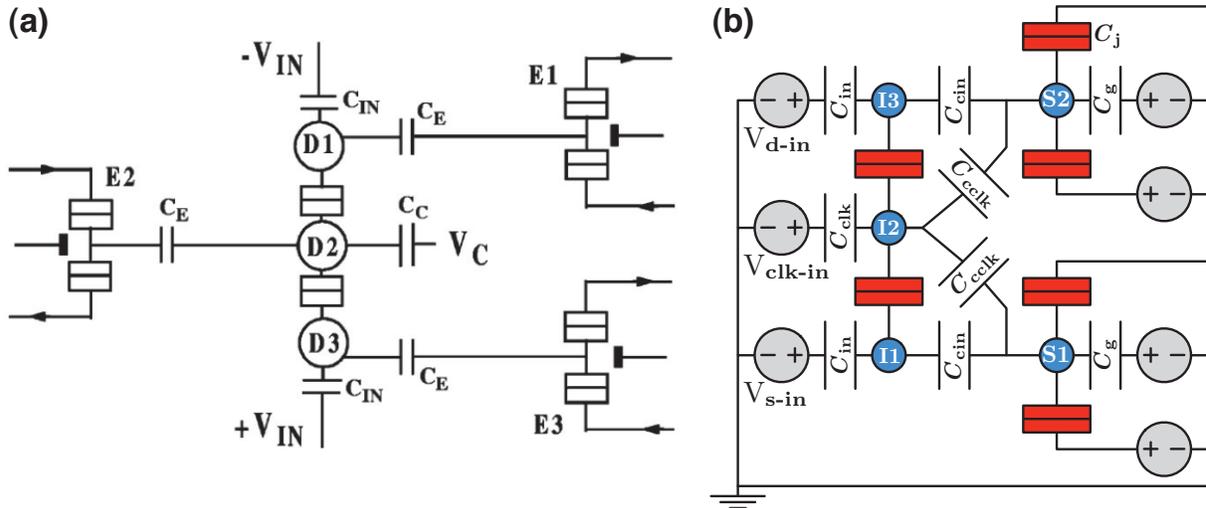
3.3 Modélisation de QCA

Plusieurs modèles existants peuvent modéliser le comportement typique d'une cellule QCA et ont été discutés au chapitre 2. Cependant, aucun de ces modèles ne prend en compte directement la géométrie exacte d'un dispositif. Généralement, ces modèles prennent plutôt en entrée les paramètres effectifs utiles au calcul comme la taille des îlots et leur couplage tunnel, ce qui est d'autant plus difficile à extraire directement de la géométrie qu'elle est complexe et petite. De plus, ces méthodes négligent complètement les effets parasites et traitent directement le système idéal. Ceci fonctionne généralement bien dans le cas de géométries où ces effets parasites sont faibles, mais lorsque la taille totale du circuit d'une demi-cellule est réduite, ces effets deviennent importants et doivent ainsi être pris en compte. Il est donc nécessaire de développer un modèle qui prend en entrée la géométrie pour simplifier et accélérer la conception du dispositif. Ceci permettra en particulier de voir directement l'impact des modifications géométriques sur les caractéristiques électriques finales du dispositif.

3.3.1 Le dispositif QCA

Le dispositif à simuler est ici une demi-cellule QCA avec horloge, similaire à celui développé par [Orlov *et al.*, 2000] et dont le schéma électrique est donné à la figure 3.2a. En fait, ce circuit est identique à celui utilisé dans les présents travaux à l'exception de l'absence du SET couplé à l'îlot central d'horloge (figure 3.2b). En effet, la dimension prévue des îlots I1, I2 et I3 (quelques centaines de nanomètres tout au plus) ne permet pas d'intégrer un troisième SET en proximité suffisante pour qu'il puisse être couplé à l'îlot central, et ce de manière équivalente aux deux autres tout en gardant l'électrode de contrôle de l'horloge V_{C} . Un couplage additionnel entre l'îlot horloge est aussi ajouté vers les SET puisque leur proximité anticipée rendra aussi les SET sensibles à cet îlot I2. L'objectif étant aussi de démontrer le fonctionnement de la demi-cellule dans un contexte d'utilisation à plus

grande échelle, une lecture de l'état de sortie à seulement deux SET est plus réaliste et le troisième SET (E2) serait inutile.



Dans ce schéma électrique, on voit les trois électrodes d'entrées avec l'indice **in**, les îlots de la demi-cellule QCA, I1, I2 et I3, les SET, S1 et S2 ayant chacun une source, un drain et une grille, ainsi que les capacités de couplage entre les îlots QCA et les îlots SET. Tel que défini, le circuit permet de simuler l'entrée de données dans un circuit QCA et de tester ensuite la lecture de l'état de sortie pour cette même cellule. L'utilisation de deux SET permet une lecture différentielle de l'état de la cellule puisque, lors d'un évènement changeant l'état de la cellule, le courant d'un des deux doit augmenter pendant que celui du second doit diminuer. Tout évènement ne montrant pas ces caractéristiques, comme un défaut se chargeant à proximité, n'aura que rarement un impact symétrique sur les deux SET ce qui augmente la robustesse de la mesure. Cette méthode de détection a été élaborée en particulier par [Brenner, 2004; Brenner et al., 2003] spécifiquement pour la détection de l'état d'une cellule QCA.

Les géométries utilisées pour traduire en dispositif le schéma électrique doit tenir compte des contraintes imposées par le procédé nanodamascène utilisé pour le fabriquer, décrit en détail dans le chapitre 4. L'une de ces contraintes est que les jonctions tunnel sont toutes identiques, autant celles de la demi-cellule que des SET. Aussi, le procédé courant limite à environ 50 nm la distance entre deux tranchées, ce qui limite la distance minimale entre deux électrodes pour les capacités non tunnel comme C_{in} par exemple. La géométrie

utilisée ici pour les simulations est donc basée sur la géométrie réelle utilisée avec le procédé nanodamascène et est donnée à la figure 4.8 du chapitre 4.

3.3.2 Objectifs de la simulation

L'objectif premier de la modélisation du circuit de la demi-cellule QCA est d'étudier son comportement électrique pour le comprendre et évaluer l'impact des couplages parasites. La simulation permet aussi de connaître dans le détail les modes de fonctionnement et d'opération du dispositif pour pouvoir par la suite optimiser les propriétés des jonctions tunnel et des capacités de couplage le formant. Ceci permet d'obtenir tous les états de la cellule (neutre, actif et bloqué) et une lecture de son état fiable. En particulier, la simulation dans une géométrie réelle permet de valider que la méthode élaborée par [Brenner *et al.*, 2003] est applicable et de modifier sa méthode au besoin.

L'utilisation directe de la géométrie fabriquée dans le simulateur pour un QCA de type métallique a été très peu étudiée puisque les procédés ne permettaient pas des dimensions suffisamment petites pour permettre une utilisation à haute température. L'intégration de la géométrie réelle est intéressante parce qu'elle permet d'ajuster le dessin du dispositif avant de le fabriquer et permet d'extraire directement du dessin de lithographie les capacités réelles en jeu et toutes les capacités parasites.

Enfin, une modélisation de ce type permet de prévoir le type de mesures électriques à réaliser pour bien caractériser le dispositif. Le simulateur permet de développer une méthodologie pour les mesures électriques puisqu'il n'est pas possible d'accéder à la charge des îlots que par des mesures indirectes faites à l'aide des SET. Bien maîtriser leur fonctionnement et leur sensibilité est crucial pour comparer les résultats expérimentaux avec le modèle.

3.3.3 Extraction de capacités par éléments finis

Afin d'obtenir une définition complète du circuit de la demi-cellule QCA avec SET de lecture, il est nécessaire de connaître la valeur des différentes capacités le composant. Pour ce faire, une simulation par éléments finis est réalisée à l'aide de Comsol Multiphysics. Ce logiciel est choisi pour sa facilité d'utilisation. En effet, les outils d'importation de géométries au format DXF provenant de dessins de lithographie électronique, la relative simplicité de création d'une géométrie 3D paramétrée et les outils de génération du maillage de la structure sont bien intégrés dans le logiciel et permettent un processus de simulation unifié.

Pour calculer la capacité entre deux conducteurs quelconques, on utilise la définition de la capacité $Q = CV$. Il faut donc connaître la charge sur les conducteurs et leur différence de potentiel pour obtenir $C = Q/V$. Dans une simulation par éléments finis, on définit donc la géométrie des différentes électrodes et îlots du circuit, puis on applique un potentiel V sur l'une des électrodes tout en fixant les autres électrodes à la masse (0 V). La loi de Gauss (équations de Maxwell) :

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_V \quad (3.1)$$

où \mathbf{D} est le champ de déplacement électrique et ρ_V la densité volumique de charges d'espace, permet ensuite de connaître la distribution de charges générant ce potentiel. Puisque $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}$ dans un milieu non polarisant et $\mathbf{E} = -\nabla V$, on peut réécrire la loi de Gauss comme

$$-\nabla \cdot \varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla V = \rho_V. \quad (3.2)$$

Le logiciel Comsol résout ensuite cette équation pour la géométrie considérée. On peut ensuite calculer la somme des charges sur chacune des électrodes et en connaissant le potentiel entre chacune d'elles, on calcule directement C .

L'une des hypothèses généralement faites pour de bons conducteurs est que leur permittivité relative est infinie. Afin d'approximer ce comportement de façon numérique, ceux-ci sont plutôt considérés comme des conducteurs parfaits ayant pour implication que le champ électrique à l'intérieur de ces conducteurs est nul et donc que toutes les charges sont à sa surface. Ces conducteurs sont ainsi intégrés à la géométrie comme des vides où l'équation 3.2 n'est pas résolue. On calcule ensuite la charge à la surface des électrodes plutôt que dans tout leur volume en utilisant le théorème de Gauss :

$$\oiint_{\text{électrode}} \mathbf{D} \cdot d\mathbf{a} = Q = CV. \quad (3.3)$$

En réalisant ce calcul pour toutes les combinaisons uniques des électrodes et îlots, on obtient la matrice complète de capacité du circuit. Les éléments diagonaux de la matrice correspondent à la capacité totale de cet élément avec l'environnement, et les autres éléments représentent la capacité entre les deux éléments concernés. On voit dès lors que certains de ces éléments hors diagonaux donnent la valeur associée à une capacité voulue, par exemple, la capacité de jonction tunnel ou de grille. Les autres éléments sont des capacités parasites, par exemple, entre l'électrode d'horloge du QCA et l'îlot de l'un des SET de détection.

Pour réaliser cette extraction de capacité directement de la géométrie utilisée en fabrication, le dessin est adapté et importé directement dans Comsol. Une adaptation est nécessaire ici puisque les tranchées étroites ($\lesssim 50$ nm) sont exposées avec des lignes de largeur nulle. Il faut donc les remplacer par des polygones de largeur voulue.²

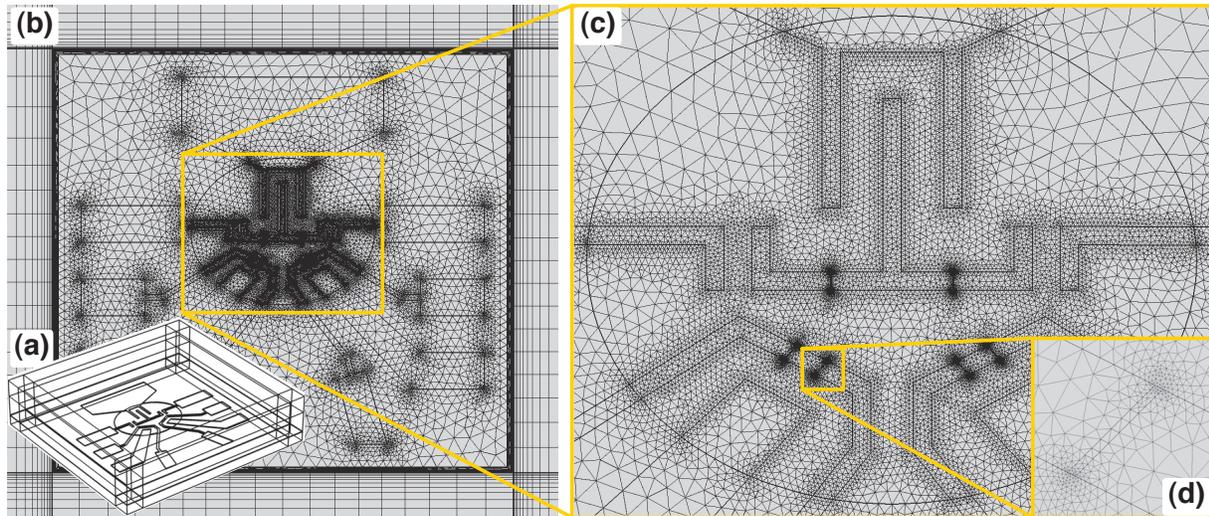


Figure 3.3 (a) Géométrie complète vue en angle, (b) maillage complet de la structure vue de dessus. (c) Agrandissement de la partie centrale à densité plus élevée de polygones puis (d) d'une jonction tunnel avec une densité maximale.

On génère ensuite une géométrie 3D complète du dispositif. Ici, on crée un substrat de SiO_2 dans lequel le dispositif est encastré, puis on ajoute le Si_3N_4 de passivation et un certain volume d'air au-dessus pour représenter l'état typique du dispositif lors de la caractérisation. Puisque le champ électrique s'étend à l'infini, une approximation de l'infini doit être faite. On utilise pour cela une fonctionnalité intégrée à Comsol permettant de simuler des frontières suffisamment éloignées sans avoir à considérer tout ce volume lors du maillage puisque le champ y est pratiquement constant. Cette condition frontière appelée éléments infinis (*Infinite Elements*) fait simplement une mise à l'échelle des points de calcul d'un volume entourant la géométrie jusqu'à des distances très grandes par rapport à la géométrie entière considérée. La figure 3.3a donne un exemple de la géométrie 3D complète obtenue. La couche d'éléments cubiques sur les côtés et le dessus de la géométrie forme la couche d'éléments infinis.

La méthode des éléments finis requiert un maillage de la structure, c'est-à-dire une division de la géométrie en de multiples polygones d'une taille qui permet d'avoir une solution simple en ses frontières. Ce maillage doit avoir une résolution suffisante dans les endroits où le champ varie rapidement. La figure 3.3b-d montre le maillage obtenu. Ce maillage

² Voir le chapitre 4 pour les détails sur la géométrie des différents dispositifs dessinés.

est généré à partir de fonctions et d'algorithmes automatisés intégrés à Comsol. Seules quelques contraintes sur la densité de points à utiliser près des jonctions tunnel et sur les surfaces principales des capacités sont utilisées pour adapter le maillage aux variations de géométries lors des étapes d'optimisation de celle-ci.

Avec une solution électrostatique de toute la géométrie ainsi que l'équation 3.3, on obtient la capacité entre chaque élément et celui ayant un potentiel de 1 V. La matrice complète de capacités est subséquemment obtenue d'une simulation paramétrique où le potentiel de 1 V est appliqué, à tour de rôle, à chaque élément indépendant (conducteur) du circuit, pendant que tous les autres sont mis à 0 V. Ensuite, pour chacune de ces solutions, l'équation 3.3 est calculée pour chaque élément donnant une ligne complète de la matrice. La solution est ensuite exportée pour être transférée dans le logiciel SIMON servant à la simulation électrique du circuit en prenant l'effet tunnel en compte. Un exemple de matrice pour une géométrie fabriquée pour le projet est donné dans le tableau 3.1. La couleur des cases correspond à celles des capacités et jonctions tunnel présentées dans le schéma de la figure 3.4.

Tableau 3.1 Matrice de capacités en attofarads simulée en utilisant la géométrie de l'échantillon J117Y (SET-6, tableau 7.1). Les couleurs de cellules dans le tableau correspondent à celles utilisées pour identifier les différents types de capacités dans le schéma électrique de la figure 3.4.

		QCA					SET 1				SET 2					
		C+	C _{Q1}	C _{Q2}	C _{Q3}	C-	C _C	C _S	C _{S1}	C _D	C _G	C _S	C _{S2}	C _D	C _G	C _{sub}
QCA	C+	134.9	6.3	1.7	0.2	0.5	11.7	16.8	0.2	1.6	5.6	0.3	0.1	0.7	0.5	94.0
	C _{Q1}	6.2	31.3	8.4	0.1	0.2	2.2	5.0	0.7	0.9	1.1	0.1	0.1	0.4	0.2	6.0
	C _{Q2}	1.7	8.4	64.6	8.4	1.7	21.1	1.1	0.6	1.8	1.0	1.1	0.6	1.8	1.0	15.3
	C _{Q3}	0.2	0.1	8.4	31.4	6.2	2.2	0.1	0.1	0.4	0.2	5.0	0.7	0.9	1.1	6.0
	C-	0.5	0.2	1.7	6.3	135.2	11.6	0.3	0.1	0.7	0.5	16.8	0.2	1.6	5.7	94.3
	C _C	11.3	2.2	20.8	2.2	11.3	318.7	2.6	0.3	1.5	2.2	2.6	0.3	1.5	2.2	252.7
SET 1	C _S	17.9	5.0	1.1	0.2	0.3	2.9	133.4	7.0	3.7	32.7	0.3	0.1	1.0	0.6	73.8
	C _{S1}	0.2	0.7	0.6	0.0	0.1	0.3	6.9	20.2	7.1	2.0	0.1	0.0	0.3	0.1	1.7
	C _D	1.7	0.9	1.9	0.4	0.7	1.6	3.8	7.2	137.5	31.9	1.0	0.3	10.6	3.1	86.1
	C _G	5.5	1.1	1.0	0.2	0.5	2.2	30.0	2.1	29.4	190.9	0.6	0.1	2.8	1.5	114.7
SET 2	C _S	0.3	0.2	1.1	5.0	18.0	2.8	0.3	0.1	0.9	0.6	134.2	6.9	3.7	33.0	73.7
	C _{S2}	0.1	0.0	0.6	0.7	0.2	0.3	0.1	0.0	0.3	0.1	6.9	20.2	7.1	2.0	1.7
	C _D	0.7	0.4	1.9	0.9	1.7	1.6	1.0	0.3	10.6	3.1	3.8	7.1	137.6	32.5	86.3
	C _G	0.5	0.2	1.0	1.1	5.5	2.2	0.6	0.1	2.8	1.5	30.6	2.1	29.4	193.4	114.4
	C _{sub}	88.2	5.6	14.4	5.7	88.4	255.9	64.9	1.6	75.8	108.4	65.1	1.6	75.9	109.8	1020.6

Puisque la géométrie est symétrique, la matrice doit l'être aussi. En comparant les deux matrices triangulaires, on voit que de petites différences sont présentes entre les valeurs

symétriques. Ces erreurs sont d'origine numérique et résultent du maillage qui n'est pas exactement symétrique, ce qui cause des différences légères dans la résolution des différentes parties du circuit censées être équivalentes. La matrice obtenue est donc symétrisée en prenant la moyenne des éléments : $\mathbf{C} = (\mathbf{C} + \mathbf{C}^T)/2$ avant d'être transférée dans le logiciel SIMON.

L'analyse des valeurs de cette matrice permet de saisir l'amplitude des effets parasites dans un circuit comme la demi-cellule QCA. Les éléments diagonaux donnent les capacités totales de chacune des électrodes et des îlots qui sont en fait la somme des autres éléments sur une même ligne ou colonne. On peut voir que les îlots de SET, plus petits ont une capacité plus faible et que l'îlot horloge du QCA a une capacité un peu plus de deux fois plus grande que les îlots latéraux. Le tableau 3.2 donne la composition de la capacité totale des différents îlots de la demi-cellule. Dans le cas des îlots QCA, on voit que les jonctions tunnel et les couplages aux grilles comptent pour un peu plus de 50 % de la capacité totale. Ceci laisse un peu plus de 40 % de la capacité totale attribuée aux capacités parasites. Pour les îlots SET, l'effet de ces parasites est moins marqué avec 20 % de la capacité totale de l'îlot qui y est attribuée. L'impact majeur de ces capacités parasites sera mis en lumière à la section 3.4 où la plateforme de modélisation est utilisée pour simuler la miniaturisation des dispositifs.

Tableau 3.2 Proportion des capacités totales attribuées aux capacités nominales et parasites. Valeurs simulées pour le SET-6 de l'échantillon J117Y (tableau 7.1).

Capacité	QCA latéraux		QCA central		DéTECTEURS SET	
	aF	%	aF	%	aF	%
C_{Σ}	31.3	100	64.6	100	20.2	100
C_j	8.4	26	16.7	25	14.1	69
C_G	8.5	27	20.8	32	2.1	10
C_{para}	14.5	46	27.1	41	4.0	19

3.3.4 Simulation Monte-Carlo (SIMON)

La connaissance de la matrice de capacités du circuit permet de simuler le dispositif à l'aide d'un logiciel, ici SIMON [Wasshuber *et al.*, 1997], combinant l'approche Monte-Carlo et la solution des équations maîtresses régissant le comportement du blocage de Coulomb. La combinaison des deux méthodes permet de prendre en compte de façon efficace les événements rares tels que le *co-tunnelling*. Cependant, ce modèle ne prend en compte ni le mode de conduction thermoïonique ni la variation de la résistance tunnel d'une jonction en fonction du potentiel lui étant appliqué. SIMON permet tout de même une analyse

de qualité suffisante pour étudier le comportement du circuit dessiné et fabriqué dans le régime où l'excitation thermique des électrons est beaucoup plus faible que la hauteur des barrières tunnel. Il devrait aussi permettre de valider les méthodes de caractérisation électriques du dispositif.

La figure 3.4 montre le circuit utilisé pour simuler les trois îlots de la demi-cellule QCA (encerclés en orange pointillé) ainsi que les deux îlots SET (encerclés en bleu). Des sources de voltage sont intégrées à chacune des électrodes (source, drain, grille, horloge et entrées) pour en permettre le contrôle. Chacun des îlots est relié à chacun des îlots et autres électrodes par une capacité de couplage, que ce couplage soit voulu ou non.

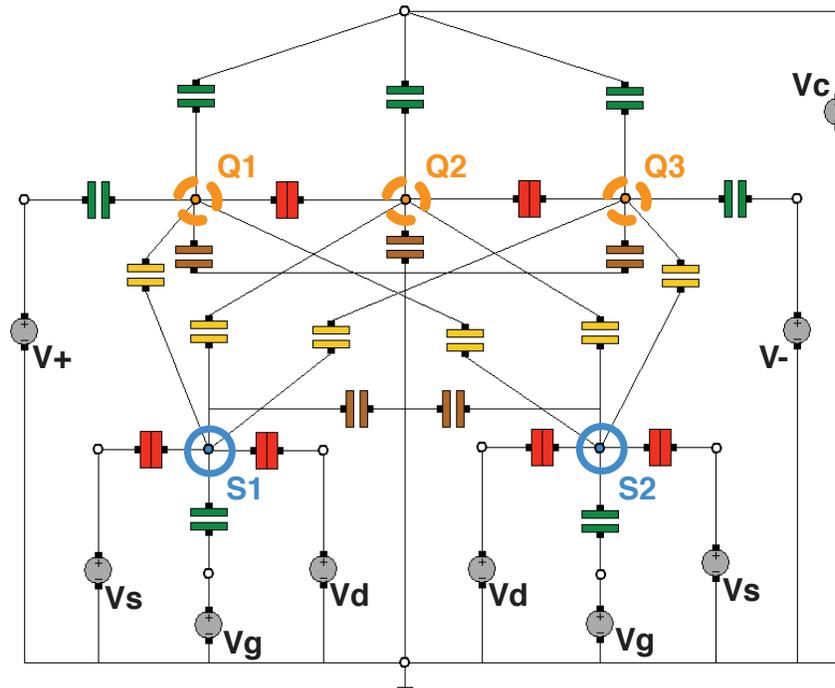


Figure 3.4 Circuit complet de la demi-cellule QCA défini dans le logiciel SIMON. Les îlots QCA sont Q1, Q2 et Q3 au centre en haut (cercles orange pointillés) et les îlots SET sont S1 et S2 en bas (cercles bleus). Les sources sont en gris et identifiées aussi. Les jonctions tunnel sont colorées en rouge, les capacités de couplage de grille aux îlots sont en vert, les capacités de couplage en jaune relient les îlots des SET à ceux du QCA. Finalement, les îlots sont aussi reliés au substrat par les capacités brunes. Dans la modélisation, chaque îlot est relié au substrat, à chacun des îlots voisins et à chacune des grilles. Par souci de clarté, les capacités considérées comme parasites ne sont pas montrées.

La complexité du circuit complet (54 capacités, 6 jonctions tunnel, 5 îlots et 9 électrodes) ne peut être aisément traitée manuellement dans le logiciel, parce que le temps nécessaire est démesurément grand et que le risque d'erreur l'est aussi. Pour automatiser ce processus ainsi que celui de la configuration des sources pour toutes les simulations typiques à faire,

une série de scripts ont été développés en langage Matlab. Une description des étapes conceptuelles de la simulation est donnée dans les prochains paragraphes et le détail des scripts et de leur utilité est donné à l'annexe B.

Configuration des SET

Toutes les capacités reliées aux îlots sont d'abord entrées dans le circuit SIMON préparé à l'avance pour correspondre à la simulation de Comsol. Les résistances tunnel sont ajoutées aux jonctions tunnel du circuit, puis les sources de tension sont configurées et la mesure est lancée. Dans le cas de la simulation de la demi-cellule QCA avec détecteurs de charge, plusieurs configurations sont nécessaires à l'obtention des courbes caractéristiques désirées. D'abord, les caractéristiques des deux SET détecteurs de charge doivent être simulées. Un diagramme de stabilité du SET en balayant la source ou le drain avec la grille dans une plage permettant de visualiser au moins trois fois la largeur d'un diamant de Coulomb en V_G et 2 fois sa hauteur en V_S :

$$-\alpha \frac{3 E_C}{2 e} < V_G < \alpha \frac{3 E_C}{2 e} \quad (3.4)$$

$$-\frac{E_C}{e} < V_S < \frac{E_C}{e} \quad (3.5)$$

où $\alpha = C_G/C_\Sigma$ est le levier de la grille sur l'îlot, C_Σ la capacité totale de l'îlot, C_G la capacité de la grille du SET et e la charge électronique. Ce diagramme de stabilité permet d'extraire d'un coup les courbes I_D-V_{DS} et I_D-V_G qui permettent de déterminer le point d'opération du SET en tant que détecteur, c'est-à-dire sur la pente d'un pic de Coulomb. La pente devrait être la plus grande possible tout en s'assurant que le déplacement occasionné par la charge détectée dans le QCA n'apporte pas le point d'opération hors du flanc du pic.

La largeur du pic doit donc être au moins le double de l'impact que peut avoir la charge à détecter, c'est-à-dire $V = eC_{Q1-S1}/C_{\Sigma-S1}$. La figure 3.5 montre le diagramme et les courbes obtenues avec la matrice de capacités donnée dans le tableau 3.1. En (a), on a le diagramme de stabilité montrant les diamants de Coulomb, typique du comportement d'un SET. Extrait de ce diagramme, en (b) on a les courbes de courant en fonction de V_{DS} qui donnent le plateau de blocage de Coulomb et en (c), les courbes en fonction de V_G montrant les pics de conductance du SET pour chacun des niveaux d'énergie de l'îlot. Ces courbes sont simulées pour une température de 1,5 K, la température à laquelle les dispositifs expérimentaux sont mesurés. Le point O indiqué dans chacun des graphiques indique le point d'opération optimal du SET. Dans ce cas-ci, $V_{DS} = 6,4$ mV et $V_G = 24$ mV permettent une sensibilité et une plage d'opération maximale, c'est-à-dire une plage ~ 20 mV où la pente

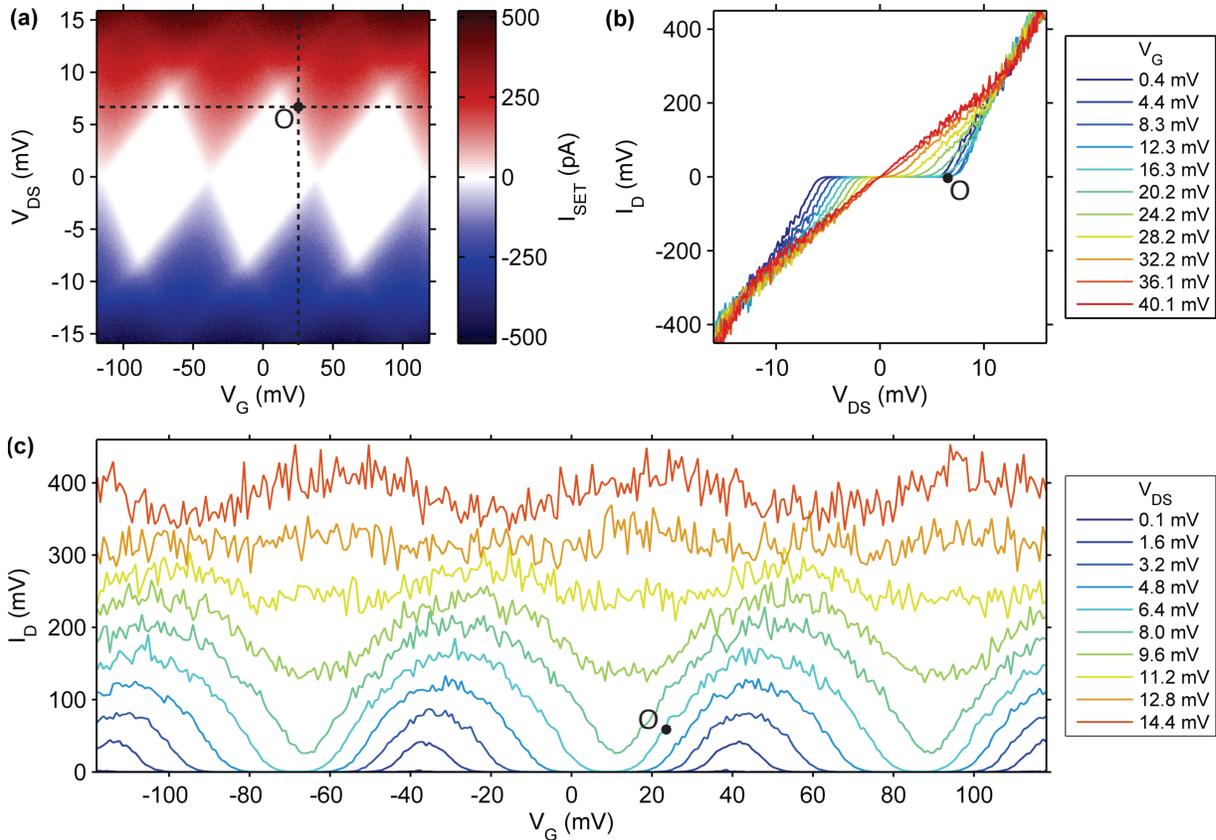


Figure 3.5 (a) Diagramme de stabilité simulé d'un SET de la demi-cellule QCA de l'échantillon J117Y montrant les diamants de Coulomb. Le point O est le point de gain maximal pour la détection de charge. (b) Traces I_D - V_{DS} à divers V_G . (c) Traces I_D - V_G à divers V_{DS} . Le bruit des simulations provient de la méthode Monte-Carlo.

du pic varie peu. Cette plage est amplement suffisante puisque l'ajout d'un électron sur l'îlot QCA à proximité d'un SET cause un changement de potentiel de moins de 1 mV. La plage est donc peu importante ici, mais la pente doit être maximale. Cette configuration est faite en l'absence de potentiel appliqué sur les autres électrodes (deuxième SET et QCA) et le reste du circuit est pris en compte plus loin dans la démarche de simulation.

Configuration du QCA

Comme pour le SET, on cherche d'abord à obtenir le diagramme de stabilité de la demi-cellule pour déterminer ses conditions d'opération. Contrairement au SET, les îlots de la demi-cellule ne sont connectés aux électrodes que par couplage capacitif. Il n'est donc pas possible de mesurer dans la réalité le courant dans le dispositif. Avec SIMON cependant, il est possible de sonder le courant dans les diverses jonctions tunnel ainsi que la charge de chacun des îlots. Le premier diagramme simulé est donc le courant dans les deux jonctions

de la demi-cellule (indépendamment de la direction du courant) en fonction des entrées V_+ et V_c . Le résultat de cette simulation est présenté à la figure 3.6a. On refait ensuite la même simulation, mais en appliquant les potentiels de source et de grille au point d'opération sur les deux SET afin de mesurer leur impact sur la demi-cellule et pouvoir calibrer les signaux d'entrée et d'horloge, de sorte à obtenir les bons états de charge. Le résultat avec les SET sous tension est donné dans le diagramme de la figure 3.6b.

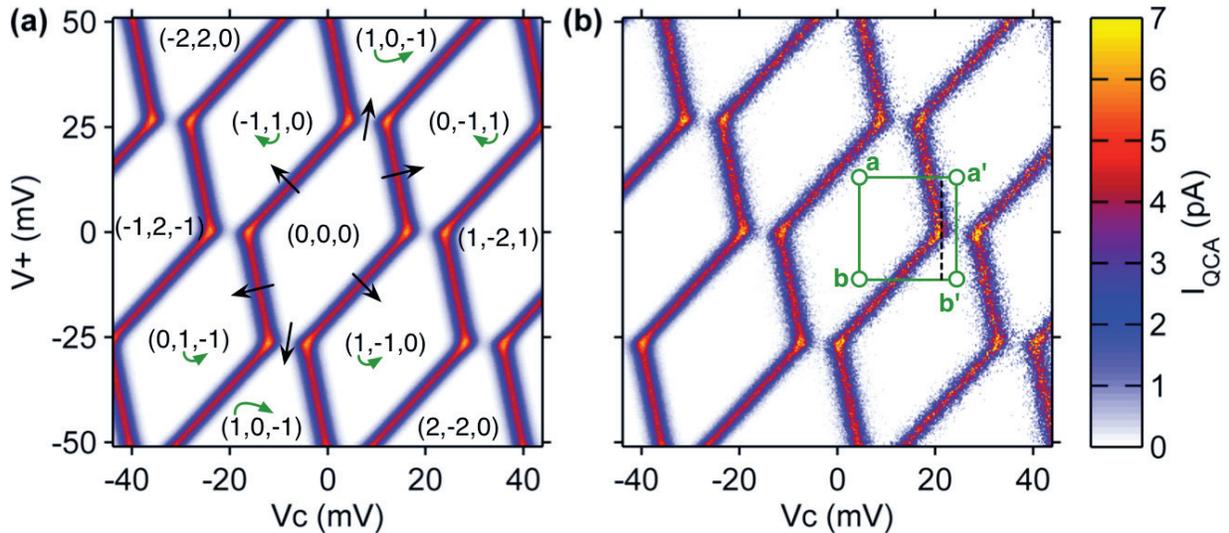


Figure 3.6 (a) Diagrammes de stabilité de la demi-cellule QCA sans tension appliquée sur les SET détecteurs de charge. La configuration électronique des états stables de charge est indiquée par les triplets (q_G, q_C, q_D) en unités de la charge électronique e . Les flèches indiquent le déplacement des électrons lors des transitions d'une région à l'autre. (b) Diagramme de stabilité avec les tensions d'opération appliquées au SET. Les quatre coins du carré (a, a', b, b') indiquent les points d'opération de la demi-cellule QCA entre les états $(0,0,0)$, $(0,-1,1)$ et $(1,-1,0)$. Le pointillé indique la transition entre les états $(0,-1,1)$ et $(1,-1,0)$ dans l'état actif.

Dans les deux diagrammes de stabilité, les zones blanches sans courant sont des régions de stabilité de la charge où les niveaux d'énergie des trois îlots de la demi-cellule sont loin les uns des autres. Dans ces régions, la charge de chacun des îlots est indiquée par le triplet (q_G, q_C, q_D) . Les q_i sont exprimés ici en multiple de e , la charge d'un électron. Ces régions sont délimitées par des zones de transition où les niveaux d'énergie de deux des trois îlots sont alignés, ce sont les quatre lignes formant les côtés des hexagones dans le diagramme. Les croisements des lignes sont les points triples [van der Wiel *et al.*, 2003] où les trois niveaux d'énergie s'alignent et permettent une transition des électrons à travers toute la demi-cellule. Ces régions sont donc celles où le courant est le plus élevé puisque les deux jonctions contribuent au courant. La transition d'un état stable à un autre se fait

à travers chacun des côtés des hexagones, comme indiqué par les flèches dans la figure 3.6. Les petites flèches courbées montrent le sens du déplacement de l'électron ($q = -e$) lors de la transition de l'état $(0,0,0)$ à l'état indiqué. On peut aussi voir dans ce diagramme que le haut et le bas des hexagones sont ouverts. Ceci vient du fait que, contrairement aux 4 transitions impliquant deux îlots adjacents, les deux transitions du haut et du bas sont des transitions où un électron doit passer de l'îlot de gauche à l'îlot de droite sans passer par l'îlot du centre. Cette transition étant beaucoup moins probable, le courant à travers cette transition est beaucoup plus faible. Lorsque les grilles de la demi-cellule passent d'un hexagone à l'autre par ces transitions verticales, le système se trouve dans un état métastable tel que décrit par [Toth et Lent, 1999]. On peut estimer que la durée de vie de cet état est de l'ordre de la microseconde en utilisant la valeur du courant dans la transition. Ceci correspond à ce qui a été précédemment publié par [Orlov *et al.*, 2000] où ils indiquent que ces états se désexcitent par effet tunnel cohérent (*cotunnelling*, [Averin et Odintsov, 1989]). L'état bloqué discuté à la section 2.3.1 n'est donc observable que pour des mesures ou simulations à haute fréquence ($f \gg 1$ MHz) qui ne sont pas possibles avec SIMON.

Lorsque le diagramme de la figure 3.6b est obtenu, on choisit les états d'opération, en l'occurrence $(0,0,0)$ pour l'état nul puis $(0,-1,1)$ et $(1,-1,0)$ pour l'état actif et bloqué. Ces trois états sont intéressants à utiliser d'abord parce qu'ils sont adjacents l'un à l'autre, ce qui évite de passer plusieurs transitions inutiles à l'obtention de l'effet bistable (logique binaire). De plus, dans une logique d'application, on cherche à avoir des états compatibles avec des tensions de sources qui pourraient elles aussi être binaires. On note aussi que puisque les îlots de la demi-cellule sont isolés électriquement, on utilise les états à nombre d'électrons initial plutôt que d'ajouter un électron supplémentaire dans la cellule comme le prévoyait le concept original de QCA. Puisque deux grilles sont nécessaires pour l'opération adéquate de la demi-cellule, quatre points d'opération peuvent être utilisés, ce qui donne les points a , a' , b et b' à la figure 3.6b en vert. Les points a et b du carré d'opération du QCA se trouvent dans l'hexagone $(0,0,0)$ et correspondent donc à l'état nul où le changement de la tension d'entrée V_+ n'affecte pas l'état de charge stable de la cellule. Les points a' et b' correspondent respectivement aux états $(0,-1,1)$ et $(1,-1,0)$ où un électron se déplace d'un des îlots latéraux vers l'îlot central et donne l'état actif. Cet état actif est accessible lorsque le signal d'horloge est augmenté jusqu'à ce que la droite reliant a et b croise l'une des deux lignes de transition d'état. L'état actif est représenté par le trait pointillé noir dans le carré de la figure 3.6b. Lorsque le signal d'horloge est à son amplitude maximale (points a' et b'), la demi-cellule est stabilisée dans l'un des deux états. Le changement de la tension d'entrée V_+ à ce point fait passer la demi-cellule de l'état $(0,-1,1)$ à l'état

(1,-1,0). Comme mentionné dans le paragraphe précédent, cette transition n'est pas aussi probable puisque l'électron doit traverser les deux jonctions tunnel en plus de l'îlot central sans état accessible. Les points a' et b' permettent donc l'état bloqué, mais seulement lorsque la fréquence d'opération est plus grande que la fréquence de désexcitation de cet état métastable.

Une note importante à ajouter à ces simulations est que le signal d'entrée est toujours appliqué uniquement sur $V+$ puisque SIMON ne permet pas la simulation de tensions symétriques pour un même axe de variation. L'impact de cette dissymétrie est que, dans les diagrammes de stabilité, on observe une inclinaison des hexagones, ce qui réduit substantiellement la plage disponible pour le positionnement du carré d'opération défini par les points a , a' , b et b' . Cette limitation ne permet pas d'étudier le système complet, mais permet une bonne estimation des performances et des possibilités et de son fonctionnement.

Lorsque ces points d'opération sont connus, on peut valider que la demi-cellule fonctionne correctement en testant la détection de son état par les détecteurs de charge SET. La figure 3.7 donne le résultat de cette simulation temporelle avec (a) les signaux d'entrée $V+$, $V-$ et le signal d'horloge V_C , (b) la charge calculée sur chacun des îlots (gauche, centre et droite), puis (c) le courant dans les deux SET. Les signaux d'entrée et d'horloge sont configurés pour tester les différentes transitions offertes par le carré d'opération. Une transition de $V+$ dans les deux directions est effectuée lorsque l'horloge V_C est haute et basse. On observe en (b) que le nombre de charges dans les îlots correspond bien à ceux prévus par le carré d'opération, c'est-à-dire un électron au centre de la cellule et un électron dans l'un des deux îlots latéraux seulement lorsque V_C est haut. En (c), le courant des deux SET est relativement plat, à l'exception des moments où V_C est haut. À ce moment, on voit que l'un des deux SET a une diminution du courant d'environ 4 pA. Le SET qui subit cette diminution de courant est du côté opposé au transfert d'électron. Ceci s'explique par le fait que dans la géométrie utilisée ici (J117Y - voir figure 3.8), le couplage de l'îlot du SET de gauche à l'îlot QCA de gauche et du centre sont presque équivalents (0,7 aF et 0,6 aF respectivement) alors que le couplage à l'îlot QCA de droite est seulement de 0,1 aF. L'ajout d'un électron sur l'îlot central est donc pratiquement compensé par la perte de cet électron dans l'îlot de gauche. En contrepartie, l'îlot de droite ne voit que l'ajout de l'électron à l'îlot central. Il le détecte comme une diminution du potentiel de son propre îlot donc une diminution du courant puisque son point d'opération est sur le flanc gauche du pic de Coulomb (voir figure 3.5).

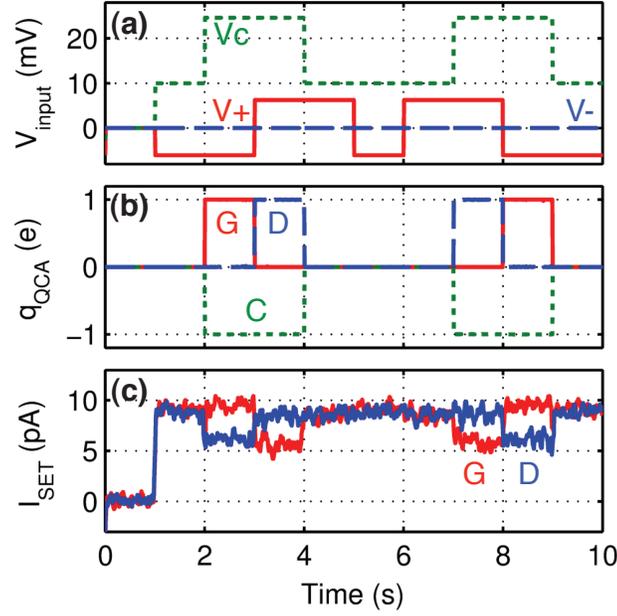


Figure 3.7 Traces simulées en fonction du temps de l'opération de la demi-cellule QCA avec horloge. (a) Signaux d'entrée ($V+$ et $V-$) et d'horloge (V_C) de la demi-cellule. (b) Charge calculée pour les îlots de gauche (G), centre (C) et droite (D). (c) Courant simulé dans les SET de gauche et de droite.

Tel que mentionné plus haut, ces traces temporelles comportent une composante de compensation puisque les grilles de contrôle de la demi-cellule QCA ont aussi un couplage direct avec l'îlot des SET. La compensation peut être réalisée de deux façons différentes. La première est d'ajuster au fil du temps la tension de la grille V_G des SET pour compenser la tension appliquée sur la grille QCA. La tension de grille appliquée aux SET a donc la forme donnée à l'équation 3.6 :

$$V_{G-Si'} = V_{G-Si} - \sum_{j \neq i} V_{Gj} \frac{C_{Gj}}{C_{\Sigma i}}, \quad (3.6)$$

avec $V_{G-Si'}$ la tension de grille SET compensée, V_{G-Si} la tension de grille au point d'opération SET, i l'indice de l'îlot SET et j l'indice de l'électrode à compenser. La somme se fait sur toutes les électrodes dont la tension est non nulle. Cependant, dans le cas particulier où deux SET doivent être compensés, cette méthode mène à une formulation circulaire puisque la grille du second SET doit être compensée, mais cette compensation a à son tour un effet sur la grille du premier SET. La deuxième méthode est donc de réaliser la compensation en opérant la demi-cellule dans un régime où aucun électron ne change d'îlot, ce qui permet de mesurer l'impact de l'opération sur les SET. Le carré d'opération de la figure 3.6b est donc déplacé et réduit pour opérer seulement dans un seul hexagone, le (0,0,0) par exemple. Le dispositif est ensuite opéré avec le même carré d'opération, mais

déplacé à l'endroit donné dans la figure pour permettre le transfert de l'électron. Les mesures de SET avec et sans échange d'électrons sont ensuite soustraites pour éliminer l'effet du changement de la tension des grilles et des îlots. On obtient ainsi une mesure de courant où les seuls sauts sont causés par les changements en nombre d'électrons des îlots. Cette deuxième méthode de compensation élimine le problème des compensations circulaires, mais limite la plage d'opération du QCA, puisque le carré doit entrer complètement dans une région stable (hexagone) du diagramme de stabilité du QCA pour fonctionner. Lors des expériences et des circuits réels, une calibration pourrait être mesurée dans certaines conditions puis extrapolée à une compensation des détecteurs de charge. Aussi, dans les conditions réelles du circuit, les électrodes des signaux d'entrée se trouvent beaucoup plus loin des détecteurs de charge d'état de sortie et donc ce problème est grandement réduit.

La variation du courant de ~ 4 pA peut être mesurable par diverses méthodes comme celle présentée à la section 2.3.2 par [Prager *et al.*, 2011, 2009]. Comme mentionné dans cette section aussi, la correction pour les événements de charge aléatoire comme la charge/décharge d'un défaut en proximité du SET peut causer des erreurs de lecture qui peuvent être compensées par l'utilisation des deux SET en combinaison. La méthode développée par [Brenner *et al.*, 2003] permet cela en éliminant les événements où un seul des deux SET subit un changement important. Ainsi, la présence des deux détecteurs de charge est utile ici pour rendre la détection plus robuste.

La figure 3.7c démontre aussi que SIMON ne peut simuler l'état bloqué puisque même lorsque l'horloge est en état haut, le transfert d'un électron de l'îlot de droite vers l'îlot de gauche se fait. Ceci s'explique par le fait que plutôt que de calculer une séquence d'événements qui mène à un courant, SIMON calcule le taux de transitions tunnel dans chaque branche du circuit dans des conditions de tension fixe et répète ce processus pour chaque point donné dans la liste d'entrées. Il ne tient donc pas compte de l'état transitoire important ici pour observer l'état bloqué. La réduction de l'échelle de temps largement en dessous de la limite à laquelle l'effet tunnel cohérent devient négligeable n'améliore pas cette situation, prouvant que SIMON ne peut pas simuler l'état bloqué.

3.4 Limites à la miniaturisation

Dans les présents travaux, la géométrie décrite (voir figure 3.3 et chapitre 4) a été optimisée pour les techniques de fabrication disponibles dans les laboratoires de l'Université de Sherbrooke. Ceci dit, le modèle décrit dans cette section permet de prendre en compte toutes les géométries de fabrication possibles. On compare donc dans cette section des

demi-cellules QCA avec horloge avec des tailles variables et surtout plus petites que ce qu'il est actuellement possible de fabriquer. Ceci permet d'obtenir les paramètres d'opération comme l'énergie de charge et la température maximale d'opération pour des dispositifs futurs miniaturisés au maximum. La comparaison est aussi faite avec les travaux de référence de [Orlov *et al.*, 2000] pour lesquels le procédé est légèrement différent, mais reste comparable. Le schéma de la figure 3.8a montre une jonction tunnel et identifie les trois dimensions de cette géométrie en fonction du procédé de fabrication anticipé. w_T est la largeur des tranchées ou des lignes fabriquées par lithographie électronique. t_{CMP} est la profondeur de la tranchée après polissage CMP c'est-à-dire l'épaisseur de métal des îlots et contact dans le dispositif final. t_{ox} est l'épaisseur d'oxyde utilisé pour la jonction tunnel.

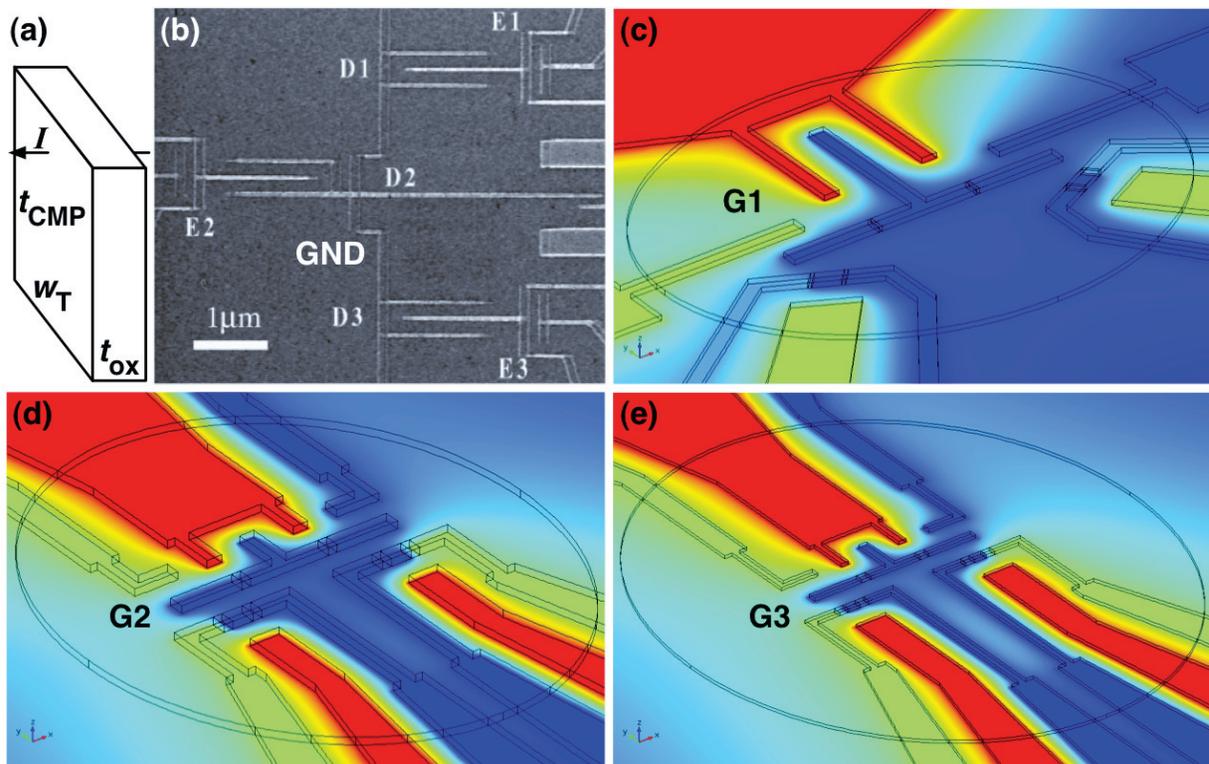


Figure 3.8 Comparaison des géométries de demi-cellule QCA avec horloge simulées. (a) Géométrie de la jonction tunnel considérée. (b) Les travaux de référence de [Orlov *et al.*, 2000] avec une section de jonction de $w_T \times t_{\text{CMP}} = 60 \times 60 \text{ nm}^2$. Géométries simulées, de section : $w_T \times t_{\text{CMP}} =$, (c) $30 \times 10 \text{ nm}^2$, (d) $10 \times 5 \text{ nm}^2$, (e) $5 \times 2 \text{ nm}^2$.

La figure 3.8b rappelle la géométrie utilisée par le groupe de Notre-Dame dans les démonstrations de principe à très basse température. Les îlots (D1-D3) dans cette géométrie font de 2 à 7 μm de longueur et 60 nm de largeur en incluant les capacités de couplage les reliant aux SET (E1-E3). La section typique des jonctions tunnel est de $w_T \times t_{\text{CMP}} = 60 \times 60 \text{ nm}^2$. Les épaisseurs d'oxyde d'aluminium utilisées ne sont pas données dans leurs travaux, mais

correspondent à des capacités de jonction tunnel de l'ordre de 100 à 200 aF. Aux figures 3.8c-e, les géométries simulées par la méthode développée ici sont présentées. En (c), la géométrie est celle fabriquée alors qu'en (d) et (e), une géométrie plus petite et plus compacte est utilisée avec des propriétés similaires. Le tableau 3.3 présente les dimensions prises en compte dans la comparaison et la simulation des différentes géométries. L'oxyde utilisé pour les géométries G1 à G3 a une épaisseur de 6 nm et une permittivité diélectrique $\varepsilon_r = 3,5$.

Tableau 3.3 Dimensions considérées pour la comparaison des géométries simulées (nm). L est la longueur, w_T la largeur et t_{CMP} l'épaisseur de l'îlot.

Géométrie	Îlots latéraux			Îlot central			Îlots SET		
	w_T	t_{CMP}	L	w_T	t_{CMP}	L	w_T	t_{CMP}	L
GND	60	25	5200	60	50	7800	60	50	2500
G1	30	10	172	30	10	479	30	10	50
G2	10	5	42	10	5	84	10	5	14
G3	5	2	32	5	2	59	5	2	8

Tel que décrit par [Thorbeck *et al.*, 2012], le modèle plaques parallèles de calcul des capacités ne tient pas compte des champs de frange qui sont dominants dans les géométries où la distance entre les plaques n'est pas beaucoup plus faible que la taille des plaques et que les plaques ne sont pas minces, comme c'est le cas ici. Lors du calcul des capacités par éléments finis, ce ne sont donc pas seulement les faces parallèles de chacune des capacités, mais bien toutes les faces de l'îlot et de l'électrode correspondante qui sont prises en compte. Comparer la section des jonctions tunnel ($w_T \times t_{\text{CMP}}$) avec le volume de l'îlot ($w_T \times t_{\text{CMP}} \times L$) permet donc d'obtenir le portrait complet de la tendance en termes des paramètres d'opération de la demi-cellule QCA. En particulier, à la figure 3.9, la température d'opération maximale respectant le critère $E_C > 10k_B T$ est tracée en fonction de la taille de l'îlot, soit en section de jonction tunnel (rouge) ou en volume de l'îlot (bleu). Les triangles dans la figure représentent une simulation identique, à l'exception de la couche de passivation qui est remplacée par de l'air ($\varepsilon_r = 1$). Ceci permet de réduire significativement les capacités parasites engendrées par la passivation de Si_3N_4 dont la permittivité est de $\varepsilon_r = 8$. Dans le contexte du procédé actuel, le matériau du substrat (SiO_2 , $\varepsilon_r = 3,9$) peut difficilement être remplacé par un matériau à permittivité inférieure et n'est donc pas changé dans ce cas-ci. Cette simulation sans passivation représente donc la limite supérieure en termes de matériaux puisque tous sont minimisés pour favoriser une plus grande température d'opération. Les points pleins du graphique correspondent à la géométrie G1 fabriquée dans ce travail, les points marqués d'une croix correspondent aux

valeurs extraites des publications du groupe de Notre-Dame³ (géométrie GND) et les points ouverts aux géométries G2 et G3. Pour chacune des géométries, les trois points représentent les trois tailles d'îlots différentes retrouvées dans chaque géométrie, en l'occurrence, les îlots latéraux, l'îlot central et les îlots des SET. Dans le cas de la section de jonction tunnel, les trois points sont positionnés les uns au-dessus des autres puisque dans toutes les géométries, c'est l'élément constant défini par le procédé de fabrication.

La géométrie GND, utilisée par le groupe de Notre-Dame pour réaliser les démonstrations importantes en relation au QCA a l'avantage principal d'être facile à contrôler et à réaliser. Cependant, la méthode d'évaporation à angle ne permet pas de réduire les tailles des jonctions de façon importante. Aussi, dans leur dessin, les capacités de couplage entre les îlots QCA et SET avec les grilles sont grandes et larges à cause du couplage en forme de « U ». Les tailles et capacités d'îlot sont donc très grandes. La géométrie utilisée dans les présents travaux a l'avantage d'une taille beaucoup plus petite des îlots et un couplage aux grilles et au SET de lecture direct, par proximité. La surface occupée par la partie active des dispositifs est donc grandement réduite, passant de $6 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m} = 36 \mu\text{m}^2$ à une surface d'environ $0,6 \mu\text{m} \times 0,6 \mu\text{m} = 0,36 \mu\text{m}^2$, soit un facteur 100 de réduction de taille. Il est aussi à noter que, la géométrie G1 fabriquée est conçue en tenant compte des tolérances d'alignement permises par le système de lithographie disponible au laboratoire et ne constitue pas une limitation physique au procédé, tel que décrit dans le chapitre 4. Au contraire, en industrie [ITRS, 2011], les résolutions d'alignement sont plus faibles et permettraient donc la fabrication de géométries similaires à G2 et G3, plus petites. De plus, le procédé nanodamascène permet d'éliminer la partie supérieure de la jonction tunnel inhérente au procédé d'évaporation à angle, ce qui réduit d'un facteur important la capacité des jonctions (figure 2.8). On passe en effet d'une section de jonction de $60 \times 60 \text{ nm}^2$ à $30 \times 10 \text{ nm}^2$, une réduction d'un facteur 12.

La régression polynomiale faite dans la figure 3.9 montre bien que la réduction de la taille des jonctions tunnel et des îlots permet d'en augmenter l'énergie de charge et par conséquent leur température maximale d'opération. La pente obtenue pour les régressions en section de l'îlot sont de $-0,89$ et $-1,04$ pour la passivation au Si_3N_4 et à l'air respectivement. Ces pentes sont très proches de la valeur attendue de -1 pour un comportement dépendant de la section des jonctions (équation 4.1).

$$T \propto E_c \propto \frac{1}{C_\Sigma} \propto A^{-1} \propto V^{-2/3} \quad (4.1)$$

³ Les dimensions ou capacités exactes n'étant pas toutes données dans la publication de [Orlov *et al.*, 2000], une estimation à partir des autres publications du groupe est utilisée [Amlani *et al.*, 2000; Orlov *et al.*, 1999, 2004].

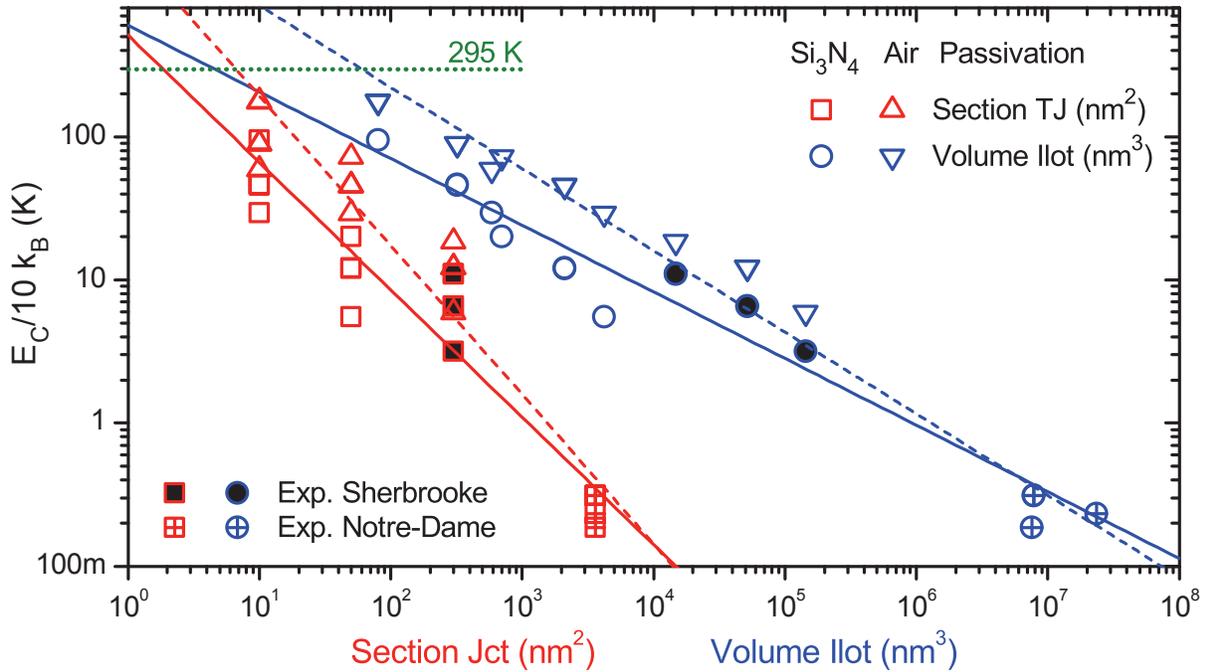


Figure 3.9 Température d'opération maximale d'un îlot métallique en considérant $E_C = 10k_B T$ en fonction de la section des jonctions tunnel et du volume de l'îlot. Les lignes indiquent une régression linéaire en log-log (apparente) et le pointillé indique la température ambiante (295 K). Les symboles ouverts sont les valeurs simulées pour les géométries les plus petites. Les symboles pleins sont des simulations avec la géométrie fabriquée (voir chapitre 4). Les symboles avec croix sont les valeurs expérimentales publiées par [Orlov *et al.*, 2000]. Les points triangulaires et les régressions pointillées sont associés aux mêmes paramètres, mais sans le Si_3N_4 de passivation.

Dans le cas du volume la pente attendue est plutôt $-2/3$ (équation 4.1), et on obtient $-0,49$ et $0,57$ pour le Si_3N_4 respectivement. La correspondance de ces régressions avec les dépendances théoriques montre que la section des jonctions et le volume total de l'îlot sont bien des paramètres importants dans l'opération des dispositifs monoélectroniques. En tenant compte de cette tendance, on extrait une taille d'îlot nécessaire à l'opération à température ambiante d'environ $4,6 \text{ nm}^3$ en volume d'îlot ou $1,9 \text{ nm}^2$ en section d'îlot, ce qui correspond respectivement à $1,7 \text{ nm}$ et $1,4 \text{ nm}$ de dimension moyenne des îlots passivés.

Dans le cas des échantillons non passivés, la taille minimale des îlots est de 60 nm^3 en volume d'îlot ou $6,6 \text{ nm}^2$ en section d'îlot ce qui correspond respectivement à $3,9 \text{ nm}$ et $2,6 \text{ nm}$ de dimension moyenne. Ces dimensions sont tout de même très petites en considérant que des électrodes doivent être amenées jusqu'à ces îlots. Elles se situent tout juste à la limite de ce qui est prévu dans les prévisions les plus poussées de l'ITRS.

Ces résultats vont dans le même sens que ce qui a été prédit par le passé au sujet des SETs, en particulier les SET métalliques [Likharev, 2003]. En effet, Likharev affirme que la technologie des dispositifs à îlots métalliques devra atteindre des tailles de l'ordre d'au plus quelques nanomètres pour permettre des énergies de charge suffisamment grandes pour fonctionner à température ambiante. Dans certaines conditions, le critère $E_C > 10k_B T$ devrait aussi être augmenté jusqu'à $100k_B T$ [Likharev, 1999], limitant sévèrement le fonctionnement à température ambiante. [Snider *et al.*, 2008] ont aussi mentionné que dans le cas des QCA, ces critères seraient présents et que des tailles d'îlot moléculaires garantiraient une température d'opération supérieure à l'ambiante. Les résultats de la figure 3.9 complètent ces prédictions en ajoutant la contribution des capacités parasites. Celles-ci, inévitablement ajoutées aux îlots par les électrodes et autres îlots et détecteurs de charge, contribuent de façon significative à leur capacité totale et donc à réduire leur température d'opération. Aussi, une augmentation de la densité est nécessaire lorsque l'on passe d'une preuve de concept au circuit utile comprenant beaucoup de dispositifs intégrés de façon compacte. L'impact des dispositifs voisins doit donc être pris en compte pour mieux estimer les performances de tels circuits et leurs limites.

3.5 Conclusion

Le développement d'un simulateur permettant la modélisation du courant à travers une jonction tunnel a été fait. Ce modèle prend en compte les paramètres importants d'une jonction tunnel comme la permittivité diélectrique, la masse effective, la hauteur de barrière ainsi que tous les paramètres géométriques. La force image réduisant la largeur et la hauteur effective de la barrière est aussi pris en compte pour améliorer la qualité du modèle. Cet outil est indispensable à l'étude des jonctions tunnel fabriquées dans le cadre de ces travaux.

Une plateforme de simulation incluant les effets réalistes de la géométrie d'un échantillon fabriqué pour le calcul de la matrice de capacités du système et le blocage de Coulomb inhérent aux dispositifs à faible dimensionnalité a été développée. Cette méthode permet la simulation de dispositifs SET en plus de configurations plus complexes comme la demi-cellule QCA avec SET de détection de charge. Il est aussi possible d'adapter cette méthode à divers circuits similaires, comme démontré dans le chapitre 7. Des mesures électriques de SET à basse température, notamment des diagrammes de stabilité (diamants de Coulomb) et des mesures de détection de charge à l'aide d'un SET y sont comparés. Ces mesures expérimentales permettent de valider les modèles.

La plateforme a aussi permis l'étude plus détaillée de la miniaturisation de la cellule QCA. On montre que la température d'opération dépend de la section de l'îlot et de son volume. L'extrapolation de cette dépendance permet de déterminer les dimensions ultimement nécessaires à la réalisation de circuit QCA fonctionnant à température ambiante. Ces dimensions sont en fait à la limite de ce qu'il est possible de fabriquer aujourd'hui. L'architecture doit donc être optimisée pour permettre une plus grande température d'opération.

CHAPITRE 4

PROCÉDÉ DE FABRICATION

4.1 Infrastructures et méthodes utilisées

La partie expérimentale de ce projet a été réalisée en majeure partie dans les laboratoires de l'Université de Sherbrooke. Dans les salles blanches (laboratoire de nanofabrication et nanocaractérisation - LNN) de l'Institut Interdisciplinaire d'Innovation Technologique (3IT), on retrouve tous les équipements pour réaliser entre autres la lithographie UV et électronique, les procédés chimiques et plasmas, le polissage CMP ainsi que la caractérisation physique (SEM, AFM et électrique). La principale partie du travail de développement du procédé y a donc été réalisé. La station sous pointe avec analyseur paramétrique du laboratoire de caractérisation et de synthèse des matériaux (LCSM) du 3IT a aussi été utilisée pour la plupart des caractérisations électriques à température ambiante. Une partie des dépôts de métaux, la micro soudure et l'ensemble des caractérisations cryogéniques ont été réalisés dans l'Infrastructure des Matériaux et Dispositifs Quantiques (IMDQ) du département de physique. Quelques dépôts d'alumine ont été réalisés par *atomic layer deposition* (ALD) en France à la PTA (Grenoble) grâce à la collaboration du Laboratoire Nanotechnologies Nanosystèmes (LN2) - CNRS UMI-3463¹.

L'annexe C donne plus de détail sur les développements connexes menant au procédé décrit ici et sur les diverses méthodes de caractérisations utilisées dans le cadre de ce projet. L'annexe D donne quant à elle le détail de toutes les étapes typiques de procédé, c'est-à-dire la version finale du procédé utilisé.

4.2 Procédé nanodamascène

La fabrication de dispositifs monoélectroniques peut être réalisée de plusieurs façons différentes, comme démontré dans le chapitre 2. Le procédé qui est développé ici est basé sur les travaux originaux de [Dubuc *et al.*, 2008; Guilmain, 2013] dont les principales étapes sont représentées schématiquement à la figure 2.9 et détaillées ici à la figure 4.1.

¹ Unité mixte internationale (UMI) du Centre national de la recherche scientifique (CNRS) en France.

La plupart des étapes ont été décrites précédemment² et sont donc décrites sommairement ici.

Les substrats de départ sont des tranches de silicium de 100 mm sur lesquelles une croissance thermique sèche d'oxyde de silicium (SiO_2) de 150 nm est réalisée. Les étapes classiques de nettoyage du silicium sont réalisées avant l'oxydation, de façon à avoir une bonne qualité d'oxyde.

Ensuite vient la première étape de photolithographie (UV1) qui permet de graver des tranchées dans l'oxyde. Ces tranchées de 60 nm de profondeur servent pour les contacts, c'est-à-dire qu'elles forment des plots de contact striés et des chemins d'amenées permettant de connecter des pointes de micromanipulateur aux dispositifs. Des marques d'alignement pour les étapes subséquentes de lithographie sont aussi incluses dans cette UV1. Les motifs sont transférés à l'aide d'une résine positive Shipley S1805 exposée à de la lumière UV à travers un masque et sont développés avec une solution basique (MF-319). Une gravure plasma ICP (*Induced Coupled Plasma*) est utilisée pour transférer le motif de la résine dans la couche de SiO_2 . L'échantillon est ensuite nettoyé aux solvants et au plasma d'oxygène avant de poursuivre le procédé.

L'étape suivante (étapes 1 et 2 de la figure 4.1) est une première électrolithographie (EBL1) qui permet de définir les tranchées de 20 nm de profondeur qui formeront les électrodes source, drain et grille des dispositifs. Ces tranchées sont aussi reliées aux amenées fabriquées à l'étape précédente (UV1). La résine utilisée est de la ZEP 520 diluée dans l'anisole (2,4:1) et est sensible au faisceau d'électrons utilisé pour l'exposer. Le développement se fait dans l'O-Xylène durant 75 s, suivi de 15 s dans du MIBK pour arrêter le développement, puis l'échantillon est séché directement. La gravure plasma, comme pour l'étape UV1, est ensuite utilisée pour transférer le motif dans l'oxyde. S'ensuit un nettoyage classique.

Les étapes 3 à 5 de la figure 4.1 montrent la formation de l'îlot par soulèvement avec une deuxième électrolithographie (EBL2). Ici, deux couches de résine, l'une sensible et l'autre faiblement sensible au faisceau d'électrons, sont utilisées pour obtenir une structure en porte-à-faux nécessaire au procédé de soulèvement. La ZEP est ici aussi développée dans de l'O-Xylène pendant 75 s. Son développement est arrêté avec 5 s d'alcool isopropylique puis la résine MMA est développée dans un mélange d'alcool isopropylique dilué à l'eau (4:1) avant un rinçage à l'eau et un séchage final. Le métal de l'îlot est ensuite déposé (25 nm), puis un solvant (Remover 1165) et quelques secondes d'ultrasons permettent de dissoudre la résine et ainsi soulever le métal excédentaire. Afin de réaliser un alignement

² Voir [Guilmain, 2013; Guilmain *et al.*, 2013; Morissette, 2010; Richard, 2013].

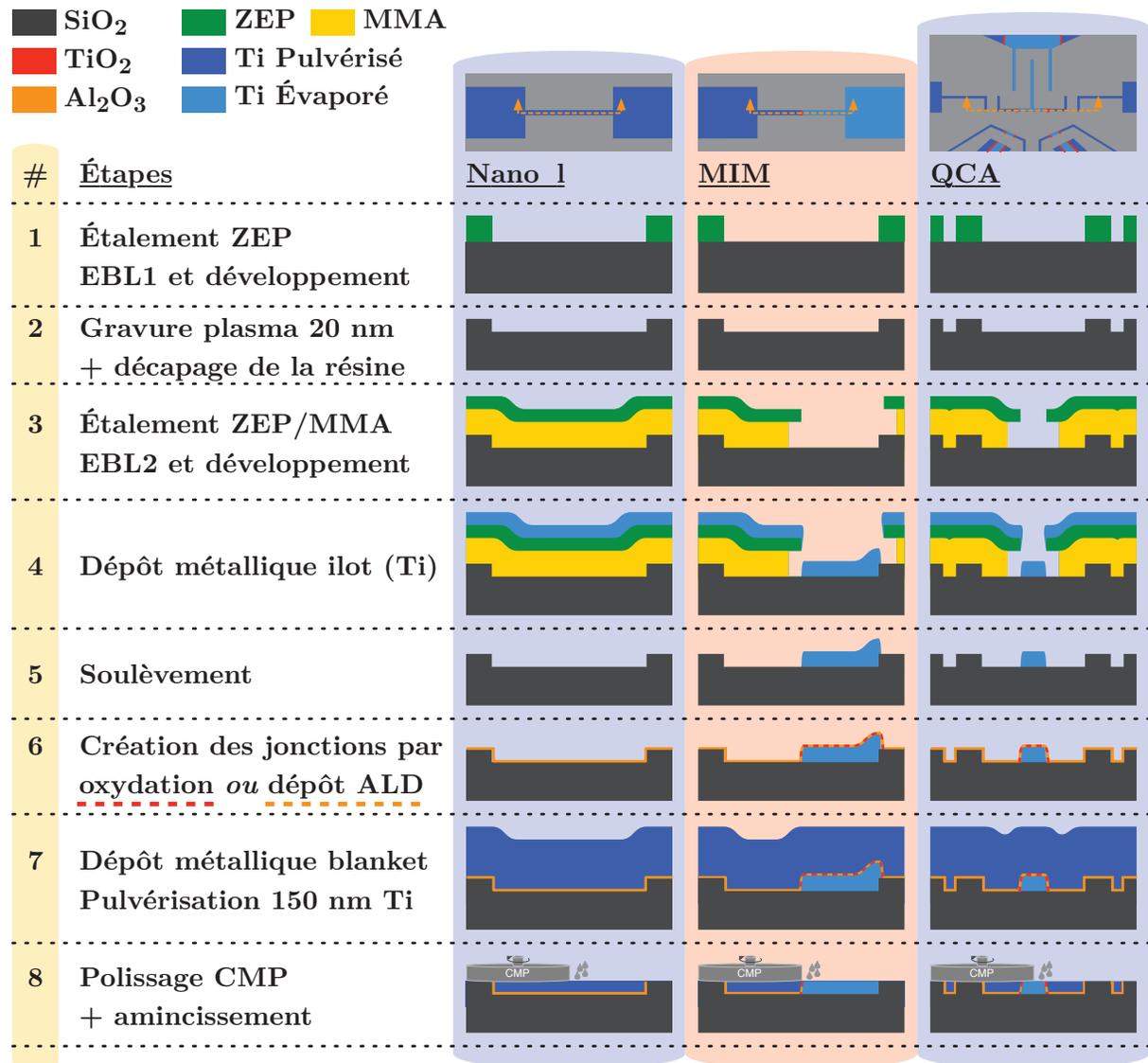


Figure 4.1 Procédé nanodamascène détaillé pour la fabrication de nanofils, de jonctions tunnel uniques (MIM) et d'une demi-cellule QCA. Les vues en coupes sont réalisées dans les schémas du haut au pointillé fléché. Le substrat de Si n'est pas montré par souci de clarté du schéma. Le pointillé aux étapes 6 à 8 indique la couche d'oxyde métallique créée par oxydation.

adéquat, il est nécessaire de bien voir les marques d'alignement au SEM. Cependant, la résine, isolante, réduit la visibilité et il faut donc minimiser l'épaisseur des résines. En contrepartie, la hauteur de la structure en porte-à-faux doit être d'au moins 3 fois l'épaisseur du métal déposé pour obtenir une bonne séparation du métal sur la résine et celui du motif voulu. Ainsi, la MMA est déposée pour avoir environ 95 nm d'épaisseur et la ZEP est plus diluée qu'à l'EBL1 pour avoir une couche faisant 40 à 50 nm. Ceci permet

une visibilité adéquate des marques d’alignement les plus petites et offre généralement une précision d’alignement entre 50 et 100 nm.

On crée ensuite la jonction tunnel par l’oxydation plasma de l’îlot ou par le dépôt d’un matériau isolant par une méthode appropriée, telle que de la déposition par couche atomique (ALD). Cet isolant doit avoir les propriétés décrites au chapitre 3. L’étape 6 de la figure 4.1 montre la différence entre les deux techniques. La première crée un oxyde à partir du métal de l’îlot et il n’est donc présent que sur l’îlot C’est le métal qui détermine l’oxyde généré. La deuxième méthode dépose une couche d’oxyde qui peut ou pas être l’oxyde du métal de l’îlot sur tout l’échantillon. Ceci a pour effet de réduire la profondeur et la largeur des tranchées, ce qui avantage aussi le procédé puisque la taille effective de l’îlot et des électrodes en est d’autant réduite. Cette deuxième méthode permet aussi le choix d’une variété d’oxyde plutôt que d’être restreint à l’oxyde conjugué du métal de l’îlot. Il faut tout de même garder en tête que le métal de l’îlot peut s’oxyder naturellement. Ainsi, même dans le cas d’un oxyde déposé, les deux couches peuvent être présentes et doivent être considérées dans la caractérisation du dispositif. Le choix de la méthode de création de l’oxyde est déterminé par les caractéristiques électriques de la jonction voulue. Les détails sont donnés dans les chapitres 5 et 6.

On poursuit ensuite le procédé par le dépôt d’un matériau conducteur (métal) sur toute la surface de l’échantillon afin de remplir les tranchées d’amenées UV1 et EBL1. (étape 7 du procédé, figure 4.1). Les diverses méthodes de dépôt et les matériaux testés sont décrits en détail aux chapitres 5 et 6.

La planarisation par CMP (étape 8 figure 4.1) permet ensuite d’éliminer l’excédent de métal, d’uniformiser la topographie de l’échantillon et de déconnecter les différentes électrodes du circuit (source, drain, grille). Ici, pour du titane, l’étape est réalisée à l’aide d’une solution basique de la compagnie Allied High Tech Products, Inc. contenant des nanoparticules de silice de 50 nm de diamètre et diluée dans de l’alcool isopropylique (IPA) [Ecoffey *et al.*, 2011].

À ce point-ci, la caractérisation électrique débute et peut s’alterner avec des ajouts de temps de CMP pour amincir les dispositifs ou révéler ceux qui ne le seraient pas encore. Il est aussi possible de passiver l’échantillon par le dépôt de nitrure de silicium Si_3N_4 . S’ensuit une photolithographie à double couche de résine LOR3A et S1805 pour reprendre la connexion aux plots de contact. Une gravure plasma du nitrure ouvre les plots et un dépôt de métal soulevé par la suite permet une connexion permanente et fiable aux plots striés encastrés dans le SiO_2 (voir section C.2 pour les détails du procédé).

Le détail de divers développements reliés à chacune des étapes décrites ci-dessus est donné dans les sections suivantes. En particulier, les détails des motifs utilisés et des divers essais faits pour améliorer le procédé en soi sont présentés. Puisque le polissage CMP est l'étape critique du procédé (voir section 2.2.2), tous ces développements sont réalisés avec un objectif partiel d'optimiser le CMP. Les améliorations ayant trait aux matériaux utilisés sont plutôt discutées dans les chapitres de résultats expérimentaux (chapitres 5 et 6).

4.3 Photolithographie UV1v4 - Interconnexion

La première étape du procédé consiste à créer des tranchées dans l'oxyde servant de chemin d'amenée et définissant les plots de caractérisation. Cette étape est réalisée par photolithographie (UVL) parce que les plots ont de grandes surfaces et que les chemins d'amenée doivent avoir la résistance la plus faible possible pour ne pas interférer avec les dispositifs. Pour uniformiser l'étape de CMP, ce masque contient aussi des structures sacrificielles de $2\ \mu\text{m}$ de largeur sur toute la surface du masque inutilisée par les amenées et contacts. Ceci implique de grandes surfaces d'écriture et une grande quantité de motifs prohibant l'électrolithographie. Aussi, la précision requise sur la taille des motifs est moins importante ici, et l'on peut donc utiliser la photolithographie.

Le photo-masque utilisé est conçu pour générer plusieurs petits échantillons à partir d'une tranche de silicium de 100 mm. Ceci permet d'utiliser le parallélisme de la photolithographie pour créer, dans ce cas-ci, 25 échantillons carrés de 1 cm de côté. Le dessin du masque lithographié sur chaque échantillon (voir figure 4.2a) contient plusieurs cellules, chacune ayant une fonction particulière. Certaines servent de test pour le polissage, de marques d'alignement, de mesure de la qualité de la lithographie ou d'identification de l'échantillon. Les autres cellules sont des cellules conçues pour la fabrication de dispositifs nanométriques. Elles constituent un ensemble d'amenées reliant les plots de contact et la partie centrale de la cellule où les dispositifs nanométriques sont fabriqués. Plusieurs versions de ce type de masque ont été réalisées et utilisées dans le projet. Ces versions ont servi à l'amélioration du masque en termes d'uniformité du polissage CMP et d'arrangement des électrodes près des zones d'EBL. La version optimisée de ce masque (UV1v4) est décrite dans la section suivante alors que les versions antérieures ainsi que les résultats ayant permis l'optimisation sont donnés à l'annexe C.

La quatrième version du masque et de la cellule universelle, utilisée principalement pour l'obtention des dispositifs des chapitres 6 et 7, est présentée à la figure 4.2. La principale cellule utilisée pour la réalisation de QCA est une cellule dite « universelle » dont les

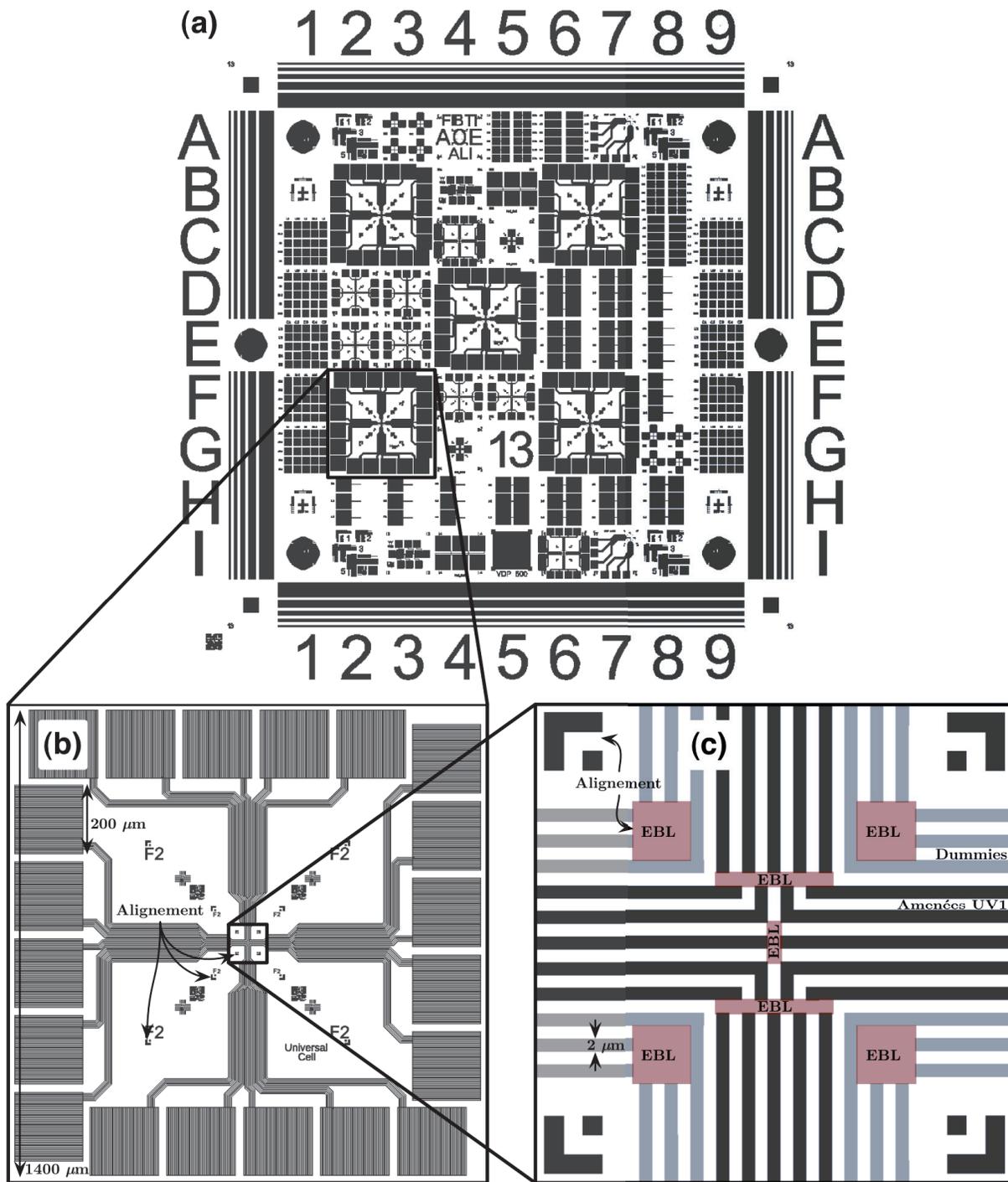


Figure 4.2 (a) Masque UV1v4 complet d'un échantillon de 1 cm \times 1 cm. (b) Agrandissement de l'une des 5 copies de la cellule universelle avec plots de 200 μm , amenées (foncé) et marques d'alignement. (c) Agrandissement du centre de la cellule avec *dummies* (pale). L'espace pour les marques d'alignement 4 et les zones d'EBL est indiqué en rouge.

détails sont donnés dans les deux agrandissements de la figure 4.2b-c. Cette cellule, plus grande que les autres cellules du masque, permet d'avoir 20 plots de contact de $200\ \mu\text{m}$ sur le pourtour de la cellule³ pour faciliter la caractérisation et la micro soudure le cas échéant. L'espace supplémentaire gagné par cette taille permet de multiplier la largeur effective des amenées afin de compenser l'augmentation de leur longueur. Les marques d'alignement sont positionnées aux endroits indiqués dans la figure et sont les mêmes pour toutes les cellules du masque afin d'avoir une procédure uniforme d'alignement. Plus de détails sur l'alignement sont donnés à la section 4.4.6. Le centre de la cellule est symétrique et comporte trois zones de 9, 2 et 9 contacts. La zone d'EBL du centre peut utiliser 6 contacts plutôt que 2 en prenant les contacts des zones du haut et du bas (zones en rouge dans la figure 4.2c). La surface sans motif a été réduite au minimum de $2\ \mu\text{m}$ dans les trois zones afin de maximiser l'uniformité du polissage.

Pour des raisons d'uniformité de planarisation CMP (section 4.5), les cellules E3, F4 et C4 ont été utilisées pour la fabrication de nanofils (NW), de jonctions tunnel unique métal-isolant-métal (MIM) et SET. Le motif de ces cellules est donné à la figure 4.3 avec un agrandissement des zones centrales. Les cellules E3 et F4 (figure 4.3a), sont toutes deux identiques aux cellules SET du masque NK Mv2 (section C.1.1), à l'exception de l'électrode centrale s'étendant jusqu'à $1\ \mu\text{m}$ du carré central (*dummy*). Ceci rend la lithographie impossible dans cet endroit puisque la moindre variation dans la qualité de l'exposition UV1 peut couper cette partie. Les coins de la zone centrale sont donc utilisés comme zones d'EBL pour ces deux cellules et sont indiqués par les régions en rouge. Ceci permet l'utilisation de 4 électrodes pour un seul dispositif et permet donc de fabriquer des SET à deux grilles tel que discuté plus loin (section 4.4.3). La cellule C4 est aussi utilisée dans ce contexte (figure 4.3b). Chaque zone d'EBL est reliée à quatre électrodes, ce qui permet aussi de fabriquer des SET doubles grille. De plus, ces zones permettent la fabrication aisée d'un NW juste à côté d'une MIM ($< 1\ \mu\text{m}$). Cela permet une correspondance directe de l'épaisseur des tranchées après CMP extraite de la mesure de résistance du NW et de l'épaisseur de la MIM. Les dispositifs fabriqués dans ces cellules sont donnés dans la section suivante.

³ Dans le cas de la cellule D4, il est important de noter que les plots de contact en haut à gauche et en bas à droite ne sont pas connectés électriquement à leurs chemins d'amenée pour des fins extérieures à ce projet. Ils peuvent tout de même être utilisés lorsque des plots d'au sont réalisés à l'aide d'une version modifiée du masque UV2 corrigeant ce défaut. (masque K460).

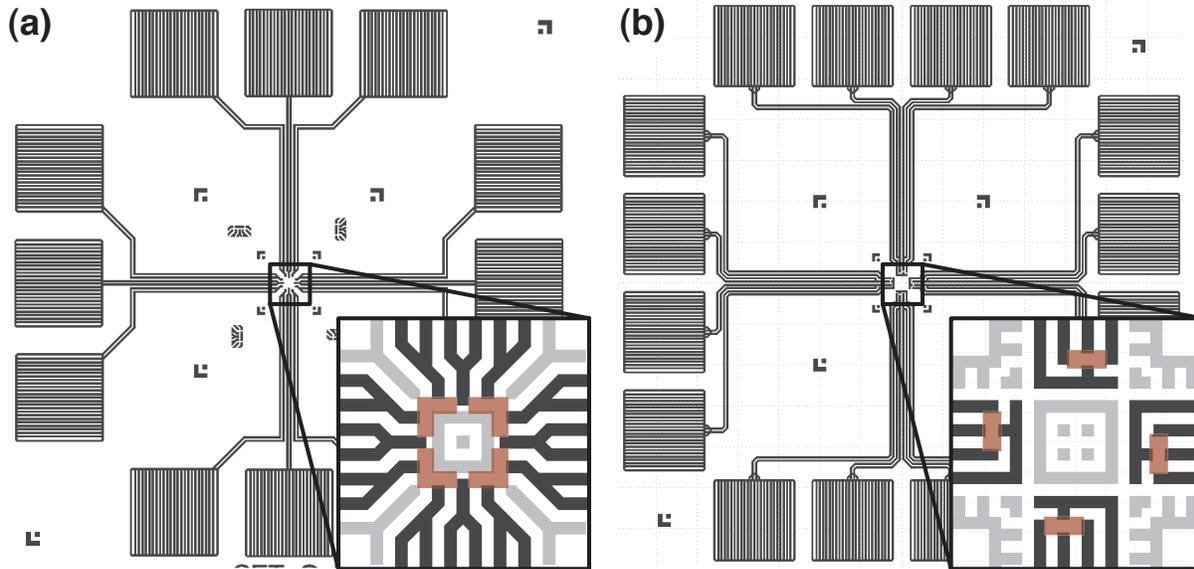


Figure 4.3 Motif UV1 des cellules (a) E3, F4 et (b) C4. Les marques d’alignement de ces cellules sont les mêmes que pour toutes les autres cellules précédentes. Pour les deux cellules, un agrandissement de la zone centrale est donné et les zones EBL sont marquées en rouge.

4.4 Électrolithographie EBL1 et EBL2

Dans le cadre de ce projet, plusieurs dispositifs ayant des fonctions intermédiaires à celle de la demi-cellule QCA sont nécessaires pour valider les différentes parties du procédé. Puisque les cellules définies par l’UV1 sont génériques, c’est l’EBL1 qui définit vraiment quel dispositif est fabriqué. La liste suivante donne les différents dispositifs et leurs utilités pour la validation du procédé de fabrication et pour l’obtention d’une demi-cellule QCA.

- Nanofils (NW) (2 contacts) : mesurer la résistance des amenées des plots de contact au dispositif ainsi que valider l’état du polissage CMP [Guilmain *et al.*, 2013].
- Jonctions MIM (2 contacts) : valider la qualité et la stabilité dans le temps de jonctions tunnel uniques de même que corroborer les résultats obtenus par simulation afin d’en valider le modèle.
- SET (3 contacts) : caractériser un SET seul afin d’avoir une référence sur ses caractéristiques et pouvoir démontrer son fonctionnement sans l’impact des dispositifs voisins.
- SET avec boîte à électron (eBOX) (4 ou 6 contacts) : permet de caractériser le fonctionnement d’un SET comme détecteur de charge pour le nombre d’électrons présent

dans la boîte à électrons à proximité. La boîte à un électron peut être simplement une électrode ayant un îlot isolé par une jonction tunnel au bout ou bien un SET.

- Demi-cellule QCA (9 contacts) : objectif ultime du projet, 3 îlots avec 3 grilles de contrôle et deux SET de lecture de l'état de charge de la demi-cellule.

Comme pour l'UV1, plusieurs générations de dessins EBL1 ont été réalisées en fonction des différents masques UV développés et des résultats obtenus à chaque essai. Cette section décrit les différents dessins utilisés lors des EBL1 définissant les tranchées ainsi que l'EBL2 définissant les îlots et la position des jonctions tunnel. Le dessin des EBL2 est directement relié au dessin EBL1, donc ces deux étapes sont combinées dans la présente section. Seuls les dessins utilisés pour les cellules du masque UV1v4 sont décrits ici, alors que les dessins précédents et optimisations connexes sont plutôt présentés à l'annexe C. Aussi, le dessin des structures sacrificielles (*dummies*) sera discuté dans la section sur le CMP.

Les dessins donnés aux figures 4.4, 4.6 et 4.8, ont été développés pour la cellule universelle UV1v4. Ce sont les principaux utilisés pour obtenir les résultats donnés dans les chapitres de résultats (chapitres 5, 6 et 7). De plus, les dispositifs sont très similaires d'une génération de masque à l'autre puisque les géométries sont basées sur les simulations réalisées au départ (chapitre 3). Les détails de cette section sont donc valables pour les autres versions de masque aussi.

4.4.1 Nanofils

Un nanofil est placé dans la région du centre qui a deux contacts principaux (voir figure 4.4b). Cet espace réservé au nanofil permet de toujours pouvoir déterminer l'avancement du polissage en utilisant un modèle permettant l'extraction de l'épaisseur de métal restante dans les structures. En effet, en connaissant la géométrie complète du nanofil et de ses amenées ainsi que la résistivité du matériau, il est possible d'extraire l'épaisseur du nanofil à l'aide du modèle de [Guilmain *et al.*, 2013]. De plus, le nanofil est un dispositif constitué uniquement du matériau de la métallisation finale (*blanket*), c'est-à-dire sans jonction tunnel. Il permet donc de valider le contact avec les plots de contact, la qualité du métal et le bon fonctionnement de toutes les parties du procédé amenant les tensions et courant aux dispositifs.

La zone du bas ayant 9 contacts et étant symétrique avec celle du haut, plusieurs combinaisons de dispositifs peuvent y être placées. La première de ces combinaisons est la série de 4 nanofils identiques positionnés en haut de la cellule et dont le motif est donné en 4.4a. Cette configuration permet ici de mesurer les différences de polissage entre les bords

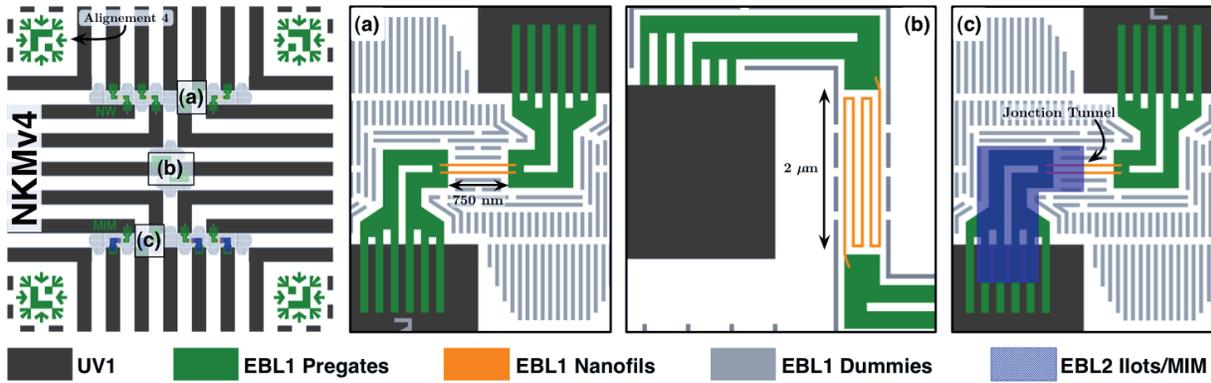


Figure 4.4 Motifs EBL complets pour (a) les nanofils courts, (b) le nanofil long central à la cellule et (c) toutes les MIM avec un nombre de branches variant de 1 à 4.

et le centre de la zone puisque la densité locale de motifs UV1 est plus faible au centre qu'aux bords. Les nanofils sont en fait dédoublés (deux fils en parallèle) afin d'augmenter le courant total, mais sans changer les propriétés *nano* des nanofils. Les effets de bords sont identiques aux nanofils simples et aux électrodes des autres dispositifs, mais en ayant deux fois plus de courant, la mesure de la résistance est plus précise.

4.4.2 MIM

En utilisant un dessin assez similaire en EBL1 (figure 4.4c), une série de 4 MIM est fabriquée. Le nombre de tranchées en parallèle (branches) est varié de 1 à 4 afin de comparer différents niveaux de courant avec la tendance prédite par la théorie. En effet, on peut s'attendre à ce que le courant des 4 MIM ait des caractéristiques I-V multiples de celle à une seule tranchée puisque le courant est directement proportionnel à la section de la jonction (voir équation 2.5). Comme dans le procédé permettant de fabriquer des SET, un motif de métal est déposé par soulèvement (EBL2) en travers des nanofils. Afin d'avoir une jonction tunnel unique (MIM), la deuxième jonction doit être éliminée puisque le procédé nanodamascène les crée toujours en nombre pair. Pour ce faire, le motif EBL2 est agrandi jusqu'à ce qu'un des côtés passe en travers des tranchées nanométriques et que tous les autres côtés soient en dehors du nanofil. Ceci crée une jonction tunnel parasite ayant une taille plus grande que la jonction dans le nanofil. Avec une taille assez grande, la jonction tunnel limitante en termes de courant est la jonction nanométrique, de par sa section beaucoup plus petite. La capacité totale équivalente est aussi très proche de celle de la jonction nanométrique puisque $C_{eq} = C_{nano}C_{parasite}/(C_{nano} + C_{parasite}) \approx C_{nano}$ lorsque $C_{parasite} \gg C_{nano}$.

Bien qu'en théorie, l'élimination de la jonction par son agrandissement soit la meilleure méthode pour réaliser une jonction *unique*, quelques problèmes ont dû être réglés. Les premières mesures réalisées sur des MIM fabriquées de cette façon montraient en effet une grande variation des niveaux de courant d'une MIM à l'autre et d'un échantillon à l'autre. L'une des causes de cette variation était la jonction entre les motifs des deux lithographies (UV1 et EBL1). En effet, l'UV1 avait une profondeur de 60 nm et l'EBL1, 20 nm, créant une surgravure de 20 nm où les deux motifs se chevauchaient ainsi qu'une marche de 60 nm. Le dépôt de métal de l'EBL2 fait par évaporation directionnelle remplit l'une des deux jonctions *UV-EBL* et le recouvrement de cette jonction peut être mauvais. Il est bien connu [Franssila, 2010] que l'évaporation ne recouvre pas bien les topographies abruptes lorsque l'épaisseur déposée est plus faible que l'épaisseur de la marche, comme c'était le cas ici. Le schéma de la figure 4.5a montre ce qui se produit lors d'un dépôt de 25 nm de métal sur la jonction ayant une marche de 60 nm. On peut voir que le contact entre le haut et le bas de la marche est petit et pourrait être irrégulier et mauvais. La section de la jonction parasite est donc réduite de toute la superficie du motif dans l'UV1 à seulement la portion verticale près de la marche UV1/EBL1.

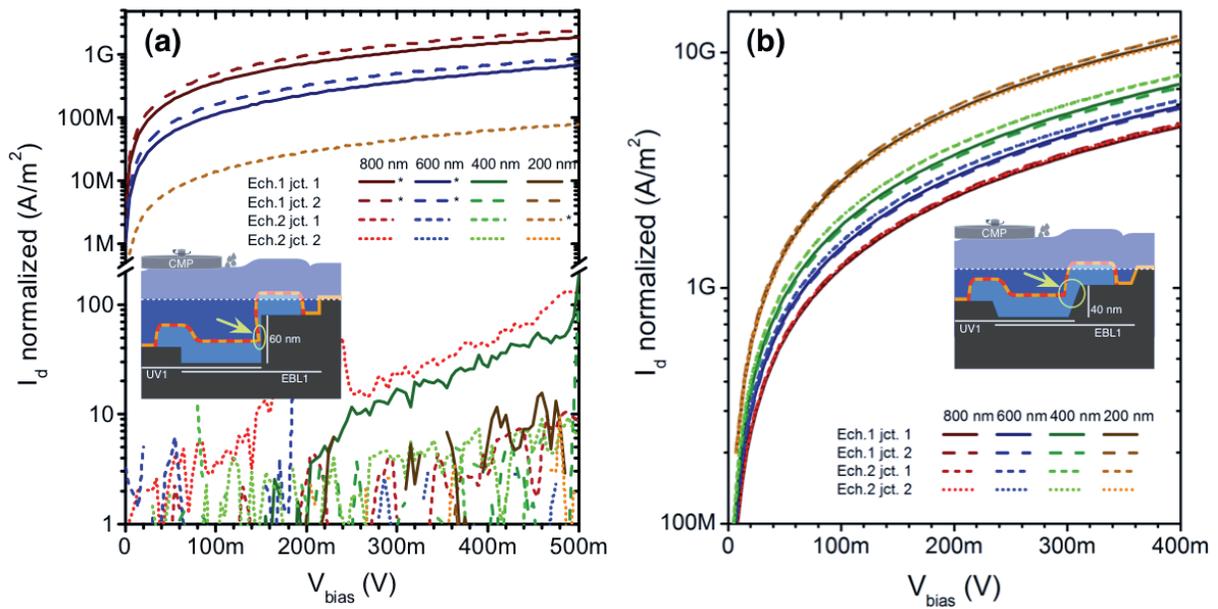


Figure 4.5 Comparaison schématique et électrique du résultat de la jonction entre UV1 et EBL1 pour (a) une profondeur de 60 nm et des tranchées à 90 ° et (b) une profondeur de 40 nm et des tranchées à 70 °. L'endroit problématique dans les deux conditions est encerclé et indiqué par une flèche.

Afin d'éliminer ce problème, le recouvrement de cette marche par une évaporation a été testé dans diverses conditions. Les mesures de densité de courant en fonction de la tension (J-V) de la figure 4.5a sont réalisées sur plusieurs séries de 4 microfils, de 200 à 800 nm de

largeur et 25 nm d'épaisseur passant par deux marches de 60 nm consécutives. On peut voir que plusieurs des courbes ne montrent que du bruit alors que d'autres ayant la même géométrie donnent des résistances cohérentes avec celle-ci. Ces dispositifs ont ensuite été reproduits sur des échantillons où les marches à passer étaient de 40 nm et l'angle de la marche était plus faible (70° contre 90°). Les schémas dans les figures 4.5a et 4.5b illustrent schématiquement l'amélioration de la qualité de la connexion entre le haut et le bas de la marche (partie encerclée). Toutes les courbes sont cohérentes avec leur géométrie et sont reproductibles sur plusieurs échantillons, ce qui confirme la nature du problème observé au départ et valide la solution envisagée. Ce correctif ayant été apporté tard dans le projet, seules les dernières séries de dispositifs possèdent ces améliorations. La profondeur de la gravure UV1 sera donc indiquée lorsqu'elle est de 40 nm pour la suite du document.

Il est important de noter ici que dans un procédé industriel, ce problème serait éliminé d'emblée puisque les circuits comprendraient plusieurs dispositifs non reliés directement à des plots de contact de grande taille. Ces circuits plus denses et à plus courte portée seraient tous fabriqués en une seule étape de lithographie et donc auraient tous la même profondeur, éliminant le problème. Ces circuits pourraient aussi utiliser l'inévitable jonction parasite comme deuxième dispositif par une conception judicieuse du motif.

4.4.3 SET

Plusieurs dessins de SET sont utilisés dans le projet avec la cellule universelle UV1v4. La figure 4.6 montre les cinq géométries différentes utilisées pour obtenir les résultats des chapitres suivants.

Le premier motif de SET (a) comporte un îlot aligné avec la grille par la lithographie. Puisque la grille est très proche de l'îlot, la ligne faite en EBL2 pour former l'îlot est prolongée dans la boîte de grille afin d'augmenter la taille des jonctions tunnel parasites dans la grille. Dans des conditions de développement et de test en DC, ces jonctions n'ont pas vraiment d'impact puisqu'elles sont de grande taille et donc permettent un courant suffisamment grand pour charger les îlots parasites rapidement. Cependant, pour des mesures ou opérations à plus grande fréquence ces capacités parasites augmentent la capacité effective de la grille, ce qui diminue la fréquence d'opération maximale possible [Griveau, 2013]. Comme pour les MIM, on pourrait donc augmenter sa surface de façon à pouvoir la négliger. Le dessin de la grille du motif de SET utilisé pour les QCA a la même caractéristique, ce qui permet d'augmenter la tolérance d'alignement.

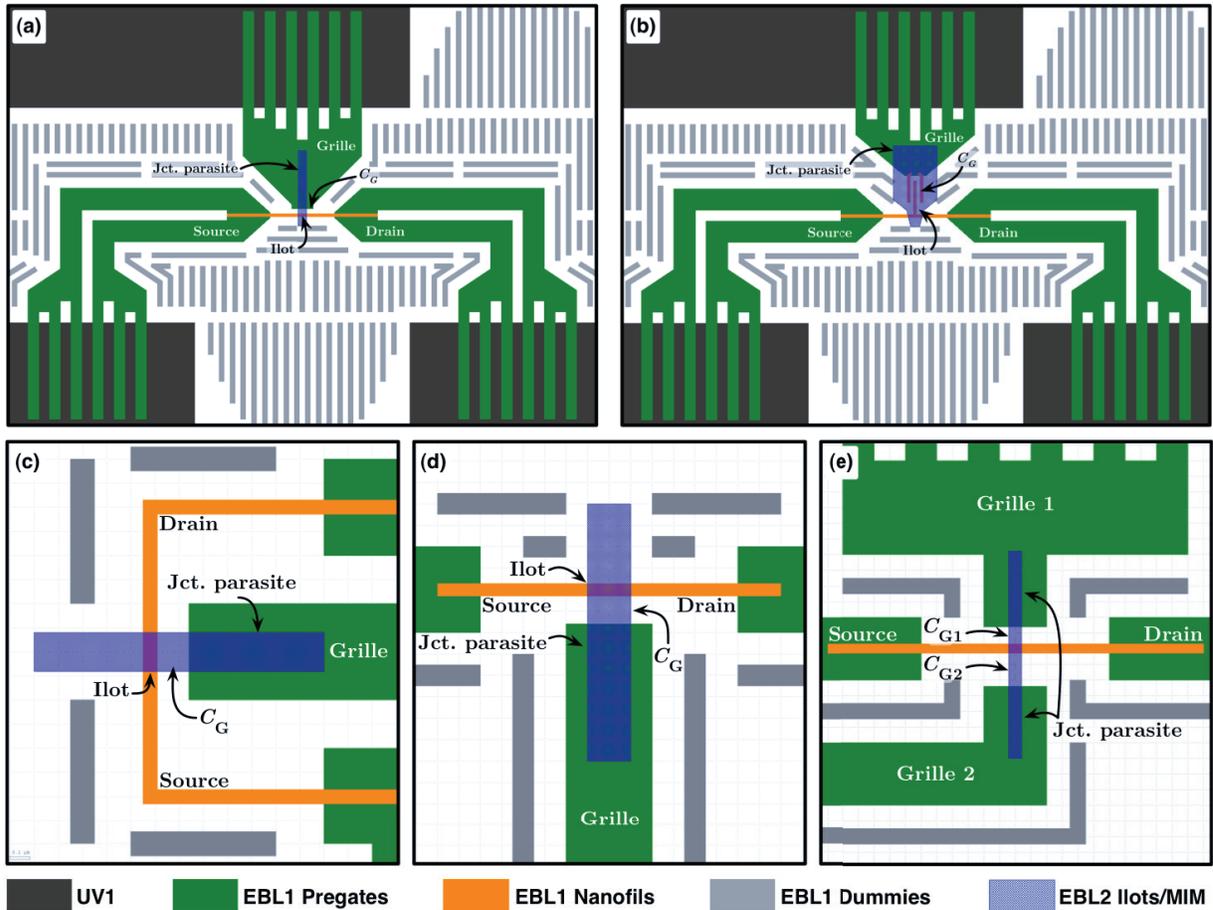


Figure 4.6 Motifs EBL pour les cinq géométries de SET développées. (a) SET à grille parallèle et (b) à grille en U. (c) SET à grille parallèle simplifiée identique à l'un de ceux utilisés avec la eBOX figure 4.7. (d) SET à grille parallèle fabriqué dans les cellules E3 et F4. (e) SET double grille de la cellule C4. Dans chaque cas, les capacités de grille C_G et la jonction parasite de grille sont indiquées ainsi que les électrodes et l'îlot.

Le deuxième dessin (b) de grille permet d'augmenter la capacité de grille de façon à réduire les tensions nécessaires pour avoir un contrôle adéquat de l'îlot. Ceci sans risquer de faire claquer la grille en appliquant un champ électrique trop fort entre l'îlot et celle-ci. Les travaux de [Guilmain, 2013; Harvey-Collard, 2013; Richard, 2013] ont tous montré des contrôles de grille relativement faibles. Dans chacune de ces démonstrations, la valeur de capacité extraite est beaucoup plus faible que les couplages typiques obtenus au chapitre 3 pour des géométries similaires. Cela peut être compensé ici par la grille en forme de U combinée à un îlot allongé vers la grille qui permet d'augmenter d'un facteur important la capacité de grille et son contrôle de l'îlot. Des calculs de capacité effectués à l'aide de la méthode développée à la section 3.3 du chapitre 3 montre en effet qu'avec une distance

égale entre l'électrode de grille et l'îlot, on peut augmenter d'un facteur 2 le contrôle α sur l'îlot et réduire les tensions d'autant.

Le troisième dessin de SET (c) est identique à celui utilisé pour la géométrie avec eBOX (section suivante), mais sans avoir le deuxième SET à proximité. Ce SET est donc une référence qui permet de comparer l'influence de l'ajout d'un deuxième SET en proximité sur les capacités d'îlot et de pouvoir valider les conclusions de la section 3.4 du chapitre 3. Les quatrième et cinquième SET sont deux variantes adaptées pour les cellules (d) E3, F4 et (e) C4. L'utilisation de ces cellules différentes a permis d'améliorer l'uniformité du polissage comme discuté à la section 4.5. Le SET (e) a la particularité d'avoir une deuxième grille. La distance des deux grilles à l'îlot est respectivement de 60 nm et 120 nm, ce qui permet de valider expérimentalement la différence de capacité de grille prédite par la simulation Comsol. Ce facteur 2 dans la distance de la grille devrait se traduire par un couplage de grille environ deux fois plus petit pour la grille à 120 nm de distance.

4.4.4 SET avec eBOX

Afin de tester les SET fabriqués comme détecteur de charge, un dispositif décrit dans la section 2.1.2 et reproduisant les travaux de [Lafarge *et al.*, 1991] est fabriqué sur les échantillons. Le dessin de ce dispositif est présenté à la figure 4.7 et est inspiré de la conception de [Richard, 2013]. Le dessin symétrique permet l'opération des deux SET dans les deux sens (eBOX ou détecteur de charge). Il permet aussi de s'assurer que les deux îlots soient directement en face, favorisant un meilleur couplage et facilitant les mesures.

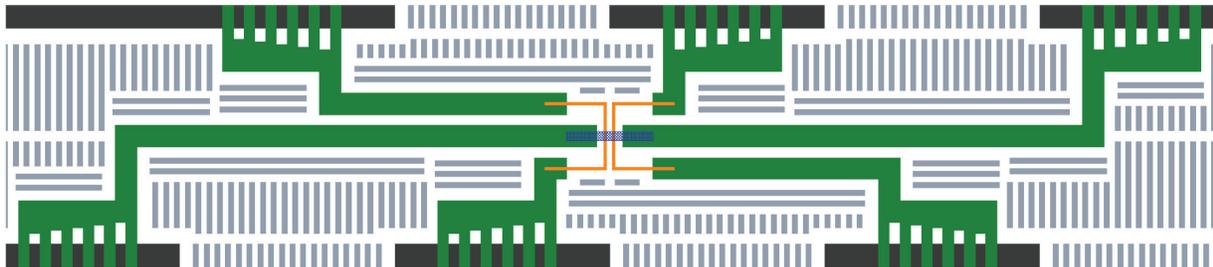


Figure 4.7 Motif EBL de deux SET côte-à-côte permettant de valider la détection de charge. L'un des SET peut être opéré comme une boîte à un électron et l'autre comme un détecteur de charge. Dessin basé sur les travaux de [Lafarge *et al.*, 1991; Richard, 2013]

4.4.5 QCA

Le dessin d'une demi-cellule QCA a été discuté dans le chapitre 3 sur la simulation de QCA. Les dessins utilisés dans ce chapitre pour tester et valider le modèle sont les deux présentés à la figure 4.8.

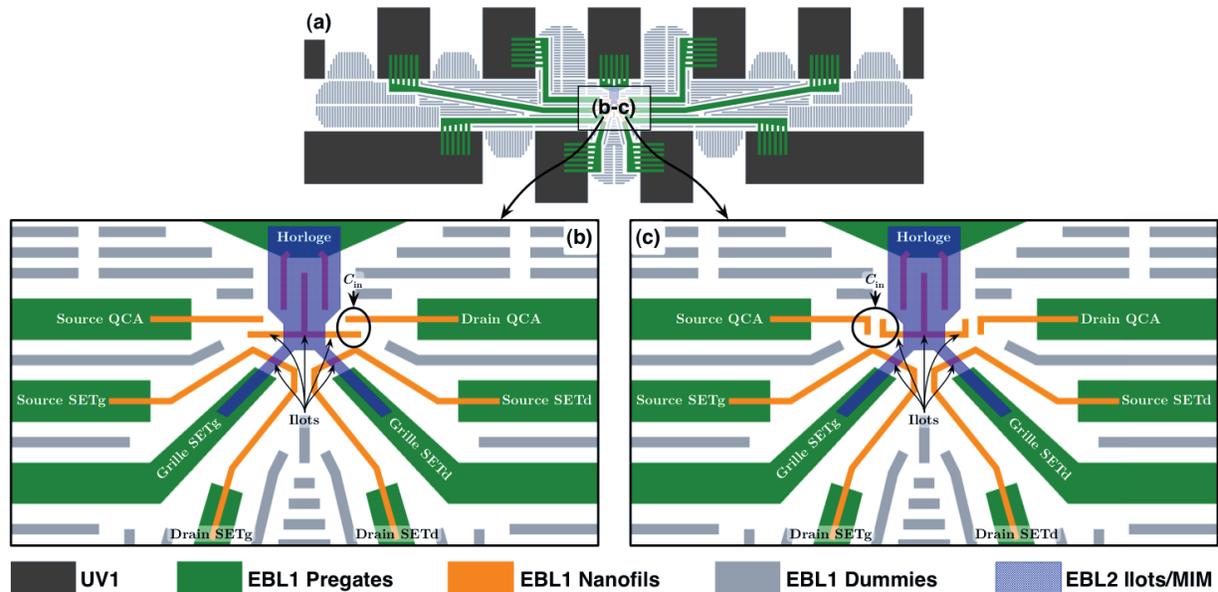


Figure 4.8 Motifs EBL globaux de la demi-cellule QCA pour des capacités d'entrée (C_{in}) (b) horizontale et (c) verticale. Toutes les électrodes et les 5 îlots sont identifiés.

Comme mentionné précédemment, les 9 contacts de la partie du haut de la cellule sont utilisés pour connecter les électrodes de la demi-cellule QCA, comme le montre la partie (a) de la figure. Dans les parties (b) et (c), les électrodes de chaque dispositif sont identifiées. Ce sont la source, le drain et la grille des SET de gauche (SETg) et de droite (SETd), les entrée source et drain de la demi-cellule QCA et l'horloge du QCA. Les grilles des deux SET sont de type parallèle puisque le motif en U occupe trop d'espace et le rend difficile à placer dans une zone de cette taille. L'horloge du QCA est quant à elle en forme de U puisque la géométrie le permet et cela augmente sa capacité de couplage. Les îlots et jonctions tunnel sont définis par le seul motif d'EBL2 en bleu pour les trois dispositifs en même temps. La grande partie du haut crée les jonctions du QCA et remplit la partie en U de la grille, tandis que les deux pattes du motif créent les îlots des SET. La zone triangulaire entre les trois îlots QCA et les îlots SET est la zone tampon permettant une certaine erreur d'alignement lors de l'EBL2. Cette géométrie permet des erreurs d'au moins 50 nm dans les deux directions. Le désalignement en X cause une asymétrie dans la

demi-cellule contrairement au désalignement qui éloigne simplement les îlots SET de ceux de la demi-cellule. Le désalignement Y est donc moins dommageable.

Les capacités d'entrée du QCA, C_{in} , ont deux géométries différentes donnant des capacités semblables, mais (c) diminuent le couplage parasite entre la source du SET et l'îlot. En effet, en (b) l'îlot QCA est situé directement entre la source QCA et la source du SET tandis qu'en (c), le repliement vers le haut augmente la distance effective entre l'îlot et le SET diminuant d'autant la capacité. La simulation de la matrice de capacité de ces deux géométries montre qu'il y a moins de 2 % de différence entre la capacité C_{in} des deux géométries, alors que le couplage entre l'îlot source et la source du SET adjacent est réduit de 64 %. En contrepartie, le couplage de cet îlot avec l'îlot SET est aussi réduit, lui de 52 %. Dans les deux géométries, ce changement n'a aucun impact sur le couplage de l'îlot horloge avec les deux SET. Afin de favoriser une lecture plus efficace des îlots QCA par les deux détecteurs SET, la géométrie parallèle (b) reste la meilleure puisque les SET sont environ deux fois plus sensibles à la charge de l'îlot source du QCA que dans la géométrie (c).

4.4.6 Alignements EBL

Afin d'aligner les différents niveaux de lithographie (UV1, EBL1, EBL2 et UV2), plusieurs marques d'alignement sont utilisées. Dans le masque UV1, trois niveaux d'alignement sont définis et indiqués sur tous les masques donnés aux figures C.1, C.2, 4.2 et 4.3. Ces marques sont 4 motifs en « L » avec un carré dans le creux de ceux-ci. Lors de l'EBL1, des images de ces marques sont prises afin d'ajuster le système de coordonnées du logiciel NPGS faisant l'écriture avec l'échantillon lui-même. Pour éviter de combiner les erreurs d'alignement lors de l'EBL2, une marque supplémentaire est écrite lors de l'EBL1 dans une zone d'EBL prévue à cet effet dans le masque UV1 (zone d'EBL en rouge aux quatre coins du centre de la cellule). Ces quatre marques supplémentaires sont montrées à la figure 4.4. Elles comprennent aussi des flèches permettant d'améliorer leur détection. Elles peuvent être en effet difficiles à voir au SEM lors de l'alignement, car le contraste fourni par la marque est dû uniquement à une différence de profondeur de 20 nm plutôt que 40-60 nm pour l'UV1. La précision typique d'alignement obtenue se situe entre 50 et 100 nm, ce qui correspond aux tolérances des dessins montrés précédemment.

Cette méthode d'alignement relativement complexe est nécessaire à cause des limitations du système de lithographie du laboratoire. Le SEM modifié pour la lithographie par faisceau d'électrons ne permet pas de déplacements de la platine suffisamment précis, ce qui force l'utilisation de plusieurs niveaux d'alignement sur chaque cellule. Dans un système

dédié, les alignements sont automatiques et les précisions d'alignement sont de l'ordre de quelques nanomètres sur de grandes plages de déplacement, ce qui élimine ce genre d'alignement. Dans ce type de système, les plots de contact peuvent aussi être beaucoup plus proches puisque le besoin de marques d'alignement dans chaque cellule est éliminé.

4.4.7 Soulèvement PMMA vs ZEP

Le soulèvement réalisé à la suite de l'EBL2 décrite plus haut a aussi été modifié au cours du développement du procédé. Au départ, la structure en porte-à-faux, schématisé à la figure 2.8a, est obtenu à l'aide d'une double couche de résine. Le procédé original utilise deux couches de PMMA ayant des poids moléculaires différents. La PMMA à poids moléculaire faible diluée à 4 % avec de l'anisole est étalée à 5000 RPM pour donner une épaisseur d'environ 75 nm après recuit 3 min à 180 °C. La PMMA à poids moléculaire élevé dilué à 3 % avec de l'anisole est ensuite étalée à 6000 RPM pour une épaisseur d'environ 60 nm après recuit 3 min à 180 °C. Cette combinaison de résines fonctionne bien pour les petits motifs comme les îlots de SET et les aires des MIM. Cependant, la durée d'exposition des marques d'alignement cause une importante surexposition de celles-ci. Puisque les deux couches de résine sont sensibles aux électrons ici, elles se développent en même temps. Aussi, la surexposition des marques d'alignement cause un surdéveloppement de la couche du dessous, menant dans certains cas à un affaissement de la couche supérieure tel que schématisé à la figure 4.9a. La conséquence de cet affaissement est que le métal déposé au fond des motifs peut être connecté au métal déposé sur la résine. Dans ce cas, lors du soulèvement, il est très fréquent que de grands morceaux de métal restent sur l'échantillon comme le montre l'image SEM de la figure 4.9b. Ces morceaux sont par la suite arrachés rapidement lors du polissage CMP à cause de leur faible adhésion au substrat. Ceci cause des coupures majeures dans les amenées de courant, détruisant le dispositif du même coup (voir image SEM après CMP du même échantillon en encart de la figure 4.9a).

Pour régler ce problème, l'empilement de résine a été changé pour utiliser deux résines ayant chacune un développeur différent. La résine MMA diluée à 2:1 avec de l'éthyle lactate et étalé à 3000 RPM donne une épaisseur d'environ 95 nm après un recuit de 5 min à 180 °C. L'épaisseur de la couche du dessous a aussi été augmentée pour faciliter davantage le soulèvement. La ZEP 520 diluée à 4,2:1 avec de l'anisole et étalée à 5000 RPM donne une épaisseur d'environ 50 nm après un recuit de 5 min à 180 °C. L'avantage de cette combinaison de résine est que le développement se fait dans deux solutions différentes. Cela permet de contrôler individuellement le développement des deux résines et ainsi la largeur des motifs finaux comme l'îlot d'un SET ou la largeur de l'effet casquette déterminant la

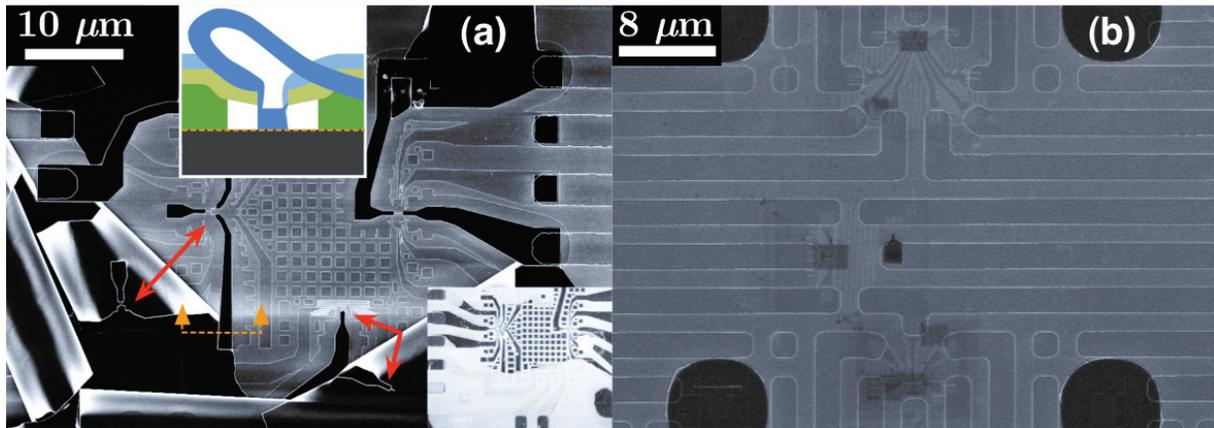


Figure 4.9 Comparaison du résultat du soulèvement de 25 nm de titane avec résine bicouche (a) PMMA et (b) MMA/ZEP. Les flèches indiquent les couches de titane s'étant enroulées car non décrochées.

qualité du soulèvement. L'image SEM de la figure 4.9b montre les résultats améliorés de soulèvement.

4.5 Polissage (CMP)

L'étape de polissage CMP est la plus importante du procédé puisqu'elle permet de révéler les dispositifs, sans quoi l'échantillon consiste en un seul grand court-circuit. La combinaison de plusieurs matériaux dans le même dispositif demande de pouvoir polir ces différents matériaux en même temps et en obtenant une uniformité adéquate sur la surface totale du dispositif, incluant ses contacts. Cette section détaille les divers points importants pour les dispositifs utilisant les procédés de ce chapitre ainsi que certains des développements qui ont été réalisés pour améliorer l'uniformité du procédé.

4.5.1 Polissage sur échantillons 1 cm × 1 cm

Les échantillons à polir sont en format 1 cm × 1 cm, défini par le masque UV1 et la découpe suivant la planarisation. En CMP, la pression est exercée sur l'échantillon par une pression d'air qui le pousse contre le tapis de polissage. Cette pression d'air étant appliquée au centre de l'échantillon, les bords subissent une moins grande pression. L'extrémité des bords fait cependant face au tapis et est polie beaucoup plus rapidement. C'est pour cette raison qu'aucun motif n'est fabriqué dans les deux premiers millimètres du bord de l'échantillon. On s'attend donc à un polissage uniforme sur un cercle centré sur l'échantillon. La figure 4.10 montre un échantillon typique à une étape de polissage intermédiaire.

Le centre de l'échantillon a en fait atteint environ t_0 , c'est-à-dire le point où les structures définies à l'étape de l'UV1 sont découvertes et déconnectées électriquement. Cette zone est reconnaissable par le SiO_2 visible en blanc et les motifs de Ti encastrés en gris. Le cercle jaune de la figure montre la limite approximative où toute la surface est à ce point. Hors de ce cercle, du métal résiduel est toujours présent entre les motifs encastrés, mais plus loin du cercle, on peut voir qu'aucun motif n'est découvert. Ceci montre le dégradé radial de l'avancement du polissage. Le point rouge sur la figure indique le centre géométrique de l'échantillon et correspond approximativement au centre du cercle, ce qui indique que la non-uniformité est bien causée par l'application de la pression au centre de l'échantillon.

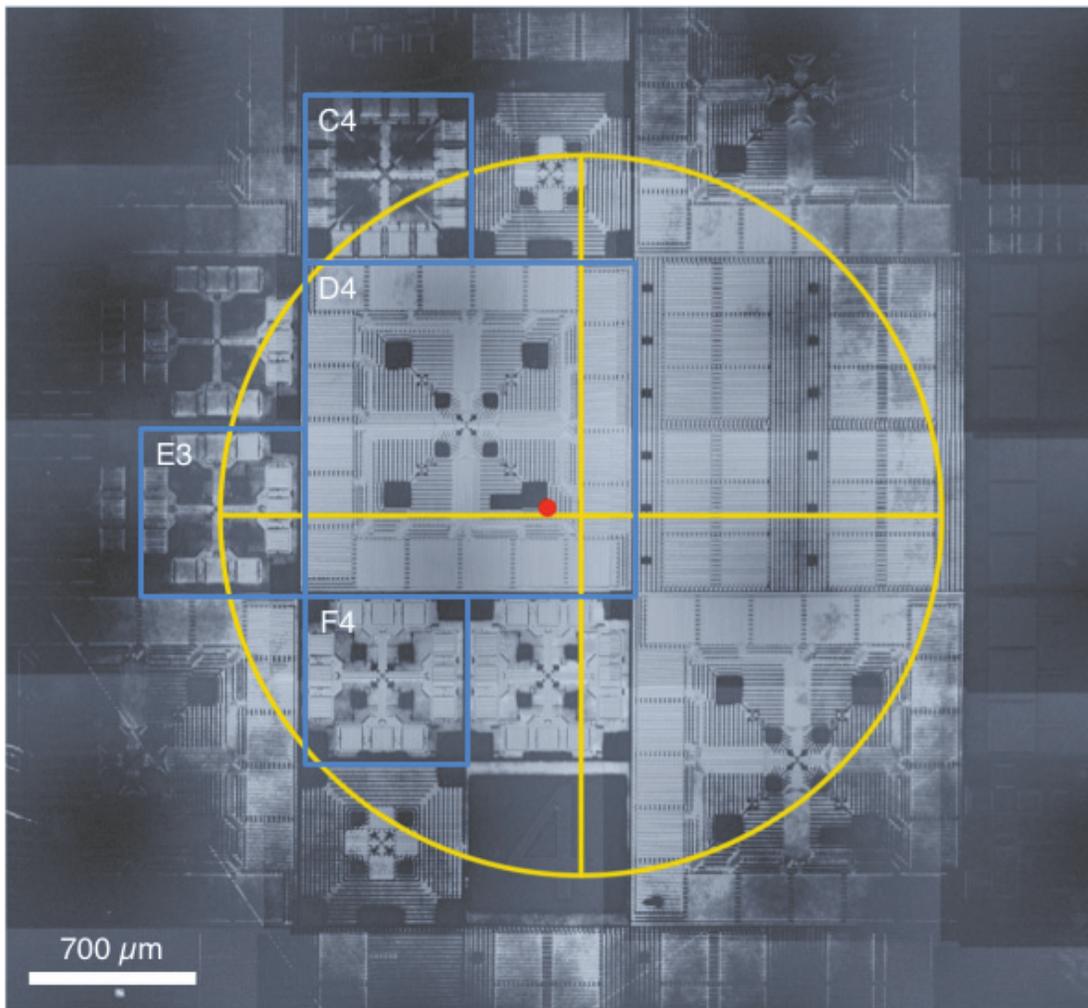


Figure 4.10 Image SEM recomposée du centre d'un échantillon $1 \text{ cm} \times 1 \text{ cm}$. Le point rouge indique le centre géométrique de l'échantillon et le cercle jaune est lui centré sur la zone t_0 approximative. Les carrés noirs indiquent les cellules permettant la fabrication des dispositifs minimisant l'écart de temps entre leur atteinte de t_0 .

Pour faciliter la micro soudure à la fin du procédé, les cellules universelles ont été placées sur les diagonales comme montrées à la figure 4.2. Cependant, comme la figure 4.10 le montre, ces cellules sont loin du centre et sont polies de façon non uniforme en commençant par les contacts près du centre de l'échantillon en finissant par les plus éloignées. Ceci rend difficile l'utilisation des cellules extérieures. Le choix final de cellules (encadrées en bleu) a donc été restreint au centre de l'échantillon pour améliorer l'uniformité dans et entre les différentes cellules utilisées. Ces cellules sont E3, C4, D4 et F4. D4 est une cellule universelle, E3 et F4 sont des cellules similaires à celles utilisées au départ dans le masque UV1v2 et C4 est similaire mais avec 4 contacts de chaque côté. Les dispositifs fabriqués dans chacune de ces cellules sont décrits à la section 4.4 et le motif des cellules E3, F4 et C4 sont donnés à la figure C.4.

4.5.2 *Pregates*

Deux améliorations ayant trait au CMP ont été apportées au procédé afin d'en améliorer la robustesse. Le polissage du masque étant optimisé avec la cellule universelle UV1v4, ce sont ici les zones d'EBL qui ont été améliorées. La première des deux améliorations a été réalisée sur les *pregates* qui sont les motifs de grande surface créés lors de l'EBL1 et qui font la jonction entre les motifs nanométriques (tranchées) et les amenées micrométriques (UV1). Ces *pregates* étaient au départ seulement des aires de grande surface conçues pour chevaucher les amenées UV1. Cependant, vu la différence de hauteur UV1-EBL1, lors du polissage, de l'érosion apparaissait à la jonction des deux types de motifs. La figure 4.11 montre deux images SEM de ces jonctions avec *pregates* (a) pleines et (b) en peigne.

L'image de gauche montre une petite région pâle juste à l'extérieur de l'amenée UV1 et indiquée par les flèches. Dans cette région, on voit le SiO₂ qui était sous le métal de la *pregate* et celle-ci est donc coupée par cette érosion. Ce phénomène de coupure est semblable à celui causé par une trop grande zone d'EBL montré à la figure C.3. L'image de droite montre la solution apportée au dessin pour corriger ce problème de polissage. Le motif a été transformé en peigne afin d'y ajouter des zones de SiO₂. L'effet de cette alternance de matériau à plus petite échelle permet de limiter le *dishing* apparaissant dans les motifs de grande taille. Aussi, le peigne réduit la zone de surgravure dans l'amenée UV1, ce qui réduit du même coup la hauteur effective de la marche entre l'UV1 et l'EBL1.

Dans les masques montrés dans la section 4.4, les peignes sont constitués de moins de branches mais chacune plus large, en gardant toujours une densité de motifs d'environ 50 % (100 nm espacés de 100 nm) comparativement à des lignes très fines. Les lignes se remplissent mieux au dépôt du *blanket* et cela rend la connexion à l'UV1 plus robuste.

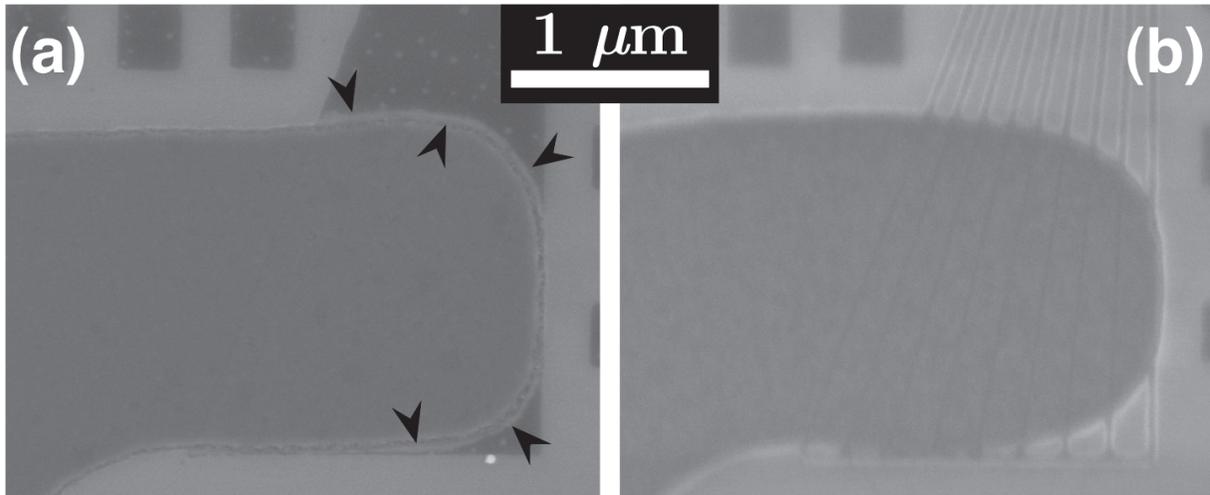


Figure 4.11 Comparaison du polissage d'une *pregate* en motif (a) plein et (b) en peigne. Les flèches indiquent les endroits où la coupure due au CMP est visible.

Cette modification contribue à l'amélioration de la planarisation devant survenir avant d'atteindre la surface du SiO_2 .

4.5.3 Structures sacrificielles (*dummies*)

La deuxième amélioration au dessin a été l'ajout et l'étude complète des structures sacrificielles (*dummies*). En utilisant le motif UV1 de la cellule universelle UV1v4, on a étudié l'impact de ces structures sur la planarisation des zones d'EBL en faisant varier la densité des réseaux de carrés et de lignes étroites. La figure 4.12 montre les divers motifs et densités réalisés lors des tests.

Les cellules n'étant pas à des endroits toujours identiques sur les échantillons, leur degré de polissage n'est pas le même pour un temps de CMP identique. On compare donc plutôt les deux zones symétriques du haut et du bas de la cellule universelle plutôt que les cellules entre elles. Il s'est avéré que la zone d'EBL centrale, étant différente, ne se compare pas bien avec le reste des zones. Aussi, certaines zones d'écriture des *dummies* ont été surexposées parce que la densité était trop importante. La figure 4.12 montre donc seulement les motifs ayant donné des résultats permettant de voir des effets de la densité et correspondant à ceux présentés dans le reste de la section (figures 4.13 à 4.15). En particulier, deux dessins ont été créés pour ces tests. Le premier ayant des structures sacrificielles dans la zone d'EBL seulement et avec une combinaison de paramètres seulement par zone. Le deuxième dessin prolonge l'action des motifs entre les amenées UV1 et compare deux motifs

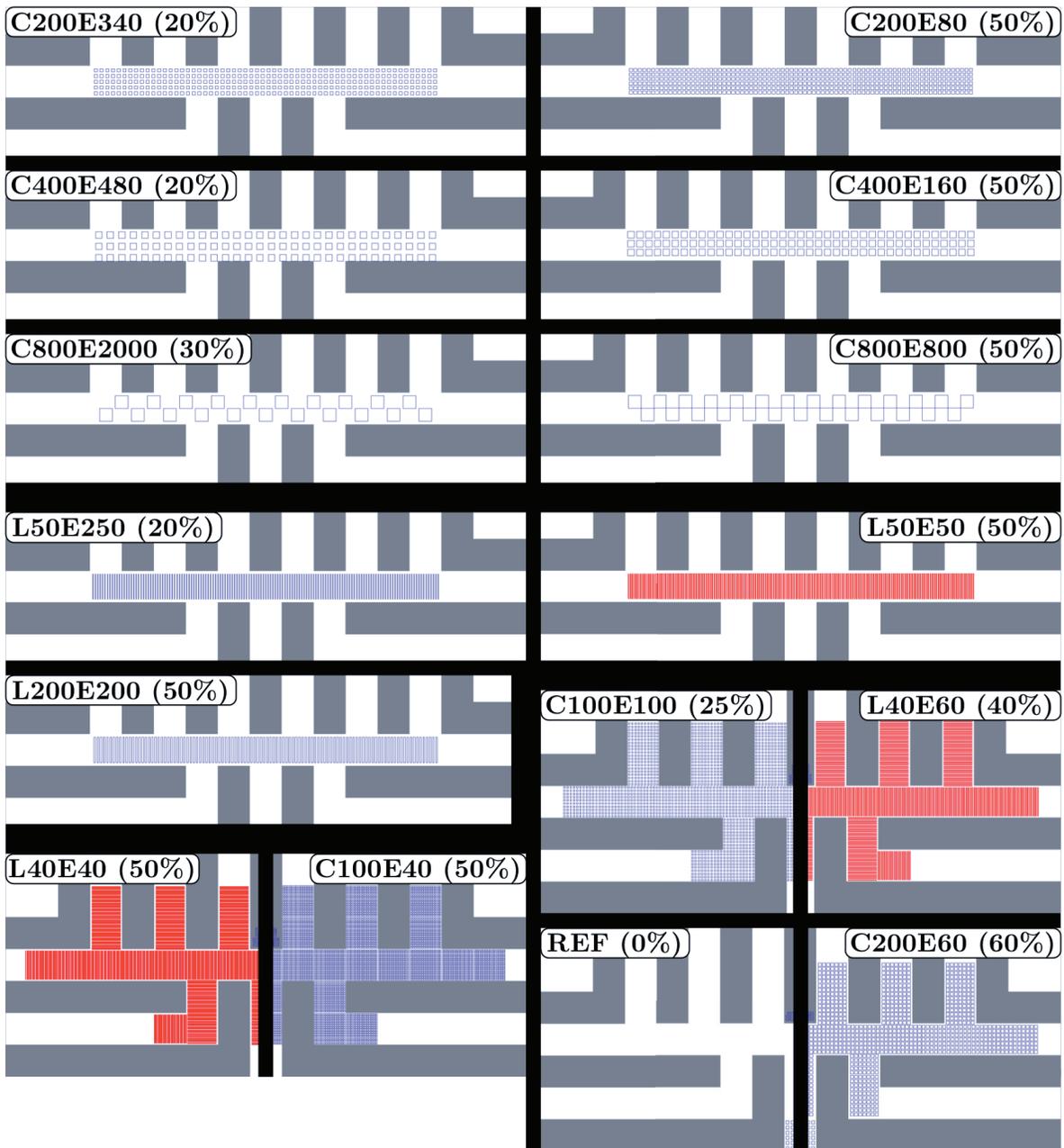


Figure 4.12 Dessins de fabrication des réseaux de *dummies* ligne (L) et carrés (C) d'espacement donné (E) en nanomètres (p.ex. « L50E50 (50 %) » signifie Lignes de 50 nm Espacées de 50 nm, Densité 50 %). Le groupe de dessin du haut (6) compare l'effet de la taille des carrés pour trois densités différentes. Le groupe du centre (3) compare l'effet de la largeur des lignes et de leur densité aussi. Le groupe du bas (6) compare des lignes et des carrés ensemble puis avec une référence sans motif. Les motifs en rouge sont des lignes pour l'écriture EBL et ceux en bleu sont des aires (carrés et rectangles).

directement dans la même zone. Les détails des motifs sont donnés dans les descriptions des résultats qui suivent.

Le procédé utilisé pour accomplir cette série de tests est le même que décrit plus haut, mais sans les étapes d'EBL2 et de création de jonctions. La planarisation principale est réalisée pour arriver près de t_0 dans l'UV1 sans toutefois s'y rendre. Ensuite, une séquence répétée d'imagerie SEM de chacune des cellules et d'ajout de temps de polissage court, 10 s ou 15 s est réalisée. Cela permet de bien caractériser l'évolution du polissage de chacun des motifs. De plus, les images SEM montrées sont la façon la plus évidente de voir le métal restant entre les motifs UV1 puisque le contraste entre le métal et le SiO_2 est très prononcé et permet de distinguer de très minces couches de métal, jusqu'à 1-2 nm. Plus le métal est mince, plus il ressort foncé sur l'image jusqu'à passer au blanc lorsque le dernier nanomètre est enlevé. C'est ce contraste qui sert à l'étude de l'impact de la géométrie et de la taille des *dummies* dans les images qui suivent.

Les premiers résultats (figure 4.13) montrent l'effet de la taille et de la densité de carrés. La densité de motif est simplement le rapport entre la proportion de la surface occupée par les structures métalliques et de l'espace « SiO_2 » les séparant. Des images SEM agrandies ont permis d'obtenir les dimensions et espacements nécessaires à ce calcul. Les images de gauche et de droite sont prises sur le même échantillon, dans la même cellule avec la zone du bas ayant été retournée pour être plus facilement comparée à la zone du haut. L'image du haut (a) représente le point tout juste avant l'atteinte de t_0 entre les amenées UV1 avec des motifs de carrés de 200 nm de côtés. Les images en (b) et (c) sont prises à des étapes subséquentes de 15 s de polissage. On y observe que dans les motifs de droite, le polissage de la zone d'EBL est plus avancé et même pratiquement terminé en (c) alors qu'il est significativement moins avancé à gauche. La vitesse plus grande est attribuée ici à la densité plus grande de carrés à droite, 46 % contre 29 % à gauche. On observe un effet similaire, mais beaucoup moins marqué, dans les images en (d) et en (e). Ces deux images sont à des étapes de polissage proches de (b) et la taille des motifs de 400 nm est le paramètre principal permettant d'expliquer que le niveau de polissage est plus semblable. En (e), une taille des carrés de 800 nm et une densité plus proche entre les deux motifs explique la différence de polissage réduite. La conclusion de cette comparaison de l'effet des *dummies* carrés est qu'une densité plus élevée de motifs plus petits accélère le polissage des zones d'EBL. En effet, il a été observé que ce sont les carrés de 200 nm à haute densité (50 %) qui permettent de réduire au minimum la différence de temps pour l'atteinte de t_0 dans l'UV1 et dans la zone d'EBL. L'augmentation de la densité de motifs fait augmenter l'érosion. Du même coup, la densité de bord augmente dans les réseaux de

lignes et cela augmente l'importance de l'effet de bord lors du polissage. Ces deux effets combinés permettent d'expliquer les observations faites ici.

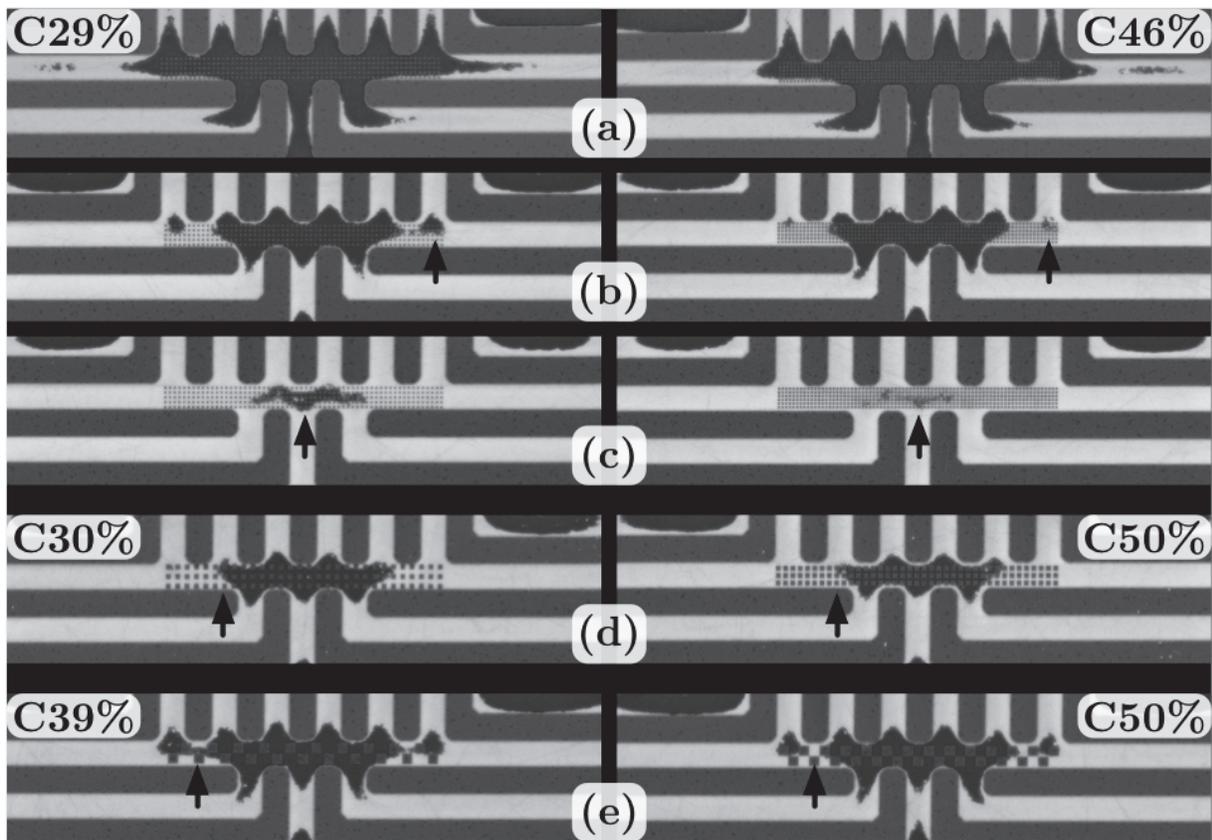


Figure 4.13 Comparaison de l'effet du polissage sur des *dummies* carrés de (a-c) 200 nm à 29 % et 46 % de densité, (d) 400 nm à 30 % et 50 % et (e) 800 nm à 39 % et 50 %. Les flèches indiquent les endroits à comparer entre la densité faible (gauche) et la densité élevée (droite). Les intervalles de CMP sont de 10 s entre les images (a) à (c).

La deuxième série de résultats est obtenue pour des réseaux de lignes faisant un peu moins de $2 \mu\text{m}$ de longueur, soit la largeur de la zone d'EBL. La figure 4.14 montre deux tests comparant des densités faibles (gauche) et plus élevées (droite). La séquence d'images de (a) à (d) montre bien l'évolution du polissage avec des temps de 15 s entre chaque image. On observe aussi que la différence de vitesse de polissage est très marquée, mais seulement à l'approche de t_0 dans la zone d'EBL. En effet, dans ce dessin de test, les structures sacrificielles ne sont disposées que dans la zone d'EBL directement et il apparaît donc naturel de voir leur effet seulement lorsque le titane restant est confiné à cette zone. Ici aussi, comme pour les réseaux de carrés, on observe que la densité de ligne la plus élevée se polit plus rapidement. Ceci s'explique encore une fois par l'augmentation de la densité de bords qui augmente l'érosion par une amplification de l'effet de coin dans la

zone d'EBL. En (e), on peut voir que la densité la plus élevée, 25 %, à droite, semble se polir légèrement plus rapidement. La différence moins grande observée montre qu'à faible densité, la variation de densité n'a pas un effet marqué sur le polissage.

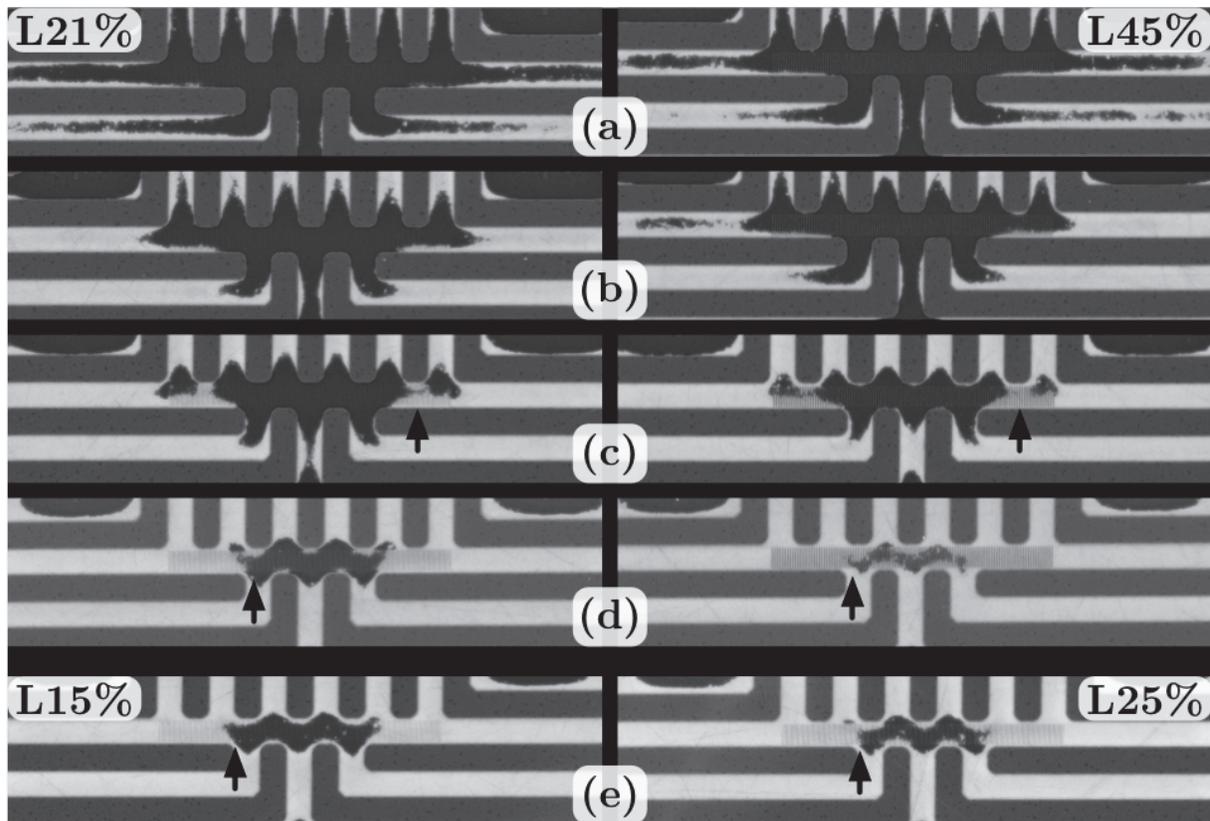


Figure 4.14 Comparaison de l'effet du polissage de réseaux de *dummies* ligne d'environ 40nm de largeur. Les densités sont de (a-d) 21 % et 45 % puis (e) 15 % et 25 %. Les flèches montrent les points de comparaison à chaque étape de CMP. Des étapes de 15 s sont ajoutées entre les images subséquentes de (a) à (d).

Les figures 4.13 et 4.14 ont des motifs seulement au centre de la zone et on observe que la forme du titane restant se prolonge en pointes entre les lignes UV1. Aussi, pour atténuer cet effet, un deuxième dessin de *dummies* a été testé, dans lequel les motifs s'étendent jusqu'à 4 μm plus loin entre les amenées UV1. Ce dessin est donné dans le groupe du bas de la figure 4.12 et il utilise la symétrie des zones d'EBL pour comparer des lignes et des carrés directement dans la même zone. De cette façon, on élimine aussi de la disparité dans les résultats puisque les zones à comparer sont directement l'une à côté de l'autre.

La figure 4.15 montre les résultats issus de ce deuxième dessin de *dummies*. En (a) et (b), on a une séquence de 5 images à des intervalles de polissage de 10 s. Dès la première image, on voit tout de suite l'impact élevé des *dummies* sur le polissage entre les amenées

UV1. On voit en fait que l'étendue des motifs *dummies* est trop grande puisque les deux derniers microns de *dummies* arrivent à t_0 avant même le reste de l'UV1. Ceci introduit une non-uniformité supplémentaire pouvant causer des coupures de contact entre l'UV1 et l'EBL1 et est donc à éviter dans le dessin de dispositifs.

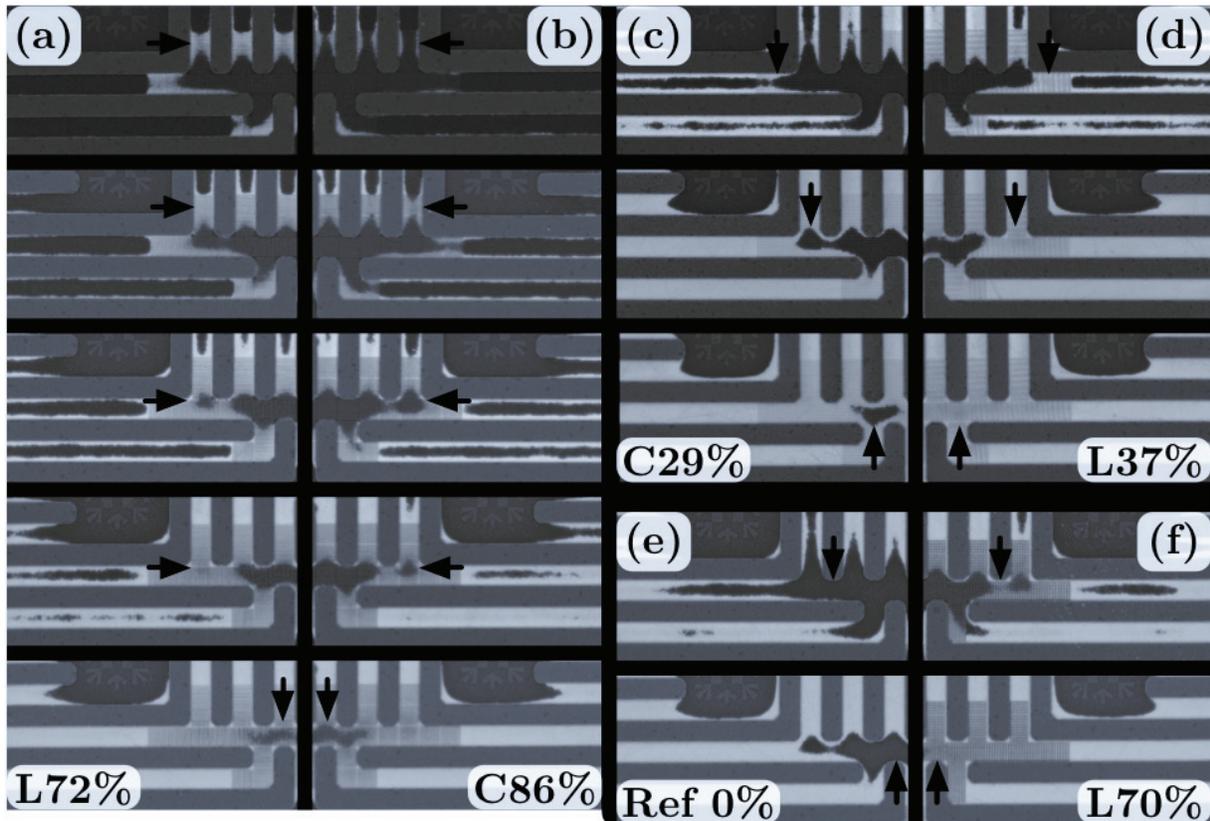


Figure 4.15 Effet du polissage sur diverses densités de *dummies*. (a) Lignes de 40 nm à 72 % comparées à (b) des carrés de 100 nm à 86 %. (c) Carrés de 100 nm à 29 % comparés à (d) des lignes de 40 nm à 37 % de densité. Comparaison des deux extrêmes : (e) sans *dummies* et (f) avec des lignes de 40 nm à 70 %. Les flèches indiquent les endroits à comparer. Les paires d'images (a-b), (c-d) et (e-f) proviennent de la même cellule et la séparation (en noir) a été ajouté pour distinguer les deux côtés.

Ensuite, en observant le reste de la séquence d'images en (a) et (b), les lignes à gauche ayant une densité plus faible (72 %) que celle des carrés de droite (86 %) se polissent plus rapidement. Bien qu'elle soit faible, la différence de densité mesurée amplifie l'avantage des réseaux de lignes. De plus, on peut voir que lorsque les amenées UV1 sont à t_0 , il ne reste que très peu de titane au centre de la cellule. En (c) et (d), on a une comparaison inverse qui confirme aussi que les réseaux de lignes ont un net avantage en termes d'augmentation de la vitesse de polissage. En effet, on voit qu'avec une densité de ligne de 37 % et une

densité de carrés de 29 %, on a un polissage beaucoup plus rapide de la zone EBL avec les lignes. On observe aussi que le temps de polissage nécessaire pour arriver à t_0 dans la zone d'EBL est un peu plus grand que pour la densité élevée du motif en (a), ce qui confirme les observations faites avec le premier dessin de *dummies*.

Finalement, en (e) et (f), on compare un réseau de ligne à 70 % de densité avec une zone d'EBL n'ayant aucun *dummy* et servant de référence à 0 %. L'avantage est marqué puisqu'on voit qu'à l'atteinte de t_0 dans la zone d'EBL avec les motifs, du titane est présent dans presque toute la zone de référence.

Il est donc indéniable que l'utilisation de structures sacrificielles dans un procédé ayant des topographies variées est nécessaire et peut apporter un meilleur contrôle de l'uniformité du polissage CMP dans les zones critiques. De plus, les résultats de polissage montrent bien que le contrôle de la densité et de l'étalement des structures sacrificielles permet d'ajuster les vitesses de polissages d'une région à l'autre. Une variation de la densité des motifs en partant du bord d'une zone d'EBL et en l'augmentant vers le centre pourrait permettre d'améliorer considérablement l'uniformité du résultat final.

Il est à noter que dans le cas de densités élevées de structures écrites en EBL1, il faut tenir compte des effets de proximité, puisque le risque de fusionner toutes les entités des réseaux en surexposant celles-ci est élevé. Par ailleurs, la densité de motifs devient plus grande vers le centre des motifs puisque la densité d'écriture est plus grande et donc plus d'effets de proximité se font sentir. Dans la mesure où les structures ne sont pas fusionnées après la lithographie, cet effet peut être avantageux puisque la densité la plus élevée se retrouve au centre des motifs où le besoin d'accélération du polissage est le plus important. Ces considérations s'ajoutent au fait que dans le dessin de dispositifs, les *dummies* ne peuvent pas occuper tout l'espace puisque les amenées nanométriques et les dispositifs eux-mêmes en prennent une certaine proportion. Dans le dessin d'un nouveau dispositif, il est donc impératif de tester le polissage du motif réel afin d'adapter l'utilisation des *dummies* aux besoins de la cellule UV1 et de l'endroit utilisé dans celle-ci.

Les divers résultats de polissage obtenus permettent de conclure que leur utilisation peut avoir un impact significatif sur l'uniformité du polissage près des structures critiques nanométriques. L'utilisation de carrés ou de lignes et une variation de la densité permettent de contrôler l'effet en fonction du dessin utilisé pour le dispositif. Cependant, dans le cas actuel, l'ajout de structures à trop grande distance de la région à corriger peut être néfaste en favorisant un polissage plus rapide à des endroits qui sont déjà plus rapides que le dispositif lui-même (figure 4.15). Il faut donc restreindre leur utilisation à une petite région

autour des motifs principaux du dispositif. Dans les dessins de la section 4.4, plusieurs arrangements de *dummies* sont utilisés, mais à la fin, l'impact est négligeable puisque les motifs de dispositifs sont déjà très denses au centre de la région à optimiser. Puisque l'objectif du projet est de valider la fabrication à basse température, cette optimisation supplémentaire n'est pas nécessaire. Dans les dernières séries d'échantillons, ils ont donc été éliminés, sauf la première ligne près des *pregates*. Une ligne sacrificielle a été gardée autour des motifs critiques afin de favoriser leur révélation rapide, même si l'entourage n'a pas atteint t_0 .

Pour avoir une utilité réelle, la densité de *dummies* doit être variée en fonction de la densité locale de motifs du masque UV1v4, ce qui n'est pas aisé à réaliser avec le système de lithographie disponible au laboratoire. Aussi, leur nécessité devient moins importante si le problème de la double gravure à l'interface entre l'UV1 et l'EBL1 est éliminé par une lithographie à grande échelle (voir section 4.4.2).

4.6 Conclusion

Le procédé nanodamascène décrit dans ce chapitre a été réalisé à l'aide des infrastructures mises à la disposition des étudiants de l'Université de Sherbrooke, notamment le 3IT, l'IMDQ et le laboratoire PTA en France par l'entremise de l'UMI-LN2. Les dessins développés et optimisés en parallèle avec la simulation devraient permettre la fabrication de dispositifs de type QCA, mais aussi de type NW, MIM et SET de sorte à valider la chaîne de concept complète menant au fonctionnement du QCA.

Plusieurs parties du procédé ont été améliorées à la lumière des travaux précédents sur ce type de procédé et des résultats obtenus pendant ce projet. En particulier, l'étude de l'impact de la géométrie et de la densité des structures sacrificielles créées en EBL1 a permis d'augmenter significativement l'uniformité du polissage dans les zones EBL. Cette étude a aussi systématisé notre utilisation de ces structures en améliorant notre compréhension de leur impact sur l'étape critique du procédé qu'est le polissage CMP. Du même coup, le dessin du masque UV1 a été optimisé pour limiter les effets détériorant l'uniformité du polissage et permet la fabrication d'une variété de dispositifs dans un environnement uniforme et constant.

Dans les chapitres suivants, les résultats obtenus pour le développement de jonctions tunnel stables sont discutés. Le développement de l'oxydation du titane, puis l'ajout de barrières anti-diffusion et la passivation des échantillons y sont décrits. Finalement, la caractérisation électrique de SET est discutée dans le chapitre 7.

CHAPITRE 5

LE TITANE ET SON OXYDATION

Il a été démontré [Guilmain, 2013] que les jonctions tunnel générées par oxydation du titane pouvaient comporter des défauts aux interfaces. Cela peut rendre les caractéristiques électriques des dispositifs instables et dépendants de la séquence exacte de mesure. Il est donc important pour la suite du développement de jonctions MIM par le procédé décrit au chapitre précédent (chapitre 4), de bien contrôler la fabrication de l'oxyde de jonction. La solution envisagée dès lors a été de travailler à trouver les matériaux les plus propres ainsi qu'à étudier différentes méthodes d'oxydation afin de limiter la quantité de défauts aux interfaces et dans l'isolant de la jonction tunnel.

Le procédé de fabrication décrit plus haut contient deux étapes distinctes de déposition de métal, ici du titane. La première est le dépôt du métal formant l'îlot de titane et constituera le principal sujet de ce chapitre. La deuxième étape est le dépôt *blanket* de titane et a déjà été discuté dans une publication du groupe [Guilmain *et al.*, 2013] au niveau du Ti et sera donc discuté seulement dans le chapitre suivant (chapitre 6) traitant du changement des divers matériaux impliqués dans le procédé.

5.1 Types de dépôt de titane

Diverses méthodes de dépôt physique en phase vapeur existent et chacune a des avantages et inconvénients. Les différents équipements disponibles ainsi que leurs caractéristiques importantes reliées au procédé utilisé pour créer les jonctions tunnel sont décrits brièvement. Ici, puisque le transfert de motif se fait par soulèvement et à l'aide de résines ayant de faibles épaisseurs, le dépôt doit être compatible avec ce type de procédé.

5.1.1 Évaporation

L'évaporation est la méthode la plus répandue et la plus simple pour déposer une couche mince d'un métal sur un échantillon. Il suffit de chauffer une pastille du métal à déposer, sous vide, jusqu'au point d'ébullition ou de sublimation et de placer l'échantillon face au jet atomique issu de la pastille chauffée. Les deux appareils disponibles et testés ici pour l'évaporation de titane pour le soulèvement utilisent un faisceau d'électrons pour chauffer la pastille. Ce procédé, réalisé sous vide est donc très directionnel puisque la taille de la

source (< 1 cm) est généralement très faible par rapport à la distance qui la sépare de l'échantillon (~ 30 cm). La contrepartie est que ce type de dépôt n'est pas conformable, c'est-à-dire qu'il ne se dépose que très peu sur les cotés des motifs comme l'indique la figure 5.1. L'évaporation se fait aussi dans des chambres à haut vide afin d'avoir une grande pureté des matériaux.

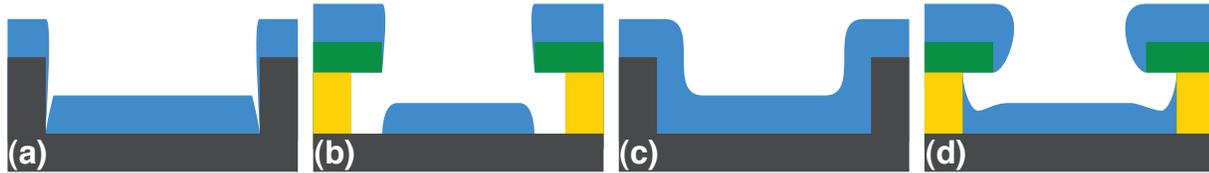


Figure 5.1 Dépôt directionnel par évaporation sur (a) substrat avec topographie et (b) substrat avec bicouche de résine pour soulèvement. Dépôt conformable par pulvérisation sur (c) substrat avec topographie et (d) sur substrat avec bicouche de résine pour soulèvement.

Le premier des deux appareils testés au laboratoire, surnommés *Sloan* du nom du fabricant, atteint généralement un vide de 1×10^{-6} Torr et la distance cible-échantillon est de 30 cm. Le deuxième appareil testé est une machine multifonction de la compagnie Intlvac. Elle permet à la fois le dépôt par évaporation avec un vide atteignant les 3×10^{-7} Torr et une distance cible-échantillon de 30 cm, mais aussi un dépôt par pulvérisation (voir section suivante) et une source d'ions dans le même appareil. Cette machine, surnommée *Intlvac* du nom de la compagnie, atteint généralement des meilleurs vides grâce au sas de transfert qui limite l'exposition de la chambre de dépôt à l'air.

5.1.2 Pulvérisation

La deuxième méthode de déposition testée est la pulvérisation cathodique. La méthode consiste à générer un plasma froid entre une anode et une cathode (cible). Les ions positifs du plasma, généralement de l'argon, sont attirés vers la cathode et pulvérisent les atomes de surface les envoyant vers l'échantillon placé dans la trajectoire. L'utilisation d'une cible plus grande, d'une distance cible-échantillon plus faible ainsi qu'un angle entre le plan de l'échantillon et de celui de la cible contribue à obtenir des dépôts plus conformables. La combinaison de la géométrie plus rapprochée et de la pression d'opération plus grande ($> 1 \times 10^{-3}$ Torr) donne en effet une distribution agrandie d'angle d'incidence des particules métalliques arrivant à la surface de l'échantillon.

La machine testée au laboratoire est de la compagnie Plasmionique et utilise des cibles de 5 cm (2 po.) La distance cible-échantillon est d'environ 20 cm. L'inconvénient principal, ici,

est que cet appareil n'est pas muni d'un sas de transfert des échantillons, ce qui nécessite l'ouverture de la chambre à chaque dépôt et réduit du même coup la qualité du vide ($\sim [3; 10] \times 10^{-7}$ Torr). L'avantage est la possibilité d'avoir jusqu'à 3 cibles différentes lors du dépôt et donc de faire des combinaisons ou des empilements de matériaux.

5.1.3 Caractérisation des dépôts de titane

Afin de choisir le meilleur matériau pour nos besoins, une étude XPS a été conduite pour déterminer la qualité de chacun des types de dépôts décrits plus haut. La figure 5.2 montre les résultats de quantification des principaux éléments présents dans chacun des dépôts. Les valeurs sont obtenues par une identification de chacun des pics du spectre suivi de l'intégration de ces pics, ce qui donne les proportions indiquées. L'axe horizontal est fonction du temps de pulvérisation par faisceau d'ions sur l'échantillon afin de sonder le contenu de la couche sur toute son épaisseur. Ici, puisque les dépôts avaient des épaisseurs différentes, les temps de pulvérisation de toute la couche sont différents et ont donc été normalisés pour mettre leur point en commun : le premier point de visibilité du silicium dans le SiO_2 sous-jacent. Les quelques points qui précèdent cette interface sont généralement l'endroit le plus propre de la couche puisqu'il est le plus loin de la surface et donc moins en contact avec l'air. La normalisation est faite à partir du dernier point n'ayant aucune présence de silicium.

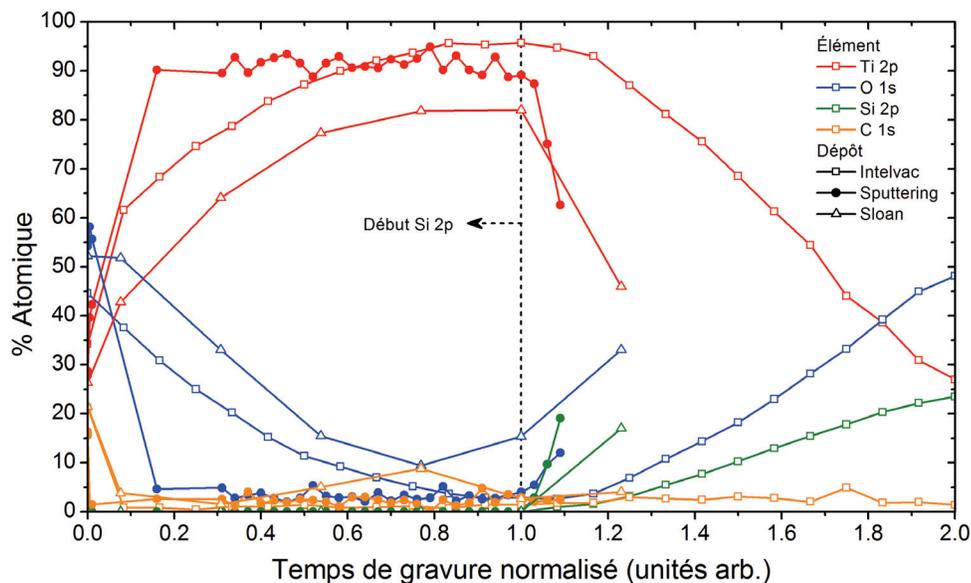


Figure 5.2 Concentration des éléments dans les divers types de dépôts de Ti disponible au laboratoire normalisés pour les différentes épaisseurs de dépôt. Le dépôt Intelvac est ici le plus propre avec moins de 5 % de carbone en profondeur.

D'abord, on peut voir que tous les échantillons ont une concentration importante de carbone en surface (premier point à gauche) qui peut être expliquée aisément par la contamination au contact de l'air. En effet, on voit qu'après seulement quelques secondes de gravure (deuxième et troisième points) la contamination en carbone diminue grandement sous les 10 %. Ensuite, il apparaît évident que le dépôt réalisé dans le Sloan est impropre à l'utilisation puisqu'il contient plus de 10 % d'oxygène et plus de 5 % de carbone. Ces valeurs sont les minimums pour toute la couche et la qualité de ce dépôt n'est donc pas suffisante pour les besoins présents.

Les dépôts pulvérisés et Intlvac sont de qualité similaire et supérieure à celle du Sloan. On peut en effet remarquer que le dépôt pulvérisé contient moins de 9 % de contaminant (C, O, Si) dans le volume et que le dépôt Intlvac est légèrement mieux avec moins de 6 % de contaminant. Ici, le choix se fait donc par le procédé utilisé. Comme le montre la figure 5.1, le dépôt pulvérisé ne se prête pas bien au soulèvement, en particulier dans le cas de couches de résines très minces comme celles utilisées pour l'étape de création de l'îlot (EBL2). Le choix s'impose donc de lui-même : dépôt Intlvac. On verra plus loin que les autres possibilités offertes par cette machine sont aussi utiles et ont contribué à ce choix. Comme démontré par M. Guilmain, le dépôt pulvérisé n'a pas été choisi pour le dépôt de l'îlot, mais sera utilisé lors du dépôt final *blanket* justement pour ses propriétés conformables.

5.2 Variation des paramètres d'oxydation du titane

Comme pour les dépôts, l'oxydation peut être réalisée de plusieurs façons différentes. Comme le démontre C. Dubuc [Dubuc, 2008], l'oxyde de titane créé par plasma offre des propriétés plus intéressantes que les oxydations thermiques ou les oxydes déposés. En effet, la constante diélectrique inférieure à 10 et la hauteur de barrière inférieure à 1 eV correspondent aux caractéristiques recherchées pour les dispositifs monoélectroniques développés ici (voir Chapitre 2). Quatre appareils plasma ont été testés pour oxyder de façon contrôlable le titane, les sections suivantes décrivent brièvement les appareils ainsi que les résultats obtenus avec chacun d'eux.

5.2.1 Oxydation au Plasmaline

Les deux premiers appareils sont deux modèles de *barrel etcher* de marque Plasmaline, l'un conçu pour des tranches de silicium de 75 mm de diamètre et l'autre pour des tranches de 100 mm. Ces appareils sont des générateurs plasma généralement utilisés pour le nettoyage

des tranches de silicium, en particulier pour éliminer les résidus organiques à l'aide d'un plasma d'oxygène. Les paramètres pouvant être contrôlés sur l'appareil sont la pression dans la chambre, de 100 mTorr à 1 Torr, la puissance incidente, de 40 W à 300 W et le temps de procédé.

La figure 5.3 montre le résultat de mesures par ellipsométrie de l'épaisseur de l'oxyde de titane créé ainsi que de l'épaisseur de titane consommé par cette croissance. La croissance est plus rapide pour des temps courts et sature à des temps dépassant les 10 min. On obtient une croissance de l'oxyde de 4,6 nm ce qui, ajouté à l'oxyde natif déjà présent sur l'échantillon, donne un contrôle de l'épaisseur entre 1,0 nm et 5,6 nm. On observe le même comportement de saturation à temps long pour le titane. On obtient donc, en calculant le rapport entre l'oxyde créé et le titane consommé, un gonflement se situant entre 1,7 et 2.

Il est important de noter ici que la constante diélectrique du modèle est fixe pour tous les points de la courbe. Comme on le verra au chapitre 7, section 7.1.2, les mesures expérimentales de SET à basse température sèment le doute sur la validité de cette hypothèse. Pour les présents travaux, on garde cependant cette hypothèse qui donne une bonne première approximation des épaisseurs d'oxyde obtenues.

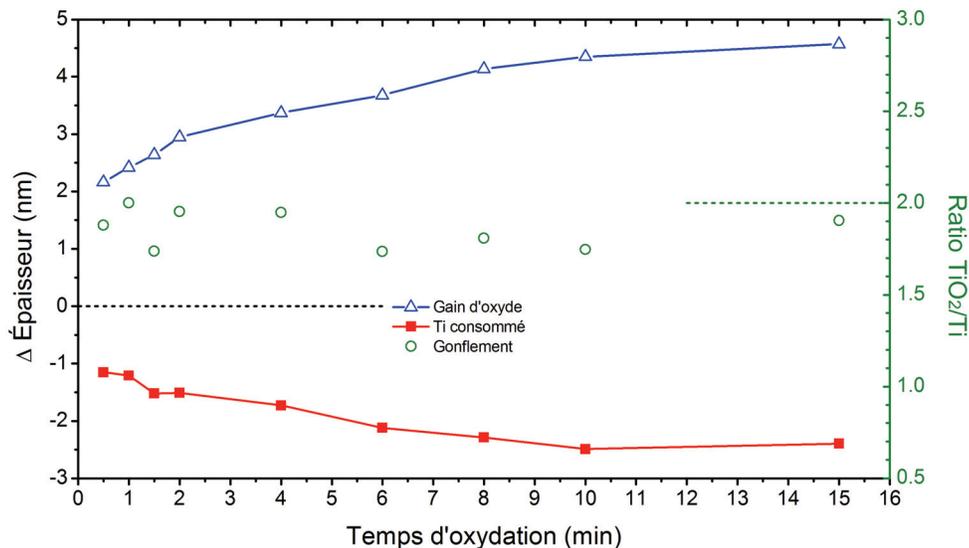


Figure 5.3 Ellipsométrie de l'oxyde de titane pour un dépôt de Ti 25 nm dans le Sloan et une oxydation dans le Plasmaline 75 mm à 50 W. Le gonflement est donné par le rapport de l'oxyde créé et du titane consommé.

Connaissant la variation d'épaisseur avec le temps d'oxydation, la vérification de la qualité de l'oxyde a pu être réalisée par des mesures XPS. La figure 5.4 montre les mesures XPS prises à plusieurs profondeurs dans les couches de métal et d'oxyde pour plusieurs temps d'oxydation permettent de déterminer la concentration et la stœchiométrie des éléments

dans chacune des couches. On observe pour l'appareil de 75 mm (figure 5.4a) que même à la surface, les proportions de titane et d'oxygène ne sont pas de 2 pour 1 comme on l'attendrait pour un oxyde stœchiométrique (TiO_2). À l'opposé, l'appareil de 100 mm (figure 5.4b) semble avoir une stœchiométrie plus près de ce qui est attendu. L'une des hypothèses pouvant expliquer la différence est la taille de la chambre. Des simulations par [Takechi et Otsuki, 2006] montre que le rapport entre le centre et les bords de chambre augmente pour la densité d'atome et d'ions dans le plasma. Ceci peut expliquer que l'oxyde contienne une plus grande fraction d'oxygène dans le cas de la chambre de 100 mm.

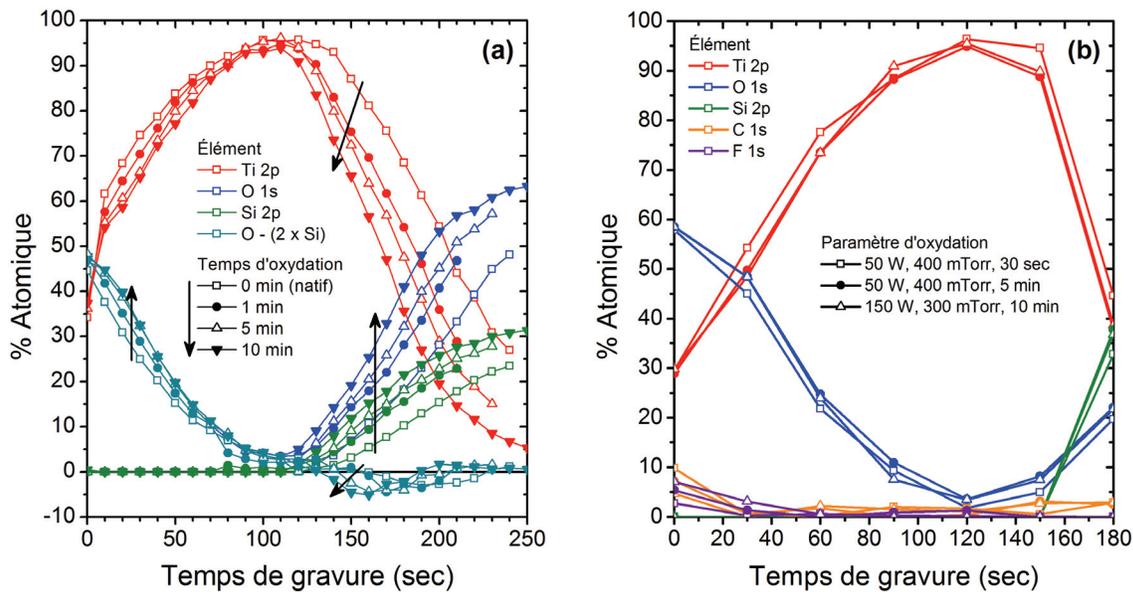


Figure 5.4 Concentration des éléments en fonction de la profondeur (temps de gravure) pour (a) 4 temps d'oxydation différents à 50 W dans le Plasma-line 75 mm et (b) 3 combinaisons de paramètres d'oxydation dans le Plasma-line 100 mm. Les flèches indiquent l'augmentation du temps d'oxydation.

Le reste de chacune des courbes semble montrer un fort gradient de concentration d'oxygène dans la couche, mais il est difficile *a priori* d'expliquer ce comportement. Il faut en fait tenir compte de plusieurs facteurs agissant sur la mesure XPS. Le premier est que la profondeur de la sonde est faible, mais non négligeable. Elle peut varier entre 3 et 10 nm dépendant du matériau. Aussi, le faisceau d'ions utilisé pour graver l'échantillon par étape peut être sélectif envers certains atomes. En particulier, il est reconnu [Grant et Briggs, 2003] que les oxydes sont généralement réduits, l'oxygène étant gravé plus rapidement par ce genre de procédé, ce qui peut fausser les proportions mesurées en profondeur. De ce fait, il est important de déconvoluer l'effet de l'empilement des matériaux de la profondeur de sonde et de la sélectivité de gravure de l'oxygène.

Une déconvolution a été réalisée empiriquement en prenant un profil type des échantillons testés avec différentes épaisseurs d'oxyde. Un gradient a été ajouté à l'interface puisqu'il est fort peu probable que l'interface d'un oxyde créé par plasma soit atomiquement définie. De plus, la diffusion de l'oxygène dans le métal voisin est aussi possible. La mesure XPS simulée avec une profondeur de sonde estimée par le libre parcours moyen des électrons dans le TiO_2 et le Ti (environ 7 nm sondés) et une diminution plus rapide de la quantité d'oxygène avec la profondeur est donnée dans la figure 5.5. La mesure simulée pour quatre épaisseurs différentes d'oxyde permet de bien analyser la mesure expérimentale.

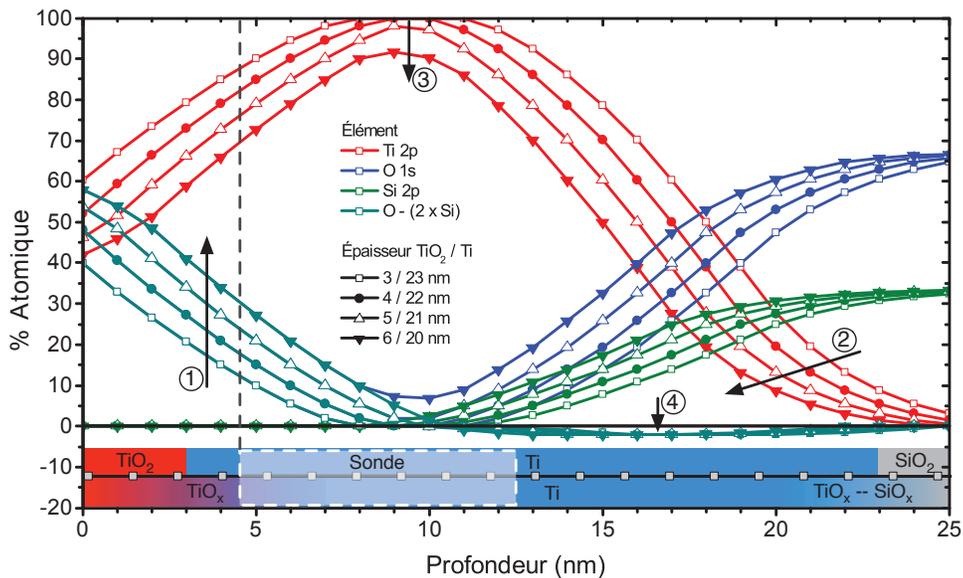


Figure 5.5 Modélisation approximative de la mesure XPS pour déconvoluer les effets de profondeur de sonde et d'empilement des matériaux dans les figures 5.4a et 5.4b. La légende du bas donne l'empilement idéal et avec des interfaces augmentées. Le pointillé est la profondeur et le carré pointillé donne la profondeur de sonde.

En comparant les courbes des figures 5.5 et 5.4a, on peut voir que le comportement est très similaire ce qui indique que le modèle empirique reproduit bien les effets de l'expérience. En premier, on voit qu'avec l'augmentation de l'épaisseur d'oxyde, correspondant à un temps d'oxydation plus long, la proportion d'oxygène est plus grande dans toute la profondeur comme l'indique la flèche ① dans la figure 5.5. En même temps, la proportion de titane dans la profondeur sondée diminue et nous amène à le voir atteindre 0 % plus rapidement (flèche ②). Ici, la profondeur de sonde permet d'expliquer la forme arrondie des courbes puisqu'elle moyenne la concentration sur une profondeur donnée. On peut d'ailleurs lui attribuer la diminution de la proportion maximale de titane vu par la mesure qui est donc moyennée sur plusieurs nanomètres (flèche ③).

La courbe identifiée par « O-(2×Si) » offre une information supplémentaire sur le processus de mesure XPS en profondeur. En effet, lorsque le silicium commence à apparaître, on observe une déficience en oxygène par rapport à ce qui est attendu pour un SiO_2 stœchiométrique (flèche ④). La profondeur de sonde à elle seule ne peut expliquer ce phénomène. Le modèle de la figure 5.5 tient compte d'une interdiffusion de l'oxygène à l'interface Ti- SiO_2 et d'une perte d'oxygène par rapport à la valeur attendue causée par la différence de taux de gravure. Sans la perte d'oxygène par gravure, il n'est pas possible d'expliquer la déficience par la méthode actuelle. On arrive donc, avec un modèle simple à comprendre ce qui est mesuré par XPS en fonction de la profondeur.

La figure 5.6 montre des spectres haute résolution du pic de titane vers 459 eV [McCafferty et Wightman, 1999] dans diverses conditions de dépôt de titane et d'oxydation. La série de courbes du haut est celle publiée dans [Droulers *et al.*, 2011] et a été oxydée dans l'ICP III-V discuté à la section 5.2.2. Les deux autres séries de courbes comparent les deux types de métaux utilisés dans le procédé (Intlvac et pulvérisé) ainsi que pour l'oxyde natif et des oxydations courte (1 min) et longue (8-10 min). Toutes deux ont été réalisées dans le Plasmaline 100 mm avec une puissance de 50 W.

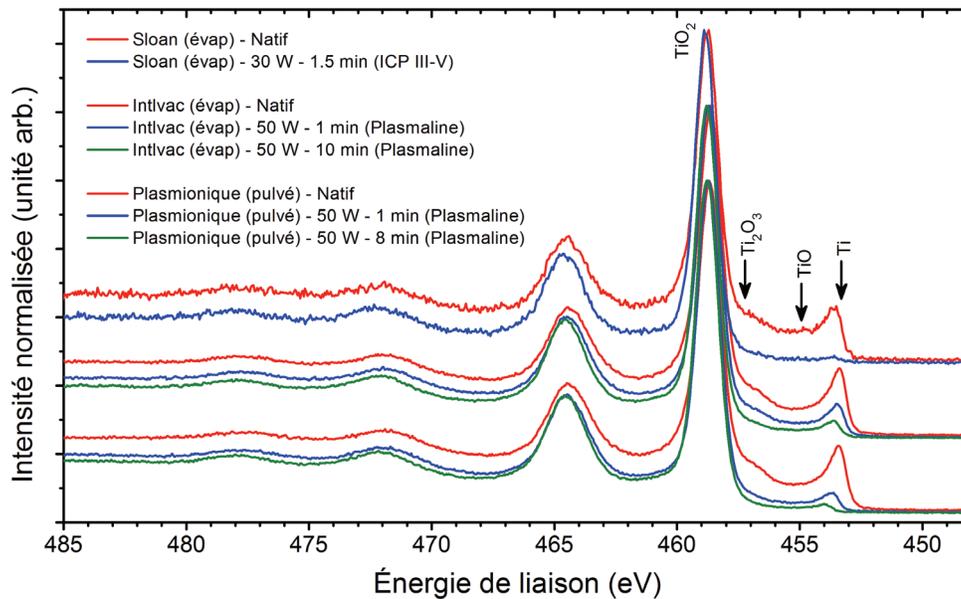


Figure 5.6 Spectres XPS haute résolution du pic de titane pour différentes machines de dépôts et conditions d'oxydation. Permet de voir la réduction des pics de titane métallique et des sous-oxydes avec l'augmentation de l'oxyde.

Tel que mentionné par McCafferty et Wightman et indiqué dans la figure 5.6, le pic principal observé est associé au TiO_2 stœchiométrique. Les pics plus petits à plus faible énergie de liaison sont associés aux sous-oxydes (Ti_2O_3 et TiO) et au titane métallique

(Ti). Les trois séries montrent une diminution marquée de ces sous-oxydes ce qui indique que l'augmentation du temps d'oxydation rapproche la stœchiométrie de celle attendue. L'oxydation du dépôt par pulvérisation montre une diminution importante de l'épaulement associé au Ti_2O_3 . Cela confirme que dès les premières minutes de l'oxydation, l'oxyde se sature rapidement en plus de croître rapidement. On observe aussi la diminution, un peu plus lente, du pic de titane métallique. Ce pic est plutôt associé à la couche de titane sous-jacente qui est visible à travers l'oxyde parce que la profondeur de sonde est plus grande que l'épaisseur de l'oxyde.

Finalement, comme on peut le voir sur la figure 5.4b, la contamination dans le volume de l'oxyde est relativement faible, mais en surface elle peut atteindre des proportions importantes, parfois plus de 10 %. Ceci implique que l'exposition à l'air de l'échantillon entre les étapes de dépôt et d'oxydation et après l'étape d'oxydation peut contaminer l'une ou l'autre ou les deux interfaces importantes pour les dispositifs. Il faut donc limiter le plus possible l'exposition à l'air entre les étapes. Les prochaines sections donnent les résultats de deux méthodes alternatives d'oxydation permettant de limiter cette contamination.

5.2.2 Gravure et oxydation dans l'ICP III-V

La première méthode testée a été d'utiliser un appareil de gravure ICP. L'idée est de pouvoir créer l'îlot et de l'oxyder dans la même machine afin d'éliminer la contamination possible entre le soulèvement et l'oxydation en plus d'éliminer la formation d'un oxyde natif. Le procédé est donc modifié pour remplacer le soulèvement par une étape de gravure plasma. Le métal de l'îlot est déposé partout sur l'échantillon après l'EBL1. Une résine positive ou négative (une seule couche) est ensuite utilisée pour définir le motif de l'îlot comme dans le procédé original, mais une gravure par plasma plutôt qu'un soulèvement permet d'éliminer le métal excédentaire. Les travaux de [Lee Sang, 2016; Lee Sang *et al.*, 2016] dans le groupe de recherche ont permis de développer ce type de gravure. L'oxydation peut donc être faite *in situ* par plasma d'oxygène et donc éliminer l'exposition à l'air.

Les premiers tests réalisés dans cette avenue ont été d'étudier les variations de l'épaisseur d'oxyde en fonction du temps d'oxydation et de la puissance du plateau de l'appareil. Ces résultats, obtenus de mesures ellipsométriques à l'aide d'un modèle publié en 2011 [Droulers *et al.*, 2011] sont rapporté ici. La figure 5.7a montre l'évolution de l'épaisseur d'oxyde en fonction du temps d'oxydation, mesuré par ellipsométrie. Le comportement de l'oxydation est rapide au début et sature vers les temps d'oxydation de plus de 5-10 min à 30 W de puissance sur le plateau. Ce comportement est typique de procédés limités par la diffusion et offre ici une épaisseur maximale de $5,4 \pm 0,4$ nm. L'épaisseur de métal

consommé par cette oxydation montre aussi ce comportement ce qui indique et confirme la stabilisation du gonflement de la couche exprimé comme le rapport entre le TiO_2 créé et le Ti consommé à une valeur entre 1,1 et 1,4. Les échelles de temps sur lesquelles l'oxydation varie permettent un contrôle suffisant pour l'application courante.

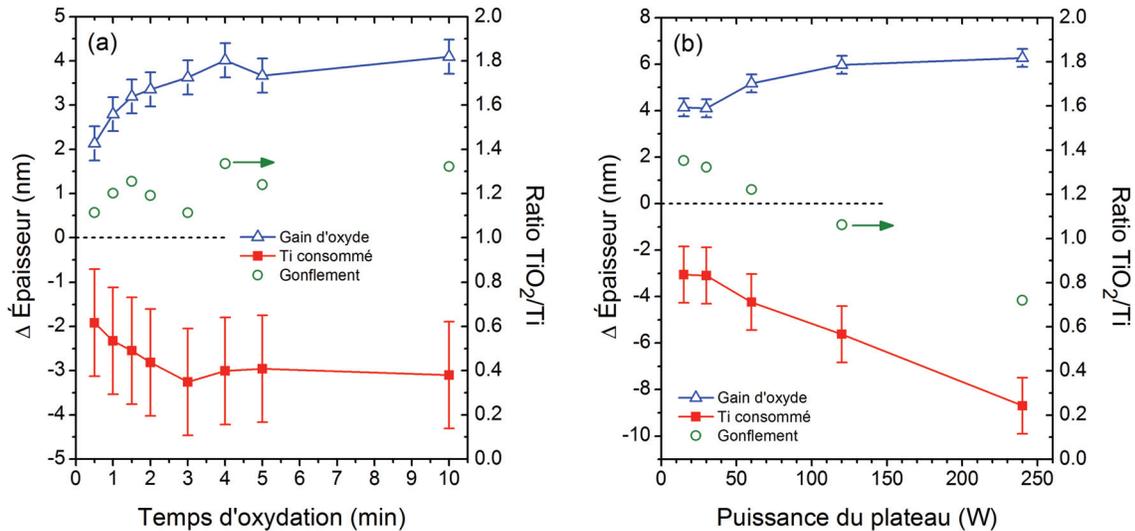


Figure 5.7 Ellipsométrie de l'oxyde créé par oxydation dans l'ICP III-V en fonction (a) du temps d'oxydation pour une puissance de plateau de 30 W et (b) de la puissance du plateau avec un temps d'oxydation de 10 min. L'oxyde natif a une épaisseur de $1,3 \pm 0,4$ nm. Adapté de [Droulers *et al.*, 2011].

La figure 5.7b montre le même type de mesures en fonction de la puissance du plateau cette fois-ci. On voit que la puissance ajoute un degré de liberté au procédé en permettant d'augmenter de $2,2 \pm 0,8$ nm l'épaisseur totale d'oxyde obtenu pour une durée de 10 min à 240 W. On voit cependant que l'augmentation de la puissance fait diminuer considérablement l'épaisseur de titane ainsi que le gonflement qui passe à des valeurs inférieures à 1. L'explication est que le bombardement ionique dû à la puissance élevée pulvérise lentement la surface et donc le métal est à la fois oxydé et gravé, ce qui cause la saturation de l'épaisseur d'oxyde observé en fonction de la puissance.

Avec ces résultats en main, l'étape suivante est de vérifier la qualité de l'oxyde créé dans ces conditions. La figure 5.8 montre une série de spectres XPS obtenus d'échantillons oxydés dans les mêmes conditions à l'exception du matériau du support d'échantillon. Un échantillon de référence non oxydé (oxyde natif seulement) est comparé à des oxydations réalisées sur support de silicium, aluminium, aluminium anodisé et de silicium recouvert de titane. Tous les essais présentés dans ce graphique sont réalisés dans les mêmes conditions d'oxydation et donc les pics de carbone, de titane et d'oxygène sont similaires entre eux. On

s'intéresse ici aux autres pics qui indiquent les contaminants ajoutés à l'oxyde par le procédé. Les échantillons utilisés ici sont des substrats de silicium d'une taille de 1 cm×1 cm. Puisque la machine de gravure fonctionne sur des gaufres complètes de 200 mm, ces petits échantillons doivent être collés sur un grand substrat pour être acceptés par la machine. L'impact du matériau de la gaufre de support doit donc être pris en compte. Aussi si l'interaction du plasma avec le support d'échantillon peut avoir un impact sur la qualité de l'oxyde formé, la même chose peut se produire sur une gaufre entière puisque les matériaux exposés sur le reste de la gaufre entrent aussi en compte dans ces contaminations. Les résultats sont donc transférables à des procédés à grande échelle.

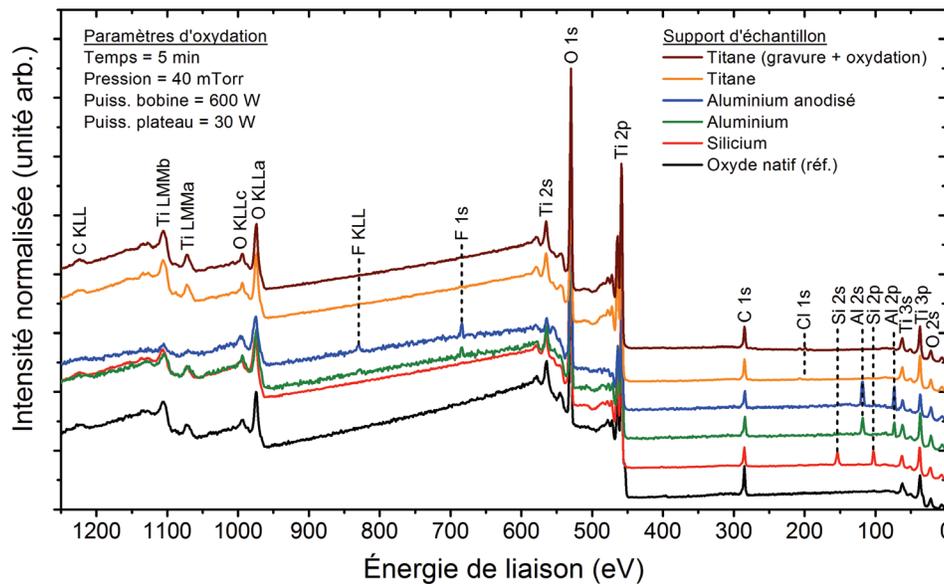


Figure 5.8 Spectres XPS de la surface du titane oxydé dans l'ICP III-V pour différents matériaux du support d'échantillon. Chacun des pics est identifié, incluant les contaminants de Si, Al, Cl et F.

Dans le cas du support de silicium (celui utilisé par défaut), on peut distinguer deux pics caractéristiques du silicium, ce qui indique qu'une petite fraction du matériau du support d'échantillon réagit dans le plasma d'oxygène puis se redépose sur l'échantillon. L'objectif étant de créer une jonction oxydée sans défaut, il est impératif d'éliminer ces contaminants. La solution la plus simple est de changer le silicium pour un matériau plus inerte au plasma d'oxygène. Puisque la chambre à plasma est construite en aluminium, il semble logique que ce métal ou son oxyde soient plus inertes et des supports d'aluminium et d'aluminium anodisé ont été testés. On observe cependant le même problème de contamination par le support d'échantillon puisque les pics de l'aluminium sont visibles à faible énergie. Une contamination au fluor est aussi visible et provient probablement d'un autre procédé réalisé dans la même chambre avec des gaz contenant du fluor. Pour contrer la réaction du

support avec le plasma et la contamination de la surface, un dernier test a été réalisé sur un support de silicium recouvert de titane. Comme le montre le spectre de la figure 5.8 il n'y a pratiquement aucune contamination visible sur l'échantillon après oxydation.

Un test du procédé complet a donc été réalisé afin de vérifier que l'ajout de la gravure plasma au chlore *in situ* avant l'oxydation n'ajoute pas de contamination supplémentaire. Le spectre du haut montre le résultat de l'analyse XPS pour un échantillon de 85 nm de titane gravé d'environ 10 nm et oxydé dans les mêmes conditions que les échantillons précédents. Ici aussi, on peut voir qu'aucune contamination significative n'apparaît à la surface de l'échantillon à l'exception de moins de 1 % de contamination au chlore vers 200 eV d'énergie de liaison. Ce chlore semble provenir de la gravure du titane qui est réalisée avec cet élément puisqu'une mesure XPS en angle de la même surface a montré moins de contaminants. Puisque la profondeur de sonde effective est plus faible lorsque l'angle d'incidence augmente, la diminution de la quantité de chlore montre qu'il est bien à l'interface TiO_2/Ti .

Des spectres à haute résolution du pic de titane comparant quatre échantillons sont donnés à la figure 5.9. Le premier échantillon a un oxyde natif, les deux suivants sont oxydés en deux temps différents sur support de silicium et le dernier est oxydé sur support de titane. On peut voir que dans tous les cas, il ne semble pas y avoir de différence notable entre les différentes stoechiométries d'oxyde malgré les contaminations, en particulier pour les deux dernières courbes ayant pour seule différence le matériau du support. La problématique du support en est seulement une de contamination des surfaces.

Les résultats montrent donc qu'il est possible d'utiliser un procédé utilisant la gravure et l'oxydation *in situ* pour créer des îlots métalliques entourés de jonction tunnel. Cependant, plusieurs facteurs expliquent que cette approche n'a pas été poursuivie. D'abord, la gravure sur support de titane implique nécessairement que le procédé grave le support en même temps que l'échantillon. Dans le cas d'un support entièrement fait de titane et en particulier dans le cas d'un support de silicium avec dépôt de titane par dessus, la gravure du support implique une variation intrinsèque du procédé à chaque répétition, ce qui en réduit la reproductibilité. Dans un contexte industriel, le problème est différent, mais tout aussi complexe puisqu'il n'y a pas de support, c'est la tranche au complet qui subit le procédé. Cependant, dans ce cas, les zones de la tranche qui ne sont pas du titane sont exposées et contamineront probablement les surfaces des motifs gravés. L'utilisation d'un support en TiO_2 pourrait permettre de réduire grandement le problème puisqu'il n'est attaqué que physiquement par la gravure plasma du titane. Cependant, il était difficile d'obtenir les dépôts de matériaux nécessaires sur support de 200 mm pour la machine utilisée.

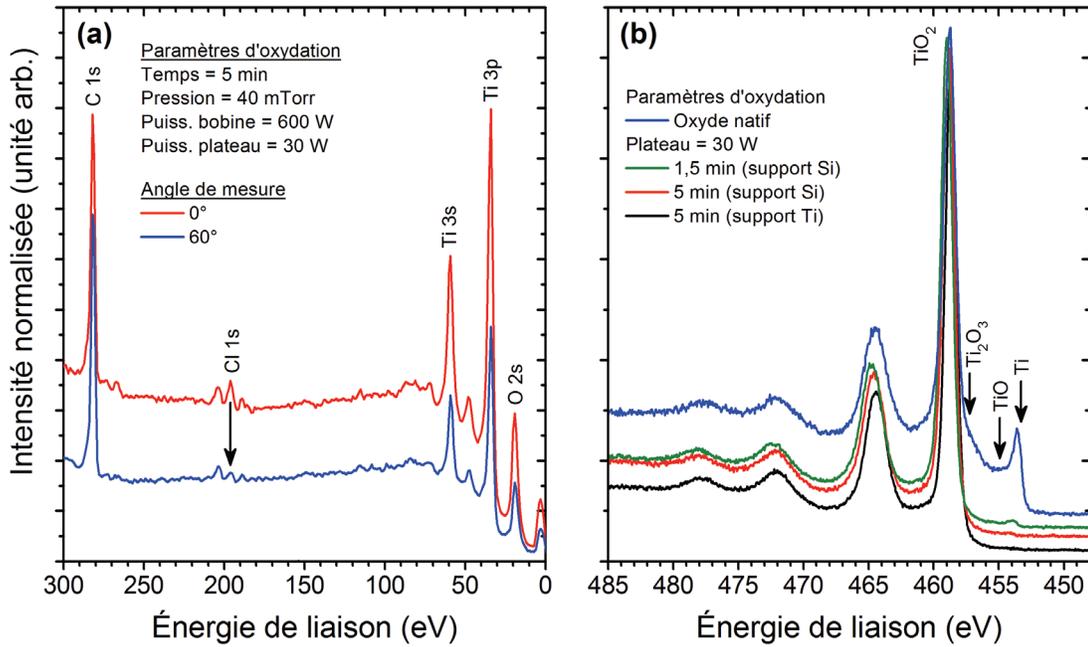


Figure 5.9 (a) Spectres XPS à 0° et 60° montrant la réduction de la contamination en Cl. (b) Comparaison XPS haute résolution du pic de Ti pour différents temps et différents supports d'oxydation.

Finalement, tel que détaillé dans la section suivante, la détérioration des propriétés de l'échantillon prohibe l'utilisation de cette méthode.

5.2.3 Oxydation *in situ* dans l'Intlvac

La deuxième méthode d'oxydation *in situ* testée utilise le procédé de soulèvement tel que décrit dans le chapitre 4. Une EBL est utilisée pour définir l'îlot de titane dans une double couche de résine de sorte à pouvoir réaliser le soulèvement. Le dépôt de titane se fait dans la machine Intlvac (voir section 5.1.1) et l'oxydation se fait directement dans la machine, *in situ*. Ceci permet d'obtenir une interface sans contamination entre l'îlot et la jonction tunnel puisqu'aucun produit n'est en contact avec le métal entre le dépôt et l'oxydation. Puisque les conditions d'oxydation optimales n'étaient pas connues, plusieurs tests ont été réalisés. Le premier a permis de valider la qualité de l'oxyde et le bon fonctionnement de la source d'ion. La figure 5.10 montre les spectres haute résolution de titane oxydé *in situ* dans l'Intlvac. Les deux premières courbes sont pour l'oxyde natif (référence) et une oxydation sous atmosphère d'oxygène, sans plasma pendant 10 minutes. On observe très peu de différence donc l'oxydation est très lente dans ces conditions et il est donc nécessaire d'avoir un plasma pour donner de l'énergie aux ions et leur permettre d'oxyder le titane. Les deux autres courbes montrent que l'oxydation avec le plasma fonctionne bien

et réduit significativement les pics de titane métallique et les sous-oxydes (TiO et Ti_2O_3) comme attendu (voir section 5.2.1, figure 5.6).

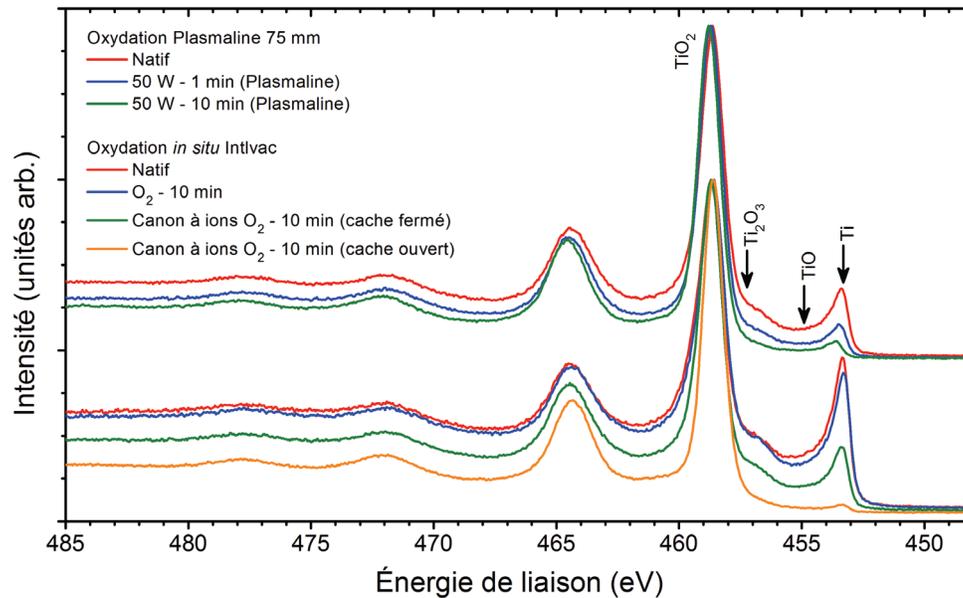


Figure 5.10 Spectres XPS haute résolution du pic de Ti pour une série d'échantillons oxydés dans le Plasmaline 75 mm et une série oxydée *in situ* dans l'Intlvac. La deuxième série permet de valider le fonctionnement du canon à ions et montre une stœchiométrie similaire à l'oxyde Plasmaline dans les conditions choisies.

Ayant trouvé les bons paramètres d'oxydation, la courbe d'oxydation optimale a pu être obtenue. La figure 5.11 montre l'épaisseur d'oxyde créée pendant l'oxydation en fonction du temps d'oxydation pour un débit d'oxygène de 50 sccm. En ajoutant l'oxyde natif de 1,1 nm, on obtient une plage d'oxydation allant de 1,1 nm à 6,8 nm d'épaisseur. On peut aussi voir la consommation de titane et du même coup le gonflement qui nous indique un oxyde moins dense. Cet effet est probablement causé par le bombardement moins intense de la surface de l'échantillon dans le plasma. L'oxyde est donc moins compact et gonfle plus qu'avec les méthodes précédentes.

5.3 Conclusion

Des mesures XPS ont permis l'évaluation objective de la qualité des métaux nécessaire à la réalisation du procédé de fabrication. La stœchiométrie et la pureté du titane déposé par évaporation et par pulvérisation dans trois machines différentes ont été évaluées. Le dépôt Intlvac par évaporation est le plus intéressant pour la réalisation de l'îlot par sa grande pureté et sa facilité d'utilisation dans un procédé de soulèvement. Ensuite, l'étude de la pureté, stœchiométrie et de l'épaisseur d'oxydes de titane créé par plasma dans diverses

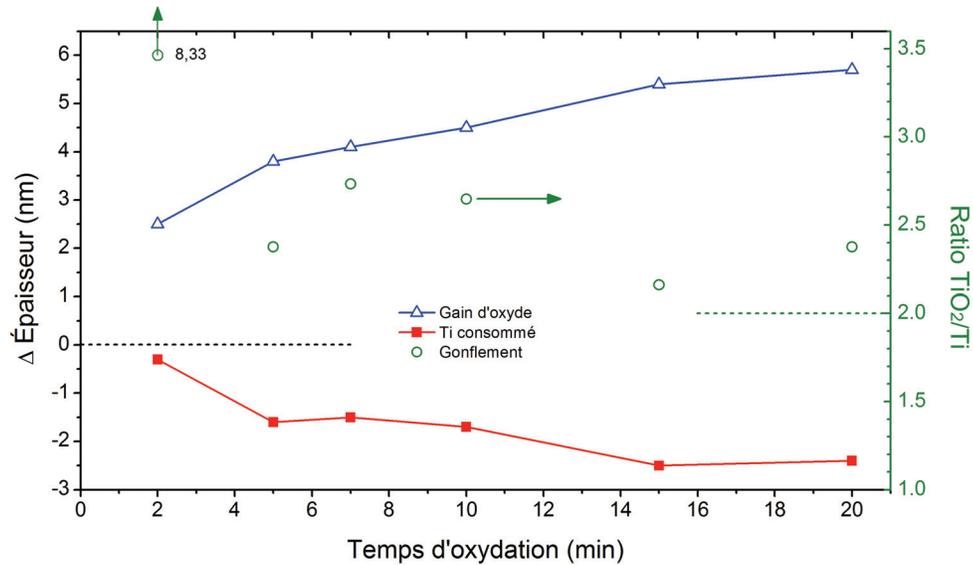


Figure 5.11 Mesure ellipsométrique de l'épaisseur d'oxyde créée lors de l'oxydation *in situ* du titane dans l'Intlvac en fonction du temps d'oxydation. Le gonflement est le rapport de volume de l'oxyde créé sur le titane consommé.

machines a permis de déterminer la méthode ainsi que les paramètres à utiliser pour la fabrication des dispositifs. La contamination de l'oxyde cru dans l'ICP III-V causée par la gravure au Cl du Ti avant l'oxydation et la contamination carbonée des autres méthodes ont favorisé l'utilisation de l'oxydation *in situ* dans la machine Intlvac pour la fabrication des dispositifs. La plage d'épaisseur est idéale pour fabriquer les barrières tunnel de quelques nanomètres d'épaisseur nécessaires au fonctionnement des dispositifs MIM, SET et QCA.

CHAPITRE 6

STABILITÉ DES JONCTIONS TUNNEL

Avec les matériaux et méthodes choisies aux chapitres précédents, des jonctions tunnel uniques ont été réalisées. Tel que démontré dans le chapitre 4, des problèmes de reproductibilité causés par la double gravure de la marche entre les deux lithographies ont été observés et attribués à la jonction UV-EBL. Ici, les MIM corrigées avec une lithographie à 40 nm sont mesurées en fonction du temps¹. La figure 6.1 montre les résultats obtenus pour l'une de ces MIM, représentative de la majorité de celles fabriquées. On observe une diminution du courant au travers de la jonction de 20 % en l'espace de trois jours. L'une des causes possibles de cette dégradation est la diffusion de l'oxygène dans le dispositif. Le titane étant reconnu pour avoir une grande affinité à l'oxygène, comme en témoigne son usage courant dans divers types de pompes à haut vide [Weissler et Carlson, 1979], c'est l'explication la plus probable. L'objectif des travaux décrits dans ce chapitre est donc de remplacer le Ti de la source, du drain et de l'îlot, ayant une grande réactivité à l'oxygène pour limiter ou éliminer la détérioration des jonctions tunnel minant la fiabilité et la reproductibilité des dispositifs fabriqués.

6.1 Nouveaux matériaux

Changer un matériau est complexe puisque le matériau de remplacement doit satisfaire à plusieurs critères avant d'être utilisé avec succès. Ici, chacune des différentes parties du procédé peut être adaptée pour réduire ou éliminer le problème de la diffusion de l'oxygène. Les métaux de l'îlot et des électrodes peuvent être changés pour des matériaux ayant une affinité à l'oxygène plus faible. Le matériau des jonctions tunnel peut aussi être modifié pour un isolant électrique ayant une plus grande stabilité thermodynamique. Avec le procédé tel que décrit au chapitre 4, le matériau de la jonction tunnel est directement lié au métal utilisé pour l'îlot, et ceci doit être pris en compte dans le choix des matériaux. Aussi, l'étude donnée dans les prochaines lignes est restreinte aux dispositifs nanofil et MIM puisque ce sont les briques de base du procédé (électrodes et jonctions tunnel) menant aux dispositifs plus complexes comme les SET et le QCA.

¹ À moins d'indication contraire, toutes les mesures électriques données dans ce chapitre sont réalisées à l'aide de la station sous pointe de la plateforme du LCSM et à température ambiante (295 K).

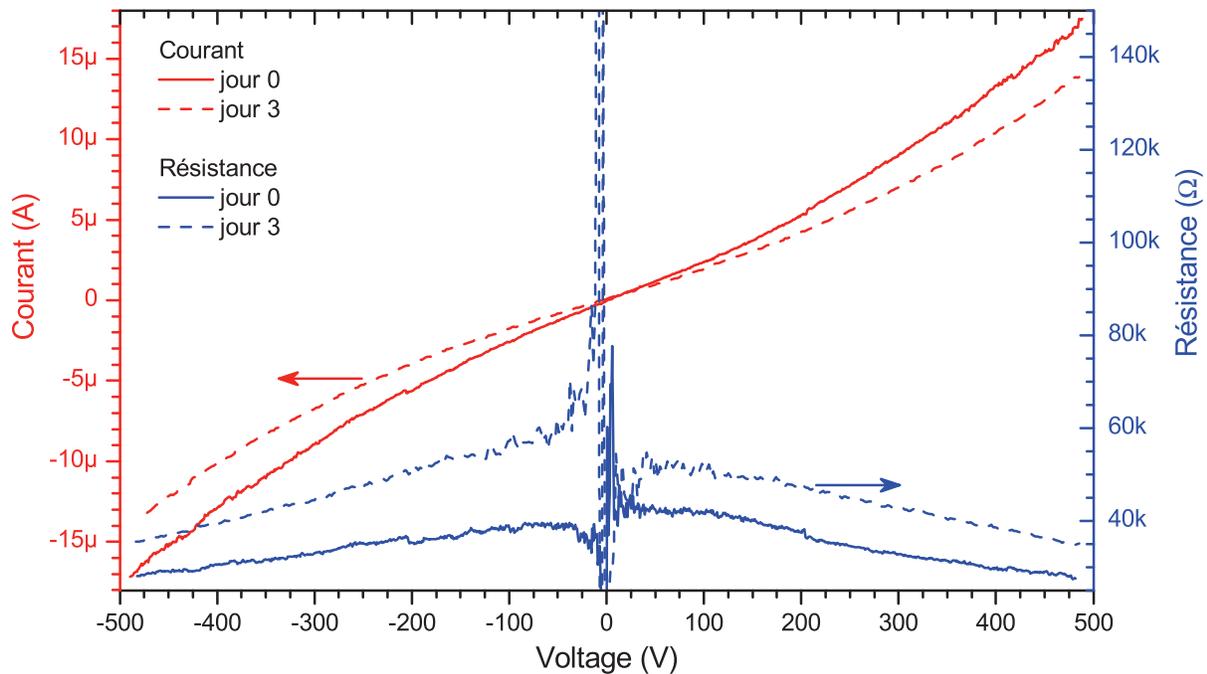


Figure 6.1 Courbes I-V et R-V d'une jonction tunnel MIM mesurées à trois jours d'écart et montrant le vieillissement de la jonction.

Les nouveaux matériaux doivent être compatible CMOS tout en satisfaisant les critères suivants pour être utilisés à diverses étapes dans le procédé :

1. l'affinité du métal à l'oxygène doit être faible pour limiter la détérioration des caractéristiques de la jonction ;
2. le métal choisi doit posséder un oxyde conjugué² adéquat pour générer une barrière tunnel permettant un courant adéquat pour la fabrication de SET comme détecteur de charge ;
3. dans le cas d'un matériau d'îlot, il doit pouvoir être déposé par évaporation pour être compatible avec le procédé de soulèvement utilisé (voir section 5.1) ;
4. dans le cas d'un matériau *blanket*, il doit pouvoir se déposer par pulvérisation afin que le remplissage des tranchées soit bon (voir section 5.1) ;
5. le matériau doit avoir une bonne adhésion sur le substrat (ici du SiO₂) ;
6. la vitesse de polissage doit être similaire à celle du SiO₂ et des autres matériaux en jeu dans le procédé envisagé.

²Un oxyde conjugué est l'oxyde naturel d'un métal. Par exemple Al → Al₂O₃, Ti → TiO₂, etc.

Des matériaux ayant une faible affinité à l'oxygène sont donnés dans le tableau 6.1 et comparés au Ti pour chacun des critères de la liste précédente. L'Au et le Pt sont les matériaux de prédilection lorsque l'oxydation du métal est un problème, mais ici, plusieurs autres prérequis sont manquants pour utiliser ces matériaux dans le procédé nanodamascène. En effet, ils sont très peu réactifs, ne s'oxydent pas et ne peuvent donc pas être utilisés pour l'îlot (pas d'isolant conjugué). Aussi, par leur coût, il est très dispendieux de fabriquer des cibles de ces matériaux pour le procédé de pulvérisation, en plus d'avoir une mauvaise adhésion sur le substrat de SiO₂, ce qui élimine leur utilisation à l'étape du *blanket*. Ils sont aussi plus difficiles à planariser en CMP. Les autres matériaux du tableau possèdent un oxyde stable et isolant électrique. Puisque le Ni, l'Al et le Cr peuvent être déposés autant par évaporation que par pulvérisation, ils peuvent être utilisés dans les deux situations (îlot ou *blanket*). Dans le cas du W et du TiN, puisqu'ils ne peuvent être déposés par évaporation, on ne peut les intégrer que pour le *blanket*. Les sections qui suivent discutent des différentes propriétés de ces matériaux afin de restreindre le choix et de limiter le nombre de tests à réaliser.

Tableau 6.1 Comparaison des différents métaux de remplacement du Ti possible pour l'îlot et les électrodes (*blanket*).³ Pour référence, la vitesse de polissage v_{CMP} du SiO₂ est 45 nm/min avec la solution Allied et 25 nm/min pour la solution CX94S. Les cases en rouge indiquent les paramètres ne satisfaisant pas aux critères d'intégration.

Compatibilité	Ti	Au	Pt	Ni	Al	Cr	W	TiN
Faible affinité à l'oxygène	✗	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Oxyde conjugué (isolant)	TiO ₂	✗	✗	NiO	Al ₃ O ₃	Cr ₂ O ₃	WO ₃	TiO _x
ϕ_0 conjugué (eV)	0,33	-	-	3,35	1,70	0,75	1,15	0,50
Évaporation (évaporation)	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✗	✗
Pulvérisation (<i>blanket</i>)	✓	✗	✗	✓	✓	✓	✓	✓
Bonne adhésion sur SiO ₂	✓	✗	✗	✓	✓	✓	✓	✓
v_{CMP} (Allied:IPA 1:1) (nm/min)	20	-	-	-	-	25	13	85
v_{CMP} (CX94S) (nm/min)	5	-	-	-	-	-	-	30

6.1.1 Comparaison des propriétés

Le tableau 6.2 rapporte les différents paramètres électriques permettant de prévoir le comportement des jonctions fabriquées à l'aide du modèle décrit au chapitre 3 et des matériaux du tableau 6.1. Ces paramètres sont utilisés pour calculer la hauteur de barrière $\phi_0 = \psi - \chi$ donnée au tableau 6.1. Les champs de claquage sont donnés à titre indicatif,

³ Les paramètres et références utilisés pour la construction du tableau sont donnés dans les tableaux A.1 et A.2.

souvent pour des méthodes de fabrication différentes de l'oxydation par plasma utilisée ici, mais fixent une limite supérieure à la différence de potentiel qu'on peut appliquer pour mesurer un courant dans une jonction tunnel.

Tableau 6.2 Travail d'extraction (ψ), affinité électronique (χ), champ de claquage (E_{BD}) et constante diélectrique (ϵ_r) estimé des divers matériaux disponibles.⁴

Métal	ψ (eV)	Isolant	χ (eV)	E_G (eV)	ϵ_r	E_{BD} (MV/cm)
Ti	4,30	TiO ₂	4,00	3,1	3,5	3,2
Ni	5,15	NiO	1,80	3,6	11,9	8,3
Al	4,28	Al ₂ O ₃	2,58	8,8	9,0	6,0
Cr	4,50	Cr ₂ O ₃	3,76	3,0	9,2	–
W	4,55	WO ₃	3,40	2,7	4,0	–
TiN	4,50					

La forme complète de la barrière est ensuite entrée dans le modèle pour en extraire les courbes J_D - V_{DS} des jonctions tunnel fabriquées avec ces nouveaux matériaux. Les résultats de cette simulation sont comparés dans le graphique de la figure 6.2⁵. Le Ni, l'Al et le Cr ont été considérés comme des îlots dans la simulation tandis que le W et le TiN sont pris comme *blanket*. Dans tous les cas, le Ti est pris comme deuxième matériau afin de voir l'impact du changement d'un seul matériau à la fois et l'oxyde est l'oxyde conjugué du matériau de l'îlot. Dans le cas du W et du TiN, le TiO₂ est pris comme oxyde puisque l'îlot est en Ti et l'oxyde est toujours celui de l'îlot par définition du procédé. La limite de détection du courant des systèmes de mesure disponibles au laboratoire est de 200 fA, ce qui correspond à une densité de courant de 1 kA/cm pour une section de jonction de 20 nm×10 nm, soit des dimensions atteintes de façon routinière avec le procédé nanodamascène. Une épaisseur d'oxyde de 2, 3 et 5 nm est simulée pour chaque combinaison de matériau afin de déterminer si ces jonctions peuvent produire des courants mesurables, ce qui est l'un des critères déterminant l'utilisation finale du matériau dans la jonction tunnel.

Comme mentionné à la section 2.3.2, l'opération d'un SET se fait à très basse tension V_{DS} pour avoir des pics de Coulomb étroits. Ceci se fait au détriment de l'amplitude du signal et il est donc nécessaire que la résistance totale du SET soit suffisamment faible pour permettre aux pics d'être mesurables, même à faible biais. Compte tenu de la résolution des appareils de mesure du laboratoire, une résistance tunnel d'au plus 1 G Ω peut être

⁴ Les références pour ces valeurs sont données dans les tableaux A.1 et A.2 et l'oxyde du TiN est le TiO₂.

⁵ Par leur faible hauteur de barrière, les courbes pour les empilements Ti/TiO₂/Ti et Ti/Ti₂/TiN ne sont valides que dans une plage de tension allant jusqu'à 1-2 V en considérant la force image dans le calcul. Cet artéfact ne serait pas présent sans la force image, mais les résultats sont tout de même comparables dans cette région.

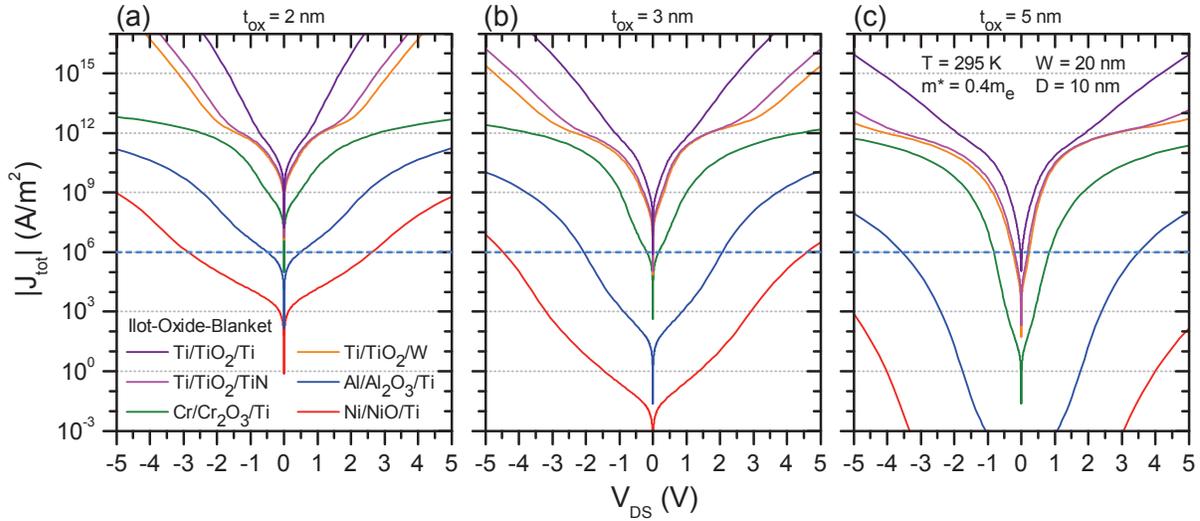


Figure 6.2 Simulation de la caractéristique J-V de MIM composées d'un nouveau métal, de son oxyde conjugué d'une épaisseur de (a) 2 nm, (b) 3 nm et (c) 5 nm, puis de Ti. La limite de mesure est indiquée par le pointillé bleu pâle. Les empilements de matériaux et les paramètres communs sont indiqués dans les graphiques (a) et (c) respectivement.

utilisée puisqu'au-delà de cette valeur, les pics de Coulomb ne sont plus visibles à basse tension. La densité de courant correspondante à cette limite pour une tension de 100 mV est de 1 MA/cm². Dans la figure 6.2, on peut voir cette limite par le pointillé bleu pâle dans chacun des graphiques. On voit que déjà, à 2 nm d'épaisseur, la densité de courant des MIM Ni/NiO/Ti et Al/Al₂O₃/Ti sont sous cette limite dans le régime basse tension. On voit aussi que dans le cas du NiO, la tension d'opération pour obtenir un courant suffisamment grand dépasse la tension de claquage de 8,3 MV/cm (2,5 V). Le NiO est donc rejeté puisque ses conditions d'opération ne permettent pas une utilisation stable et soutenue du dispositif. L'Al₂O₃ quant à lui, pourrait être utilisé si son épaisseur pouvait être réduite un peu, mais comme la plupart des métaux évalués ici, au contact de l'air, une fine couche d'oxyde natif d'une épaisseur de 1 à 2 nm (voir par exemple : [Ernsberger *et al.*, 1986; Gloos *et al.*, 2003]) se forme à la surface de ces métaux. Le contrôle de l'épaisseur d'oxyde sous les 2 nm d'épaisseur est donc difficile à réaliser en utilisant l'oxydation par plasma présenté au chapitre 5 puisque l'échantillon est exposé à l'air entre le dépôt de l'îlot et du *blanket*. L'aluminium comme îlot est rejeté puisque l'épaisseur d'oxyde est donc d'au moins 2 nm et qu'ainsi il est non idéal pour l'application au SET. Le meilleur candidat pour le remplacement du Ti dans l'îlot est donc le Cr, puisque sa hauteur de barrière est suffisamment petite à une épaisseur de 2 ou 3 nm pour permettre la fabrication de SET. Le Cr, ayant aussi une vitesse de polissage similaire à celle du Ti, devrait pouvoir s'intégrer

aisément au procédé et offrir des caractéristiques électriques intéressantes tout en montrant une meilleure résistance à l'oxydation. Le Cr a donc été testé dans la fabrication de MIM et de SET afin de valider ses propriétés avec la simulation (section 6.1.2).

6.1.2 Empilement Cr/Cr₂O₃/Ti

Pour intégrer le Cr dans le procédé, il faut d'abord valider que le soulèvement de ce métal se produit normalement et donne la forme d'îlot voulue. Avec le procédé de soulèvement utilisé pour le Ti, les îlots de Cr formés lors de ces tests possèdent un *pied*. La figure 6.3a montre ce pied d'environ 50 nm de large formé tout autour des motifs d'EBL2 et est aussi présent dans les tranchées, ce qui peut être gênant pour la géométrie de la jonction tunnel. En effet, un pied d'une hauteur de 5-6 nm crée une jonction qui n'est pas plane mais plutôt en forme d'escalier, comme le montre le schéma en encart de la figure. Cela rend plus difficile la compréhension de ce qui se passe à la jonction en termes de composition et de densité. À titre comparatif, le même motif en Al réalisé avec le même procédé ne forme pas de pied (figure 6.3b).

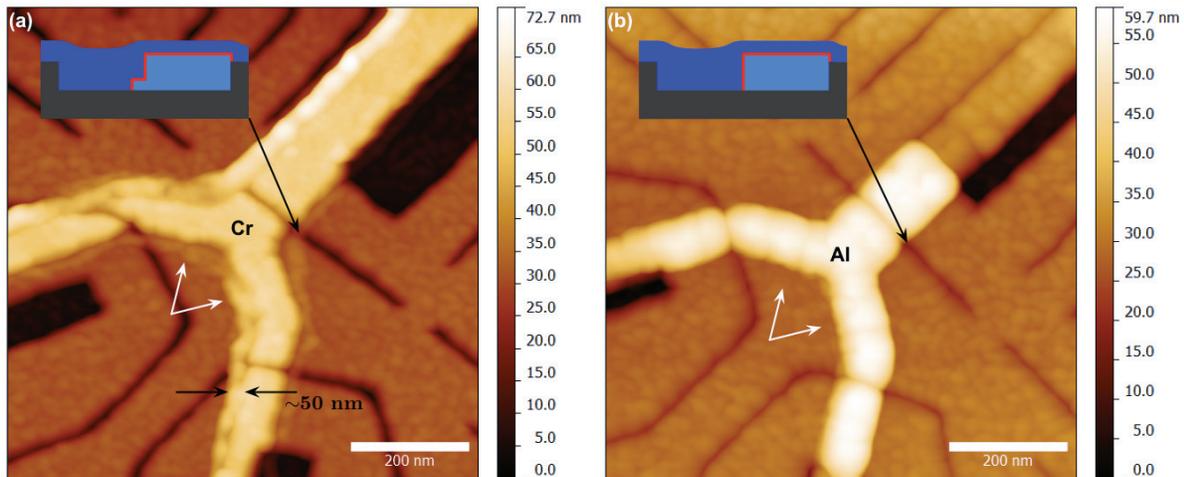


Figure 6.3 Image AFM d'un dépôt d'îlot en (a) Cr et (b) Al. Un pied, d'environ 50 nm de large et 6 nm de haut est visible sur le bord du motif de Cr, mais pas sur l'Al.

Afin de comprendre ce qui a causé ce pied, un dépôt dans les mêmes conditions a été refait, mais cette fois-ci sur des réseaux de lignes. L'objectif est de pouvoir cliver l'échantillon et l'observer en coupe avant le soulèvement, c'est-à-dire avec la résine et le métal déposé. La figure 6.4 montre une image SEM de la vue en coupe d'un échantillon où 25 nm de Cr a été déposé. L'encart montre la surface vue de dessus et on peut y voir les fissures créées lors du dépôt.

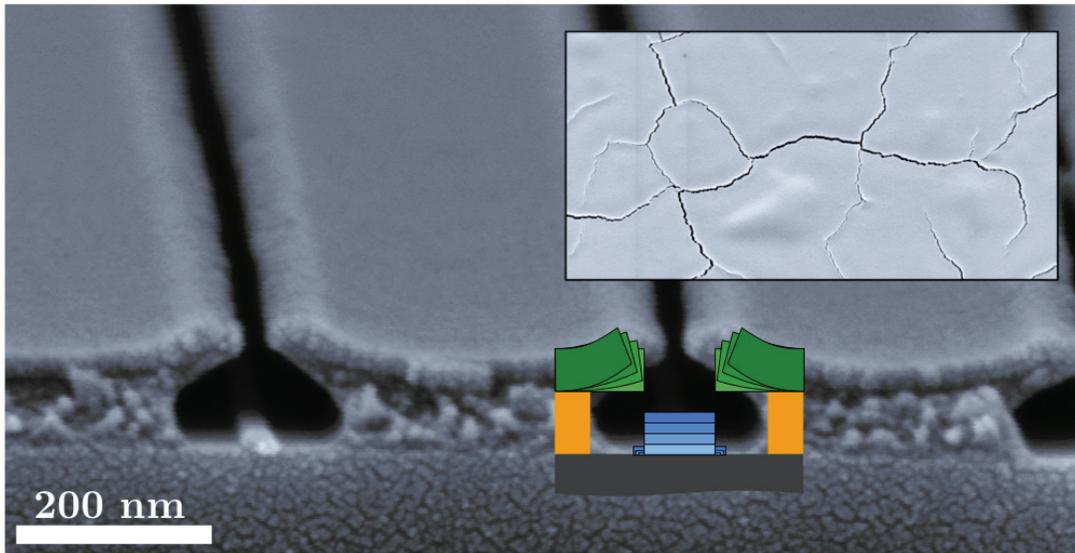


Figure 6.4 Vue en coupe d'un dépôt de Cr 25 nm sur résine ZEP/MMA. La courbure vers le haut de la résine montre la contrainte présente dans le Cr déposé. L'encart montre le résultat sur une surface sans motif. L'effet est aussi schématisé.

Deux phénomènes peuvent causer cette fissuration, le premier est la surcuisson de la résine. Lors du dépôt par évaporation, le métal de la cible doit atteindre le point de fusion, ce qui peut entraîner l'échauffement de l'échantillon par radiation. L'augmentation de température peut évacuer des solvants résiduels et modifier la forme de la résine. Ce phénomène n'est cependant pas en cause ici puisque le Cr se sublime plutôt que de fusionner et ensuite s'évaporer. La puissance utilisée pour évaporer le Cr est en effet environ 60 fois plus faible que pour le Ti. Le deuxième phénomène principalement responsable de ces fissures est la contrainte possiblement présente dans le matériau suivant le dépôt. Il semble ici que le Cr rétrécisse beaucoup plus que la résine lors du refroidissement de l'échantillon à la fin de l'évaporation, et ceci cause donc une courbure de la couche telle qu'observée sur la vue en coupe et dans le schéma de la figure 6.4. Cette contrainte semble être à l'origine de la formation du pied observé sur les motifs déposés puisque les fissures sont observées seulement sur les matériaux ayant montré des pieds.

Afin d'étudier complètement la question, des échantillons identiques ont été faits avec divers matériaux (Ti, Ni, Cr et Al) et le soulèvement a été réalisé pour ensuite observer par AFM les lignes de métal déposées sur la surface de SiO_2 . La figure 6.5 montre une topographie de ces lignes métalliques représentative de l'échantillon. L'échelle de couleur de l'image est différente pour chaque image puisque les pieds n'ont pas tous la même hauteur. De cela, on peut voir que dans le cas du Ti, il n'y a qu'un pied très étroit faisant

moins de 3 nm de hauteur, alors que le Ni a un pied d'environ 10 nm et le Cr, 20 nm. Dans le cas de l'Al, le pied semble faire entre 5 à 10 nm, mais n'est pas continu sur toute la longueur de la ligne. C'est plutôt des grains à la base de la ligne qui ont cru plus que le reste. Ces tests montrent donc que le Cr ne peut être utilisé avec le procédé de soulèvement développé ici puisque ce pied vient limiter la taille minimale des îlots qu'il est possible de fabriquer et ajoute un segment de matériau dont la géométrie exacte et les propriétés électriques ne peuvent être contrôlées adéquatement. Cela ajoute aussi à la variabilité du procédé puisque l'uniformité du pied n'est pas bonne et rend le contrôle des jonctions tunnel créées à partir de ces matériaux plus difficile à effectuer. Une gravure sèche permettrait de corriger ce problème, cependant on verra plus loin dans le chapitre que les autres solutions testées ont réglé le problème en grande partie, rendant inutile le développement du soulèvement ou de la gravure du Cr dans le cadre du projet.

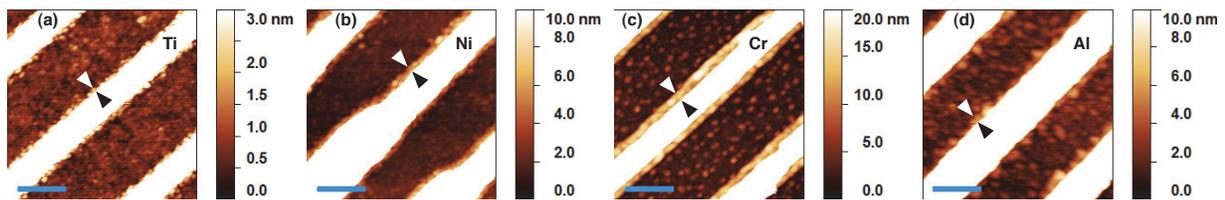


Figure 6.5 Images AFM des réseaux de lignes de (a) Ti, (b) Ni, (c) Cr et (d) Al après soulèvement. Les zones blanches sont les lignes de métal saturées dans l'échelle de couleur pour montrer les pieds de dépôt observés sur tous les échantillons (entre les triangles). La barre d'échelle fait 200 nm.

6.2 Barrière anti-diffusion

Dans le cas des candidats pour le remplacement du métal de *blanket*, le W et le TiN ont tous deux des hauteurs de barrières adéquates avec le TiO_2 ou le Cr_2O_3 formant la jonction tunnel. Cependant, des tests de CMP réalisés sur le W et le TiN ont démontré que ces matériaux ne sont pas compatibles avec le Ti et le Cr dans l'étape de polissage du dispositif. En effet, le W est beaucoup trop dur et se polit donc très lentement comparé au SiO_2 . Les principaux résultats de ces tests sont donnés en annexe à la section C.3.1 et montrent que les zones où les structures nanométriques se trouvent sont largement surpolies alors qu'à d'autres endroits, les électrodes sont encore connectées ensemble par le W restant entre les motifs. À l'inverse, le TiN se polit beaucoup trop rapidement pour avoir un contrôle adéquat et pouvoir arrêter le polissage avant de surpolir les motifs nanométriques. La section C.3.2 en annexe montre en effet que des échantillons n'ayant pas atteint t_0 au niveau du polissage CMP sont complètement surpolis (dispositifs disparus) après un

polissage supplémentaire de 10 s, ce qui est à la limite de la méthode⁶. L'utilisation du W et du TiN n'est donc pas possible comme *blanket* complet.

La barrière anti-diffusion (BAD) est une technique largement utilisée dans l'industrie afin de limiter la diffusion du cuivre, en particulier, puisqu'il cause des pièges profonds dans le silicium et occasionne donc facilement des dysfonctionnements [Wang *et al.*, 1990]. Ici, on veut cependant protéger les dispositifs contre la diffusion de l'oxygène du diélectrique de la jonction vers les électrodes. Plutôt que de changer le matériau du *blanket*, ce qui occasionne les problématiques mentionnées précédemment, on ajoute une fine couche d'un matériau à faible diffusion d'oxygène avant le dépôt du *blanket*. Dans le cas du procédé nanodamascène, l'utilisation d'une couche mince des matériaux du tableau 6.1 peut minimiser l'impact sur le polissage, puisque cette couche mince ne compose qu'une petite partie de l'échantillon à polir. Le Cr et le W sont de bons candidats pour créer l'interface entre la jonction tunnel et le métal. Cependant, tel que démontré aux sections C.3.4 et C.3.5, le Cr et le W ne donnent pas des résultats intéressants. Dans le premier cas, la pulvérisation du Cr *in situ* dans l'Intlvac ne fonctionne pas bien parce que la résine est encore sur l'échantillon et prévient le recouvrement complet des jonctions tunnel (section C.3.4). Dans le deuxième, le W agit comme une couche d'arrêt pour le polissage (se polit trop lentement par rapport aux autres matériaux), même à 5 nm d'épaisseur, ce qui détériore grandement l'uniformité de l'étape de CMP.

6.2.1 BAD de nitrure de titane pulvérisé

Le TiN, quant à lui, a aussi été testé et présente de meilleures caractéristiques. En effet, utilisé en couche mince (5 nm) avant le dépôt *blanket*, il peut être polit adéquatement puisque même si sa vitesse de polissage est très rapide (tableau 6.1), le Ti et le SiO₂ environnants le protègent en se polissant plus lentement. La jonction est donc protégée du Ti des électrodes par ce TiN et du côté de l'îlot, comme l'oxydation a déjà été faite, le gradient d'oxygène de la jonction devrait limiter la diffusion de l'oxygène.

La figure 6.6 présente des caractéristiques électriques de MIM ayant des comportements typiques de ce qui est attendu par la simulation. En effet, la figure 6.6a montre les courbes de trois MIM oxydées pendant 5, 10 et 15 min. Ces trois MIM nominalement identiques et fabriquées sur trois échantillons différents montrent un comportement cohérent avec le paramètre varié. On voit que plus le temps d'oxydation est grand, plus le courant de la MIM diminue. Ceci est validé par le modèle indiqué par les courbes noires plus minces sur le

⁶ Des temps de CMP plus courts ne permettent pas une activation de la phase chimique du polissage et donc le polissage est très lent au début.

graphique. L’ajustement des paramètres du modèle pour correspondre aux trois différentes courbes prend en compte les largeurs réelles des MIM, les profondeurs calculées à partir des mesures de nanofils et tous les autres paramètres constants d’une MIM à l’autre. Cette dernière hypothèse est utilisée parce que les trois échantillons ont été fabriqués directement en parallèle, à l’exception de l’étape d’oxydation. Les paramètres du modèle ajustés sont donnés dans le tableau 6.3 pour les trois échantillons. Les deux paramètres devant varier avec le temps d’oxydation sont la hauteur de barrière ϕ_0 et l’épaisseur d’oxyde t_{ox} et ce sont les deux qui sont variés dans les simulations, les autres étant dépendants de la géométrie seulement. En augmentant le temps d’oxydation, l’épaisseur d’oxyde augmente ce qui réduit la densité de courant dans la jonction. Une augmentation du temps d’oxydation fait aussi augmenter la hauteur de barrière. Ceci s’explique par le fait qu’en oxydant plus longtemps, on obtient un oxyde plus dense et plus près de la stœchiométrie idéale TiO_2 , tel que démontré à la section 5.2.3. La masse effective obtenue de ces courbes est plus faible que la valeur obtenue par [Dubuc *et al.*, 2009], mais l’oxyde est obtenu avec un procédé d’oxydation différent, ce qui peut expliquer cette différence. Il est aussi nécessaire de réduire légèrement cette masse effective pour l’échantillon oxydé pendant 15 min, ce qui est explicable par le fait que la densification de l’oxyde change sa structure et les électrons voient plus de centres de diffusion et peuvent donc être ralentis.

Tableau 6.3 Paramètres du modèle ajusté pour les 3 MIM de la figure 6.6a.

†[Dubuc *et al.*, 2009].

Param.	5 min	10 min	15 min	Ref.†
D (nm)	8,4	7,2	6,5	- -
t_{ox} (nm)	3,4	3,6	3,8	- -
ϵ_r	3,5	3,5	3,5	3,5
ϕ_0 (eV)	0,40	0,42	0,43	0,35
C_j (aF)	7,8	6,6	5,1	- -
m^*/m_0	0,20	0,20	0,15	0,40

La figure 6.6b donne des courbes pour deux autres MIM sur un échantillon différent. Ces MIM ont été mesurées après chaque étape de CMP, c’est à dire à t_0 , le moment où les tranchées et dispositifs sont tout juste découverts, et après 10 s et 25 s de polissage supplémentaire. Les deux MIM montrent une légère réduction de courant après 10 s et une beaucoup plus grande après 25 s supplémentaires. Le polissage réduit évidemment la profondeur des tranchées (D) à chaque étape, ce qui a été mesuré de deux façons. La première a été de mesurer la résistance du nanofil adjacent pour en extraire l’épaisseur, ce qui est montré par les points pleins (\blacktriangle) en (c). On voit que le facteur 2,5 de temps de polissage ne correspond pas au facteur 3 de réduction de la profondeur du nanofil. Cette différence provient du fait que le polissage nécessite un temps d’activation qui peut être de

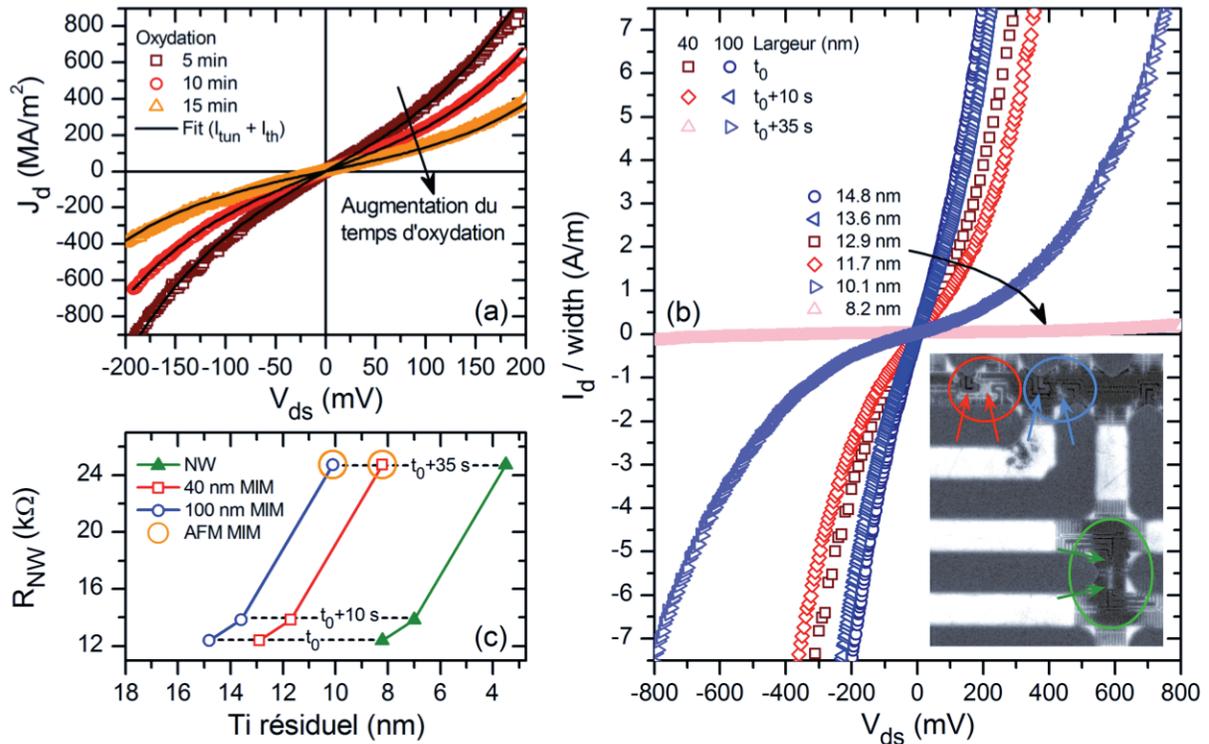


Figure 6.6 (a) Caractéristiques J_D - V_{DS} de trois MIM oxydées 5, 10 et 15 min dans l'Intlvac, avec barrière TiN, et faisant environ 100 nm de largeur. (b) Caractéristique I_d - V_{ds} de deux MIM oxydées 15 min à trois temps de polissage : t_0 , t_0+10 s et t_0+35 s. (c) Estimation des épaisseurs de dispositifs à chaque étape de CMP par résistance de nanofils ou mesures AFM.

quelques secondes et donc le temps effectif de polissage en est réduit. Avec pour hypothèse que le temps d'activation est le même indépendamment du temps total de polissage, on peut calculer qu'il est d'environ 2,5 s. Ensuite, puisque les MIM et le nanofil ne sont pas directement à côté l'un de l'autre, une différence d'épaisseur peut être causée par une non-uniformité de la CMP. Des topographies AFM des dispositifs ont été comparées après CMP et après avoir enlevé sélectivement le métal par une gravure humide au H_2O_2 . Pour les deux MIM de la figure 6.6c, l'épaisseur obtenue est donnée par les points ouverts et encadrés en orange. L'écart observé entre le nanofil et les MIM peut être expliqué par leur position et par le procédé subit par chacun des dispositifs dans la cellule universelle, illustrée ici par l'image en encart du graphique. Les deux MIM et le nanofil sont encadrés en haut et en bas à droite respectivement et l'image est prise avant l'atteinte de t_0 . On voit que le nanofil a pratiquement atteint t_0 comme le montre le SiO_2 visible en blanc. En contrepartie, les deux MIM commencent à être révélées, la MIM de 100 nm (bleue) étant moins avancée que l'autre puisqu'elle est plus près du centre de la zone d'EBL, comme discuté au chapitre 4, section 4.5. De plus, les MIM ont un dépôt de Ti réalisé à l'étape de

l'EBL2, ce qui ajoute du matériau à polir dans leur environnement par rapport au nanofil qui ne subit pas l'EBL2. Les résultats associés à la figure 6.6 et au tableau 6.3 ont été présentés au congrès IEEE-NANO à Toronto en 2014 et ensuite publié dans les actes de conférence [Droulers *et al.*, 2014].

Ces résultats montrent que les dispositifs MIM fabriqués se comportent comme prédit par la simulation. Cependant, le courant de ces MIM se détériore toujours. En effet, on peut remarquer que la diminution du courant dans les deux MIM n'est pas proportionnelle à la diminution de la profondeur des tranchées. En particulier, la MIM de 100 nm montre une diminution importante entre les deux dernières étapes de CMP qui ne peut s'expliquer uniquement par une diminution de la profondeur. Les mesures expérimentales de la figure 6.7, prises en fonction du temps passé après l'atteinte de t_0 , montrent une réduction de courant dépassant un ordre de grandeur sur une période de 100 jours.

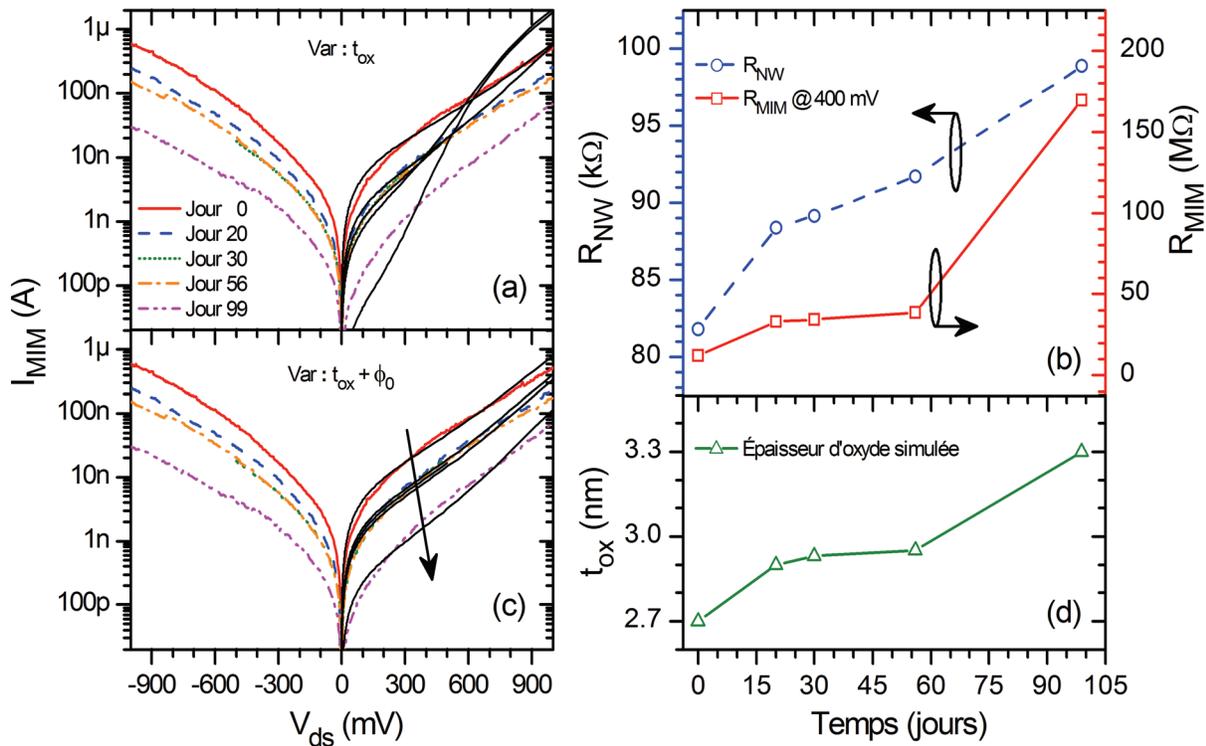


Figure 6.7 (a) et (c) Caractéristiques I_D - V_{DS} d'une MIM avec barrière anti-diffusion de TiN en fonction du temps après l'étape de CMP. Les courbes pleines en noir sont la simulation pour une variation de (a) t_{ox} et ϕ_0 en même temps et (c) t_{ox} seulement. (b) Comparaison de la résistance d'un nanofil et d'une MIM. (d) Variation de l'épaisseur d'oxyde simulée en (c) en fonction du temps.

Le modèle MIM du chapitre 3 est utilisé ici pour tester l'hypothèse de la diffusion de l'oxygène de la jonction tunnel vers les électrodes (hypothèse 1). On assume ici que puisque

l'oxyde est cru par oxydation plasma, un gradient de concentration d'oxygène est présent du côté îlot de la jonction tunnel et limite la diffusion de l'oxygène de ce côté. À l'opposé, l'électrode de Ti (source/drain) est quant à elle déposée directement sur la surface de l'oxyde. Ce côté de la jonction est donc plus propice à l'interdiffusion de l'oxygène. Pour que l'hypothèse 1 soit valide, il faut d'abord que l'épaisseur de l'oxyde augmente avec le temps. Cela doit aussi réduire la quantité d'oxygène dans la jonction ce qui devrait la rendre plus métallique et peut être représenté par une réduction de la hauteur de barrière. Puisque les deux effets sont opposés en terme de variation du courant tunnel, pour expliquer la variation observée, l'augmentation de l'épaisseur t_{ox} doit dominer la réduction de la hauteur de barrière ϕ_0 . Dans la figure 6.7a, une simulation prenant ces variations en compte est montrée par les courbes pleines en noir (paramètres utilisés donnés dans le tableau A.3 en annexe). On voit bien que cela correspond mal à l'expérience et plusieurs autres essais avec diverses combinaisons de paramètres ont aussi échoué à reproduire cet effet. L'explication de cette dégradation doit donc être revue. La seconde hypothèse (hypothèse 2) pouvant expliquer une réduction de la conduction des jonctions tunnel dans le temps est l'exposition à l'air ambiant. L'oxygène pourrait contribuer à oxyder les électrodes et réduire la section effective des jonctions. Cependant, une comparaison de la variation de résistance des MIM et des nanofils, donnée à la figure 6.7b montre que la variation de résistance du nanofil n'est pas suffisante pour expliquer toute la variation de la MIM. En 100 jours, la résistance du nanofil augmente de 16 k Ω alors que la MIM augmente de 157 M Ω . L'hypothèse restante (hypothèse 3) permettant d'expliquer la réduction de la conductivité est la diffusion de l'oxygène de l'air à travers l'interface de la jonction et vers le métal des électrodes, augmentant l'épaisseur de la jonction, mais ne modifiant pas la hauteur de barrière. La simulation de la MIM de ce cas est donnée à la figure 6.7c et correspond bien avec les données expérimentales. Les valeurs extraites du modèle sont présentées à la figure 6.7d. Tous les autres paramètres de la jonction sont gardés constants dans ce cas et sont donnés en annexe dans le tableau A.4. Les schémas de la figure 6.8a-b donnent une représentation schématique de l'hypothèse 3. Le schéma en (a) donne le cas original (Ti/TiO₂/Ti) où l'oxygène diffuse à partir de l'air et de la jonction vers les électrodes de Ti. En (b), la barrière anti-diffusion de TiN est ajoutée, ce qui prévient la diffusion vers l'électrode de Ti (foncée), mais n'élimine pas la diffusion vers l'îlot (pâle). Dans les deux cas, on voit que l'oxygène de l'air accède toujours au métal.

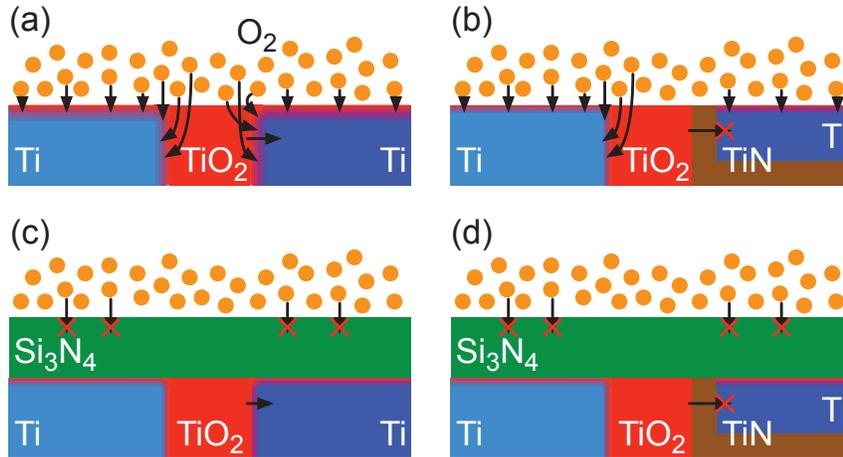


Figure 6.8 Vue en coupe schématisée de (a) la MIM originale, (b) la MIM avec barrière-anti-diffusion TiN, (c-d) les versions passivées avec du Si_3N_4 de ces deux cas.

6.3 Passivation par Si_3N_4 PECVD

La solution envisagée pour pallier à cette diffusion de l'oxygène est la passivation de la surface. Le matériau choisi est le Si_3N_4 puisqu'il est largement utilisé pour la passivation de dispositifs entre autres parce que c'est un bon isolant électrique, une bonne barrière contre l'humidité et un matériau très dur [Jaouad *et al.*, 2004; Schmidt et Kerr, 2001]. Il s'avère aussi que cet isolant peut être gravé par plasma de la même façon que le SiO_2 et donc la reprise de contact peut être faite aisément. Les schémas (c) et (d) de la figure 6.8 montre l'effet de la couche de passivation sur le cas original et sur le cas avec barrière anti-diffusion de TiN. La couche de Si_3N_4 arrête la diffusion de l'oxygène de l'air vers les électrodes. Ce faisant, la réduction de la conductivité due à l'oxydation en surface des électrodes et îlots de Ti est aussi arrêtée. Ces deux derniers cas, mesurés expérimentalement (figure 6.9), montrent une bonne stabilité sur de grandes périodes de temps. On voit en (a) que pour les 3 MIM, le niveau de courant ne varie pratiquement pas sur une période de 115 jours tandis qu'en (b), les 2 MIM sont stables sur une période de 120 jours. Le coefficient de variation de chacune des mesures par rapport à la moyenne des mesures sur toute la période est donné par $C_v = \sigma_v / \rho_v$ avec σ_v l'écart entre une des mesures et la moyenne des mesures (ρ_v) de la MIM sur toute la période. Le coefficient est calculé pour chaque point en V_{DS} puis moyenné sur toute la courbe. Dans le cas de l'empilement original (Ti/TiO₂/Ti) passivé (figure 6.8c et figure 6.9a), le coefficient moyen des 4 courbes est d'environ 11,4 % et dans le cas incluant la barrière anti-diffusion de TiN, cette variation est de 10,5 % en excluant la partie centrale du dispositif B (−0,3 V à 0,3 V) où le niveau de courant est de l'ordre de la résolution de l'appareil de mesure (~ 50 fA). Ces coefficients sont à comparer

avec la réduction de courant de la MIM non passivée (figure 6.7c) de 1480 % en moyenne. Ceci confirme donc que la passivation élimine complètement la variation due au contact avec l'air ambiant. Ces résultats montrent aussi que bien que la diffusion de l'oxygène de la jonction puisse se produire dans tous les cas, il est négligeable par rapport à l'oxygène de l'air. En effet, les deux séries de MIM passivées mesurées avec et sans TiN montrent très peu de différence au niveau de leur variation de courant sur une échelle de temps de plusieurs mois. Ceci indique aussi que la couche de TiN a un impact très faible dans ces circonstances.

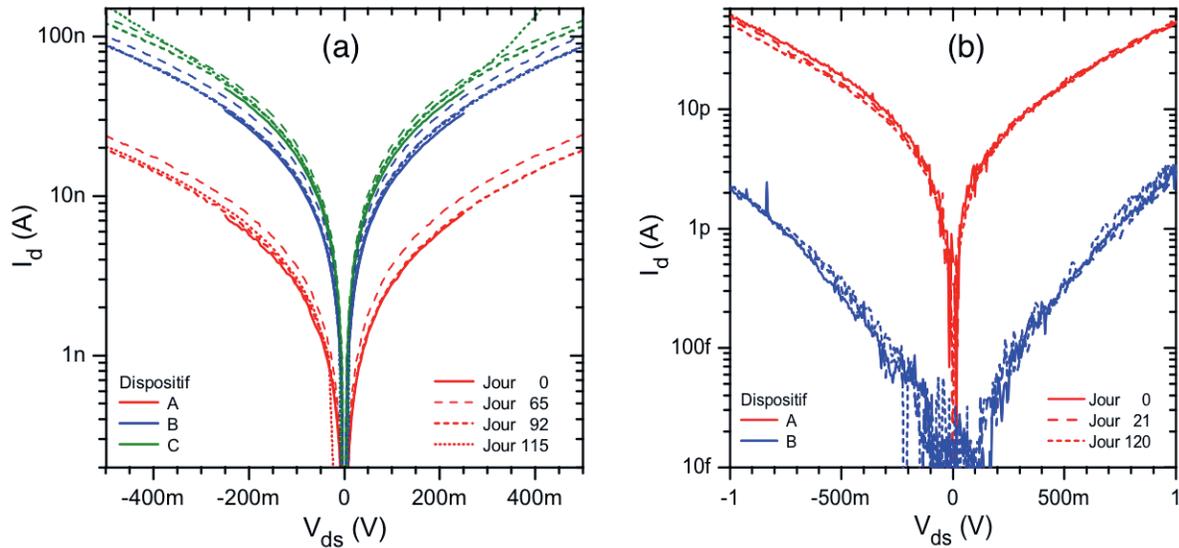


Figure 6.9 Courbes I_d - V_{ds} pour plusieurs MIM (a) Ti/TiO₂/Ti et (b) Ti/TiO₂/TiN/Ti en fonction du temps. Les deux séries de MIM sont passivées.

Une comparaison de l'effet de la passivation par barrière anti-diffusion de TiN avec passivation Si₃N₄ a aussi été réalisée sur des échantillons ayant un oxyde tunnel déposé par ALD. Cinq MIM ont été fabriquées avec un îlot de Ti, une jonction d'Al₂O₃ (1,5 nm) déposé par ALD suivi dans la même machine (*in situ*) de 30 nm de TiN. Ceci permet de sceller la couche d'oxyde directement dans la machine d'ALD. Les MIM ont ensuite été passivées après le polissage puis mesurées 4 fois sur une période de 48 jours. Les MIM A et B (figure 6.10) qui ont toutes deux branches ont une résistance deux fois moins grande que les MIM C à E qui n'en ont qu'une. Chaque branche correspond à une jonction tunnel de la largeur d'une tranchée (voir motifs multibranches, figure 4.4). Aussi, le courant ne varie pratiquement pas entre les différentes reprises de mesures jusqu'à 48 jours après le polissage (courbes toutes superposées). Pour ces cinq MIM, le coefficient de variation C_v est en moyenne 1,8 %, ce qui indique une stabilité accrue des jonctions tunnel fabriquées de cette façon.

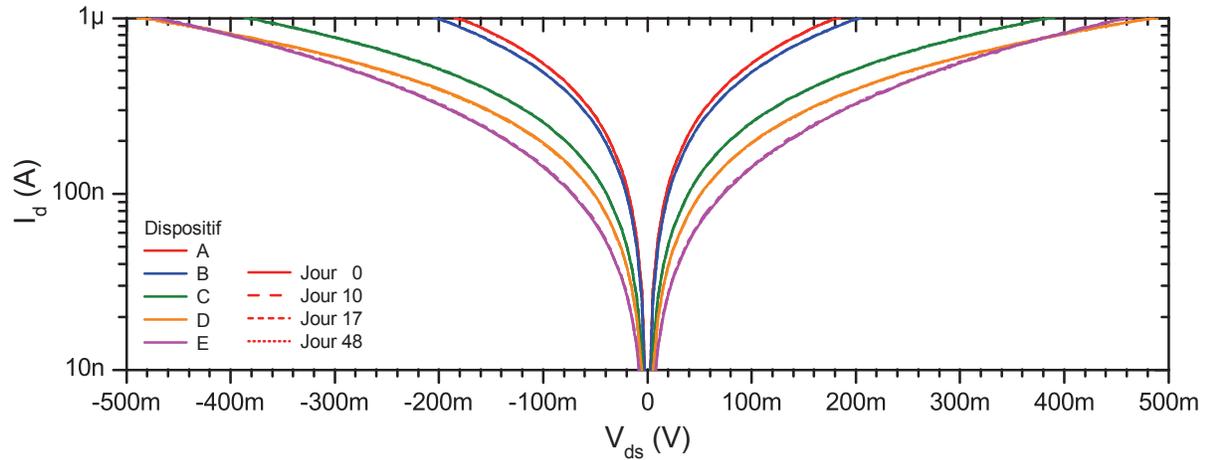


Figure 6.10 Courbes I_d - V_{ds} de plusieurs MIM avec l'empilement de matériaux Ti/ Al_2O_3 /TiN/Ti mesurées sur une période de 48 jours. Les MIM A et B ont deux branches tandis que les MIM C à E n'en ont qu'une. Les courbes de chaque MIM sont superposées car la variation entre elles est trop faible pour être discernable sur ce graphique.

6.4 Conclusion

Cette partie des travaux a été consacrée à l'étude de la stabilité des jonctions dans le temps. La détérioration de la conductivité des jonctions par l'augmentation de leur résistance tunnel a été observée. Divers matériaux ont été étudiés afin de réduire la diffusion de l'oxygène vers l'îlot et les électrodes, identifiée comme l'une des causes possibles de l'augmentation de résistance. Le Cr comme matériau d'îlot n'a pas permis de régler le problème à cause de difficultés lors du polissage CMP. Le TiN a les caractéristiques voulues, mais son taux de polissage est trop grand pour permettre un contrôle adéquat de l'épaisseur des dispositifs. Le TiN a aussi été testé comme barrière anti-diffusion mince, ce qui a permis de l'intégrer au procédé. La migration de l'oxygène de la jonction vers l'îlot et les électrodes n'était cependant pas la principale cause de la détérioration puisqu'elle était toujours observée avec la barrière anti-diffusion de TiN. La solution a donc été de passiver les dispositifs à l'aide d'une couche de Si_3N_4 afin de bloquer l'entrée de l'oxygène de l'air dans l'échantillon, ce qui pouvait oxyder l'îlot et les électrodes et causer la réduction de conductivité observée. L'utilisation de diélectriques et barrières anti-diffusion déposés par ALD a permis de réduire davantage les variations de mesures.

À la lumière de ces divers tests, tous les échantillons ayant été passivés ont montré une grande stabilité au cours du temps et des mesures. Le TiO_2 ayant une hauteur de barrière plus faible et une permittivité diélectrique plus faible que l' Al_2O_3 et l'oxydation plasma étant plus accessible dans le contexte du laboratoire (ALD en France), la jonc-

tion Ti/TiO₂/TiN/Ti a été sélectionnée pour la fabrication de SET et QCA. La barrière anti-diffusion de TiN, ne détériorant pas les caractéristiques électriques ou la stabilité du dispositif, est conservée dans le procédé final.

CHAPITRE 7

SET ET DÉTECTION DE CHARGE

Les divers développements et améliorations discutées dans les chapitres 4 (fabrication), 5 (oxydation du Ti) et 6 (vieillessement de MIM) ont permis la fabrication de divers dispositifs SET. La démonstration du fonctionnement d'un ou plusieurs SET fabriqués avec le procédé nanodamascène est le point central de recherche puisque celui-ci sert de détecteur à la demi-cellule QCA. L'objectif des travaux de cette thèse étant de s'approcher de la démonstration d'une demi-cellule QCA fabriquée à l'aide du procédé nanodamascène, le SET doit non seulement fonctionner adéquatement, mais il doit aussi permettre la détection de changements en nombre de charges dans des îlots voisins comme ceux de la demi-cellule QCA.

Dans ce chapitre, les divers SET fonctionnels réalisés sont décrits en comparant plusieurs paramètres influençant leur fonctionnement. En particulier, les capacités en jeu et les énergies résultantes sont décrites. L'effet de la direction de balayage lors de la prise de données et l'effet de la température sont aussi discutés. Deux SET fonctionnels côte à côte ont permis d'étudier et valider en détail la détection de charges en utilisant l'un des SET comme boîte à un électron et le deuxième comme détecteur de charge.

7.1 Échantillons SET fabriqués

Pour tous les SET présentés dans ce chapitre, l'îlot de Ti a été déposé dans la machine Intlvac et les jonctions tunnel sont créées par l'oxydation *in situ* de cet îlot dans le même système. Le *blanket* utilisé est réalisé en deux parties, la première consistant en une couche de 5 nm de TiN comme barrière anti-diffusion pour l'oxygène des jonctions et la deuxième en un dépôt de 150 nm de Ti. Ces deux matériaux sont déposés par pulvérisation. Après le polissage, dans tous les cas, des images AFM des dispositifs sont prises puis les échantillons sont directement passivés. Ces trois étapes (CMP, AFM et passivation) sont réalisées la même journée pour limiter au maximum l'exposition des jonctions tunnel à l'air ambiant.

La caractérisation de tous ces dispositifs a été réalisée dans les deux cryostats du laboratoire de Michel Pioro-Ladrière au département de physique de l'Université de Sherbrooke. Le premier cryostat est refroidi à l'hélium liquide et permet de pomper sur cet hélium. La température minimale atteinte par le système est d'environ 1,3 K. Le système permet

de brancher un porte-échantillon à 48 contacts comme celui présenté dans la section C.2. Ceci permet de connecter plus d'une quinzaine de dispositifs sur chacun des échantillons et de contrôler électriquement chacun des contacts. Le deuxième système cryogénique est un cryostat à dilution de la compagnie BlueFors. La température de base du système est de 10 mK, mais dans les conditions de mesures utilisées, la température atteinte était plutôt aux environs de 50 mK. Le refroidissement est fait à l'aide d'un mélange d' ^3He et d' ^4He mis sous vide en circuit fermé. À très basse température, le mélange subit une séparation de phase (phase riche et une phase pauvre en ^3He) et lorsque l'on pompe sur le liquide séparé, l' ^3He passe de la phase riche à la phase pauvre, ce qui requiert de l'énergie et permet le refroidissement de la chambre. Ce système permet aussi le branchement du même type de porte-échantillon à 48 contacts. Tous les SET ont été caractérisés dans le premier système alors que seul l'échantillon K215T avec le double SET pour la détection de charge a été caractérisé dans le deuxième.

7.1.1 Extraction des paramètres de SET

Les dimensions de six des SET mesurés dans ces travaux ont été extraites de mesures AFM après l'étape de CMP sur le dispositif lui-même ou sur un autre identique et fabriqué en même temps¹. Le tableau 7.1 donne les dimensions ainsi obtenues.

La section géométrie du tableau donne les paramètres liés à la fabrication des dispositifs. Le temps d'oxydation est le seul paramètre varié nominalement entre les échantillons et l'épaisseur d'oxyde t_{ox} crue est calculée à partir de la figure 5.11. Les dimensions données sont dépendantes du dessin de chacun des SET et sont données dans le schéma de la figure 7.1a. La profondeur des tranchées résiduelles t_{CMP} est extraite de la mesure de nanofils présents dans chacune des cellules. La profondeur est obtenue en utilisant le modèle développé par [Guilmain *et al.*, 2013]. Avec cette géométrie, la méthode de simulation développée au chapitre 3 est utilisée pour reproduire les diamants de Coulomb de chacun des SET. La valeur de ε_r^{J} est ajustée pour obtenir la même hauteur de diamant que l'expérience (voir section 7.1.2) tandis que la valeur nominale de 3,9 est prise pour l'oxyde de grille (SiO_2) ε_r^{G} . Le SiO_2 thermique étant très reproductible, la constante diélectrique du substrat est fixée à la valeur théorique. Dans le cas de ε_r^{J} , [Dubuc *et al.*, 2008] avait trouvé une valeur de 3,5 pour un oxyde de titane cru par plasma. Cependant, puisque la machine utilisée ici pour faire la croissance de l'oxyde n'est pas la même, aucune hypothèse ne peut être faite sur la valeur de la constante diélectrique du TiO_2 des dispositifs fabriqués

¹ Certains des dispositifs n'ont pu être mesurés entre les étapes de CMP et de passivation au Si_3N_4 par manque de temps. Lorsque les dimensions latérales d'un dispositif fonctionnel n'ont pu être mesurées, on utilisera celles d'un dispositif similaire fabriqué la même journée.

Tableau 7.1 Paramètres expérimentaux et simulés des SET fonctionnels. ID est l'identifiant utilisé tout au long du chapitre pour référer au différents SET. SETdg = SET double grille. dSET = double SET (détection de charge). qSET = SET détecteur du QCA. La grille utilisée est entre parenthèses lorsqu'il y en a plusieurs. SSE est le numéro unique de référence de l'échantillon. L = gauche et R = droite. T_{Max} est calculé avec un facteur $10k_{\text{B}}T$

	ID		SET-1	SET-2	SET-3	SET-4	SET-5	SET-6
	SSE		K215T	K215T	K215T	K215V	K215X	J117Y
	Cellule		C4	D4	D4	D4	C4	D4
	Dispositif		SETdg(g1)	dSET-L	dSET-R	dSET-L(gR)	SETdg(g1)	qSET-R
Géométrie	Oxy.	min.	1	1	1	2	5	5
	t_{ox}	nm	2,5	2,5	2,5	3,6	4,9	4,9
	W_{G}	nm	203	224	232	230	178	118
	W_{T}	nm	28	28	28	32	20	30
	L_{I}	nm	23	84	84	72	114	60
	d_{G}	nm	39	85	83	157	149	41
	t_{CMP}	nm	10,5	7,7	7,7	7,2	8,5	13,4
Jct. Tunnel	$\varepsilon_{\text{r}}^{\text{J}}$	–	25	20	20	35	45	40
	$C_{\text{j}}(\text{pp})$	aF	26,0	15,1	15,1	19,8	13,8	29,0
	$C_{\text{j}}(\text{sim})$	aF	29,7	20,0	20,1	22,8	20,5	34,4
	$C_1(\text{exp})$	aF	21,8	21,2	20,1	36,0	26,4	38,0
	$C_2(\text{exp})$	aF	43,9	21,1	19,4	19,0	21,8	67,0
	$R_{\text{t1}}(\text{sim})$	M Ω	2	4	6	1000	200	145
	$R_{\text{t2}}(\text{sim})$	M Ω	5	2	2	1500	100	180
Grille	$\varepsilon_{\text{r}}^{\text{G}}$	–	3,9	3,9	3,9	3,9	3,9	3,9
	$C_{\text{G}}(\text{pp})$	aF	1,89	0,70	0,73	0,36	0,35	1,33
	$C_{\text{G}}(\text{sim})$	aF	1,34	2,35	2,55	0,47	1,71	2,05
	$C_{\text{G}}(\text{exp})$	aF	0,62	2,34	2,58	0,51	0,25	1,78
Îlot	$C_{\Sigma}(\text{pp})$	aF	53,9	38,9	39,0	40,0	28,0	59,3
	$C_{\Sigma}(\text{sim})$	aF	60,7	42,4	42,8	46,1	42,7	70,9
	$C_{\Sigma}(\text{exp})$	aF	66,3	44,6	42,1	55,5	48,5	106,8
E	$E_{\text{C}}(\text{pp})$	meV	2,97	4,12	4,11	4,01	5,72	2,70
	$E_{\text{C}}(\text{sim})$	meV	2,64	3,78	3,74	3,48	3,75	2,26
	$E_{\text{C}}(\text{exp-c})$	meV	2,42	3,59	3,81	2,89	3,30	1,50
	$E_{\text{C}}(\text{exp-d})$	meV	2,50	2,90	3,00	3,04	3,04	1,50
T	T_{m}	K	1,55	0,05	0,05	1,55	1,55	1,55
	T_{Max}	K	2,47	4,71	3,48	2,67	3,66	1,71

ici. Dans la littérature, on trouve des valeurs allant de 3,5 à 74 [Wypych *et al.*, 2014] pour des oxydes amorphes et cristallins respectivement. On peut donc s'attendre

Au niveau des capacités, les valeurs simulées sont directement obtenues de Comsol alors que les valeurs expérimentales sont extraites des diamants de Coulomb. La figure 7.1b schématise un diagramme de stabilité de SET (diamant de Coulomb) et donne les diverses équations permettant l'extraction des paramètres du SET. Les capacités de jonction tunnel sont extraites à partir des deux pentes des diamants, alors que la capacité de grille provient

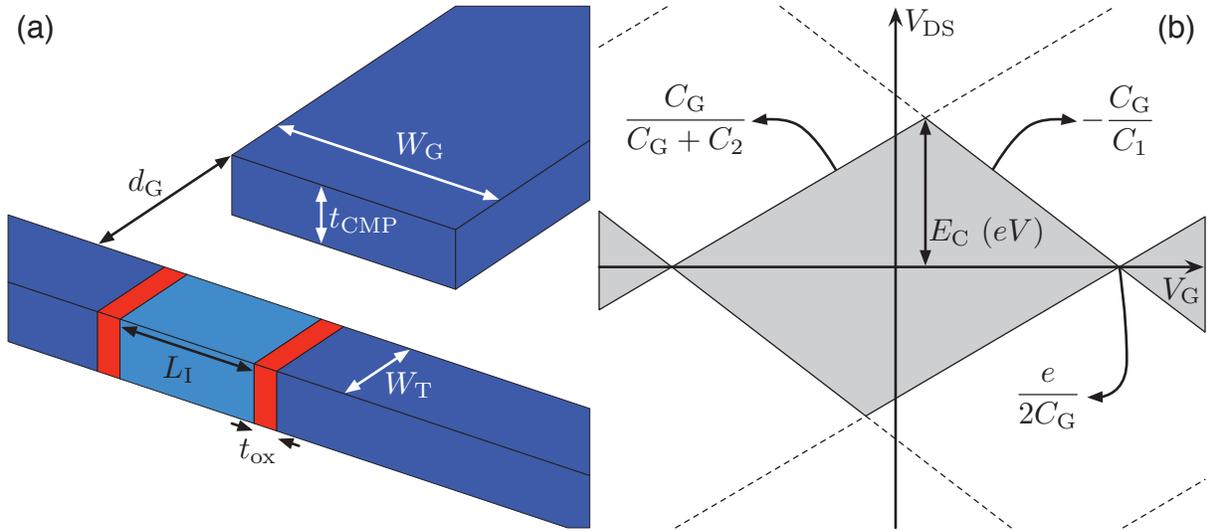


Figure 7.1 (a) Illustration schématique des dimensions d'un SET typique. (b) Diagramme de stabilité d'un SET (diamant de Coulomb) indiquant les relations permettant l'extraction des capacités et énergies de charge du dispositif.

de la largeur totale du diamant. L'énergie de charge expérimentale ($E_C(\text{exp-c})$) est calculée à l'aide de $E_C = e^2/C_\Sigma$ sachant que $C_\Sigma = C_1 + C_2 + C_G$. Cette énergie peut être validée en comparant avec l'énergie de charge extraite de la demi-hauteur du diamant de Coulomb. Cependant, la hauteur du diamant peut être difficile à déterminer dans certaines conditions et doit être prise comme un indicatif lors des comparaisons. Les capacités parasites sont incluses dans les capacités des jonctions et dans l'énergie de charge extraites des diamants. Comme le montre la simulation (tableau 3.2), ces capacités peuvent jouer un rôle important dans le comportement du SET. Les comparaisons doivent donc être faites avec précautions. Les capacités de grille et de jonction tunnel calculées avec le modèle plaque parallèle sont aussi indiquées dans le tableau avec la mention (pp). On voit d'ailleurs que les capacités calculées avec ce modèle sont toujours inférieures à celles obtenues avec Comsol qui est plus proche des valeurs mesurées en général. Le levier de la grille sur l'îlot $\alpha_{I/G}$ est calculé avec $\alpha_{I/G} = C_G/C_\Sigma$ et correspond à la variation du potentiel de l'îlot pour 1 V de tension appliquée à la grille du SET.

Les énergies de charge E_C (pp), E_C (sim) et E_C (exp-c) sont calculées à l'aide de $E_C = e^2/C_\Sigma$ ($C_\Sigma = C_1 + C_2 + C_G$) tandis que l'énergie de charge E_C (exp-d) est plutôt estimée directement par la hauteur d'un diamant du SET. Ceci permet de comparer les deux valeurs expérimentales pour valider qu'elles correspondent bien. On s'assure ainsi que le diamant mesuré est bien le diamant réel et n'est pas causé par des artefacts de mesure ou du dispositif.

Finale­ment, la température à laquelle les mesures ont été prises T_m ainsi que la température maximale d'opération basée sur le critère $E_C \geq 10k_B T$ sont données. Les SET-2 et SET-3 ont été mesurés dans les deux cryostats du laboratoire à plusieurs températures. La température indiquée dans le tableau 7.1 (50 mK) correspond aux mesures utilisées pour extraire les paramètres du tableau. Puisque les SET fabriqués ont tous des géométries similaires, l'obtention de températures d'opération maximale similaire pour les six SET fonctionnels indique un bon contrôle du procédé et corrobore leur fonctionnement à 1,5 K et 50 mK.

7.1.2 Effet du temps d'oxydation

La permittivité diélectrique des jonctions tunnel ne correspond pas à celle attendue de 3,5 [Dubuc *et al.*, 2007]. Cette valeur nominale dépend de la méthode d'oxydation du Ti [Chiu *et al.*, 2005; Matsumoto *et al.*, 1995] et donc l'utilisation de l'oxydation *in situ* plutôt que le générateur plasma externe pour la croissance de l'oxyde de jonction peut en affecter la constante diélectrique. Il est aussi impossible de mesurer directement cette valeur parce que l'oxyde est très mince et se retrouve dans la tranchée du SET. Parmi les paramètres expérimentaux, la constante diélectrique (ϵ_r^J) des jonctions tunnel est le paramètre le moins bien connu. En effet, les dimensions des dispositifs peuvent être bien estimées à partir des images AFM et les propriétés du SiO₂ du substrat sont bien contrôlées. ϵ_r^J est donc ajusté dans les simulations pour obtenir des diamants correspondants à l'expérience. Ceci revient à ajuster ϵ_r^J pour que l'énergie de charge simulée corresponde à l'expérience.

Les diamants de Coulomb de trois des SET (SET-1, SET-4 et SET-5) sont donnés à la figure 7.2. Les diagrammes de gauche sont les données expérimentales tandis que ceux de droite sont les diagrammes simulés à l'aide des paramètres du tableau 7.1. On peut voir que pour le SET-4 à la figure 7.2c, des oscillations sont présentes, mais sans avoir de diamants complets. Aussi, l'extraction des capacités à partir de ces oscillations n'est pas précise. Cependant, en estimant l'énergie de charge totale par la hauteur des diamants, ici entre 2 meV et 4 meV, on peut reproduire les diamants qui ne sont simplement pas mesurables puisque la résistance du dispositif est trop élevée pour en mesurer le courant. Les couplages de grille, quant à eux, ne correspondent pas toujours à la simulation, malgré un ordre de grandeur adéquat. En effet, en comparant les figures 7.2a et 7.2b, on voit que l'espacement entre les pics obtenus avec la simulation de la géométrie fabriquée est environ deux fois plus petit que celui de la mesure expérimentale du SET-1. Dans le cas des figures 7.2e et 7.2f, la simulation est plus petite d'un facteur ~ 7 .

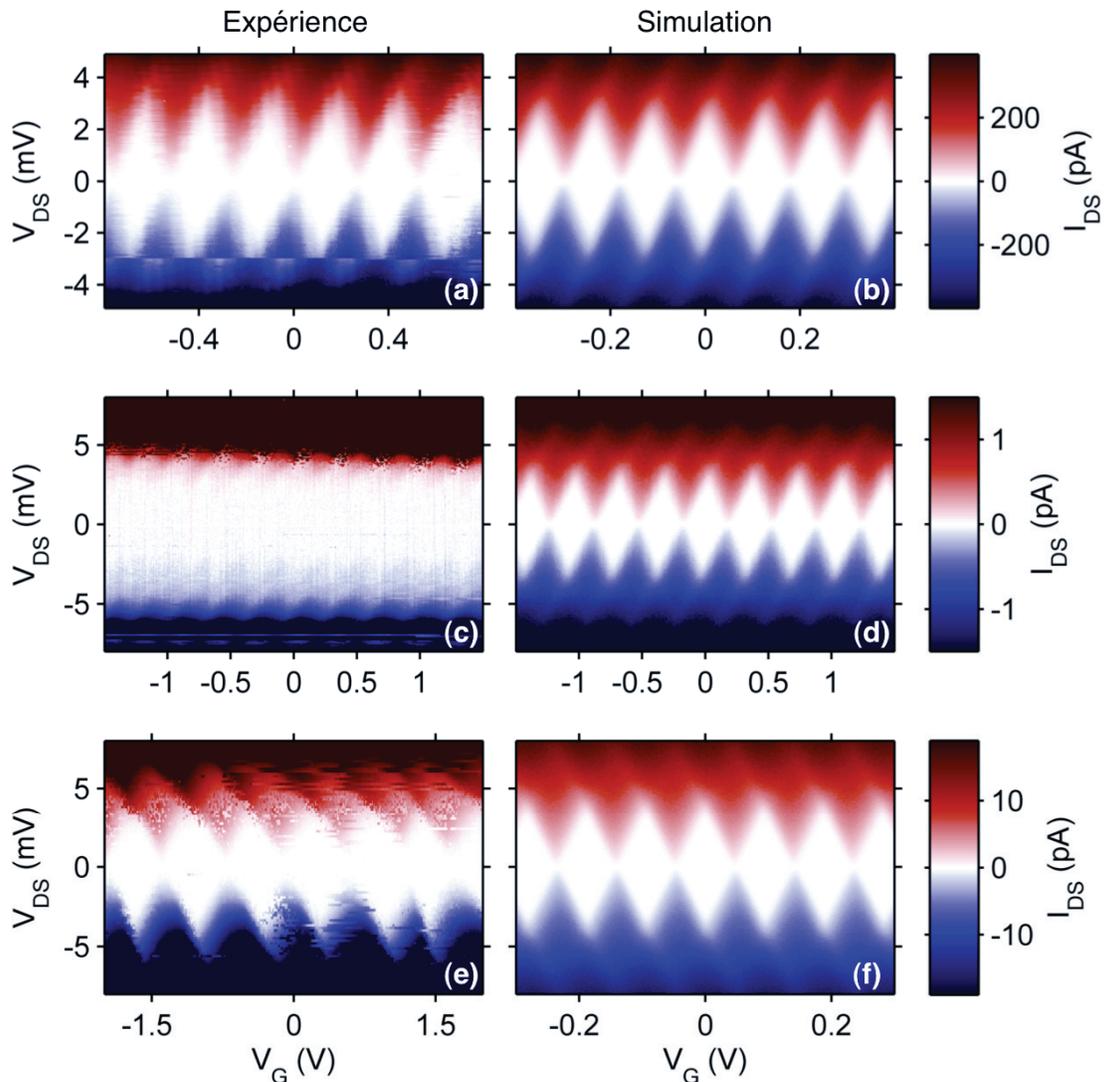


Figure 7.2 Comparaison de diamants de Coulomb pour différents temps d'oxydation : (a-b) 1 min, (c-d) 2 min et (e-f) 5 min. Les diagrammes de gauche (a), (c) et (e) sont mesurés à $T = 1,5$ K sur les SET-1, SET-4 et SET-5 respectivement. Les diagrammes de droite (b), (d) et (f) sont le résultat de la simulation utilisant les paramètres du tableau 7.1.

Afin de réduire le temps entre les étapes de CMP et de passivation des échantillons, seulement quelques images AFM des échantillons ont été prises. Il n'est donc pas possible de déterminer avec certitude le problème causant ces écarts importants dans les capacités de grille. Ce peut être des problèmes similaires à ceux observés par [Guilmain, 2013; Harvey-Collard, 2013; Richard, 2013]. L'une de ces hypothèses est un problème lors du polissage. Il est possible que la grille de ces dispositifs soit surpolie ou même coupée, de sorte que sa géométrie réelle n'est pas la même que celle simulée. La figure 7.3a montre le SET-5 après le soulèvement de l'îlot. Ce SET a une géométrie particulière de tranchée

source-drain où le drain est beaucoup plus large que la source. L'erreur d'alignement lors de l'EBL1 et de l'EBL2 n'a pas permis de créer le dispositif voulu, mais le SET fonctionne tout de même. La flèche dans l'image indique l'endroit où le motif de l'îlot se superpose avec celui de la grille. Si cette partie de Ti a été arrachée ou largement surpolie au CMP, le grand trou laissé dans la grille diminuerait de façon importante le couplage de celle-ci à l'îlot. Ceci pourrait expliquer la différence de couplage observé avec la simulation de la géométrie de l'EBL1.

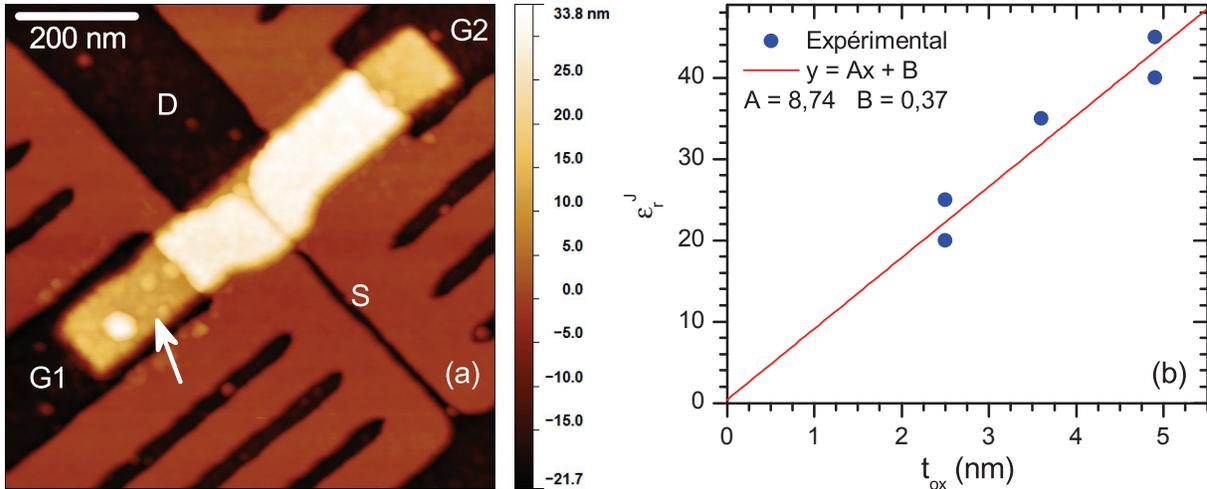


Figure 7.3 (a) AFM du SET-5 après l'étape de soulèvement de l'îlot. La flèche indique la grille utilisée pour opérer le SET. (b) Constante diélectrique simulée, ajustée aux diamants de Coulomb expérimentaux en fonction de l'épaisseur d'oxyde mesurée par ellipsométrie. La tendance montre que le ratio $\varepsilon_r^J/t_{\text{ox}}$ est constant et vaut environ 8,74.

Les valeurs de ε_r^J obtenues des comparaisons expérience-simulation sont tracées à la figure 7.3b en fonction de l'épaisseur d'oxyde pour les 6 SET analysés². La tendance linéaire observée montre que le ratio $\varepsilon_r^J/t_{\text{ox}} = 8,74 \text{ nm}^{-1}$ est constant. Cela semble indiquer une grande variation des propriétés électriques de l'oxyde en fonction du temps d'oxydation. Le modèle d'ellipsométrie utilisé pour extraire les épaisseurs de TiO_2 en fonction du temps d'oxydation (figure 5.11) considère cependant que les propriétés de cet oxyde sont les mêmes, peu importe l'épaisseur. L'approximation de Cauchy dans ce modèle est donc trop simple pour bien étudier l'épaisseur de TiO_2 obtenue simplement à partir de la mesure d'ellipsométrie. Des mesures indépendantes de l'épaisseur de l'oxyde par observation en microscopie électronique en transmission (TEM) permettraient en particulier de fixer les épaisseurs réelles de la couche d'oxyde dans la courbe d'oxydation. Cela peut ensuite servir au développement d'un meilleur modèle d'ellipsométrie afin de caractériser

² Deux des points sont identiques l'un à l'autre et sont donc superposés dans le graphique.

plus adéquatement la constante diélectrique de ce matériau. Des travaux supplémentaires sont donc nécessaires pour bien interpréter les données extraites des mesures de blocage de Coulomb présentées dans la présente section.

L'analyse faite ici prend pour hypothèse raisonnable que l'épaisseur d'oxyde varie avec le temps d'oxydation. On ajuste donc la constante diélectrique puisque c'est le paramètre le moins bien connu. L'approche aurait aussi pu être de fixer la constante diélectrique et de varier plutôt l'épaisseur d'oxyde. Puisque les résultats de la figure 7.3b montre un rapport $\varepsilon_r^J/t_{\text{ox}}$ constant, fixer ε_r^J à une valeur de 3,5 donnerait des résultats d'épaisseur d'oxyde inférieure à 1 nm. Ceci ne fait pas de sens puisqu'au moins 1,5 nm d'oxyde natif est présent à la surface du Ti, rapidement après exposition à l'air. Les mesures TEM sont donc réellement nécessaires pour déterminer la meilleure méthode d'ajustement des données et confirmer les caractéristiques du TiO_2 .

7.1.3 Effet de la température

Les énergies de charge déterminées expérimentalement sont aux environs de 2,75 meV (moyenne excluant le SET-4). La température ayant un effet direct sur la qualité observée du blocage de Coulomb, ces énergies permettent d'estimer les températures d'opération des différents dispositifs. La température d'opération maximale du SET peut être calculée par $E_C = x k_B T_{\text{Max}}$. En prenant $x = 10$, on trouve les températures indiquées dans le tableau à la ligne T_{Max} , soit environ 3,1 K avec un maximum de 4,7 K. La figure 7.4 montre un agrandissement de 3 des diamants de Coulomb pour les SET-2 et SET-3 à 1,5, 3 et 5 K. Pour les deux SET, on voit que la présence de régions de blocage (blanc) diminue rapidement avec la température. Les oscillations de Coulomb sont toujours présentes à 3 K, et tout juste visibles à 5 K ce qui indique que la limite de température est atteinte. On voit aussi avec ces diagrammes que le critère de $x = 10$ n'est pas suffisant pour obtenir des caractéristiques bien définies pour les SET. En effet, même à 3 K, sous la limite du critère, les oscillations de Coulomb sont trop faibles pour utiliser le SET dans ces conditions. Plus l'énergie de charge sera grande par rapport à l'énergie thermique, plus les oscillations de Coulomb auront de l'amplitude et meilleure sera la plage d'utilisation. Les diagrammes de la figure 7.4 montrent que le critère de sélection de l'énergie de charge devrait être d'au moins $x = 20$ correspondant à environ 1,5 K pour les SET-2 et SET-3.

Afin d'avoir une vue plus complète de la dépendance en température, des mesures Id-Vds ont été réalisées en fonction de la température. La mesure des traces est plus rapide, ce qui permet de ne pas laisser stabiliser la température à chaque point, mais plutôt de balayer la température à un rythme constant et prendre des mesures en continu. Les points de la

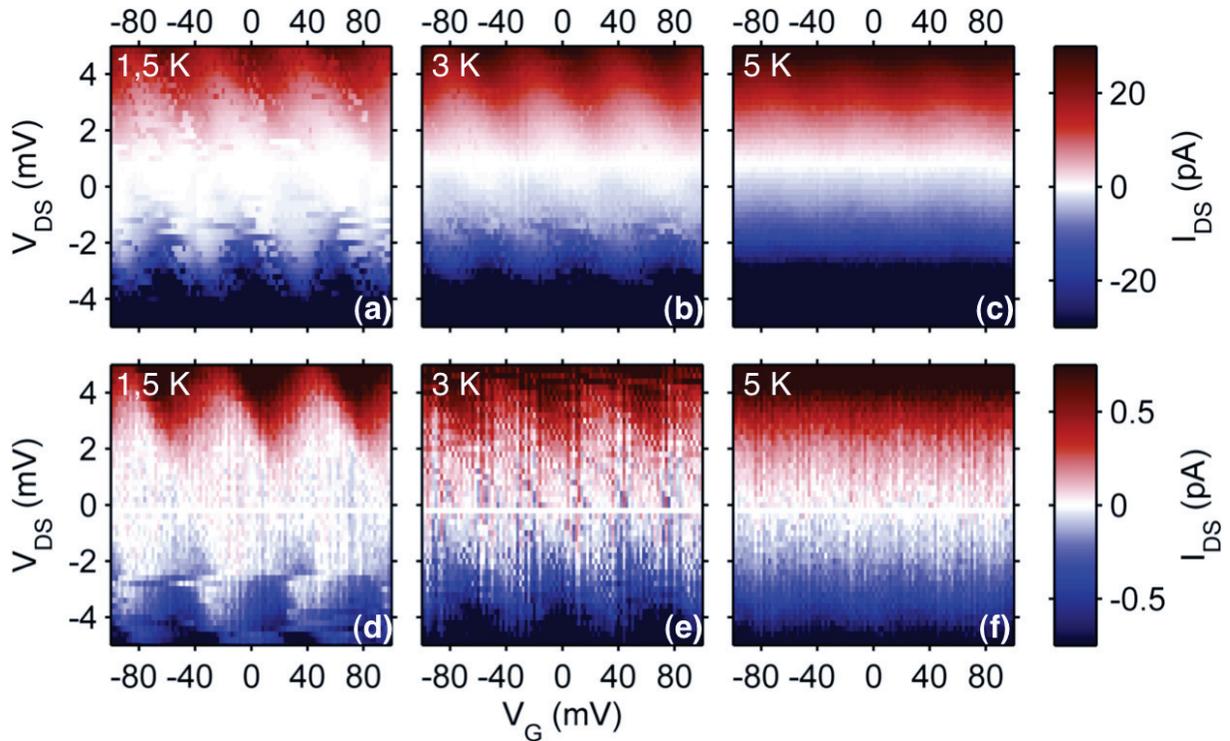


Figure 7.4 Effet de la température sur les diamants de Coulomb de deux SET de l'échantillon J117T. Mesures prises à 1,5 K, 3 K et 5 K pour (a-c) le SET-2 et (d-f) le SET-3 respectivement. Les diamants disparaissent au-delà de 5 K.

figure 7.5 donnent le courant dans le SET-1 à diverses tensions V_{DS} et à $V_G = 0$ V. L'encart montre quelques-unes de ces traces en fonction de V_{DS} et de la température (variation indiquée par la flèche). Les pointillés dans la figure indiquent les critères de température d'opération pour $x = 1$ et $x = 5$. Chacune des séries de points en température (différents V_{DS}) montre deux régimes. Le régime à faible température représente les conditions où l'énergie thermique est beaucoup plus faible que l'énergie du gap de Coulomb ($E_C/2$)³. Le courant est donc très faible, même plus faible que la résolution de la mesure. Dans ce régime, la température a très peu d'impact sur le courant dans le SET, comme le montre le plateau observé sous les 18 K, l'énergie thermique maximale du SET-1. Le niveau de courant de ce plateau augmente avec la tension appliquée seulement.

La partie de droite des courbes ($T > 18$ K) semble montrer une dépendance exponentielle, tel qu'attendu pour une excitation thermique des électrons. Le schéma en bas à droite montre que l'augmentation de la température dans ce régime a pour effet de permettre aux électrons de traverser l'îlot sans que la tension appliquée ne soit au-delà de l'énergie du gap de Coulomb. Pour une tension constante, on observe donc une augmentation en

³ Ici on prend $E_C/2$ puisque le gap de Coulomb d'énergie E_C est centré sur les énergies de Fermi des deux électrodes

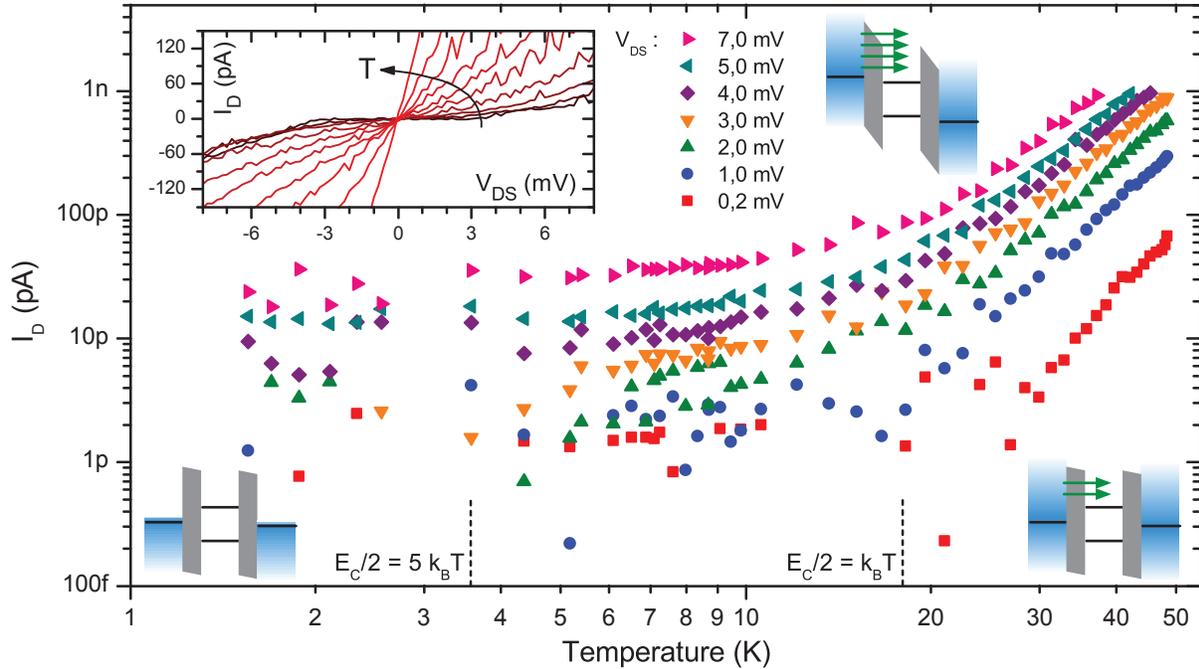


Figure 7.5 Courant dans le SET-5 à divers V_{DS} en fonction de la température. Les pointillés verticaux indiquent les températures d'opération pour satisfaire le critère $E_C \geq x k_B T$ avec $x = 1$ et $x = 5$. L'encart montre une série de courbes I_D - V_{DS} à diverses températures, augmentant du foncé vers le pâle. Les schémas en énergie illustrent l'impact de la température et de la tension V_{DS} sur le courant mesuré.

loi de puissance du courant avec l'augmentation de la température. Le schéma en haut à droite dans la figure 7.5 montre quant à lui le cas d'une tension appliquée supérieure à l'énergie de charge de l'îlot. Dans ce cas, on voit que la température a le même effet que dans les deux cas précédents, mais à une valeur de courant plus élevée puisque même si la température est diminuée, la tension donne toujours suffisamment d'énergie aux électrons pour passer à travers l'îlot. La présence de la zone de transition entre les deux régimes de conduction, près de la température correspondant à $E_C/2 = k_B T$, valide l'énergie de charge extraite par les autres méthodes, soit l'extraction des capacités par les diamants et la demi-hauteur des diamants.

7.1.4 Effet de la direction de balayage

La direction de balayage des tensions n'influence pas en théorie le résultat de la mesure pour des diamants de Coulomb. Cependant, lorsque les dispositifs mesurés sont bruités, c'est un paramètre à considérer. En effet, lorsque les défauts présents dans le voisinage de l'îlot se chargent et se déchargent, ils peuvent influencer le potentiel de l'îlot du SET.

Ces défauts sont couplés à l'îlot et agissent donc comme des grilles supplémentaires non contrôlées induisant des sauts dans les mesures. Dans certaines conditions de couplage, l'ajout d'une seule charge dans le défaut peut déplacer le potentiel de l'îlot d'une portion significative de la période d'oscillation de Coulomb. Ceci peut donc faire passer le SET d'un état conducteur à un état bloqué. Puisque le temps de mesure pour un diagramme de Coulomb est de plusieurs heures, ces sauts peuvent occasionner des déplacements indésirables des traces individuelles entre elles. La figure 7.6 compare la mesure de diamants de Coulomb pour le SET-6 en balayant la tension V_{DS} en (a) et la tension V_G en (b).

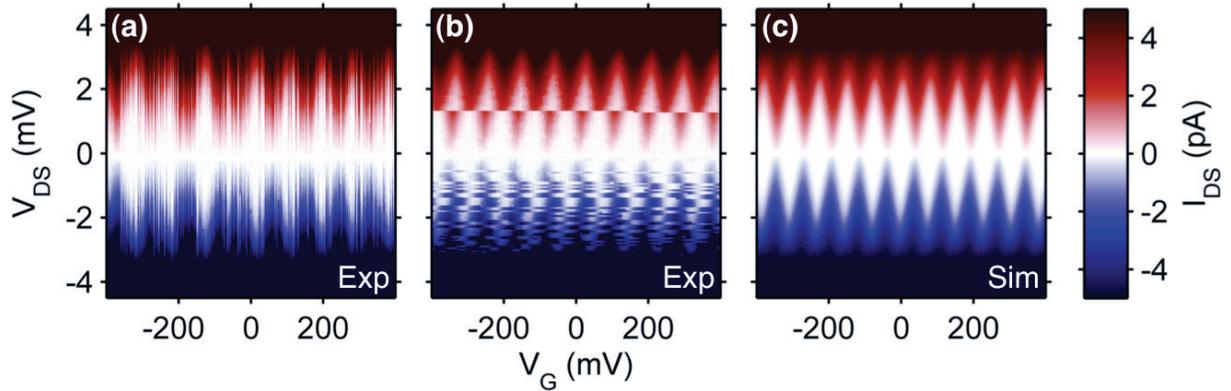


Figure 7.6 Diamants de Coulomb pour le SET-6 comparant la direction de balayage lors de la mesure. Mesure prise en variant (a) V_{DS} (de bas en haut puis de gauche à droite) et (b) V_G (de gauche à droite puis de bas en haut). (c) Diagramme simulé à l'aide de la méthode du chapitre 3. ϵ_r est ajusté à 40 pour correspondre à l'expérience. $T = 1,5$ K.

On voit que les diamants semblent identiques dans les deux mesures. Cependant, les sauts télégraphiques rendent plus difficile l'extraction des paramètres du SET dans le cas (a). En effet, la période et la largeur des diamants ne peuvent être extraites que par statistique tandis que la pente des diamants est irrégulière et donc plus difficile à déterminer. En (b), malgré la présence du bruit, on voit que l'extraction de la période des diamants est beaucoup plus aisée et les pentes des diamants aussi, dans la mesure où une petite partie du diagramme est sans bruit. Tous les diagrammes de Coulomb donnés dans ce chapitre sont donc mesurés en balayant V_G .

Le décalage visible à V_{DS} positif est le même qui est observé comme du bruit en V_{DS} négatif. Ces sauts sont probablement dus à la présence de défauts à plusieurs niveaux très près de l'îlot et qui agit comme une grille déplaçant le potentiel de l'îlot lorsqu'il se charge et se décharge. En positif, l'espacement des niveaux de ce défaut est probablement plus grand qu'en négatif de sorte qu'un seul saut est visible, tandis qu'en négatif, le défaut est plus actif. Ce défaut ne semble pas non plus affecter la conductance du SET et n'est donc pas

positionné dans les barrières tunnel mais plutôt dans l'oxyde autour de l'îlot. Le couplage important (saut de $\Delta V_G(n + \frac{1}{2})$) indique qu'il est près de l'îlot aussi.

7.2 Détection de charge

Comme discuté au chapitre 2, l'étape suivante dans le développement d'une demi-cellule QCA est de démontrer que les SET fabriqués à l'aide du procédé nanodamascène permettent de détecter le changement du nombre de charges dans un îlot adjacent. Pour ce faire, le dispositif double SET, dont le dessin est donné à la figure 4.7, est caractérisé. Afin d'obtenir les meilleures mesures et le moins de bruit de charge possible, les mesures ont été réalisées dans le système BlueFors à une température d'environ 50 mK. Le circuit considéré pour ce dispositif est donné à la figure 7.7 et inclut toutes les capacités prises en compte dans les simulations. Dans le cas idéal, les deux SET ne seraient couplés que par la capacité de couplage direct C_m (jaune), mais dans le cas réel, les capacités de couplage parasite (orange) des électrodes source, drain et grille du SET voisin l'influencent également.

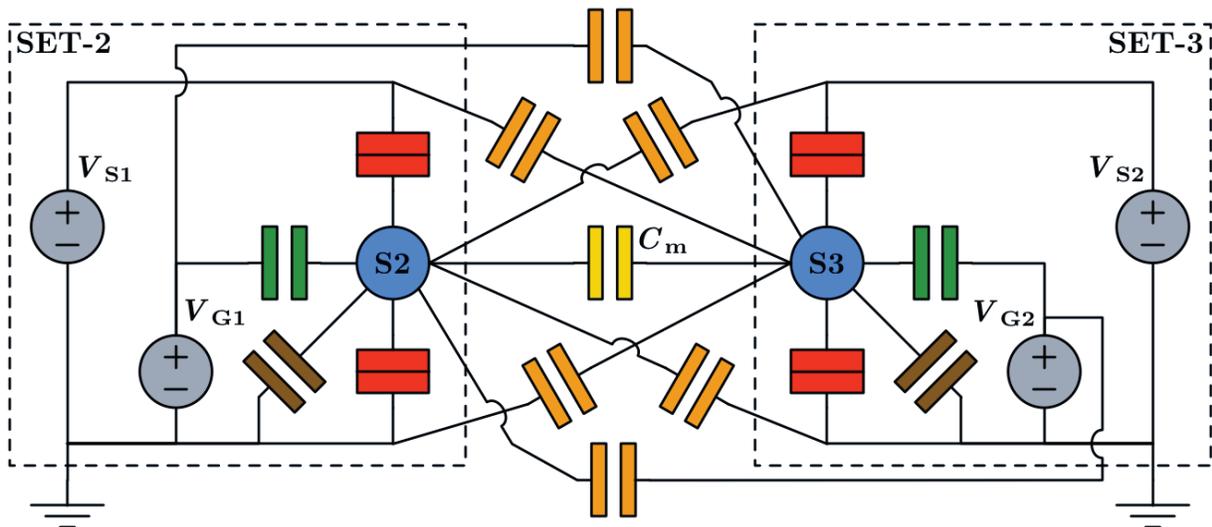


Figure 7.7 Circuit complet du double SET démonstrateur de la détection de charge. Capacités de jonctions tunnel en rouge, de grilles en vert, de couplage mutuel en jaune, de couplage parasite en orangé et au substrat en brun.

7.2.1 Validation des composantes

La caractérisation du double SET composé des SET-2 et SET-3 commence d'abord par la validation du fonctionnement et des caractéristiques de chacun des SET. Ceci est fait par

la mesure d'un diagramme de stabilité des deux SET (diamant de Coulomb). La figure 7.8 montre en (a) et (c) les diamants expérimentaux mesurés à 50 mK pour les SET-2 et SET-3 respectivement. Dans ces deux diagrammes, les pointillés indiquent la forme d'un diamant avec lequel les paramètres du tableau 7.1 ont été extraits. Les capacités de jonction tunnel extraites des diamants sont de 20,5 aF en moyenne, les capacités de grilles sont d'environ 2,5 aF, ce qui porte l'énergie de charge des deux SET à 3,6 meV et 3,8 meV respectivement. En comparant ces énergies de charge avec les hauteurs des diamants respectifs, on voit que dans les deux cas, l'énergie de charge réelle de chaque SET ($E_C(\text{exp-d})$) est environ 0,75 meV plus faible que la valeur calculée par l'extraction des paramètres. Puisqu'environ 20 % de la capacité totale des îlots provient des capacités de couplage et parasites, le modèle permettant d'extraire les capacités des diamants de Coulomb n'est plus directement valide. Il permet plutôt de déterminer approximativement les valeurs de capacités et donc peut mener à de légères différences avec les valeurs attendues. La simulation du double SET, avec la méthode du chapitre 3, le dessin de la figure 4.7 et le circuit SIMON de la figure 7.7 ont permis de générer les deux diamants de Coulomb des figures 7.8b et 7.8d. La valeur de la permittivité diélectrique relative de l'oxyde de la jonction (ϵ_r^J) utilisée pour obtenir ces diamants simulés est de 20, ce qui est proche de la valeur obtenue pour le SET-1 (25).

Ces mesures de diamant sont très peu bruitées par rapport aux mesures allant de 1,5 à 5 K (figure 7.4). Ceci peut être attribué à deux facteurs, le premier étant la température 30 fois plus basse, qui réduit considérablement l'énergie thermique des électrons et diminue l'activité des pièges environnant les îlots. Le deuxième facteur est la combinaison des voltages de grilles utilisée pour mesurer ces diamants. En effet, le positionnement en énergie des défauts présents près des îlots est aléatoire. Cela dit, il est généralement possible d'utiliser les grilles des SET dans des plages de voltage rendant moins accessibles les défauts principaux, ce qui réduit grandement le bruit télégraphique observé dans les dispositifs. Un diagramme de stabilité donnant le courant dans un SET en fonction des deux tensions de grille permet de déterminer les meilleures plages d'opération des grilles. Un tel diagramme est donné à la figure 7.9 pour le SET-3 et montre plusieurs choses. D'abord, les lignes inclinées représentent les pics de conduction du SET-3 lorsque le nombre de charges dans l'îlot change d'un électron. La pente de ces transitions indique le ratio du couplage des deux grilles par rapport à l'îlot du SET-3, qui est ici d'environ 4. Cela signifie que la capacité de l'îlot avec la grille du SET-3 est environ 4 fois plus grande qu'avec la grille du SET-2. Ce rapport de levier est aussi validé par la simulation de la géométrie du double SET qui donne des capacités de grille croisée d'environ 0,41 aF ce qui représente un couplage environ 5,5 fois plus faible, proche de l'expérience.

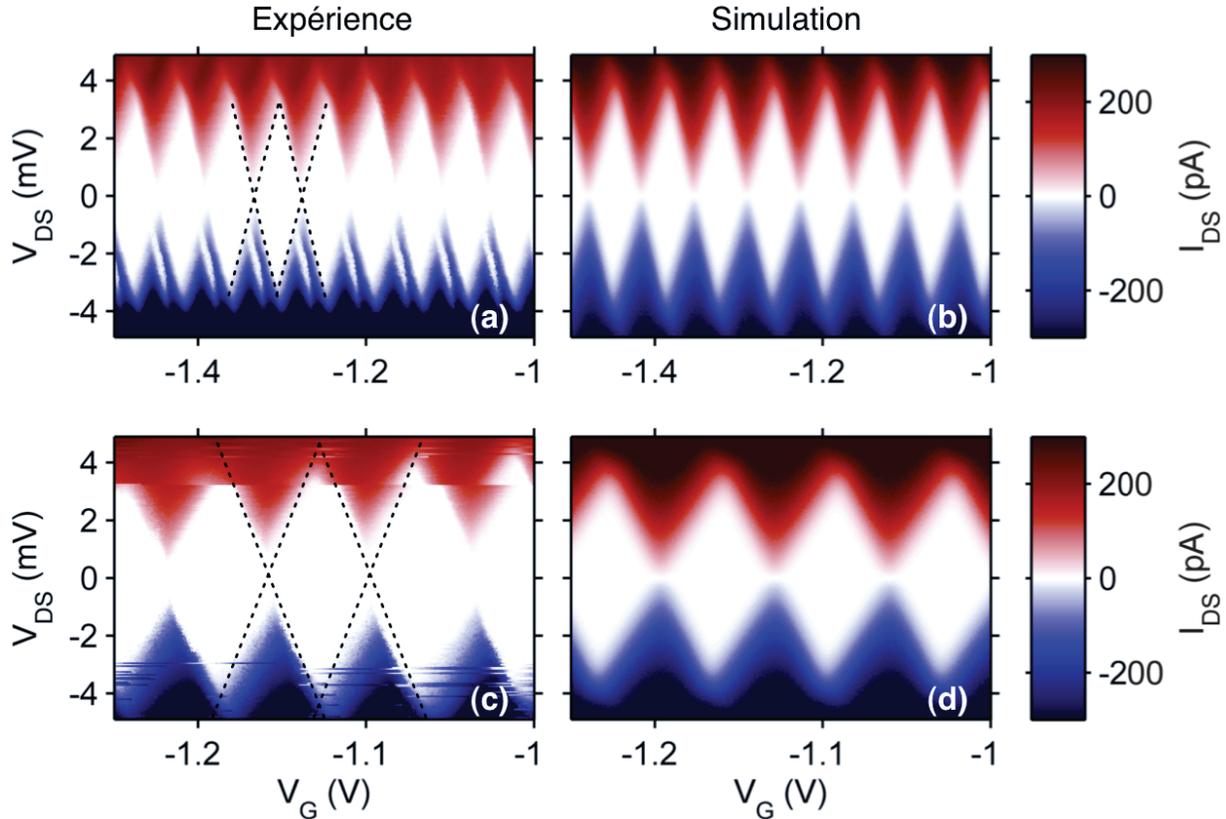


Figure 7.8 Diamants de Coulomb expérimentaux pris dans la région ① (figure 7.9) pour le (a-b) SET-2 (avec $V_{GR} = -1,17$ V) et (c-d) le SET-3 (avec $V_{GL} = -1,25$ V) $T = 50$ mK. Les diagrammes de droite sont simulés avec $\epsilon_r = 20$. Les pointillés indiquent les frontières de diamants utilisées pour l'extraction des paramètres.

On voit aussi sur ce diagramme que l'intensité des pics de Coulomb varie d'une région à l'autre. Dans certaines régions indiquées par les flèches pointillées, les pics vont même jusqu'à disparaître sous le niveau de détection. Le diagramme montre aussi les régions d'instabilité dues aux défauts aléatoires causant des sauts télégraphiques. Les encadrés ① ② et ③ (figure 7.9) identifient des régions où le bruit est minimal, mais tout en montrant plusieurs transitions. Les mesures subséquentes sont effectuées dans la région ① pour la qualité des transitions et de son niveau de courant. Les diamants donnés à la figure 7.8 ont été pris dans cette région avec $V_{GL} = -1,25$ V et $V_{GR} = -1,17$ V comme valeurs de référence. En fait, durant toutes les mesures ayant suivi ce diagramme de stabilité, ces deux voltages de grille ont été gardés à l'intérieur de la zone ① pour éviter de mettre les SET même temporairement dans des régions où les défauts sont plus actifs.

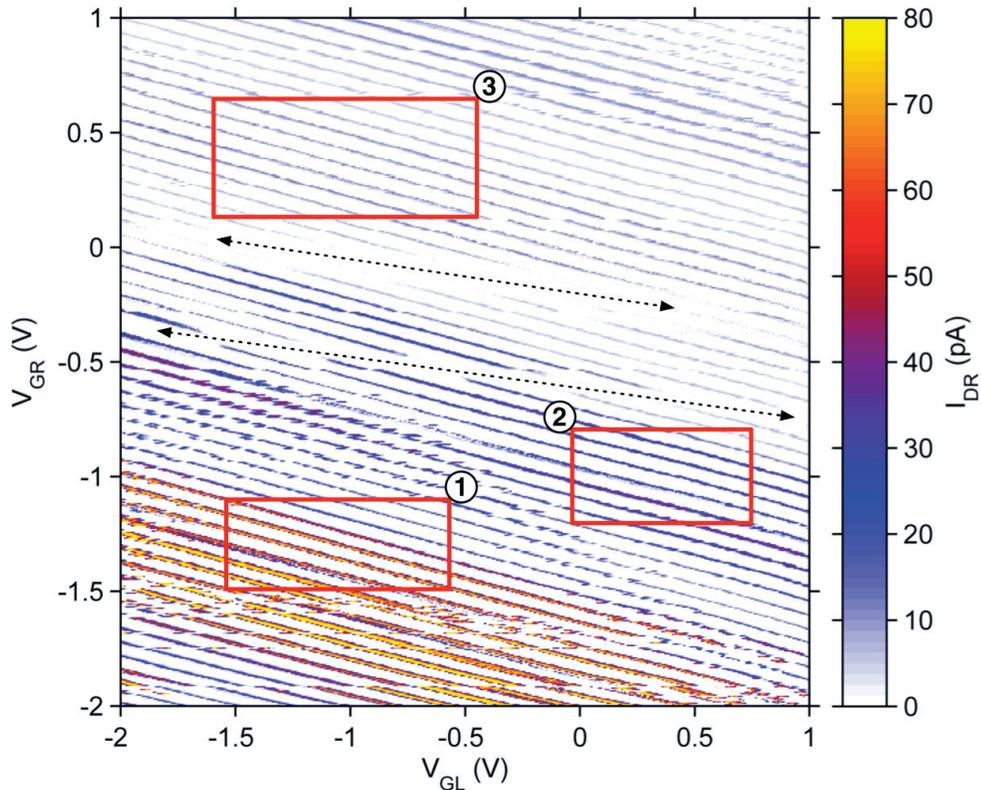


Figure 7.9 Diagramme de stabilité du SET-3 de l'échantillon K215T pour $V_{DS} = 1,5$ mV. V_{GL} est la grille du SET-2 (gauche) et V_{GR} la grille du SET-3 (droite). Les flèches pointillées identifient des régions du diagramme où les pics de Coulomb sont diminués par des effets de piéges. Les régions ①, ② et ③ sont des régions où le bruit télégraphique causé par les piéges est à son minimum, ce sont les régions stables où des mesures de détection de charge peuvent être faites. $T = 50$ mK.

7.2.2 Diagramme de stabilité du double SET

Dans la mesure où les deux SET sont fonctionnels et montrent bien les oscillations de Coulomb, on peut étudier ce diagramme de stabilité plus en détail. En faisant un agrandissement de la zone ①, on obtient le diagramme de la figure 7.10a. Les diagrammes de stabilité combinés des deux SET sont réalisés en additionnant les diagrammes individuels (normalisés en courant) des deux SETs mesurés en même temps ($|I_{DL}|/2 + |I_{Dr}|/2$). Comme expliqué dans la littérature [van der Wiel *et al.*, 2003], dans le cas où l'on place deux SET côte à côte, on obtient ce type de diagramme en combinant les courants des deux dispositifs. Ce diagramme correspond à l'addition du courant des deux SET normalisés puisque dans ce cas-ci, c'est la forme et la position des parties du diagramme qui sont importantes plutôt que le niveau de courant. Les lignes plutôt verticales et plutôt horizontales correspondent au changement du nombre de charges dans l'îlot de gauche (n_1) et de

droite (n_2) respectivement. Les transitions dans les diagonales correspondent donc à un changement simultané dans les deux îlots. L'inclinaison des lignes dans le diagramme est causée par les couplages de grille. En effet, pour les lignes du SET-2 (verticales), on voit que l'augmentation de la tension de grille du SET-3 réduit la tension de grille du SET-2 à laquelle la transition se produit.

La zone de croisement des lignes des deux SET est agrandie dans la figure 7.10b. On observe dans cette zone que les lignes ne se croisent pas directement. L'écart qui se forme entre les deux lignes est dû à la sensibilité d'un SET à l'état de charge de l'autre, c'est-à-dire au couplage des deux SET. Ce diagramme ressemble aux diagrammes typiquement obtenus pour des doubles boîtes quantiques couplées par effet tunnel [van der Wiel *et al.*, 2003]. Cependant, les deux îlots ne sont couplés que par une capacité classique (C_m dans la figure 7.7). Puisque le formalisme de C_m s'applique seulement à la partie capacitive du circuit, le parallèle peut se faire en ramenant le circuit de la figure 7.7 à celui de la double boîte quantique. On simplifie en éliminant d'abord les capacités parasites, puis en ramenant les deux jonctions tunnel de chaque SET en une. Ceci devrait nous permettre d'utiliser directement le formalisme de la double boîte quantique pour la partie électrostatique (capacitive).

De ces diagrammes (figure 7.10a-b), on peut extraire les capacités totales des deux îlots (C_L et C_R) et la capacité de couplage C_m . Pour ce faire, on utilise les relations suivantes entre les énergies de charge et les capacités :

$$E_{CL} = \frac{e^2 C_R}{C_L C_R - C_m^2}, \quad E_{CR} = \frac{e^2 C_L}{C_L C_R - C_m^2}, \quad E_{Cm} = \frac{e^2 C_m}{C_L C_R - C_m^2}. \quad (2.1)$$

E_{CL} et E_{CR} sont les énergies extraites de la hauteur des diamants de Coulomb de la figure 7.8 et données dans le tableau 7.1 ($E_C(\text{exp-d})$). Cependant, on ne peut pas prendre directement E_{Cm} à partir de la figure 7.10b puisque la calibration en énergie n'est pas connue pour les axes de tension de grille. En effet, une variation de V_{GL} (V_{GR}) entraîne un changement d'énergie de l'îlot gauche (droit), mais aussi de l'îlot droit (gauche) dans une proportion dépendant du couplage des deux îlots. Il faut donc calculer E_{Cm} dans un référentiel où l'énergie est connue. Le schéma d'une partie d'un diagramme de stabilité (figure 7.11) montre la conversion entre les deux systèmes de coordonnées, en tension de grille et en énergies des deux îlots). Dans le schéma, la longueur AB (CD) correspond à l'énergie E_{CL} (E_{CR}) puisque dans cet axe, la variation d'énergie induite par V_{GL} (V_{GR}) dans l'îlot droit (gauche) est compensé par la variation de V_{GR} (V_{GL}) (diagrammes d'énergie, figure 7.11).

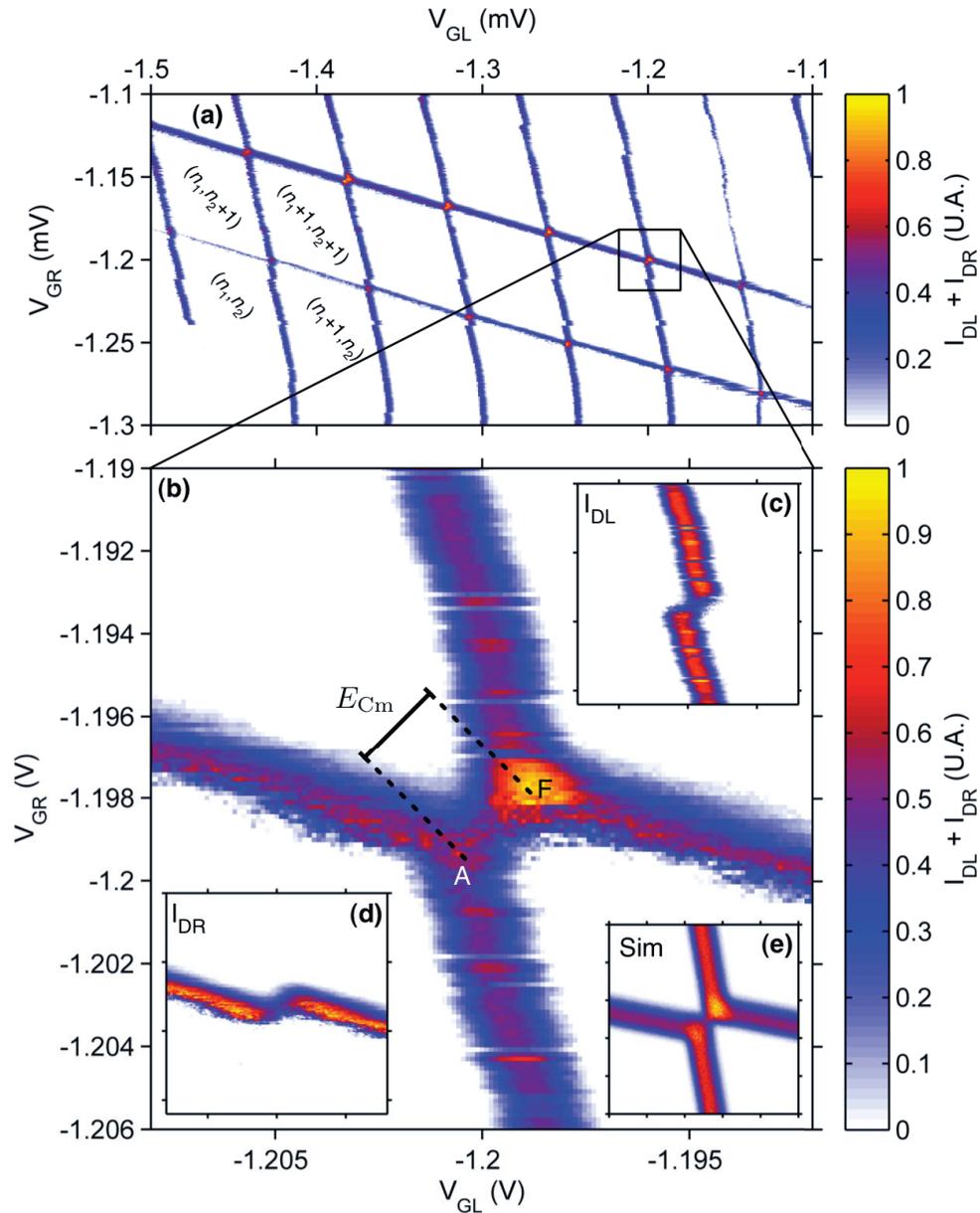


Figure 7.10 (a) Diagramme de stabilité combiné des SET-2 et SET-3 couplés pris $V_{DS-L} = 100 \mu\text{V}$, $V_{DS-R} = 300 \mu\text{V}$ et $T = 50 \text{ mK}$. (b) Agrandissement d'une zone de transition (points triples). Les décalages observés dans chaque SET individuellement correspondent au couplage des deux îlots E_C^m . Encart : diagrammes de stabilité individuels des deux SET montrant les transitions et leur hauteur respectives ΔV_{Gi}^m pour (c) le SET-2 et (d) le SET-3 puis (e) la zone de transition simulée.

On mesure les vecteurs \mathbf{E}_1 (\mathbf{E}_2) à l'aide des diagrammes de la figure 7.10 et on obtient :

$$\mathbf{E}_1 = [61,0; -17,5] \text{ mV}, \quad \mathbf{E}_2 = [-17,0; 67,5] \text{ mV}. \quad (2.2)$$

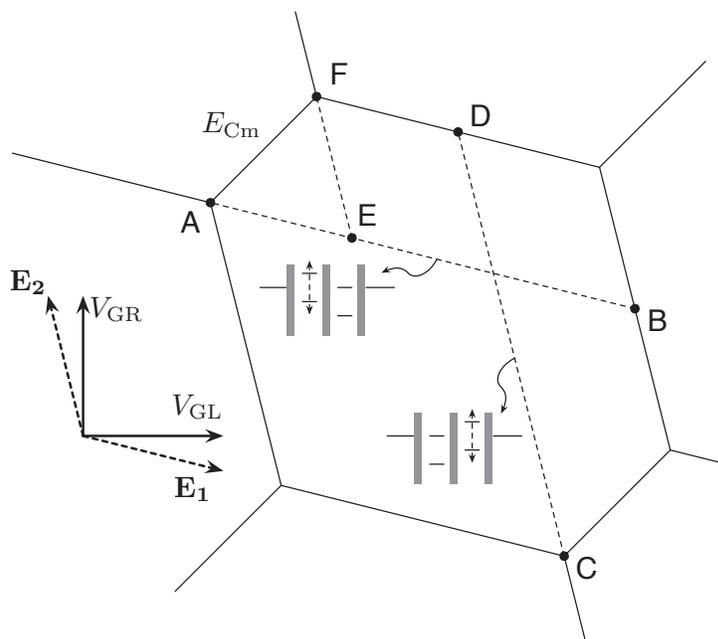


Figure 7.11 Diagramme de stabilité schématique du double SET. Les directions AB et CD correspondent aux axes d'énergie des deux îlots (\mathbf{E}_1 et \mathbf{E}_2), donc au mouvement d'un seul îlot à la fois comme le montrent les diagrammes d'énergie. Le segment AF correspond à l'énergie de couplage des deux SET. AE et EF sont les projections de E_{Cm} sur les axes d'énergie AB et CD.

On peut ensuite projeter $\mathbf{AF} = [1,6; 1,4]$ mV dans cette nouvelle base pour obtenir :

$$E_{Cm} = E_{CL}(\mathbf{E}_{Cm} \cdot \mathbf{E}_1) + E_{CR}(\mathbf{E}_{Cm} \cdot \mathbf{E}_2) = 6,2 \mu\text{eV}. \quad (2.3)$$

Connaissant maintenant toutes les énergies nécessaires, on peut résoudre le système d'équations défini par les relations 2.1. On obtient les valeurs suivantes pour les capacités totales des îlots et la capacité de couplage :

$$C_L = 55,2 \text{ aF}, \quad C_R = 53,4 \text{ aF}, \quad C_m = 0,11 \text{ aF}. \quad (2.4)$$

Les capacités totales expérimentales des îlots gauche et droit sont de 44,6 aF et 42,1 aF respectivement. Ces valeurs, extraites des diamants de Coulomb, sont inférieures d'environ 20 % à celles extraites du diagramme de stabilité. La capacité totale, calculée avec $C_{\Sigma i} = C_{Si} + C_{Di} + C_{Gi}$, ne tient pas compte du couplage de l'îlot i avec les électrodes (source, drain, grille) et l'îlot du SET voisin qui l'augmente. Ceci indique tout de même une bonne correspondance entre les diverses méthodes d'extraction des capacités totales. Dans le cas de C_{ms} , la valeur simulée est de 0,87 aF, ce qui est huit fois plus grand que le couplage extrait du diagramme de stabilité. L'origine de cet écart n'est pas évidente, mais certaines

pistes peuvent y répondre au moins en partie. Le fait que C_{ms} provienne d'une simulation utilisant une valeur de ε_r^J faisant correspondre la hauteur des diamants avec l'expérience est une première hypothèse. L'erreur sur la mesure des différentes énergies et largeurs dans le diagramme de stabilité est une deuxième hypothèse. Finalement, il est possible que le modèle utilisé ici ne soit pas complètement applicable pour deux îlots couplés capacitivement. Le modèle est basé sur le fait que C_m est une jonction tunnel et que le diagramme est mesuré en transport à travers les deux îlots en série. Cependant dans le dispositif double SET, C_m n'est qu'une capacité et le transport est mesuré dans les deux îlots indépendamment. Cela se traduit par un régime d'opération qui peut être différent pour les deux dispositifs. Il n'en reste pas moins que l'ordre de grandeur obtenu par les différentes méthodes est bon, ce qui confirme que les sauts observés proviennent bien du couplage des deux SET. La géométrie exacte du dispositif étant inconnue, il n'est pas possible de mieux comparer les simulations avec l'expérience.

7.2.3 Opération en détection de charge

L'énergie de couplage E_C^m représente le changement dans l'énergie électrostatique de l'un des îlots lorsque le nombre de charges dans l'îlot voisin change d'un électron ($n_i \rightarrow n_i + 1$ ou $n_i \rightarrow n_i - 1$). C'est ce changement d'énergie induit qui permet la détection de la charge. Puisque le dispositif est composé de deux SET, il peut être utilisé dans les deux sens pour réaliser la détection de la charge. Comme [Lafarge *et al.*, 1991], on utilise l'un des deux SET comme boîte à un électron en fixant ses électrodes source et drains à la masse puis en utilisant sa grille pour contrôler le potentiel de son îlot, et donc son nombre d'électrons n . On polarise ensuite le deuxième SET comme détecteur de charge de sorte à le positionner sur le flanc d'un pic de Coulomb, là où sa sensibilité est la plus élevée. Au passage de chacune des transitions, un électron est donc ajouté à l'îlot de la boîte, ce qui cause un changement abrupt du potentiel qui est ensuite ressenti par le détecteur. Ce saut induit un changement dans la résistance du détecteur et peut donc être détecté. Puisque le potentiel de la grille de la boîte a un impact sur l'îlot du détecteur, on doit aussi varier le potentiel du détecteur de sorte à compenser cet effet et garder le SET dans son état de détection optimal. Ce processus revient à se placer sur le bord d'une des lignes du diagramme de stabilité de la figure 7.12a et de la suivre en traversant plusieurs transitions de l'autre SET.

Les séries de traces des figures 7.12b et 7.12c représentent cette détection de charge. En (b), on a le cas où le SET-2 sert de détecteur pour la boîte du SET-3 (flèche noire en (a)) puis en (c), on a le cas où le SET-3 détecte l'état de charge de la boîte du SET-2

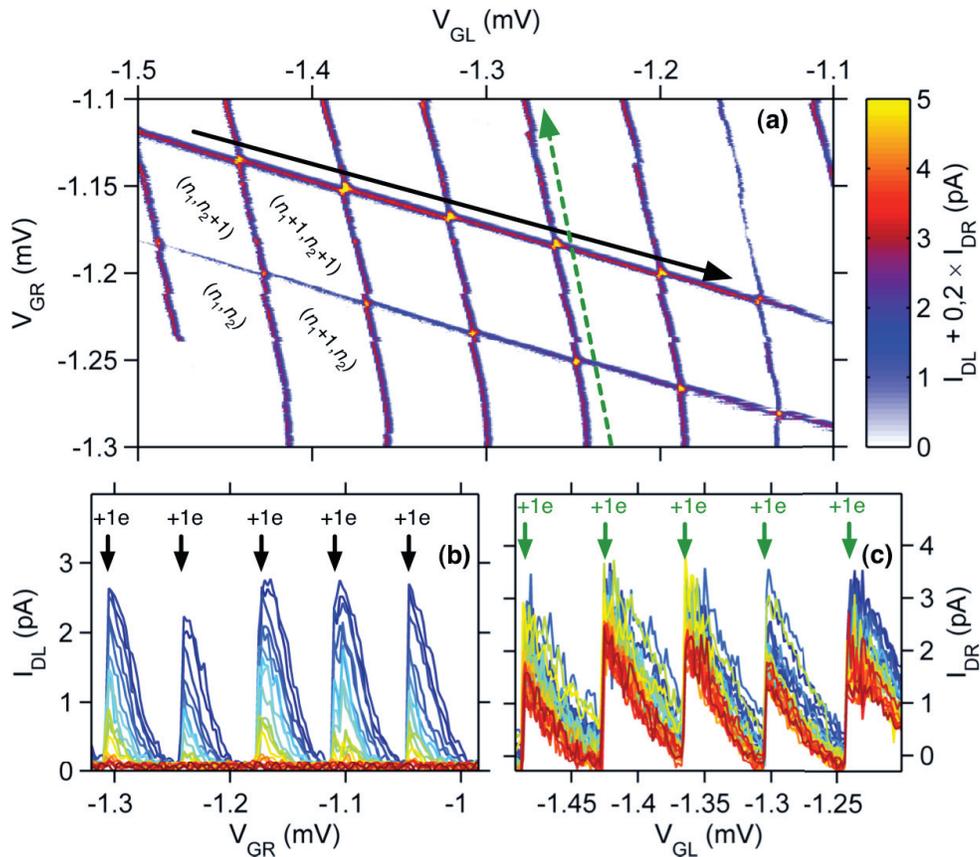


Figure 7.12 (a) Diagramme de stabilité combiné du SET-2 et SET-3 en fonction de leurs deux grilles respectives (GL et GR). Les lignes plutôt verticales sont les pics de Coulomb du SET-2 (GL) et les lignes plutôt horizontales sont les pics du SET-3 (GR). La flèche en noir représente la direction de la détection de la charge du SET-3 par le SET-2, mesurée indépendamment en (b) et la flèche pointillée verte indique la direction de la détection inverse (charge du SET-2 détectée par le SET-3) mesurée indépendamment en (c). Les sauts en (b) et (c) indiquent l'ajout d'un électron dans la boîte détectée et plusieurs traces sont prises. $T = 50$ mK.

(flèche verte en (a)). Les flèches dans chacun des graphiques indiquent l'ajout d'un électron dans la boîte (+1e). Les différentes courbes représentent des mesures consécutives avec les mêmes paramètres. On voit dans les deux graphiques en (b) et en (c) que les traces ne se superposent pas toutes. Dans les deux cas, les courbes diminuent en intensité d'une mesure à l'autre et cet effet est plus marqué en (b). Ceci indique une dérive de la position des pics de Coulomb des deux SET en fonction du temps pouvant être causée par une légère variation de la température de l'échantillon. Ces traces en dent de scie correspondent bien à ce qui est prévu dans la littérature (voir figure 2.14) et démontrent bien que les SET nanodamascène fonctionnent aussi comme détecteur de charge. De plus, la détection fonctionne dans les deux sens, ce qui indique une certaine robustesse du procédé.

Le dispositif double SET permet aussi d'étudier plus en détail le couplage entre les deux SET. La figure 7.13 montre l'agrandissement du croisement de deux lignes du diagramme de stabilité. La tension source V_{DS} est variée sur le SET-2 dans les diagrammes de gauche. On voit que la largeur du pic de Coulomb augmente avec la tension qui passe de 0 V en (a) à 900 μV en (d). Dans les diagrammes de droite, la tension source du SET-3 est gardée constante à 600 μV et les mesures du courant des deux SET sont faites en même temps. Les sauts marqués dans les traces des figures 7.12b et 7.12c sont indiqués par les flèches dans tous les diagrammes. On peut aisément voir que l'impact de l'élargissement des pics de Coulomb du SET-2 (gauche) est d'élargir la transition observée dans le SET-3 (droite). Lorsque la tension du SET-2 est basse, la transition mesurée au SET-3 est abrupte tandis que l'augmentation de la tension élargit cette transition, comme le montrent les diagrammes (f-h). Les traces dans les figures de droite schématisent la détection telle que mesurée dans la figure 7.12c et les marques sur l'axe des X donne la plage de tension hypothétique pour la détection de charge. La différence de courant mesurée pour le passage d'une marque à l'autre diminue lorsque la tension V_{DS} d'un des SET est augmentée. Pour obtenir le meilleur signal de détection de charge, il faut donc travailler dans des conditions de faible V_{DS} .

Cette série de mesure en fonction de la tension de source permet de discriminer les transitions dans une application donnée. En particulier, dans l'application aux QCA où la complexité du circuit nécessite de s'assurer qu'un évènement détecté appartient bien aux îlots QCA et non à une transition d'un des deux SET. Dans cette application, un diagramme de stabilité permet d'abord de déterminer toutes les transitions présentes dans le dispositif. Ensuite, on augmente le V_{DS} d'un seul des deux SET détecteurs et on reprend le même diagramme de stabilité. En analysant les différentes transitions présentes, l'élargissement de certaines des transitions observées dans le SET maintenu fixe indique que ces transitions sont dues à l'élargissement du pic de Coulomb du SET changé. Cette transition peut donc être éliminée des mesures ou compensée directement à la grille. On peut ensuite répéter la méthode pour l'autre SET en inversant les rôles, ce qui permet d'éliminer de chacune des mesures de SET les transitions de l'autre détecteur et de garder seulement celles dues à la cellule QCA.

7.3 Conclusion

Ce chapitre résume les avancements faits en terme de fabrication et de caractérisation de SET individuels et couplés. Tous les paramètres des SET ont été extraits des différentes mesures physiques (AFM et SEM) et électriques (diamants de Coulomb) à basse

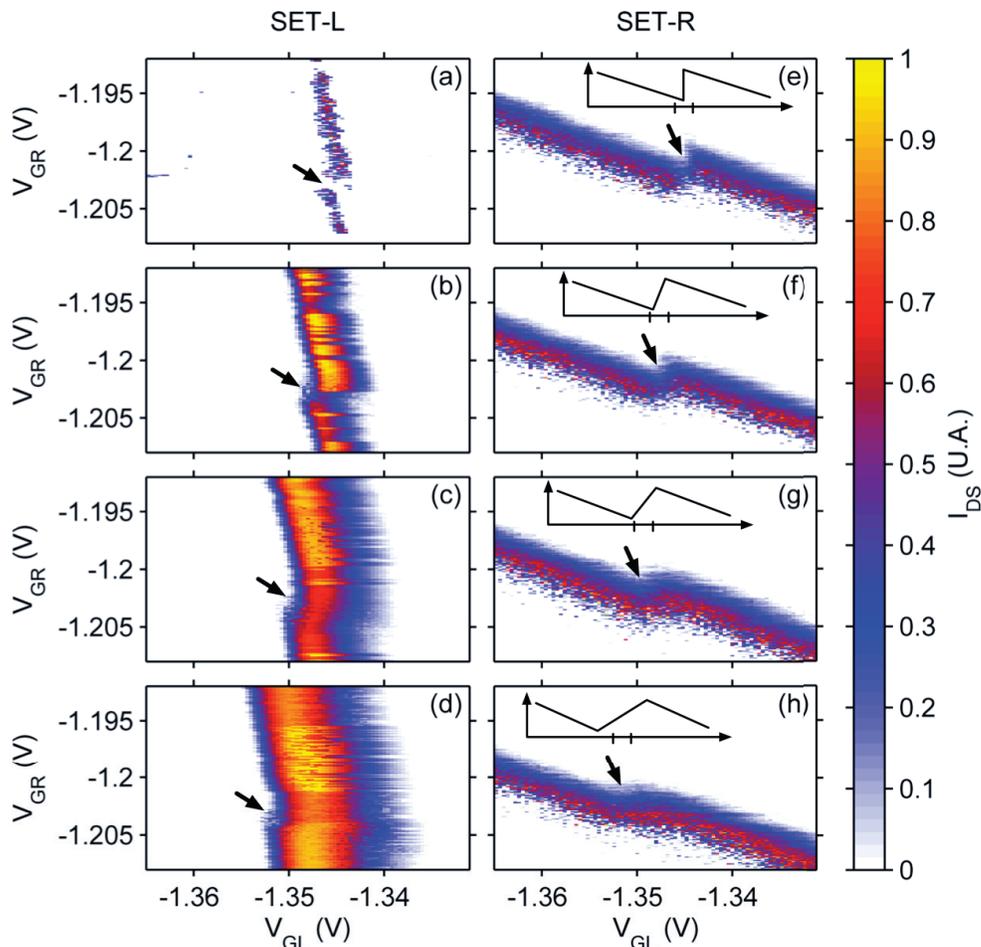


Figure 7.13 Diagrammes de stabilité des SET-2 (gauche) et SET-3 (droite) dans diverses conditions de tension. La tension $V_{DS-R} = 600 \mu\text{V}$ est constante pour (e-h), tandis que V_{DS-L} est (a) 0 V, (b) $300 \mu\text{V}$, (c) $600 \mu\text{V}$ et (d) $900 \mu\text{V}$. L'augmentation de la largeur du pic du SET-2 (gauche) et de la largeur de la transition dans le SET-3 (droite) est indiquée par les flèches. $T = 50 \text{ mK}$ et les courants sont normalisés.

température (1,5 K). On a pu calculer les énergies de charge de chacun des SET et les comparer avec les valeurs simulées. Les permittivités diélectriques des jonctions tunnel ont dû être ajustées pour correspondre à l'expérience. Les valeurs obtenues de ces ajustements indiquent une variation de l'épaisseur et des propriétés électriques de l'oxyde avec le temps d'oxydation. Par ailleurs, on en conclut que des travaux plus en profondeur avec des mesures indépendantes de l'épaisseur et de la constante diélectrique sont nécessaires pour valider les valeurs extraites des SET fabriqués. La dépendance en température des caractéristiques des SET a aussi pu être observée afin de valider l'extraction des énergies de charge et des capacités du circuit. Dans cette analyse, deux régimes de dépendance de la résistance tunnel en fonction de la température ont été observés. Le premier régime à

$T < E_C/2k_B$ (régime de blocage de Coulomb) montre une résistance constante en fonction de la température et le deuxième régime à $T > E_C/2k_B$ montre une résistance tunnel dépendant exponentiellement de la température. Le sens des mesures s'est aussi avéré être un paramètre important puisque les mesures prises en balayant V_{DS} ne permettaient pas de bien identifier les diamants de Coulomb ou d'en extraire des paramètres de façon fiable.

Des mesures à 50 mK ont permis d'étudier deux SET couplés capacitivement par leur proximité. Des diamants de bonne qualité et pratiquement sans bruit ont pu être mesurés. L'étude des diagrammes de stabilité des SET a permis de déterminer les régimes d'opérations où le bruit est minimal. Le couplage des deux SET a pu être mesuré à l'intersection des transitions d'état des deux SET par l'écart créé par leur couplage (E_C^m). La détection du changement d'état de charge dans un SET utilisé comme boîte à un électron par le deuxième SET a été démontrée en utilisant à tour de rôle chacun des SET comme détecteur et comme boîte à un électron. Finalement, l'impact de la tension de source des SET a pu être étudié en détail et permet de déterminer que les meilleures conditions d'opération pour les SET est lorsque leur V_{DS} est le plus faible possible tout en permettant quand même un rapport signal sur bruit suffisamment grand. Dans un contexte d'application de QCA, cela a aussi permis de définir une méthode permettant de discriminer les transitions de charge détectées par un SET comme appartenant au SET de détection ou aux îlots de la demi-cellule QCA.

Les résultats de ce chapitre permettent donc de valider le fonctionnement de toutes les briques nécessaire au fonctionnement du QCA. La suite logique est de fabriquer plusieurs cellules avec des géométries comme celles conçues au chapitre 4 ou des versions optimisées inspirées de celles simulées au chapitre 3 et de les caractériser.

CHAPITRE 8

CONCLUSION

8.1 Conclusions générales

Depuis leur invention il y a plus de 20 ans maintenant, beaucoup de travail a été fait pour développer la technologie QCA. Autant dans les travaux du groupe initiateur (Notre-Dame), que dans d'autres groupes à travers le monde, diverses approches inspirées du concept de base ont été introduites et développées. Malgré certaines réticences exprimées¹ à l'endroit du concept même de QCA, les approches de nanoaimants (NML), de QCA moléculaires et de QCA atomiques suscitent beaucoup d'intérêt dans la communauté. Chacune de ces approches offre des possibilités intéressantes pour des applications différentes. L'avènement de logiciels de simulation comme QCADesigner a aussi permis le développement de toute une architecture de circuits logiques qui permettent en théorie de reproduire un cœur de calcul complet.

Il semble cependant que le prototype original, le QCA à îlots métalliques, ait perdu de son intérêt même s'il a permis toutes les démonstrations faisant du QCA une technologie encore crédible aujourd'hui. En 2013, un colloque a permis de réunir la communauté scientifique du domaine afin de discuter des travaux en cours et des directions futures à prendre pour faire avancer cette technologie. Lors du panel de clôture du colloque, C. S. Lent mentionne ceci à propos des points importants sur lesquels les chercheurs doivent se concentrer pour le futur :

« It will also be helpful to have more proof of concept deliverables, things that you can see working. Magnetic devices working. I frankly don't know why the metal dot devices do not have more credibility; fairly sophisticated things have been made that way. And the results Bob showed with these atomic scaled devices. Seeing those things working, I think will help a lot in terms of sustaining the interest in the field. » [Anderson et Bhanja, 2014]

Ceci se résume en disant que pour garder l'intérêt et la crédibilité de cette technologie, il faut travailler à la réalisation de preuves de concept. Il ajoute même que l'on devrait

¹ Lettre en réponse à la publication [Lent, 2000] : <http://www.sciencemag.org/content/288/5471/1597.full/reply#content-block>

continuer la recherche dans les circuits à îlots métalliques puisque des choses relativement sophistiquées ont été réalisées de cette manière. L'architecture nécessaire à la réalisation de calculs intéressants est présente, mais maintenant, c'est plutôt du côté de la fabrication qu'il faut mettre de l'énergie afin de construire des briques technologiques fonctionnelles et compatibles avec des systèmes à plus grande échelle. Le but de cette thèse correspond tout à fait à cette ligne de pensée. De plus, comme dans beaucoup de domaines, en chemin pour se rendre à un processeur QCA, nous verrons certainement des découvertes technologiques qui pourront contribuer à ce domaine, mais aussi à d'autres.

Pour réaliser l'ambition d'améliorer la température d'opération des QCA métalliques, le procédé nanodamascène a dû être adapté et développé. Ce procédé, démontré comme intéressant pour des applications à température ambiante et à grande échelle, n'a pu être reproduit de façon convaincante jusqu'à maintenant. Cependant, différentes briques importantes du procédé de fabrication de SET à grilles latérales ont été apportées depuis les travaux de C. Dubuc. Les SET faisant partie intégrante du QCA métallique, leur fonctionnement adéquat et les propriétés de détection de charge devaient être redémontrées dans le procédé actuel. C'est ce qui a été réalisé dans cette thèse. Ceci s'appuie sur les travaux de plusieurs personnes ayant développé les éléments clés permettant la fabrication de SET compatible CMOS (par rapport au procédé de C. Dubuc). En particulier :

- passer d'une lithographie directe dans l'oxyde de silicium à l'utilisation de résines électrosensibles permettant la gravure plasma et le contrôle des profils de tranchées (M. Guilmain) ;
- utiliser un dépôt de métal (*blanket*) par pulvérisation afin d'améliorer le remplissage des tranchées et l'uniformité de la planarisation CMP (M. Guilmain) ;
- utiliser des tranchées ayant un angle inférieur à 90° pour améliorer l'uniformité du CMP dans la région joignant les lithographies UVL et EBL et
- minimiser l'exposition des jonctions tunnel à l'air en utilisant une oxydation *in situ* et une passivation rapidement après la planarisation des échantillons.

Le développement des deux derniers points a requis beaucoup de travail de fabrication, de caractérisation physique et électrique ainsi que de l'analyse de données. Plus de 1100 échantillons ont été utilisés dans la durée des travaux. L'objectif ultime visé par le projet, soit de démontrer le fonctionnement d'une demi-cellule QCA métallique en procédé nanodamascène, n'a pu être réalisé, mais grâce à ces travaux, tous les éléments sont maintenant en place pour y arriver. On a pu refaire plusieurs SET fonctionnels sur plus d'un mois de caractérisations impliquant l'utilisation de deux systèmes cryogéniques différents

reproduisant dans chaque cas les résultats et confirmant du même coup leur stabilité. Le point culminant de la caractérisation a été de pouvoir démontrer la détection de charge dans le cas de deux SET côte à côte, ce qui valide la possibilité de lire l'état de sortie d'un circuit QCA, un élément critique de la technologie sans lequel la technologie est inutile.

La méthode de simulation développée au chapitre 3 a permis de mettre en lumière l'importance des capacités parasites ajoutées aux dispositifs monoélectroniques lorsqu'ils ne sont plus isolés, mais dans des circuits plus complexes. Ces limitations devront être étudiées plus en détail pour vérifier la possibilité et l'utilité de la recherche sur ces dispositifs ou la rediriger vers des applications où ces phénomènes sont moins importants voir négligeables.

8.2 Perspectives

À la lumière de ces travaux, beaucoup de recherche reste à faire afin de construire et développer le plein potentiel de la technologie QCA avec le procédé nanodamascène. Le développement des SET dans cette approche est aussi prometteur puisque des travaux (Y. Ayadi) sont en cours pour développer des capteurs de gaz en utilisant le SET comme détecteur principal. M. Labalette travaille aussi au développement de mémoires résistives (RRAM) en utilisant aussi ce procédé. Ces différentes approches développées à Sherbrooke pourraient, à terme, mener à des systèmes complets fabriqués avec une seule technologie les rendant robustes et faciles à produire.

Plusieurs avenues de recherche peuvent découler des travaux présentés dans cette thèse. D'abord, une poursuite directe du projet peut être envisagée. Le procédé Ti/TiO₂/TiN/Ti, ayant maintenant fait ses preuves au moins à températures cryogéniques, peut être utilisé pour fabriquer les QCA conçus ici. Ceux-ci peuvent même être davantage miniaturisés avec un accès à des appareils de lithographie plus performants. La démonstration cryogénique, mais à des températures supérieures au Kelvin, permettraient de montrer le potentiel de la méthode et d'étudier plus en détail comment ces systèmes se comportent à températures plus élevées. Reproduire les résultats les plus importants du groupe de Notre-Dame avec la technologie nanodamascène permettrait de valider leurs résultats et de pousser la complexité du circuit plus loin en ajoutant plusieurs triplets d'îlots en série entre les entrées et les détecteurs afin de montrer un réel « fil binaire ». Ces recherches permettraient aussi de développer l'expertise de caractérisation et de fabrication de ce type de dispositifs ainsi que les équipements, systèmes de mesure et méthodes d'analyse nécessaires à ces caractérisations. Un débouché intéressant peut être de travailler au développement de systèmes automatisés de mesure et d'analyse des données et des caractéristiques des circuits. À cet

effet, les méthodes de mesure à faible bruit et de compensation des couplages parasites aux signaux d'entrée pourraient être visées dès le départ.

Évidemment, vu les dimensions relâchées utilisées pour les dispositifs montrés au chapitre 7, une autre avenue de recherche peut consister à réduire ces dimensions en poussant les étapes de lithographie des tranchées et de l'îlot ainsi que la planarisation CMP. La largeur et la profondeur des tranchées peuvent aussi être réduites par une approche de dépôt par couche atomique (ALD) qui permet de créer l'oxyde des barrières tunnel, mais aussi de remplir partiellement les tranchées réduisant d'autant leur taille. Comme suggéré par C. Dubuc, le développement de couches d'arrêt permettant un meilleur contrôle de la planarisation CMP est aussi une avenue à développer afin d'optimiser le procédé de fabrication. Sans chercher à réaliser un QCA, ces différentes avenues d'améliorations du procédé nanodamascène doivent permettre de reproduire les résultats de C. Dubuc, c'est-à-dire des SET fonctionnant à température ambiante, avec en plus un procédé amélioré par une grille latérale individuelle et des procédés industriels.

Finalement, la suite logique à ces deux avenues serait de procéder au transfert de ces procédés sur des puces CMOS réelles. Lorsque les procédés sont bien démontrés et validés, l'intégration dans un procédé industriel en première ligne (FEOL) ou en fin de ligne (BEOL) permet d'étudier plus en détail la cohabitation des technologies monoélectroniques et CMOS. La sensibilité aux charges environnantes des premiers les rend nécessairement vulnérables à la présence des derniers et l'étude de cette cohabitation permettra de déterminer les conditions dans lesquelles ces deux technologies pourront être intégrées ensemble. Dans les procédés de fin de ligne, le substrat peut aussi devenir un problème puisque les matériaux isolants utilisés sont souvent poreux, ce qui peut rendre plus difficile la planarisation des dispositifs. En contrepartie, si les dispositifs sont intégrés dans les procédés de première ligne, les transistors et QCA doivent être capables de supporter toutes les étapes de procédé (chaleur, plasma, etc.) réalisées sur une puce après, ce qui est non trivial.

L'intérêt grandissant pour l'informatique quantique et en particulier pour les qubits de spin offre de nouvelles opportunités d'applications pour les dispositifs monoélectroniques. Une approche innovante de fabrication de qubit calquée sur le principe de QCA a été proposée récemment [Bayat *et al.*, 2015]. Dans cette approche, le QCA électrostatique pourrait servir d'interface entre le monde de l'informatique quantique et celui du classique.

Les travaux de cette thèse contribuent à faire avancer un peu plus le domaine des QCA, mais il reste beaucoup à faire. Pour reprendre les mots de C. S. Lent :

« The field is in its awkward adolescence. » [Anderson et Bhanja, 2014]

ANNEXE A

SIMULATEUR MIM

A.1 Caractéristiques du programme

L'interface développée (figure A.1) contient plusieurs caractéristiques facilitant la simulation et évitant de travailler dans le code ce qui permet d'éviter des erreurs.

- Possibilité d'entrer tous les paramètres importants de la simulation directement dans l'interface.
 - Géométrie de la jonction largeur (w_T), hauteur (t_{CMP}) et épaisseur de l'oxyde (t_{ox}).
 - Permittivité relative (ϵ_r), hauteur de barrière (ϕ_0) et masse effective (m^*).
 - Température (T) et tension maximale (V).
- Visualisation graphique de la forme de la jonction tunnel en prenant en compte ou non la force image. Visualisation graphique de la distribution de Fermi-Dirac pour chaque électrode directement sur la forme de la jonction.
- Visualisation linéaire ou semi-log de un ou plusieurs des résultats de la simulation pour le courant, la densité de courant et la résistance tunnel pour chacun des modèles intégrés :
 - Fowler-Nordheim, Schottky (thermoïonique), Tunnel,
 - Total = Tunnel + Schottky.
- Intégration de courbes expérimentales sous format Excel. La première ligne d'entête est affichée comme description des colonnes du fichier pour le repérage. Sélection possible des colonnes X et Y et de la feuille.
- Activation ou non de la force image, garder en mémoire jusqu'à 10 courbes dans le graphique.
- Exportation des données (dernières simulées) sous format Excel incluant une feuille avec la liste des paramètres de simulation, une feuille avec les formes de jonction idéales et non idéales dans les trois cas de tension possibles et une feuille avec les données de courant, densité et résistance.
- Possibilité lire les données du graphique directement ainsi que les fonctions zoom et déplacer (pan).

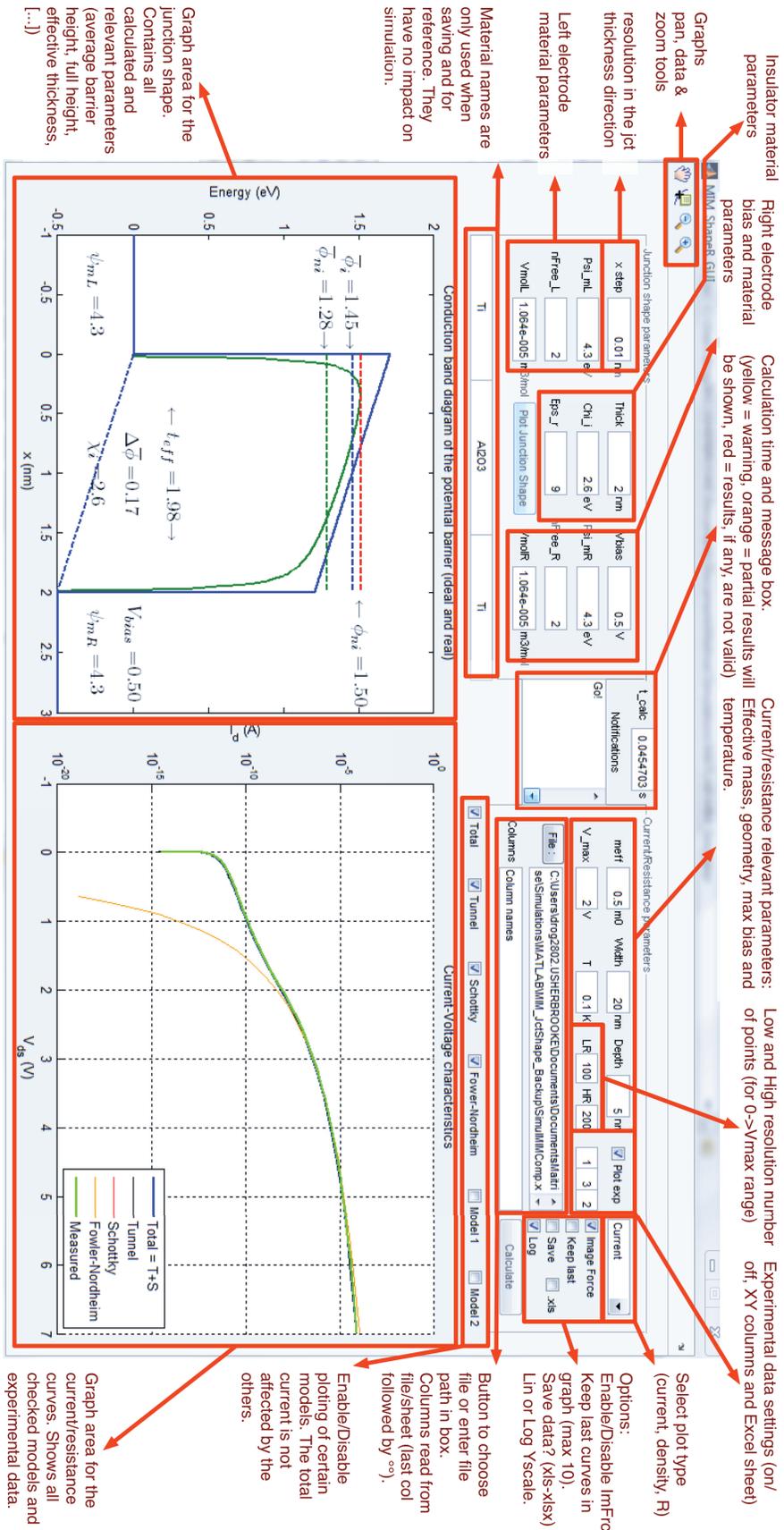


Figure A.1 Description de l'interface développée pour le modèle MIM.

A.2 Paramètres des simulations

A.2.1 Paramètres électriques des nouveaux matériaux

Les tableaux A.1 et A.2 reprennent les valeurs données dans les tableaux 6.1 et 6.2 en ajoutant toutes les références pertinentes.

Tableau A.1 Propriétés des métaux reprises du tableau 6.2 et référencées. ψ est le travail de sortie du métal.

Métaux	ψ (eV)	<i>Affinité à l'oxygène</i>	Références
Ti	4,33		[Michaelson, 1977]
Ni	5,15		[Michaelson, 1977]
Al	4,28		[Michaelson, 1977]
Cr	4,50		[Michaelson, 1977]
W	4,55		[Michaelson, 1977]
TiN	4,50		[Kar <i>et al.</i> , 2007]

Tableau A.2 Propriétés des isolants reprises du tableau 6.2 et référencées. χ est l'affinité électronique, E_G est le gap et ϵ_r est la constante diélectrique.

Paramètre (Unités)	χ (eV)	E_G (eV)	ϵ_r –	E_{BD} (MV/cm)	Références
TiO ₂	4,00	3,1	3,5	3,2	[Dubuc, 2008; Park, 2006]
NiO	1,80	3,6	11,9	8,3	[Irwin <i>et al.</i> , 2008; Rao et Smakula, 1965]
Al ₂ O ₃	2,58	8,8	9,0	6,0	[Huang <i>et al.</i> , 2006; Robertson, 2004]
Cr ₂ O ₃	3,76	3,0	9,2	–	[Cheng <i>et al.</i> , 1996; Eliasson, 2001; Scherer <i>et al.</i> , 1999; Song et Xiao, 2003; Zhai et Wang, 2006]
WO ₃	3,40	2,7	4,0	–	[Saadi, 2012; Sichel <i>et al.</i> , 1977; Walter <i>et al.</i> , 1991; Wang <i>et al.</i> , 2011]

A.2.2 Dégénération des barrières (régression)

Les tableaux A.3 et A.4 donnent les paramètres des régressions réalisées dans le chapitre 6 à l'aide du modèle (pour référence).

Tableau A.3 Paramètres du modèle ajusté pour la MIM de la figure 6.7a.

Param.	Jour 0	Jour 20	Jour 30	Jour 56	Jour 99
W (nm)	75	75	75	75	75
D (nm)	5,3	5,0	5,0	4,8	4,5
t_{ox} (nm)	2,6	3,0	3,3	3,7	5,0
ε_r	6	6	6	6	6
ϕ_0 (eV)	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4
m^*/m_0	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25

Tableau A.4 Paramètres du modèle ajusté pour la MIM de la figure 6.7c.

Param.	Jour 0	Jour 20	Jour 30	Jour 56	Jour 99
W (nm)	75	75	75	75	75
D (nm)	5,3	5,0	5,0	4,8	4,5
t_{ox} (nm)	2,7	2,9	2,93	2,95	3,3
ε_r	6	6	6	6	6
ϕ_0 (eV)	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8
m^*/m_0	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25

ANNEXE B

CONTRÔLE PAR SCRIPT DE SIMON

La configuration d'un circuit tel que celui de la figure 3.4 avec toutes les capacités parasites peut être difficile, longue et procéder manuellement apporte un grand risque d'erreur. La variation de paramètres dans la géométrie changeant la matrice de capacité nécessite de répéter la séquence complète de simulation et ajoute au risque d'erreur. Une méthode automatique pour contrôler SIMON a donc été développée. Puisque l'information complète sur l'arrangement du circuit ainsi que toutes les valeurs de capacité, résistance et voltage sont enregistrées dans un fichier texte, le développement de script modifiant ces données directement a été fait en utilisant Matlab.

B.1 Description du fichier « .set »

La liste suivante énumère les différents types de lignes retrouvés dans un fichier texte typique de SIMON (.set) et donne une description sommaire de son contenu et de son utilité.¹

1. Paramètres généraux de la simulation comme la température, le nombre d'évènements ou la résolution temporelle de la simulation.
TEMPERATURE= 4.000000e+00
2. Condensateurs de capacité C. Les deux nombres après l'identifiant du condensateur sont les noeuds auxquels il est connecté.
C1 1 2 C=2.216033e-018
3. Jonction tunnel de capacité C et de résistance tunnel R. SD indique si le courant de la jonction est pris en compte dans les diagrammes de stabilité.
J1 2 3 C=3.437467e-018 R="5.000e+07" NV1=-1 NV2=-1 SD=FALSE
4. Sources de tension V constante.
V1 1 0 V=0.000000e+00
5. Sources de tension linéaire par morceau (Piece-Wise-Linear - PWL). La série de valeurs est une alternance de temps et de tensions.
V5 10 0 PWL: 0.000000e+00 0.000000e+00 1.000000e+01 1.000000e+00
6. Voltmètre entre-deux les deux noeuds connectés.
.U1 1 0
7. Mesure de la charge du noeud connecté.
.Q1 2

¹ Les {} contenant le positionnement pour l'interface graphique ont été omises dans la liste.

8. Mesure du courant dans une branche du circuit avec orientation définie.

```
.I1 J3 ORIENTATION=POSITIVE
```
9. Diagramme de stabilité. Les sources contrôlées dans les axes X et Y sont indiqués avec les valeurs minimale, maximale et le nombre de points. Le nombre d'évènements par point est le dernier nombre.

```
.SD1 CONTROL=V3 0.000e+00 1.000e+00 50 CONTROL=V1 0.000e+00  
1.000e+00 50 10
```
10. Nœud du circuit (conducteurs). Une charge de base Q peut y être ajoutée.

```
N 1 Q=0.000000e+00 VOLATILE=ON MATERIAL: METAL EC=0.000000e+00  
EV=0.000000e+00
```
11. Nœud de la masse.

```
Z 0
```
12. Informations sur le nœud de la masse.

```
ZERO_NODE_INFO MATERIAL: METAL EC=0.000000e+00 EV=0.000000e+00
```
13. Ligne de description des éléments de texte ajouté au schéma électrique.

```
T "C1"
```

Chacune de ces lignes est répétée et numérotée en fonction du nombre respectif d'éléments d'un type donné dans le circuit.

B.2 Description des scripts de simulation

Les scripts développés permettent de modifier les valeurs importantes pour chacune des lignes nécessaires du fichier « .set ». La séquence globale de simulation est décrite à la figure B.1. Les boîtes en jaune sont les scripts développés. « Capamat2SIMON.m » lit la matrice de capacité enregistrée au préalable dans un fichier texte à l'aide de la fonction dédiée de Comsol, symétrise la matrice puis modifie le fichier « .set » pour y intégrer les nouvelles valeurs de capacités.

« Config2SIMON.m » est le code central permettant de configurer le circuit pour les simulations. Ce code offre d'abord la possibilité de choisir la simulation à faire par un menu interactif et configure ensuite toutes les sources du circuit pour avoir les bonnes tensions ou bonnes variations de tension, sélectionne les bonnes jonctions tunnel à utiliser pour les diagrammes de stabilité le cas échéant puis modifie le fichier « .set ». Les paramètres utilisés (typiques) sont donnés pour chaque cas dans le diagramme de flux de la figure B.2. Ces paramètres peuvent être adaptés au besoin si les résultats obtenus ne sont pas satisfaisants ou s'ils ne montrent pas les courbes voulues. Par exemple, les plages de voltages pourraient être trop petites dans certains cas pour voir complètement les hexagones de QCA et cela dépend de la matrice de capacité.

Une fois les configurations faites, le fichier « .set » peut être chargé dans le logiciel SIMON et simplement exécuté. Il suffit d'exécuter la simulation stationnaire (*Stationary Simulation*) ou la simulation de stabilité (*Stability Simulation*) dépendant de la configuration

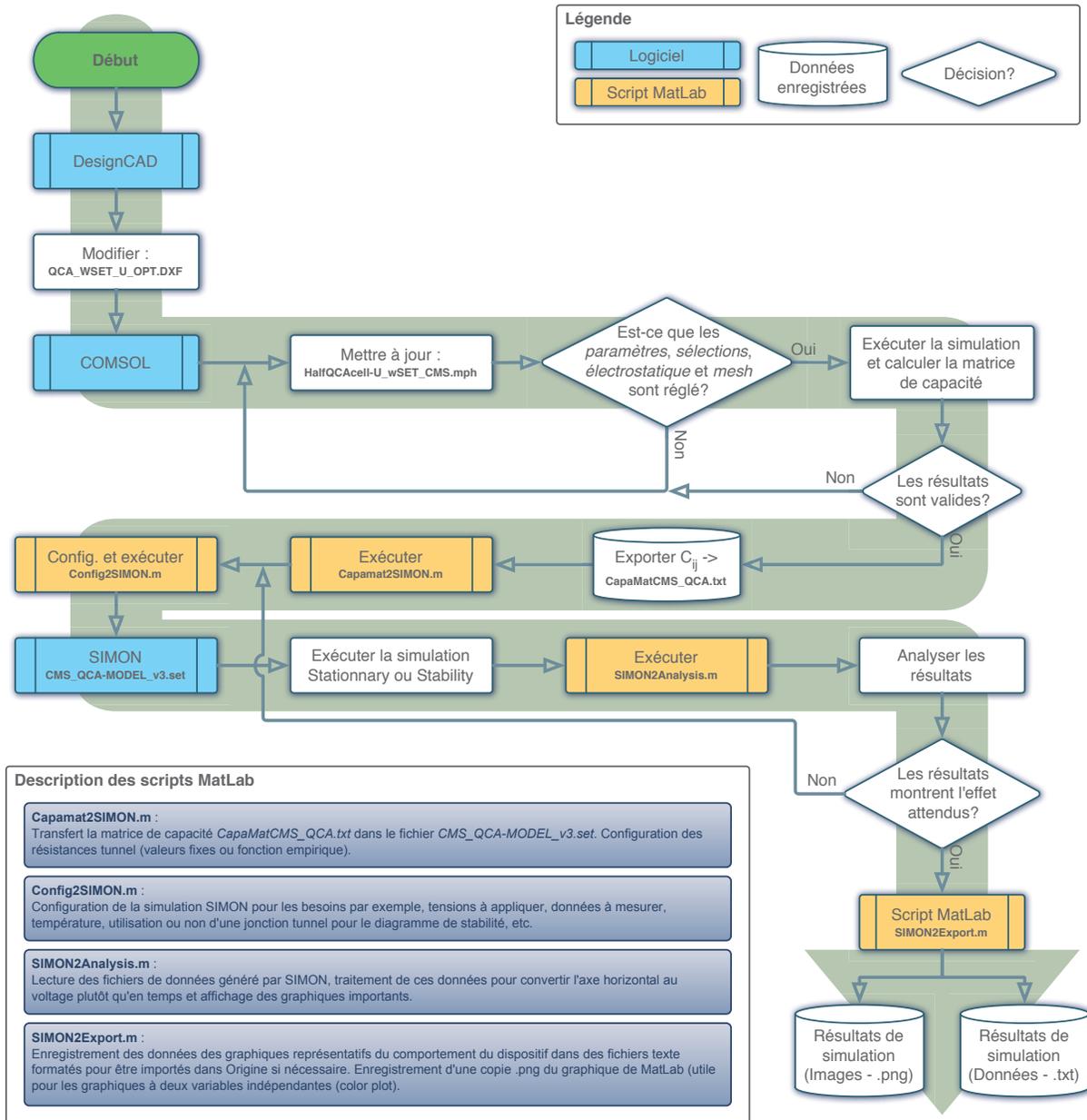


Figure B.1 Séquence globale de simulation pour une demi-cellule QCA avec SET de lecture, du dessin de CAD à l'opération du dispositif.

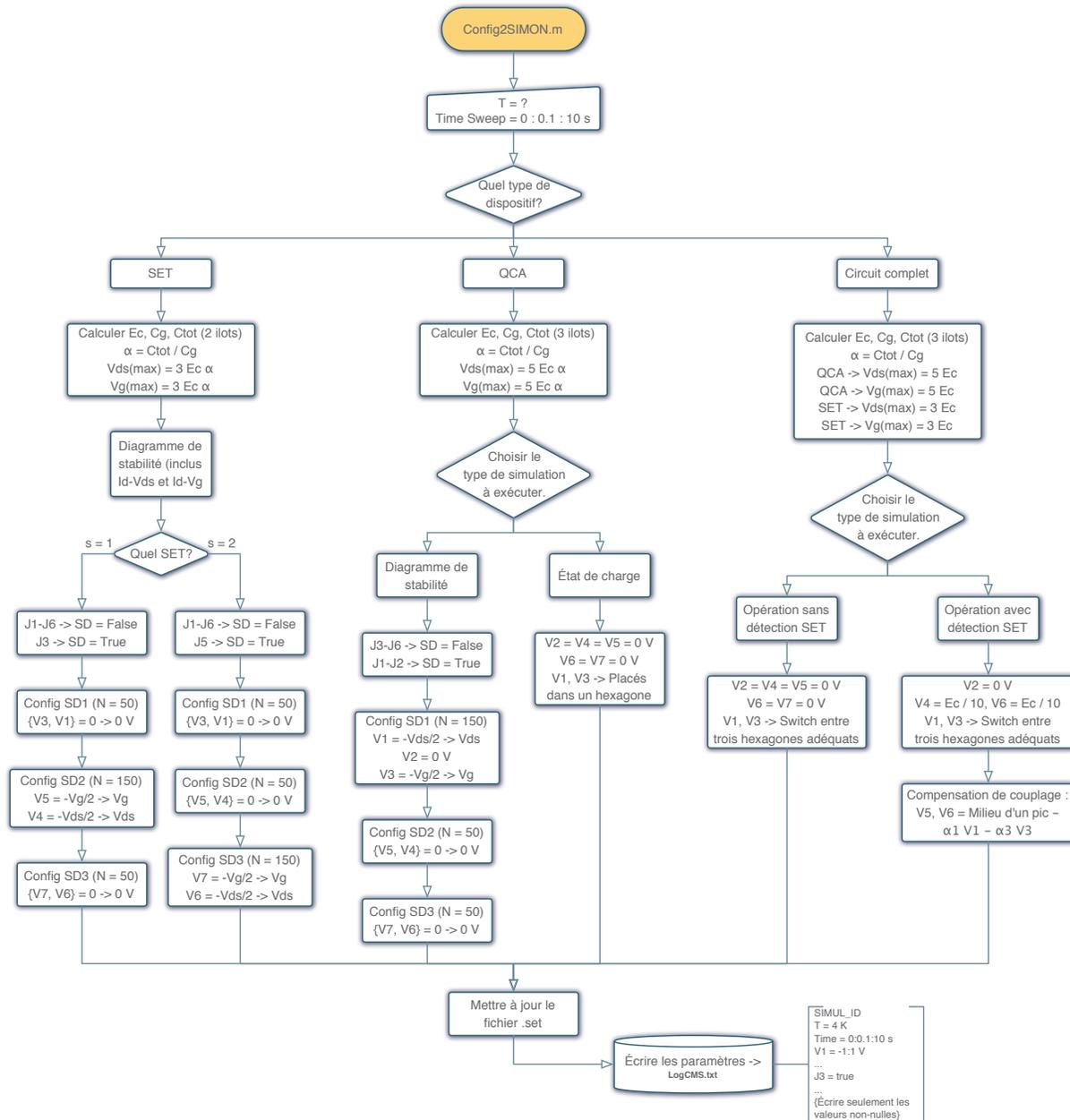


Figure B.2 Flux de données et paramètres pour chacune des configurations programmées de la demi-cellule QCA.

sélectionnée. Lorsque la simulation est complétée, le script « SIMON2Analysis.m » est exécuté. Ce code lit les données produites par SIMON, les traite puis trace les graphiques dans Matlab de façon à pouvoir les visualiser. Matlab permet plus de flexibilité que SIMON dans la visualisation des données et permet aussi de tracer des courbes Id-Vds et d'y faire correspondre les bons axes plutôt que l'axe du temps. Les courbes généralement tracées pour chacune des configurations simulées sont données dans le diagramme de la figure B.3.

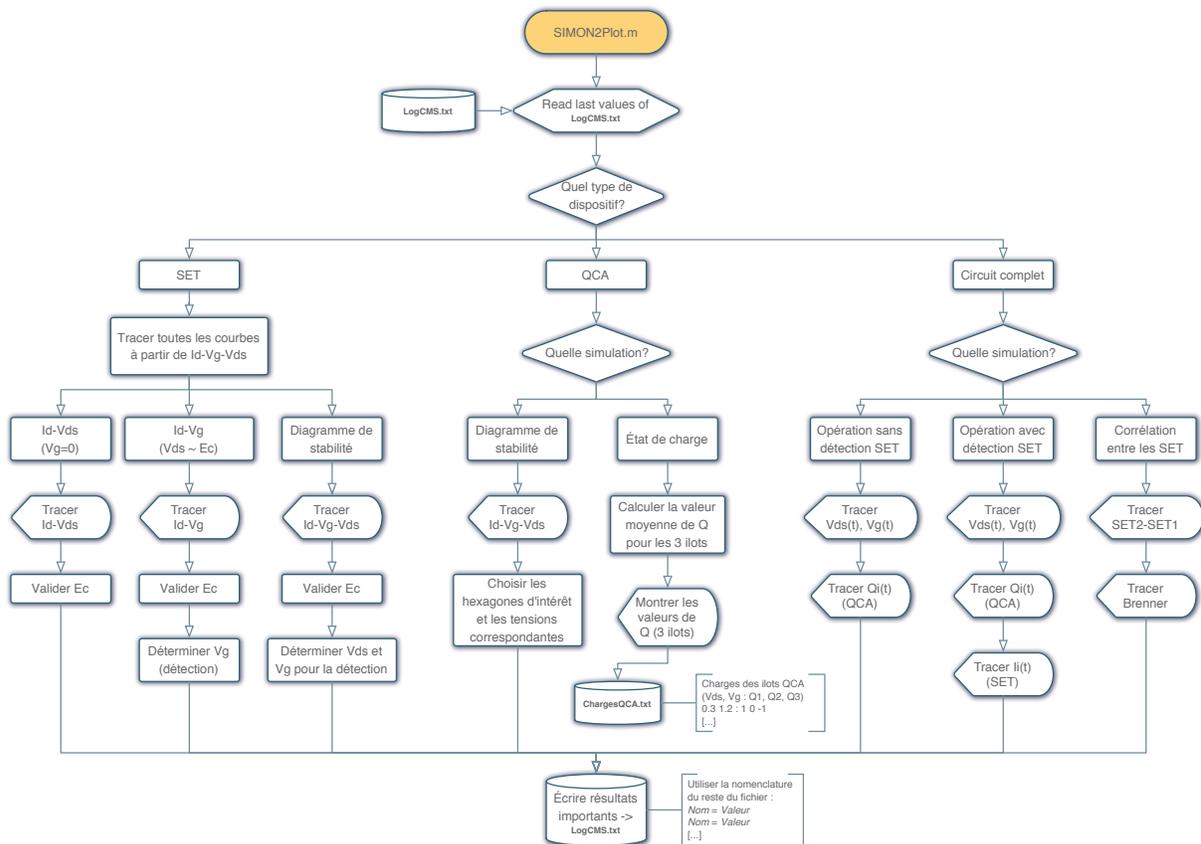


Figure B.3 Flux de données, paramètres et courbes à tracer pour chacune des configurations simulées.

Lorsque toutes les simulations sont terminées et donnent des résultats intéressants ou doivent être enregistrées, « SIMON2Export.m » permet d'enregistrer une image de chacun des graphiques produits à chacune des étapes ainsi que la structure complète des données. Le format des données est le format « .mat » qui est un format de variable de Matlab. De cette façon, le script « LoadData.m » permet de recharger des données enregistrées et de reproduire les graphiques au besoin.

Chacun de ces codes est aussi configuré pour écrire les données importantes modifiées à chaque fois dans un fichier texte (« Log_AAAA-MM-JJ.txt ») permettant le suivi des simulations. Cela permet de noter des commentaires à chaque étape du processus complexe de simulation et de pouvoir remonter aux paramètres utilisés pour chacune des simulations.

Ce flux de simulation avec le code qu'il contient peut être adapté à toute simulation utilisant SIMON et en particulier lorsque les circuits générés sont complexes. L'intégration automatique de la matrice de capacité, des résistances tunnel et des configurations de sources permet de fixer une méthode de simulation puis de l'utiliser de façon systématique par la suite. Ceci augmente et facilite la comparabilité des données générées par le modèle et standardise leur enregistrement pour donner une méthode globalement efficace. La possibilité de simuler des tensions symétriques en diagrammes de stabilité, par exemple $V_D = V_S = -0,5$ V est l'un des éléments manquants de ce simulateur et qui ne se corrige pas avec le code Matlab. Cependant, il est évident que SIMON est un logiciel âgé et une refonte complète de ce simulateur en y intégrant les possibilités offertes par le code développé ici pourrait grandement améliorer l'efficacité et l'intérêt de cette méthode.

ANNEXE C

DÉVELOPPEMENT EN FABRICATION ET CARACTÉRISATION

Dans cette annexe, le détail des développements réalisés par plusieurs membres du groupe dont moi-même est donné. Les différentes générations de masques de photolithographie et EBL ayant mené à la version UV1v4 décrite au chapitre 4 sont détaillées et les résultats importants permettant d’optimiser les dessins sont aussi donnés. Le détail du procédé de fabrication de la passivation et des plots de contact est ensuite décrit.

C.1 Générations antérieures de masques

Depuis les travaux de [Dubuc, 2008], plusieurs personnes du groupe ([Guilmain, 2013; Harvey-Collard, 2013; Morissette, 2010; Richard, 2013]) ont développé différentes versions d’un masque de photolithographie permettant la fabrication de dispositifs monoélectroniques. Ces masques servent pour les contacts macroscopiques (mesures sous pointe et micro-soudure) et les amènés vers des régions plus petites de l’espace où les dispositifs nanométriques sont fabriqués. Ces photomasques comprennent aussi des marques d’alignement permettant de bien positionner les différentes lithographies par rapport à ce masque.

C.1.1 Cellule SET - Masque UV1v2

Plusieurs dessins de cellule et de masques ont été réalisés et optimisés à chaque étape pour aboutir à la version UV1v2 d’une cellule optimisée pour la fabrication de SET, développée par M. Guilmain et présentée à la figure C.1. Cette version, développée principalement pour la fabrication de nanofils, de jonctions MIM et de SET, intègre plusieurs éléments importants pour l’uniformité du polissage CMP.¹ En effet, le polissage CMP est dépendant de la forme et de la densité des motifs et donc le photo-masque doit être conçu en fonction de ces besoins.

Plusieurs ont [Guilmain, 2013; Richard, 2013] jusqu’à maintenant démontré que le dessin de cette cellule fonctionne bien pour la fabrication de dispositifs SET. En particulier, le polissage se produit de façon uniforme dans toutes les parties de la cellule, des plots jusqu’au centre où sont placés les dispositifs. Ceci grâce à une densité de surface des motifs de 50 %, autant dans les plots que dans les amenées et près des dispositifs. On peut voir que les seuls endroits dérogeant à cette règle sont les zones d’électrolithographie (zones d’EBL) où de l’espace est réservé aux étapes subséquentes de lithographie. Une largeur des

¹ Voir section 2.10 pour les détails sur le fonctionnement du CMP et les effets à prévoir dans la fabrication concernant cette étape clé et la section 4.5 pour les résultats de développement reliés au CMP.

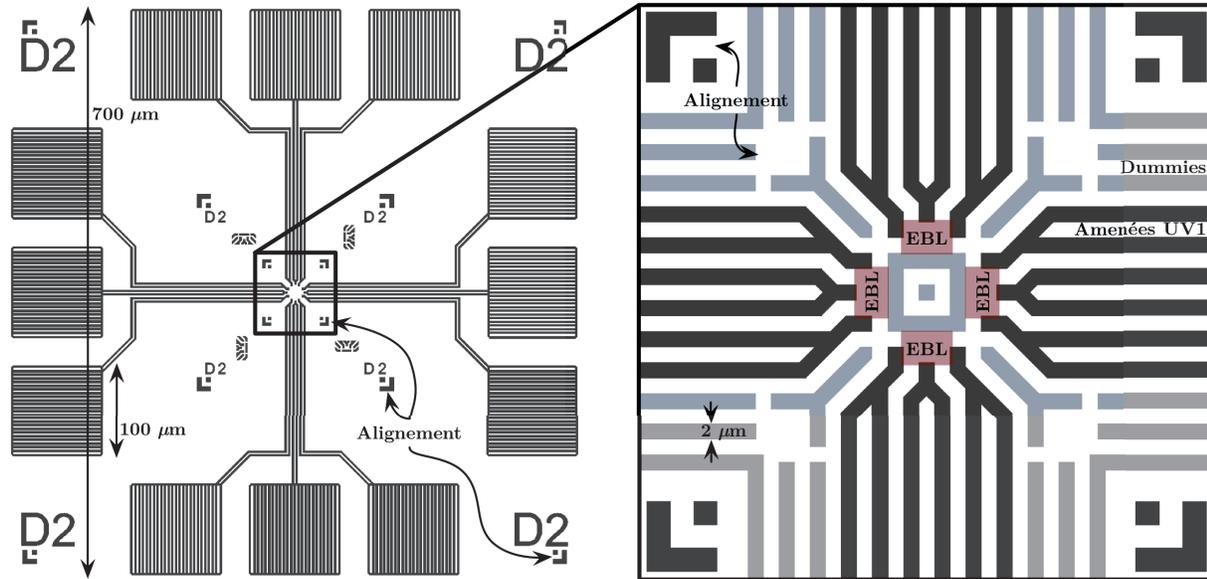


Figure C.1 Cellule SET UV1v2 pour la fabrication de nanofils, MIM et SET. À gauche, la cellule complète avec plots de contact, amenées (foncé), marques d'alignement et sans dummies par souci de clarté. À droite, agrandissement du centre de la cellule montrant les dummies (pale) et les zones d'EBL.

motifs de $2 \mu\text{m}$ est privilégiée parce que c'est la plus petite taille de motifs réalisable de façon reproductible avec les équipements de photolithographie disponible au laboratoire. Les plots de $100 \mu\text{m}$ de coté sont donc en fait des réseaux de lignes de $2 \mu\text{m}$ espacées de $2 \mu\text{m}$, tout comme les chemins d'amenées et les structures sacrificielles (dummies).

Comme le montre la figure C.1, la cellule est composée de 4 zones centrales ayant 3 contacts chacun afin d'y fabriquer un SET. Il y a aussi 4 zones vides de motif pour y écrire les marques d'alignement lors de l'EBL. L'inconvénient de ce dessin est que pour tout dispositif ayant plus de 3 contacts, les amenées ne sont pas disposées de façon optimale et sont surtout trop loin. Il est donc nécessaire d'adapter le concept pour augmenter le nombre de contacts disponible dans chaque zone d'EBL.

C.1.2 Cellule universelle UV1v3

Deux dessins de cellules *universelles* ont été testés sur deux générations de masques différentes. Le nom *universelle* est utilisé ici parce que le nombre de contacts est plus grand, permettant ainsi la fabrication de plusieurs types de dispositifs en ayant toujours un polissage similaire puisque le reste de la cellule ne change pas, une façon de standardiser le dessin UV1. Le premier dessin, montré à la figure C.2 comporte plus de contact au total : 20 au lieu des 12 de la cellule SET. Aussi, la partie centrale est divisée en trois zones de 6, 5 et 9 contacts avec suffisamment d'espace pour y placer tous les motifs nanométriques nécessaires. Les espaces à 5 et 6 contacts permettent de placer les dispositifs intermédiaires comme les nanofils, MIM ou SET avec ou sans boîte à électron. L'espace à 9 contacts est dédié à l'intégration de la demi-cellule QCA qui comporte 3 électrodes pour le contrôle de

l'état et 2 fois 3 autres électrodes pour accommoder les deux SET de lecture de l'état de la cellule. La taille plus faible ($75 \mu\text{m}$) et la position du cinquième plot sur chacun des côtés de la cellule sont dues à un manque d'espace puisque les cellules étaient restreintes à une taille maximum de $700 \mu\text{m}$. Cette limitation a été utilisée pour avoir un réseau régulier de cellules et la taille de $700 \mu\text{m}$ est basée sur la taille originale de la cellule développée par [Guilmain, 2013; Morissette, 2010].

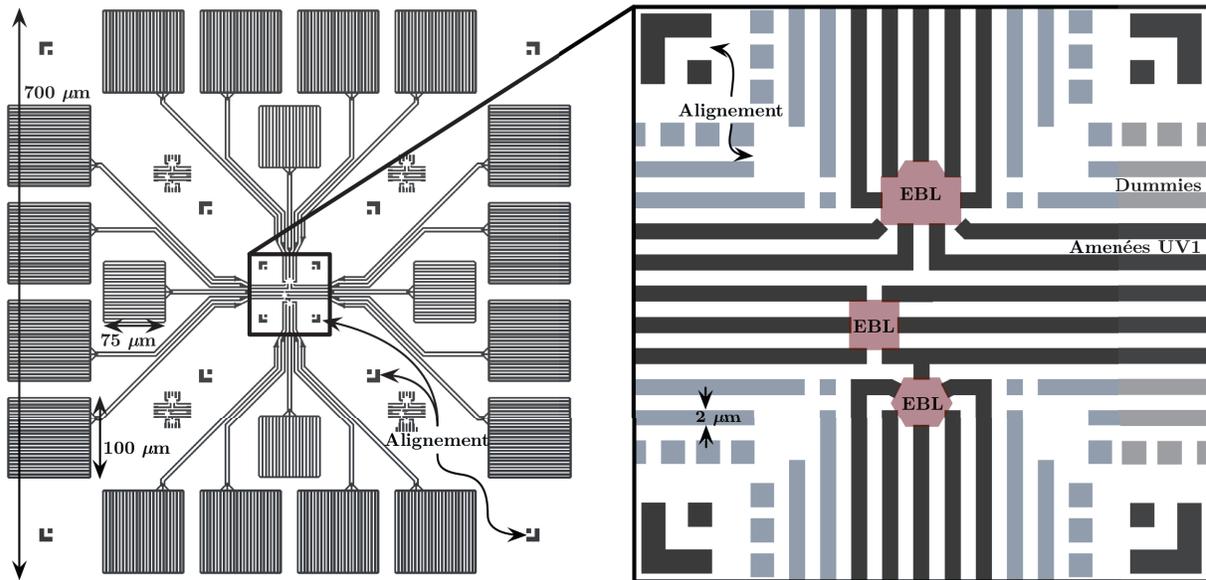


Figure C.2 Cellule universelle version 1 (UV1v3) pour la fabrication de tout dispositif à 9 contacts ou moins. À gauche, la cellule complète avec les aménagements (foncé) reliant les 20 plots de contact au centre de la cellule. À droite, l'agrandissement du centre de la cellule avec les espaces pour l'alignement de l'EBL2, les dummies (pale) et les zones d'EBL1 indiquées en rouge.

Avec l'utilisation de cette cellule, plusieurs contraintes supplémentaires ont été mises en évidence. La première est que la taille des zones d'EBL est beaucoup trop grande. On peut en effet voir dans l'image SEM de la figure C.3a que les endroits où la densité de structures est de 50 %, entre les aménagements, sont bien poli et dégagés contrairement au centre de la zone d'EBL où la densité est inférieure à 50 %. Cette zone, n'ayant pas de tranchées faites à l'UV1, est plus haute que son voisinage. Cette inégalité cause un amincissement des aménagements plus important que la zone d'EBL ce qui peut causer des coupures au niveau des jonctions entre les motifs UV ($40\text{-}60 \text{ nm}$) et EBL (20 nm). On peut voir cet effet dans l'image SEM de la figure C.3b, où le contact entre motifs nano et micrométrique est coupé lorsque le polissage atteint le point où le substrat de SiO_2 est révélé (t_0). Les parties (c) à (e) de la figure montre schématiquement le polissage de ce type de topographie. On peut voir que le bord des motifs UV1, indiqué par la flèche, est aminci plus rapidement que le reste dû à l'érosion du coin. En (e), il ne reste plus de métal dans cette région du motif et le contact électrique est donc coupé.

La taille et le positionnement des plots de contact dans cette première version de la cellule universelle ont aussi causé des difficultés. Lors de la caractérisation des dispositifs fabriqués

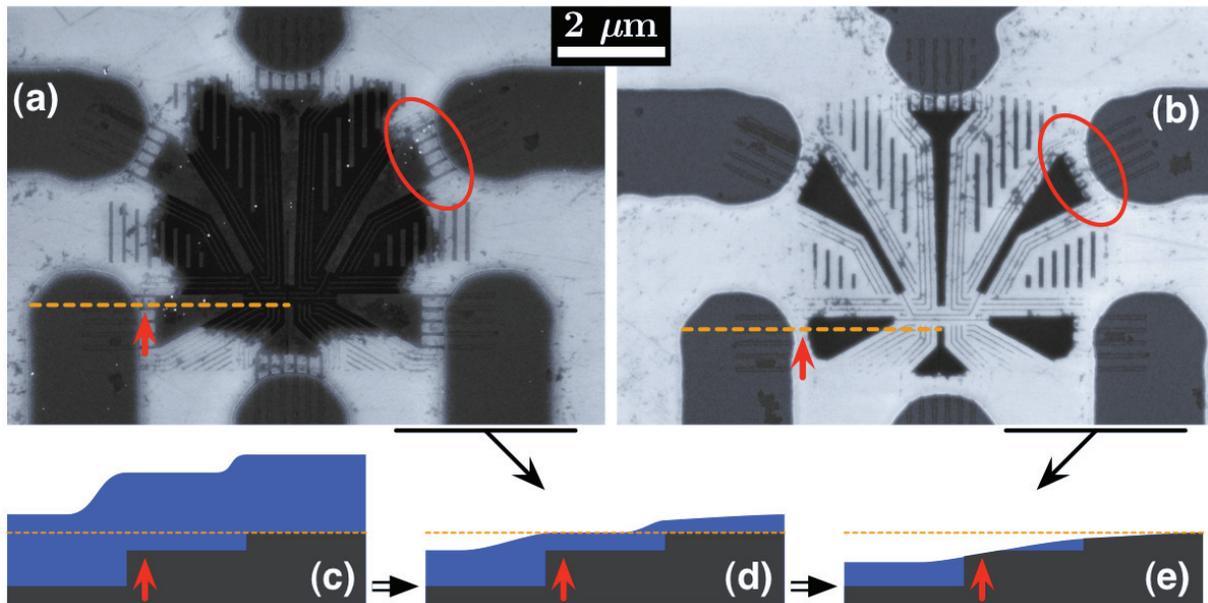


Figure C.3 Effet de la taille de la zone d'EBL dans la cellule universelle UV1v3. (a) Image SEM avant t_0 et (b) tout juste après t_0 en. Schéma montrant les marches de 60 et 20 nm (c) avant le polissage, (d) avant t_0 et (e) juste après t_0 .

dans cette cellule, l'accès aux cinquième pad est plus difficile et plus délicat puisqu'il est à l'intérieur de la cellule (voir figure C.2). Il est aussi entouré de chemins d'amenée des plots adjacents, ce qui requiert de ne pas poser de pointe de micromanipulateur en dehors du plot pour ne pas couper ces connexions. Dans le cas de caractérisations plus poussées, à très basse température par exemple, il peut être nécessaire de faire de la micro-soudure pour connecter ces plots au système de câblage de cryostat. À ce moment, il est encore plus difficile d'éviter de briser une connexion adjacente ou de ne pas créer de court-circuit entre deux plots puisque les soudures font entre $50 \mu\text{m}$ et $80 \mu\text{m}$ de diamètre.

C.1.3 Dessin EBL antérieur (EBLv2 et EBLv3)

La première version a été développée pour la cellule SET et le dessin est donné à la figure C.4 dans la partie du haut. La légende de couleurs est indiquée au centre de la figure. Dans l'agrandissement (a), on voit le QCA intégrant les dummies et le motif de l'EBL2 qui crée deux jonctions dans la ligne d'îlot du QCA et deux îlots supplémentaires dans les SET en dessous. En (b), on voit un nanofil avec l'électrode de droite et celle du centre puis du centre à gauche, une MIM.

La première chose à remarquer sur ce dessin est que 6 des 9 contacts nécessaires pour la demi-cellule QCA sont dans une zone d'EBL différente de celle où sont les îlots et les SET. Ceci implique des interconnexions longue et très sensible à la différence de vitesse de polissage entre les zones d'EBL à densité UV1 plus faible et les coins. Ce dessin a tout de même servi aux premiers essais pendant le développement de la cellule universelle. La partie du bas de la figure C.4 montre la cellule universelle dans sa première phase (UV1v3)

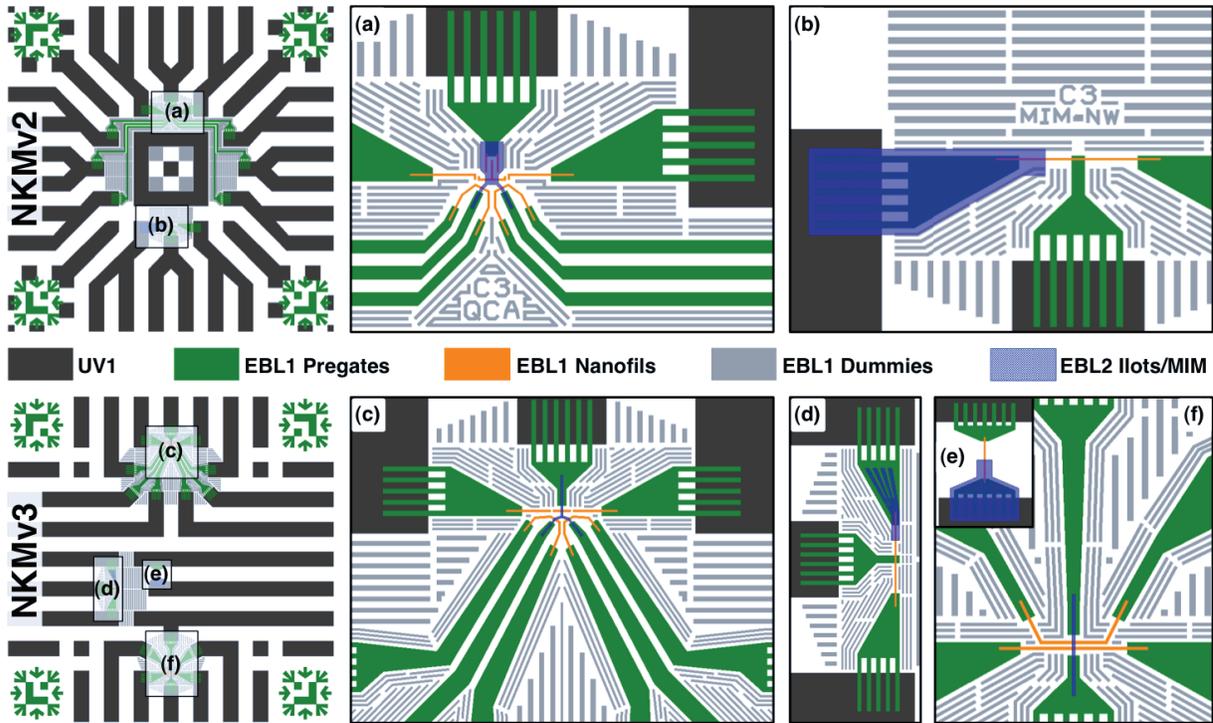


Figure C.4 Motifs EBL pour la cellule SET (UV1v2) en haut et la cellule universelle version 1 (UV1v3) en bas. UV1v2 : (a) QCA, (b) MIM et nanofil. UV1v3 : (c) QCA, (d) nanofil et MIM, (e) MIM et (f) deux SET juxtaposés pour détection de charge. Légende des couleurs au centre.

avec les motifs EBL. La zone d'EBL du centre (d-e) contient un NW et deux MIM, dont l'une est à droite entre les deux amenées et l'autre partage l'électrode centrale de gauche avec le NW. La zone du bas, elle, contient deux SET côte à côte dont l'un doit servir de boîte à électron et l'autre de détecteur de charge. Cette disposition a été développée et optimisée par [Richard, 2013] et reprise ici pour permettre la validation de la détection de charge. Finalement, la zone du haut, avec 9 contacts, contient la demi-cellule QCA ayant un dessin similaire à celle de la cellule SET, mais avec des connexions adaptées à la nouvelle disposition de la cellule.

Dans les deux dessins, les dummies en gris pâle ont une densité proche de 50 % pour accélérer le polissage dans ces zones d'EBL assez grandes. Les résultats de polissage de la version UV1v3 ont été discutés dans la section C.1.2 et justifient le passage à la version UV1v4 qui suit.

C.2 Procédé de Photolithographie UV2

Tel que démontré par [Guilmain *et al.*, 2013], les dispositifs de titane sont sensibles à l'oxydation avec l'air et doivent donc être passivés pour limiter leur dégradation. Ils ont cependant seulement démontré cet effet sur des nanofils et donc dans le cadre de la présente étude, la passivation sera aussi utilisée pour vérifier l'impact de l'exposition à l'air de

certaines des dispositifs avec jonctions tunnel (voir chapitre 6). La passivation est faite par un dépôt de nitrure de silicium (Si_3N_4) par PECVD d'une épaisseur de 100 nm. Une photolithographie (UV2) utilisant le masque montré à la figure C.5a suit ensuite pour définir des plots de contact. Le schéma de la figure C.5c montre les étapes de ce procédé.

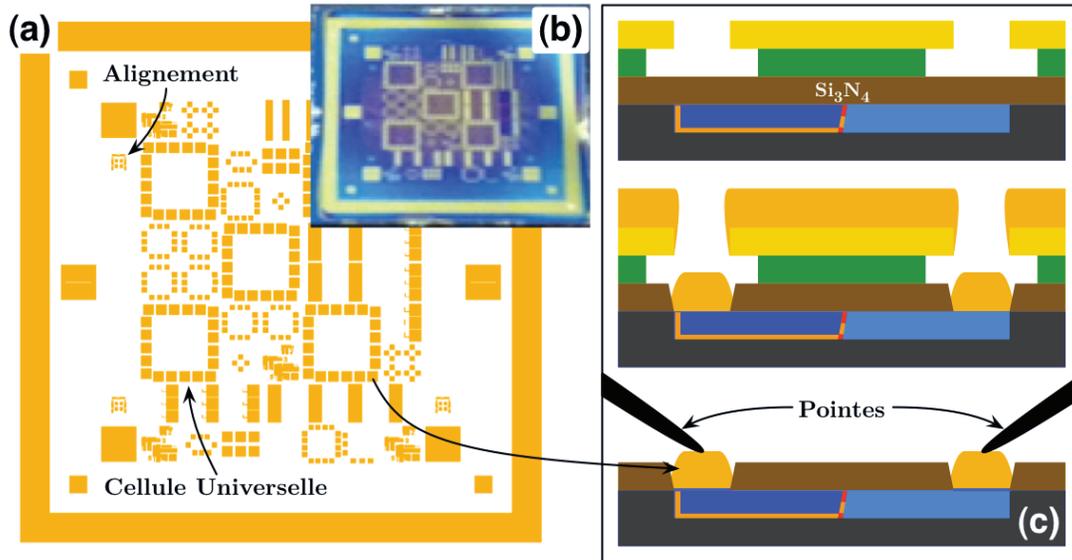


Figure C.5 (a) Masque de plots de contacts pour UV1v4 et (b) échantillon terminé avec passivation Si_3N_4 et plots d'or. La cellule universelle est indiquée ainsi que les marques d'alignement pour ce niveau de masque. À droite, le schéma du procédé de passivation et soulèvement des pads.

Comme pour le soulèvement de l'EBL2, une première couche de résine LOR3A, non sensible à la lumière UV, est étalée puis la deuxième couche, de la Shipley S1805 est étalée par dessus. L'exposition à la lumière UV permet ensuite de transférer le motif du masque dans la première couche de résine sensible et le développement subséquent permet de le révéler. Le temps de développement est ajusté de sorte à surdévelopper la couche de LOR3A pour créer l'effet casquette.

Ensuite, la couche de nitrure de silicium est gravée par plasma ICP afin d'exposer les plots de contact en titane. Cette étape étant directionnelle, l'effet casquette n'est pas endommagé et on peut donc procéder directement à la métallisation des contacts par le dépôt d'une couche d'accroche de titane de 15 nm puis 150 nm d'or. Le choix de l'or est dû à son inertie chimique et à sa ductilité qui permet un très bon contact avec des pointes de caractérisation électrique. En effet, la résistance typique de contact entre deux pointes déposées sur un même plot strié en titane se situe entre 1 k Ω et 10 k Ω . Avec des plots en or déposés après passivation d'un échantillon, la résistance de contact passe à des valeurs entre 10 Ω et 100 Ω , une réduction d'un facteur 100. De plus, la reproductibilité des mesures en est aussi améliorée puisque le contact sur plot strié est généralement difficile à préserver et est fragile aux vibrations, ce qui peut causer du bruit dans les mesures.

La contrepartie de cette passivation, c'est qu'elle ne peut être réalisée qu'après la dernière étape de polissage. Il est évident que même si les plots sont déposés sans la passivation, le

polissage de la cellule serait grandement affecté. L'uniformité de la cellule serait perdue par l'ajout de 150 nm d'or en plus de s'ajouter aux différents matériaux à polir rendant la tâche plus complexe. La procédure à suivre est donc de terminer le polissage en s'assurant que les dispositifs ont les caractéristiques électriques voulues et ensuite procéder à la passivation et au dépôt des plots de contact.

Lorsque les contacts sont terminés, la caractérisation électrique peut directement être faite à l'aide d'une station sous pointes à température ambiante. Dans le cas de dispositifs ne permettant pas une opération à température ambiante, comme c'est le cas ici, des mesures à basse température sont nécessaires pour valider les caractéristiques des dispositifs fabriqués. Pour ce faire, l'échantillon doit être fixé à un support d'échantillon connecté ensuite à travers le cryostat aux appareils de mesure. Ceci est réalisé ici à l'aide d'un support d'échantillon à 48 contacts et adapté pour les deux cryostats décrits au début du chapitre. L'échantillon de 1 cm^2 est collé au support montré à la figure C.6 avec de la laque d'argent conductrice d'électricité. Cette laque est aussi connectée à l'une des pins de contact pour donner un accès au substrat (① dans la figure C.6). Les micro-soudures sont réalisées en mode *wedge* où le fil d'aluminium de $25 \mu\text{m}$ de diamètre est écrasé sur la surface à l'aide d'une pointe sur laquelle une force et des ultrasons sont appliqués. Une fois la soudure de tous les contacts, l'échantillon peut être installé dans le cryostat sur l'adaptateur approprié.

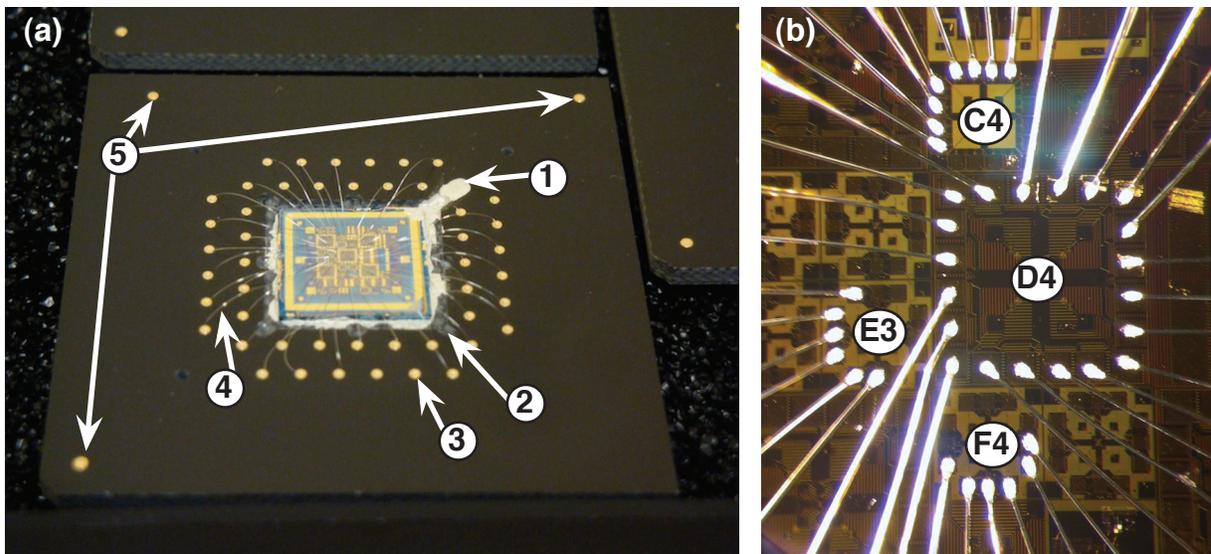


Figure C.6 (a) Photo du support d'échantillon à 48 contacts. (1) L'échantillon est collé avec de la laque d'argent qui joue le rôle d'adhésif et de conducteur reliant le substrat à l'un des contacts. (2) Creux acceptant l'échantillon, (3) pin de contact sur laquelle le fil d'Al (4) de $25 \mu\text{m}$ de diamètre est micro-soudé. (5) Pins d'alignement du support dans l'adaptateur. (b) Aggrandissement montrant les cellules utilisées et un exemple d'arrangement des connexions.

C.3 Développement de nouveaux matériaux

Une des avenues étudiées pour réduire la diffusion de l'oxygène est le changement du matériau du dépôt *blanket*. Puisque c'est le principal matériau attaqué lors du polissage CMP, il a un plus grand impact sur la facilité de réalisation du procédé complet. En effet, ici la vitesse de polissage du *blanket* par rapport au SiO_2 (sélectivité) change avec le matériau et dépend en plus de la solution de polissage utilisée (*slurry*). Le tableau 6.1 donne les vitesses de polissage de chacun des métaux de *blanket*, pour le substrat et pour les deux *slurry* importantes pour la suite des tests. Les solutions de polissage utilisées sont aussi indiquées puisque le polissage se fait avec une seule solution pour tous les matériaux de l'échantillon. Il est donc important de comparer les vitesses avec la même solution.

C.3.1 *Blanket* tungstène (W)

Le tungstène a été testé comme matériau de *blanket* pour sa dureté, sa grande résistance à l'oxydation et sa bonne conductivité. Ces caractéristiques en font un bon candidat pour résister à l'étape de polissage. La figure C.7a-c montre le premier problème rencontré dans son intégration au procédé de polissage. On peut voir par la topographie AFM (a) que la surface montre de gros grains d'orientation aléatoire et de hauteur variable. Cette granularité reste présente dans toute la couche, comme le montre l'image SEM de droite après CMP (b). Ici le problème causé par la taille des grains est que le polissage est différent d'une orientation de grain à l'autre ce qui peut occasionner des trous ou des discontinuités dans les tranchées, comme on peut voir dans la tranchée de nanofil présenté en (c). L'image SEM (b) montre aussi que toute la partie du motif comportant des tranchées nanométriques est disparue. Ceci est attribué à la différence de vitesse de polissage entre le W et le SiO_2 . L'abaissement plus rapide du SiO_2 augmente la pression de polissage sur le W et cet effet est plus grand sur les nanostructures de par leur petite taille. Celles-ci se polissent plus rapidement que les électrodes plus larges ou peuvent même s'arracher.

La différence de vitesse de polissage entre le substrat et le *blanket* cause aussi d'importantes inégalités de la surface. En effet, les deux topographies de la figure C.7d-e montre les creux de plus de 30 nm de profondeur se retrouvant aux bords des motifs UV. On voit aussi qu'entre les motifs UV, il reste plus de 5 nm de W alors qu'en (b), le titane dans la grille (EBL2) est complètement poli ainsi que l'îlot et les tranchées source et drain. Il est donc évident que le W ne peut être utilisé dans ces conditions pour remplacer le titane en *blanket*. Il faudrait plutôt développer une nouvelle recette de polissage en recherchant une sélectivité plus proche de 1 : 1 entre les matériaux du substrat (SiO_2), de l'EBL2 (Ti ou autre) et du *blanket* (W). Malgré plusieurs conditions de dépôts de W, différentes solutions de polissage et plusieurs séries de paramètres de polissage testés, cet objectif n'a pu être atteint et cette option a aussi été abandonnée pour la suite.

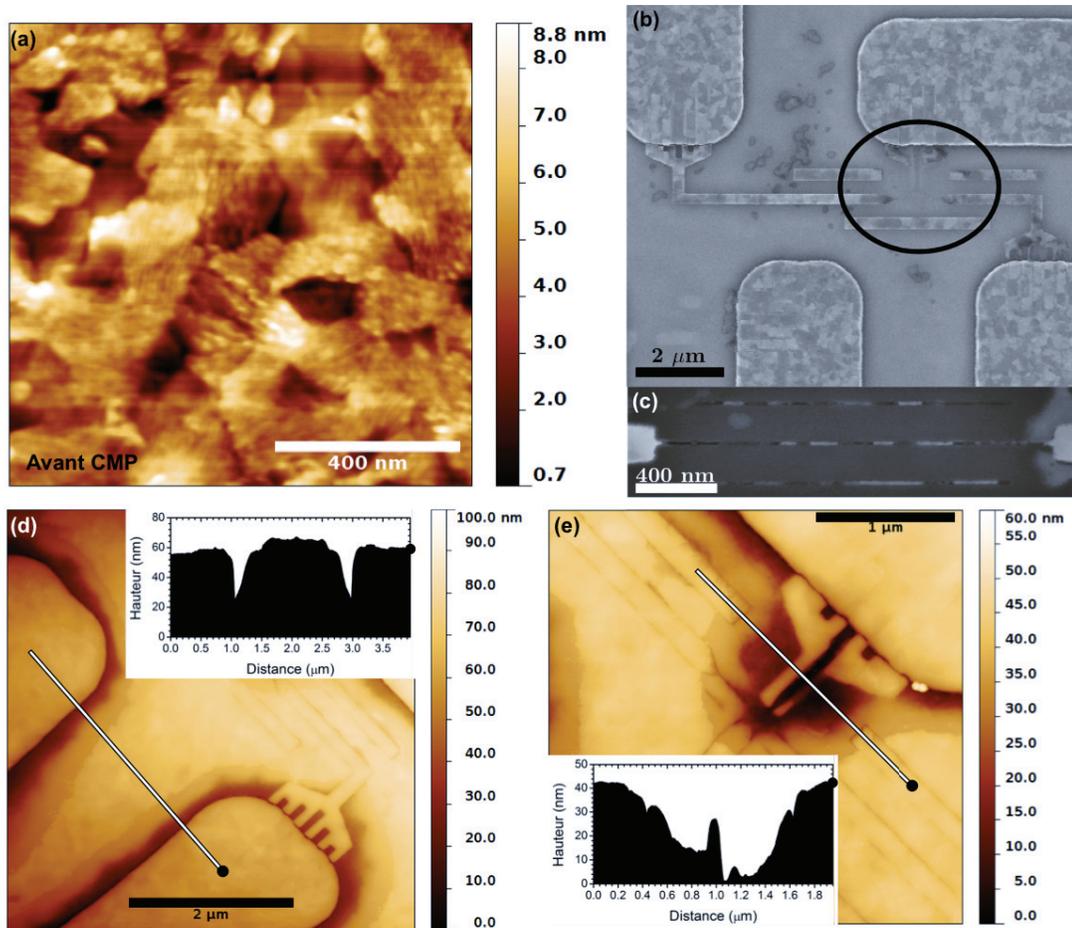


Figure C.7 (a) Topographie AFM de la surface d'un dépôt de 150 nm de W. (b) Image SEM d'un SET après CMP. La structure nanométrique est complètement disparue (encerclée). (c) Nanofil après polissage. (d) AFM du SET après CMP montrant les creux au bord des motifs UV et (e) montrant le surpolissage de l'îlot et des nanostructures près de la grille. Les profils respectifs (d-e) sont donnés en encart.

C.3.2 *Blanket* nitrure de titane (TiN)

Le TiN déposé par pulvérisation a aussi été testé puisqu'il est aussi beaucoup plus résistant à la diffusion de l'oxygène que le titane. Plusieurs essais ont été réalisés avec différentes recettes de dépôt. Cependant, plusieurs problèmes découverts sur l'utilisation de ce matériau en couche épaisse (> 80 nm) ont inhibé l'aboutissement du procédé.

Le premier problème est causé par la configuration de la machine Plasmionique qui est à l'envers des machines de dépôt habituelles. En effet, les cibles sont au-dessus des échantillons qui, eux, font face vers le haut. Cette configuration a été choisie lors de l'achat de la machine pour éviter que les fragments de matériaux se décrochant des sources ne créent de court-circuit entre anode et cathode, mais cela ajoute la possibilité que ces particules se déposent sur l'échantillon pendant le dépôt et soient donc encastrées dans la couche.

C'est ce qui se produit dans le cas du TiN qui se dépose avec une contrainte importante sur l'anode du magnétron. Lors de dépôt de plus de 80 nm sur l'échantillon, cette pièce du magnétron reçoit beaucoup plus de TiN qui se brise en fines particules, comme une couche épaisse de poussière. Une partie de cette poussière tombe sur l'échantillon et peut causer des problèmes au niveau des dispositifs.

Le deuxième problème dans l'utilisation du TiN en *blanket* est que son polissage est très rapide. En fait, il est beaucoup plus rapide que les autres matériaux en jeu et il est donc très difficile de contrôler l'arrêt du polissage à t_0 . En effet, les images SEM de la figure C.8 montrent la difficulté de contrôle de la vitesse du polissage. Les trois images du haut représentent l'état de la surface de deux échantillons juste après t_0 et celles du bas après un polissage supplémentaire de 10 s. Dans le cas de l'échantillon de gauche (a) et (b), on voit que le polissage au slurry optimisé (CX) est très non uniforme et semble s'enlever par morceau incohérent avec le motif présent. De plus, la cellule F2 n'est pas prête à la caractérisation alors que B6 est prête en haut et les motifs sont complètement disparus en bas. Une inégalité de cette envergure n'a jamais été observée avec le titane comme *blanket*. Dans le cas de l'échantillon de droite poli avec le *slurry* Allied, la situation est pire puisqu'en une seule étape de CMP de 10 s, tous les motifs sont disparus. Cela implique une vitesse de polissage encore plus grande et une marge de manœuvre inutilisable.

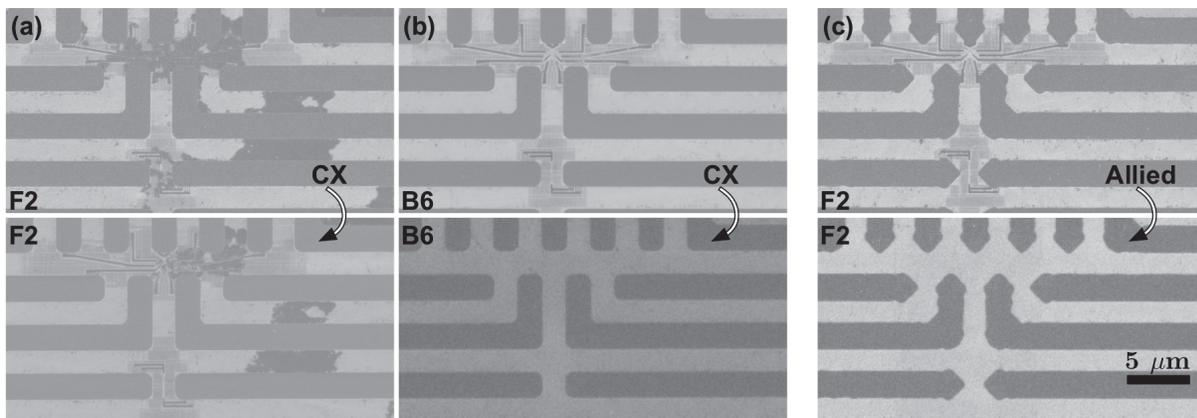


Figure C.8 État de la surface en cours de polissage CMP de *blanket* TiN. (a) Cellule F2 et (b) cellule B6 du même échantillon, polies avec *slurry* CX. (c) Cellule F2 polie avec *slurry* Allied. 10 s de polissage entre les images.

Dans le cas des deux matériaux testés pour remplacer le titane comme *blanket*, la conclusion est que nous n'avons pas les outils nécessaires à l'optimisation et au contrôle de ces matériaux en terme de CMP. La solution envisagée est donc de garder le titane qui a toutes les propriétés voulues pour un polissage contrôlé et une résistivité adéquate, mais de changer le matériau faisant l'interface avec la jonction tunnel. La section suivante traite donc du développement d'une barrière anti-diffusion déposée avant le *blanket*.

C.3.3 CMP Cr/Cr₂O₃/Ti

Suite aux tests non concluants de soulèvement du Cr à la section 6.1.2, l'étape de CMP a tout de même été validée avec les échantillons ayant des îlots de Cr pour compléter l'étude du matériau. Comme on peut l'observer sur les images AFM et SEM de la figure C.9, l'îlot est complètement disparu. L'image montre un échantillon avec îlots de Cr absent, par le creux qu'il laisse après CMP et un contraste pâle au SEM. Le problème provient soit d'une mauvaise adhésion intrinsèque des matériaux en EBL2, soit par une vitesse de polissage démesurément plus rapide que le titane et le SiO₂ l'entourant. Comme le montre le tableau 6.1, la vitesse de polissage du Cr a été vérifiée pour une couche sans motif (pleine plaque). Son adhésion est généralement bonne puisque le Cr est utilisé comme couche d'accroche pour l'Au ([Anderson, 1972; Haq, 1969]). Cependant, on ne peut connaître l'adhésion des pieds des motifs réalisés par soulèvement. Il est possible que ces parties de lignes soient moins bien accrochées au SiO₂ de surface et peuvent par conséquent s'arracher rapidement. Il est aussi possible que le matériau déposé sur les pieds adhère moins bien, ce qui favoriserait un polissage beaucoup plus rapide. Dans tous les cas, de nouveaux essais seraient nécessaires afin de développer un procédé d'îlot de Cr compatible avec le polissage CMP.

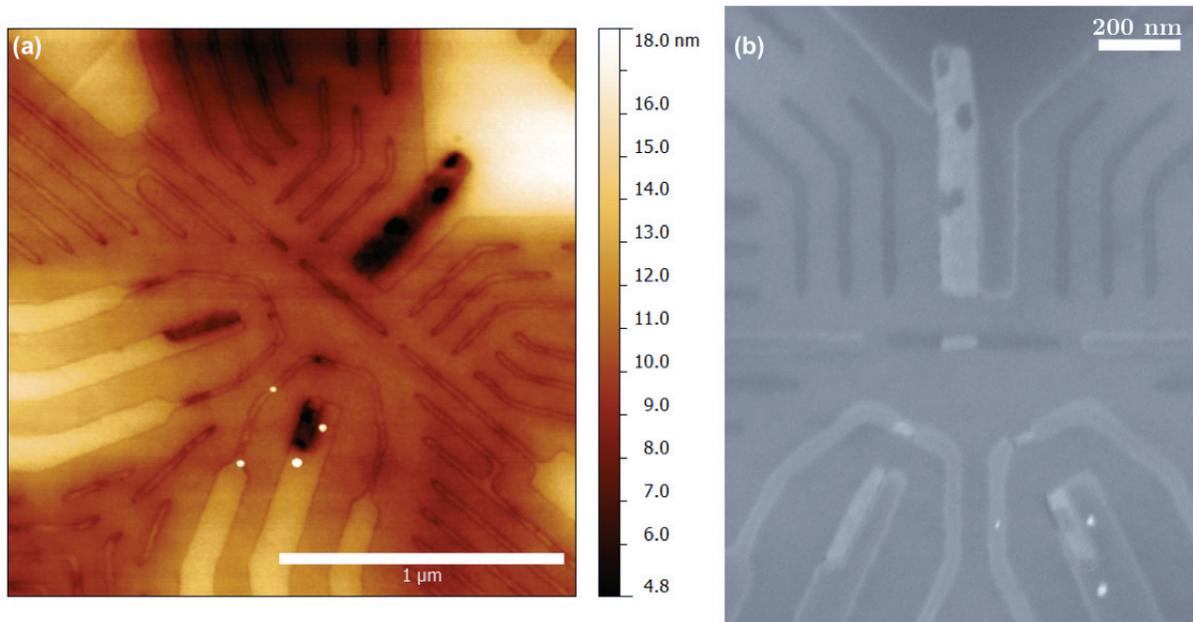


Figure C.9 (a) Image AFM d'un QCA avec un îlot de Cr après planarisation CMP et (b) image SEM du même dispositif.

C.3.4 BAD de chrome *in situ* dans l'Intlvac

La solution idéale pour éliminer toute contamination de la jonction et la diffusion de l'oxygène est de créer et sceller la jonction sans briser le vide. Puisque l'Intlvac permet de réaliser de l'évaporation, de l'oxydation et de la pulvérisation dans une seule machine, la solution a pu y être testée. La méthode mise en œuvre ici est donc de réaliser l'EBL

de l'îlot puis, après l'oxydation de l'îlot en titane, déposer *in situ* une couche de chrome de 5 nm par pulvérisation. Cette couche sert à la fois de barrière anti-diffusion et de protection de la jonction pour les étapes subséquentes du procédé. En effet, le soulèvement expose les jonctions aux solvants utilisés et on réduit donc ainsi la contamination et les défauts d'interface. La difficulté dans ce procédé est le recouvrement complet des jonctions tunnel, les flancs du métal dans les tranchées, lors du dépôt de la BAD puisque la résine est toujours présente. On s'attend donc à une épaisseur déposée plus faible sur les côtés que sur le dessus.

Les caractéristiques électriques (I-V) des premières jonctions MIM fabriquées avec ce procédé sont rapportées à la figure C.10. La figure C.10a donne plusieurs courbes I-V d'une même MIM de 72 nm de largeur. Toutes ces courbes ont été prises le même jour. On observe d'abord qu'au fil des mesures, le courant dans la jonction diminue par coup. On observe plusieurs mesures reproductibles, puis une mesure va plus loin en tension et en courant, ce qui semble apporter un changement physique à la jonction et une diminution du courant. On peut voir à l'aide de la légende que cet effet est d'abord causé par une mesure négative (pointillé large) puis par une mesure positive (pointillé rapproché).

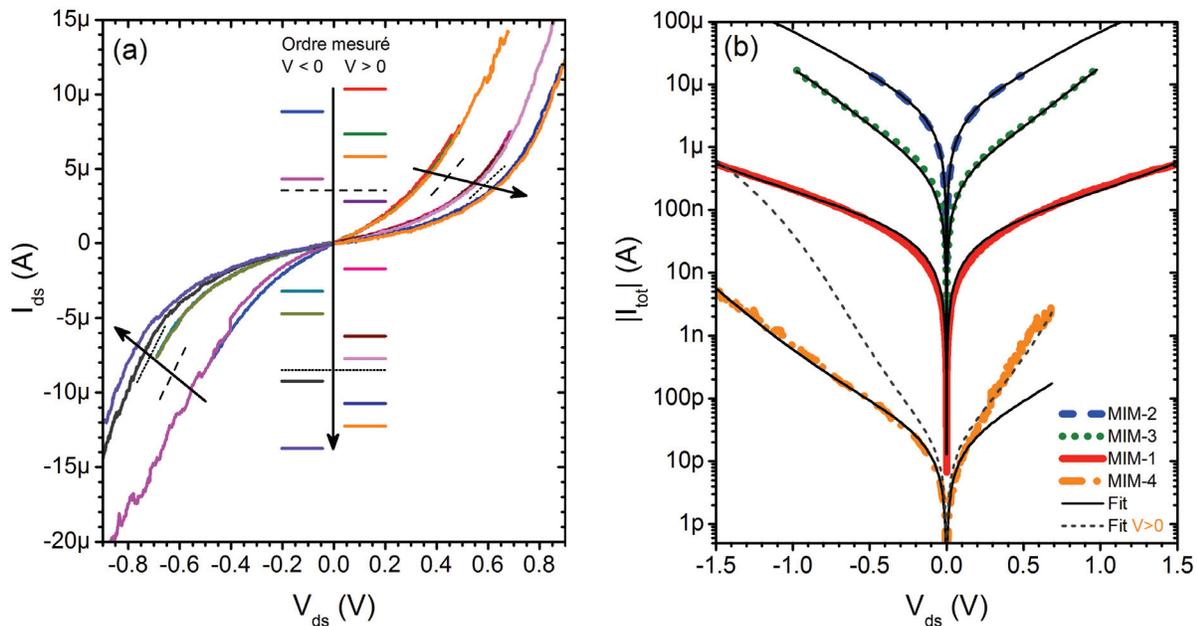


Figure C.10 Mesures I-V de MIM Ti/Cr/TiO₂/Cr/Ti de différentes largeurs. (a) MIM-3 de 72 nm de largeur dans une séquence longue de mesures. (b) MIM-1 à MIM-4 (24 à 72 nm de largeur) en valeur absolue avec les fits correspondant. Les valeurs des différents fits sont données dans le tableau C.1.

Puisque c'est une montée en courant qui semble causer ces changements, on peut conclure à une instabilité de la jonction, des lacunes ou des défauts qui changent lorsque la tension ou le courant appliqué sont trop grands. Cela rend difficile toute comparaison de jonction entre elles et ce type de problématique a aussi été observé auparavant dans le groupe de recherche [Guilmain, 2013]. En particulier, la figure C.10b montre les données pour 4 MIM

de différente largeur nominale sur le même échantillon. Les largeurs nominales sont des multiples de la plus faible et sont fabriquées en ajoutant plusieurs jonctions en parallèle. MIM-1 à MIM-4 sont donc nominalement de 25, 50, 75 et 100 nm. La théorie prédit dans ce cas que le courant est proportionnel à la largeur, mais on peut voir dans le graphique de la figure C.10b que l'échantillon ne suit pas du tout cette tendance. En effet l'ordre de grandeur de courant pour les 4 jonctions semble aléatoire et même inversé par rapport aux attentes.

Lorsque l'on tente de reproduire les caractéristiques de ces jonctions MIM à l'aide du modèle développé au chapitre 3, on obtient les courbes minces superposées aux différentes Courbes expérimentales. Les valeurs utilisées comme paramètres d'entrée dans le modèle sont données dans le tableau C.1 et ont été ajustées pour que le modèle corresponde le mieux possible à l'expérience.

Tableau C.1 Données de fit de 4 MIMs Ti/Cr/TiO₂/Ti (figure C.10b).
 $T = 293 \text{ K} \mid N_{\text{libre-L}} = N_{\text{libre-R}} = 2 \mid V_{\text{mol-L}} = V_{\text{mol-R}} = 1,064 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$.

Parameters	MIM-1	MIM-2	MIM-3	MIM-4(-)	MIM-4(+)
W (nm)	24.1	54.6	72.3	67.8	67.8
D (nm)	1	6	6	4	4
t_{ox} (nm)	1.4	1.5	2	2.75	3.95
ε_r	20	3	3	4	3.5
m^*/m_0	0.3	0.3	0.3	0.28	0.28
ϕ_{OL}	1.62	0.85	0.73	1.45	0.65
ϕ_{OR}	1.52	0.81	0.88	1.65	0.85
Ψ_{ML} (eV)	4.4	4.34	4.3	4.3	4.3
χ_{I} (eV)	2.78	3.49	3.57	2.85	3.65
Ψ_{MR} (eV)	4.3	4.3	4.45	4.5	4.5

On peut voir que tout comme les courbes expérimentales, le modèle donne des résultats qui sont incohérents de par l'hypothèse de base que toutes les jonctions sont identiques à l'exception de leur largeur (nombre en parallèle). Il est en effet impossible de reproduire l'expérience sans faire varier les paramètres matériaux des jonctions ce qui indique qu'il y a des différences majeures entre les différentes jonctions malgré que le procédé réalisé sur chacune soit identique. La figure C.11 montre une image AFM de chacune des MIM avec leurs défauts respectifs. On peut voir que plusieurs creux sont présents un peu partout dans les tranchées, tant au niveau de la jonction que des électrodes. En particulier, on peut voir que les tranchées de la MIM-4 en (d) semblent avoir été complètement arrachée du côté de l'EBL2 ce qui explique le courant très faible et asymétrique mesuré.

En plus des incohérences observées lors des mesures électriques, une dégradation rapide des jonctions tunnel est observée dans un SET. La figure C.12a montre des mesures Id-Vds pour des mesures à 0, 27 et 71 jours du polissage. Après un peu plus de 2 mois, il est évident que le dispositif n'est plus fonctionnel puisque le courant mesuré a diminué de plus de deux ordres de grandeur.

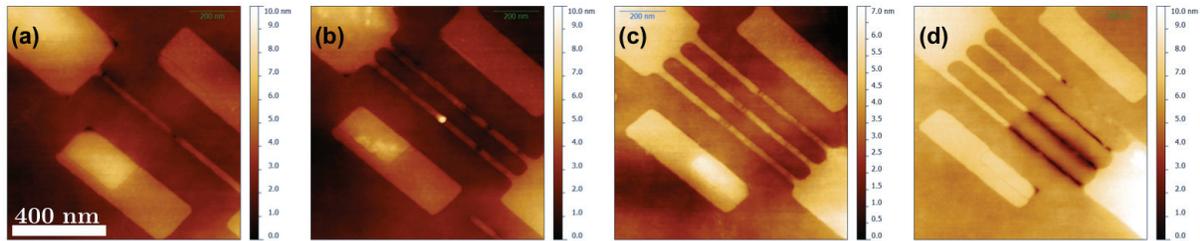


Figure C.11 Images AFM de MIM de 4 largeurs nominales de 25 à 100 nm (a) à (d) respectivement. Plusieurs zones creuses dans les tranchées sont à l'origine des résultats incohérents observés en caractérisation électrique (voir figure C.10b).

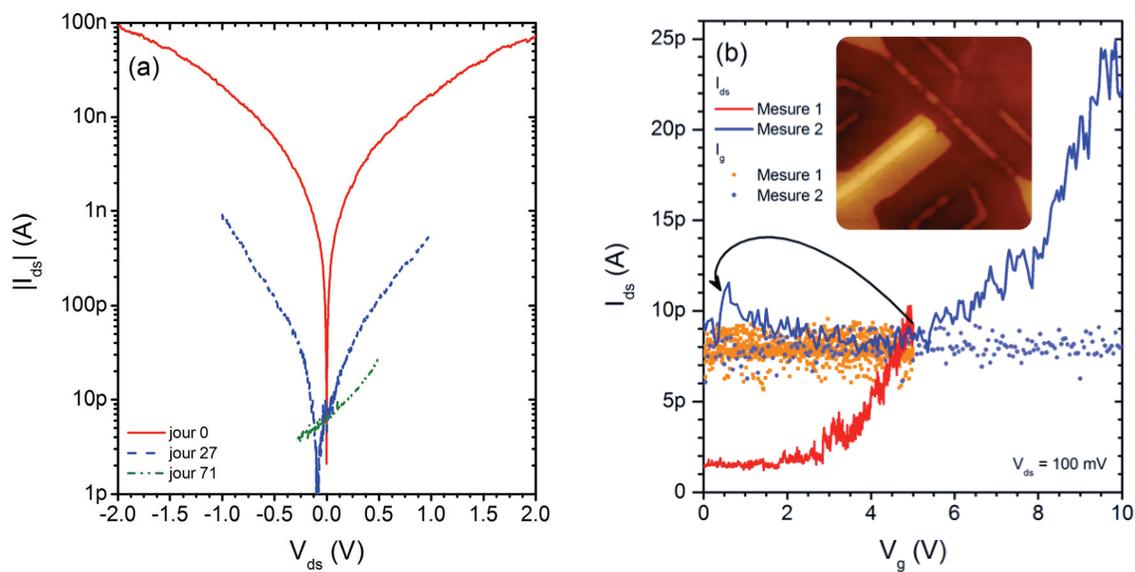


Figure C.12 (a) Vieillessement d'un SET avec BAD de chrome. (b) Caractérisation I_d - V_{ds} du même SET à $V_{ds} = 100$ mV en deux mesures consécutives. L'encart montre ce SET et les défauts présents dans la tranchée.

On voit aussi à la figure C.12b deux mesures subséquentes de ce dispositif SET. Les deux courbes de courant de drain (lignes) ne repassant pas sur elles-mêmes tout en ayant des courants de grille (points) similaire, on en déduit que les jonctions sont altérées par la mesure électrique. Il est donc clair, avec ces résultats, que le procédé avec barrière anti-diffusion de chrome ne fonctionne pas. Ceci peut être expliqué par un chrome trop instable ou bien trop mince pour offrir une bonne protection contre la diffusion de l'oxygène. Le côté non protégé des jonctions tunnel pourrait aussi être en cause bien que l'îlot d'un SET est petit, il est possible qu'il s'oxyde quand même et dans le cas des MIM, l'îlot est très grand ce qui amplifie ce problème.

C.3.5 BAD de tungstène pulvérisé

Pour tester l'effet d'une BAD en tungstène, il faut utiliser la pulvérisation puisque ce métal s'évapore à trop haute température et les résines de soulèvement ne résistent généralement pas à cette chaleur. L'échantillon est donc oxydé *in situ* lors de l'évaporation à la suite de l'EBL2, comme dans le procédé de chrome sans la BAD. Ensuite, après le soulèvement, une couche de tungstène de 5 nm est déposée par pulvérisation *in situ* avant de faire le *blanket*. Tout comme lors des essais de *blanket* tungstène, il s'avère que c'est un métal très dur et difficile à polir en combinaison avec le titane. Même à 5 nm d'épaisseur, il agit, lors du CMP, comme une couche d'arrêt. En effet, on peut voir à la figure C.13 que l'uniformité du polissage est encore une fois peu intéressante. Les deux cotés des jonctions tunnel ne sont pas du tout de la même hauteur, causé par l'atteinte en premier du tungstène sur le motif EBL2 ce qui en fait une bosse puisque le titane autour continue de se polir. De plus, on peut voir dans l'image de droite (b) que la structure, indésirable, du tungstène est transférée en partie dans le titane puisque des gros grains sont visibles dans les motifs UV plus profonds et donc où le tungstène n'est pas encore exposé. L'essai de plusieurs recettes et solutions de polissage n'ont pas permis d'améliorer l'uniformité. Le titane se polit toujours plus rapidement que le tungstène qui n'est donc pas une option viable.

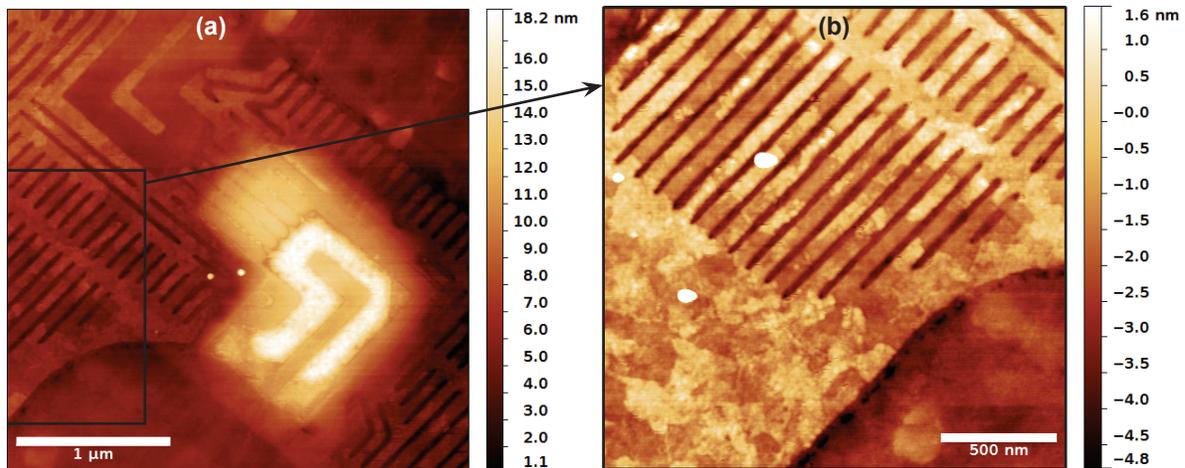


Figure C.13 Image AFM de la surface d'une MIM avec BAD de tungstène avant t_0 . (a) Vue globale du dispositif avec motifs UV, EBL1 et EBL2 visibles. (b) Vue agrandie d'une zone entre les électrodes UV montrant la structure du tungstène agissant comme couche d'arrêt temporaire.

ANNEXE D

PROCÉDÉ DE FABRICATION DÉTAILLÉ

Le tableau suivant donne le détail des paramètres à utiliser pour réaliser le procédé nanodamascène décrit dans cette thèse. Ces paramètres peuvent varier dans le temps alors il est utile de faire des tests de vitesse de gravure, d'épaisseur des matériaux ou d'autres tests afin de les valider avant de faire plusieurs échantillons. Comme décrit dans les chapitres 6 et 7, toutes les étapes où le métal de l'échantillon est exposé à l'air doivent être réalisées le plus rapidement possible afin de limiter la détérioration des propriétés des dispositifs et leur contamination. Les étapes 5.12 à 6.01 sont critiques et peuvent être réalisées en quelques heures. Il est possible d'attendre avant de réaliser les étapes 7 et 8, mais le plus rapidement reste le mieux. Suite à l'atteinte de t_0 à l'étape 7.01, les étapes 7.03 à 7.05 doivent être faites rapidement pour passer l'échantillon le plus tôt possible. Dans l'attente, les échantillons peuvent être entreposés dans un environnement sous vide ou sous atmosphère d'azote.

ÉTAPE	ÉQUIPEMENT	DÉTAILS	CIBLE	NOTES
1	Oxydation			
1.01	Nettoyage RCA	Opticlear : 5 min Acétone : 5 min IPA : 5 min Rinçage eau D.I. : 2 min H ₂ O:HF 10:1 : 10 s Rinçage : 2 min H ₂ O ₂ :H ₂ SO ₄ (1:1) : 15 min Rinçage : 2 min H ₂ O:NH ₄ OH:H ₂ O ₂ 100:1:4 75 °C / 15 min Rinçage eau D.I. : 2 min H ₂ O:HF 50:1 : 15 s Rinçage court : 30 s H ₂ O:H ₂ O ₂ :HCl 6:1:1 75 °C / 15 min Rinçage : 1 min Essorage eau désionisée (2 min) Séchage azote (3 min)	Nettoyage	(RCA SC-1) (RCA SC-2)
1.02	Oxydation Thermique	Tube 3 Entré à 800 °C sous N ₂ à 20 % 5 L/min Monté à 1050 °C en 20 min Attente de 20 min Oxydation sous O ₂ 40 % 5 L/min de 215 min Attente de 60 min sous N ₂ à 20 % 5 L/min Refroidissement de 30 min et sortie	150 nm SiO ₂	
1.03	Ellipsomètre Alpha-SE	SiO ₂ on thermal oxide.mod		Mesurer épaisseur SiO ₂
2	Contacts photolithographie			
2.01	Étuve	180 °C / 5 min		
2.02	Étaleuse Polos	S1805 / dépôt statique / couvrir la gaufre Grand échantillon / 5000 rpm / 30 s	500 nm	
2.03	Plaqué chauffante	115 °C / 1 min		
2.04	Ellipsomètre Alpha-SE	Transparent film on SiO ₂ on Si.mod		Centre de la gaufre
2.05	Aligneuse OAI 806	Mode : Intensité courante Intensité : 15 mW/cm ² Format du masque : 5 po		

ÉTAPE	ÉQUIPEMENT	DÉTAILS	CIBLE	NOTES
		#SSE du photomasque : G817 (EBR 4 po) Alignement : Oui, centré sur la gaufre Mode de contact : N ₂ Hard Durée d'exposition : 10 s		
2.06	Développeuse Polos	Développeur : MF319 Durée : 2x15 s (puddle double) Température : TP		
2.07	Aligneuse OAI 806	Mode : Intensité courante Intensité : 15 mW/cm ² Format du masque : 5 po #SSE du photomasque : I057 (NKMv4) Alignement : Oui, centré sur la gaufre Mode de contact : N ₂ Hard Durée d'exposition : 3.5 s		
2.08	Développeuse Polos	Développeur : MF319 Durée : 2x15 s (puddle double) Température : TP		
2.09	Microscope Nikon	Inspection / résidus / align. / contacts / lignes 1:1		
2.10	AOE-STTS	Recette : DescUV Durée : 30 s	Descum	
2.11	AOE-STTS	Recette : SiO_70 Durée : 120 s	40 nm tranchées	
2.12	Banc humide (nett.)	Remover1165 / 70 °C / > 30 min + Bain ultrasons 5 min Acétone 5 min / IPA 5 min Rinçage Eau DI 1 min / Séchage azote		S1805 brûlée par la gravure AOE -> faire un bon nettoyage
2.13	Plasmaline	O ₂ / 150 W / 300 mTorr / 5 min		
2.14	Microscope Nikon	Inspection / résidus / marques al. / contacts / lignes 1:1		
2.15	Profilomètre DEKTAK	Profondeur des tranchées (contacts)		
3	Découpe			
3.01	Étaleuse Polos	S1805 / dépôt statique / couvrir la gaufre Grand échantillon / 5000 rpm / 30 s	> 500 nm	Protection pour la découpe
3.02	Plaque chauffante	115 °C / 1 min		
3.03	Scie de découpe		1 cm x 1 cm	
3.04	Banc humide (nett.)	Remover1165 / 70 °C / 30 min + Bain ultrasons 5 min Acétone 5 min / IPA 5 min Rinçage Eau DI 1 min / Séchage azote		
3.05	SSE	Créer les #SSE pour chaque échantillon Identifier chaque échantillon dans sa boîte	A-Y = NKMv4	ZA-ZY = Dummies sans motif
4	Tranchées électrolithographie			
4.01	Plaque chauffante	180 °C / 5 min		
4.02	Étaleuse Polos	ZEP520A DR2.4 / 5000 rpm / 30 s	80 nm	
4.03	Plaque chauffante	180 °C / 5 min		
4.04	Ellipsomètre Alpha-SE	Mesure épaisseur résine (Cauchy_SiO ₂ _Si.mod)		Échantillon dummy sans motifs
4.05	Zeiss FIB	20 kV / 7.5 μm / 4.70 mm / ~20 pA Dose linéaire : 0.16 nC/cm, Dummies 0.24 nC/cm Dose surfacique : 50 μC/cm ²	20-25 nm (larg.)	Faire test de dose avec motif réel Attention à l'exposition des alignements
4.06	Banc humide (dev)	Développeur : O-Xylène / TP / 75 s Rinçage : MIBK (méthyl-4 pentanone-2) 15 s Séchage : azote		
4.07	Plaque chauffante	125 °C / 5 min		
4.08	AOE-STTS	Recette : DescZEP Durée : 15 s	Descum	
4.09	AOE-STTS	Recette : SiO_70 Durée : 55 s	20 nm	
4.10	Banc humide (nett.)	Remover1165 / 70 °C / > 30 min + Bain ultrasons 5 min Acétone 5 min / IPA 5 min Rinçage Eau DI 1 min / Séchage azote		ZEP brûlée par la gravure AOE -> faire un bon nettoyage

ÉTAPE	ÉQUIPEMENT	DÉTAILS	CIBLE	NOTES
4.11	Plasmaline	O ₂ / 150 W / 300 mTorr / 5 min		
4.12	Microscope Nikon	Inspection / résidus / marques al.		
4.13	Profilomètre DEKTAK	Profondeur des tranchées (nanofils)		
4.14	AFM	Taille des nanotranchées, propreté du fond de gravure		Picots ?
4.15	Zeiss FIB	Largeur des nanofils, alignements, état de la lithographie		Contamination C aux endroits observés
4.16	Plasmaline	O ₂ / 150 W / 300 mTorr / 15 min	Descum	Enlever le carbone du SEM
5	Soulèvement flot / oxydation barrière tunnel			
5.01	Plaque chauffante	180 °C / 5 min		
5.02	Étaleuse Polos	MMA:EL 2:1 (frigo) / 5000 rpm / 30 s	95 nm	
5.03	Plaque chauffante	180 °C / 5 min		
5.04	Ellipsomètre Alpha-SE	Mesure épaisseur résine (Cauchy_SiO ₂ _Si.mod)		Échantillon dummy sans motifs
5.05	Étaleuse Polos	ZEP520A DR4.2 / 5000 rpm / 30 s	45 nm	
5.06	Plaque chauffante	180 °C / 5 min		
5.07	Ellipsomètre Alpha-SE	Mesure épaisseur résine (Cauchy_Cauchy_SiO ₂ _Si.mod)		Échantillon dummy sans motifs
5.08	Zeiss FIB	20 kV / 7.5 µm / 4.70 mm / ~20 pA Dose linéaire : 0.16 nC/cm, Dummies 0.24 nC/cm Dose surfacique : 50 µC/cm ²	25 nm	Attention à l'exposition des alignements
5.09	Banc humide (dev)	Développeur : O-Xylène / TP / 75 s Rinçage : IPA 15 s		
5.10	Banc humide (dev)	Développeur : IPA:H ₂ O 4:1 / TP / 120 s Rinçage : IPA 15 s Séchage : azote		
5.11	Plasmaline (3IT)	O ₂ / 50 W / 800 mTorr / 0.4 min Profondeur visée : 3-6 nm	Descum	
5.12	Intlvac (évaporation)	Cible : Ti Taux de dépôt : 5 Å/s	25 nm Ti	
5.13	Intlvac (ion gun)	Gaz : O ₂ Durée : 30 s à 15 min Débit source : 50 sccm débit Hces : 15 sccm Keeper : 1500 mA Bias : 2000 mA Discharge : 2000 mA	1-8 nm TiO ₂	
5.14	Banc humide (nett.)	Remover1165 / 70 °C / > 30 min Acétone 5 min / IPA 5 min Rinçage Eau DI 1 min / Séchage azote		Bain ultrasons 0-30 s (Optionnel)
5.15	Microscope Nikon	Inspection / résidus / marques al.		
5.16	Profilomètre DEKTAK	Épaisseur de métal déposée (marques al.)		
5.17	AFM	Largeur et état des îlots déposés.		
5.18	Zeiss FIB	Largeur des nanofils, alignements, état de la lithographie		Éviter si possible (contamination C)
6	Source/drain			
6.01	Pulvérisation	Cible : TiN (RF) 12 min / Pw : 60 W / P : 2.4 mTorr / Ar : 15 sccm	5 nm TiN	
	Pulvérisation	Cible : Ti (RF) 1 h 21 min / Pw : 40 W / P : 2.4 mTorr / Ar : 15 sccm	30 nm Ti	
	Pulvérisation	Cible : Ti (RF) 1 h 25 min / Pw : 100 W / P : 2.9 mTorr / Ar : 20 sccm	120 nm Ti	
6.03	Profilomètre DEKTAK	Épaisseur de métal déposée		Échantillon avec motif de soulèvement
6.04	Résistivité 4 pointes	Mesure de résistivité de l'empilement		Échantillon dummy sans motifs
7	Planarisation			
7.01	CMP	Recette Allied 50 nm : IPA (1:1 vol) 1) 900 g / P : 70 rpm / T : 60 rpm / 40 % ring / d : 20 %	2x60 s (0°-180°)	En boucle avec l'étape de CMP

ÉTAPE	ÉQUIPEMENT	DÉTAILS	CIBLE	NOTES
		2) 350 g / P : 60 rpm / T : 50 rpm / 50 % ring / d : 20 %	Jusqu'à t_0	
7.02	Microscope Nikon	Inspection / épaisseur restante / résidus / marques al.		
7.03	Zeiss LEO VP	Inspection du polissage et choix des celules à caractériser. En boucle avec l'étape de CMP.		Limiter le dépôt C (faible mag)
7.04	AFM	Dimensions et choix des dispositifs à caractériser.		(Optionnel)
7.05	Keithley4200 (LCSM)	Mesure des nanofils et quelques dispositifs pour déterminer l'état et choix des dispo à mesurer en cryo.		(Optionnel)
8	Passivation			
8.01	PECVD-STC	Recette : HFSiN Durée : 10 min	100 nm Si3N4	
9	Gravure Si3N4 et dépôt de pads de micro-soudure			
9.01	Plaque chauffante	150 °C / 5 min		
9.02	Étaleur Polos	LOR3A / 3000 rpm / 30 s	300 nm	
9.03	Plaque chauffante	150 °C / 5 min		
9.04	Ellipsomètre Alpha-SE	Mesure épaisseur résine (Cauchy_SiO ₂ _Si.mod)		Échantillon dummy sans motifs
9.05	Étaleur Polos	S1805 / 5000 rpm / 30 s	500 nm	
9.06	Plaque chauffante	115 °C / 1 min		
9.07	Ellipsomètre Alpha-SE	Mesure épaisseur résine (Cauchy_Cauchy_SiO ₂ _Si.mod)		Échantillon dummy sans motifs
9.08	Aligneuse OAI 806	Mode : Intensité courante Intensité : 15 mW/cm ² Format du masque : 5 po #SSE du photomasque : K460 (NKMv4-Pads-D4Corrigé) Alignement : Oui Mode de contact : N ₂ Hard Durée d'exposition : 3.5 s		
9.09	Développeuse Polos	Développeur : MF319 Durée : 2x15 s (puddle double) Température : TP		
9.10	Microscope Nikon	Inspection / résidus	Undercut > 500 nm	
9.11	AOE-STC	Recette : DescUV Durée : 30 s	Descum	
9.12	AOE-STC	Recette : SiO_90 Durée : 55 s	100 nm	
9.13	Edwards (évaporation)	Cible : Cr Cible : Au	15 nm 150 nm	
9.14	Banc humide (nett.)	Remover1165 / 70 °C / > 30 min Acétone 5 min / IPA 5 min Rinçage Eau DI 1 min / Séchage azote Pompage résidus (pompe péristaltique)		Bain ultrasons 0-30 s (Optionnel)
10	Caractérisation Électrique (TP)			
10.01	Keithley4200 (LCSM)	Mesure des nanofils et quelques dispositifs pour choisir les dispo à mesurer en cryo.		(Optionnel)
11	Montage et micro-soudure			
11.01	Labo Michel P.L.	Nettoyage support 48 pins à l'IPA (coton-tige ou chiffon) pour enlever le gras. Séchage : azote ou air (1-5 min) Collage de l'échantillon avec laque d'argent. Connecter la laque à une pin pour contact au substrat		(Travailler avec des gants)
11.02	Micro-soudeuse K&S4700	Micro-soudure : Wedge-Wedge Paramètres 1 : Tear : 7 / Tail : 8 / Loop : 5-7 Paramètres 1 : Pw : 5 / t : 7 / F : 4,5 Paramètres 2 : Pw : 6 / t : 7 / F : 5	Généraux Pin support Pad échantillon	Salles propres 2 (Phys.)
11.03	VTI (LaboMPL)	Mesures cryo (1,5 K à 300 K)		
11.04	BlueFors (LaboMPL)	Mesures cryo (10 mK à 1 K)		

LISTE DES RÉFÉRENCES

- Amlani, I., Orlov, A., Kummamuru, R. K., Bernstein, G. H., Lent, C. S. et Snider, G. L. (2000). Experimental demonstration of a leadless quantum-dot cellular automata cell. *Applied Physics Letters*, volume 77, numéro 5, p. 738–740.
- Amlani, I., Orlov, A., Snider, G. L. et Bernstein, G. H. (1997). Differential charge detection for quantum-dot cellular automata. *Journal of Vacuum Science & Technology B*, volume 15, numéro 6, p. 2832–2835.
- Anderson, J. (1972). Applications of thin films in microelectronics. *Thin Solid Films*, volume 12, numéro 1, p. 1–15.
- Anderson, N. G. et Bhanja, S. (2014). *Field-Coupled Nanocomputing Paradigms, Progress, and Perspectives*. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 392 p.
- Arima, V., Iurlo, M., Zoli, L., Kumar, S., Piacenza, M., Della Sala, F., Martino, F., Maruccio, G., Rinaldi, R., Paolucci, F., Marcaccio, M., Cozzi, P. G. et Bramanti, A. P. (2012). Toward Quantum-dot Cellular Automata units : thiolated-carbazole linked bis-ferrocenes. *Nanoscale*, volume 4, numéro 3, p. 813–823.
- Arzubiaga, L., Golmar, F., Llopis, R., Casanova, F. et Hueso, L. E. (2014). In situ electrical characterization of palladium-based single electron transistors made by electromigration technique. *AIP Advances*, volume 4, numéro 11, p. 117126.
- Averin, D. et Odintsov, A. (1989). Macroscopic quantum tunneling of the electric charge in small tunnel junctions. *Physics Letters A*, volume 140, numéro 5, p. 251–257.
- Averin, D. V. et Likharev, K. K. (1991). *Single Charge Tunneling Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures*, chapitre Possible A. NATO ASI Series, B294, New York, Plenum Press, p. 311–331.
- Baishnab, K. L. et Talukdar, F. a. (2010). Low power, high precision and reduced size CMOS Comparator for high speed ADC design. *2010 5th International Conference on Industrial and Information Systems*, p. 219–223.
- Bayat, A., Creffield, C. E., Jefferson, J. H., Pepper, M. et Bose, S. (2015). Quantum dot spin cellular automata for realizing a quantum processor. *Semiconductor Science and Technology*, volume 30, numéro 10, p. 105025.
- Beaumont, A., Dubuc, C., Beauvais, J. et Drouin, D. (2009). Room Temperature Single-Electron Transistor Featuring Gate-Enhanced ON-State Current. *IEEE Electron Device Letters*, volume 30, numéro 7, p. 766–768.
- Bernstein, G. H., Amlani, I., Orlov, A., Lent, C. S. et Snider, G. L. (1999). Observation of switching in a quantum-dot cellular automata cell. *Nanotechnology*, volume 10, p. 166–173.

- Blick, R., Haug, R., Weis, J., Pfannkuche, D., Klitzing, K. et Eberl, K. (1996). Single-electron tunneling through a double quantum dot : The artificial molecule. *Physical review. B, Condensed matter*, volume 53, numéro 12, p. 7899–7902.
- Bounouar, M. A., Beaumont, A., Calmon, F. et Drouin, D. (2012). On the use of nanoelectronic logic cells based on metallic Single Electron Transistors. Dans *2012 13th International Conference on Ultimate Integration on Silicon (ULIS)*. volume 1. IEEE, p. 157–160.
- Brenner, R. (2004). *Single-electron transistors for detection of charge motion in the solid state*. Thèse de doctorat, University of New South Wales, 216 p.
- Brenner, R., Hamilton, A. R., Clark, R. G. et Dzurak, A. S. (2003). Double-island single-electron transistor for noise-suppressed detection of charge transfer. *Microelectronic engineering*, volume 68, p. 826–831.
- Buehler, T. M., Reilly, D. J., Starrett, R. P., Court, N. A., Hamilton, A. R., Dzurak, A. S. et Clark, R. G. (2004). Development and operation of the twin radio frequency single electron transistor for cross-correlated charge detection. *Journal of Applied Physics*, volume 96, numéro 8, p. 4508.
- Chen, R. H. (1996). MOSES : a general MonteCarlo simulator for single-electron circuits. Dans *Meeting Abstracts, The Electrochemical Society*. p. 576.
- Cheng, C.-S., Gomi, H. et Sakata, H. (1996). Electrical and Optical Properties of Cr₂O₃ Films Prepared by Chemical Vapour Deposition. *Physica Status Solidi (a)*, volume 155, numéro 2, p. 417–425.
- Chiu, F.-C., Fan, S.-K., Tai, K.-C., Lee, J. Y.-m. et Chou, Y.-C. (2005). Electrical characterization of tunnel insulator in metal/insulator tunnel transistors fabricated by atomic force microscope. *Applied Physics Letters*, volume 87, numéro 24, p. 243506.
- Cho, H. et Swartzlander, E. E. (2006). Modular Design of Conditional Sum Adders Using Quantum-dot Cellular Automata. *2006 Sixth IEEE Conference on Nanotechnology*, volume 1.
- Cordan, A. S. et Goltzené, A. (1999). Optimization of the master equation set for a multidot tunnel structure. *The European Physical Journal - Applied Physics*, volume 7, p. 137–143.
- Cowburn, R. et Welland, M. (2000). Room temperature magnetic quantum cellular automata. *Science (New York, N.Y.)*, volume 287, numéro 5457, p. 1466–1468.
- Dolan, G. J. (1977). Offset masks for lift-off photoprocessing. *Applied Physics Letters*, volume 31, numéro 5, p. 337–339.
- Droulers, G., Beaumont, A., Beauvais, J. et Drouin, D. (2011). Spectroscopic ellipsometry on thin titanium oxide layers grown on titanium by plasma oxidation. *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures*, volume 29, numéro 2, p. 021010.

- Droulers, G., Ecoffey, S., Guilmain, M., Souifi, A., Pioro-Ladriere, M. et Drouin, D. (2014). Damascene planar metal-insulator-metal tunnel junctions. Dans *14th IEEE International Conference on Nanotechnology*. p. 884–887.
- Dubuc, C. (2008). *Étude et fabrication de transistors mono-électroniques à température d'opération étendue*. Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke, 126 p.
- Dubuc, C., Beaumont, A., Beauvais, J. et Drouin, D. (2009). Current conduction models in the high temperature single-electron transistor. *Solid-State Electronics*, volume 53, numéro 5, p. 478–482.
- Dubuc, C., Beauvais, J. et Drouin, D. (2007). Single-electron transistors with wide operating temperature range. *Applied Physics Letters*, volume 90, numéro 11, p. 113104.
- Dubuc, C., Beauvais, J. et Drouin, D. (2008). A Nanodamascene Process for Advanced Single-Electron Transistor Fabrication. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, volume 7, numéro 1, p. 68–73.
- Ecoffey, S., Morissette, J.-F., Jedidi, N., Guilmain, M., Nauenheim, C. et Drouin, D. (2011). Ultrathin titanium passive devices fabrication. Dans *2011 11th IEEE International Conference on Nanotechnology*. volume 2. IEEE, p. 1689–1692.
- Eliasson, B. J. (2001). *Metal-Insulator-Metal Diodes for Solar Energy Conversion*. Ph. d., University of Colorado, 228 p.
- Ercan, I. et Anderson, N. G. (2011). Heat Dissipation Bounds for Nanocomputing : Theory and Application to QCA. Dans *IEEE International Conference on Nanotechnology*. IEEE, p. 1289–1294.
- Ernsberger, C., Nickerson, J., Smith, T., Miller, A. E. et Banks, D. (1986). Low temperature oxidation behavior of reactively sputtered TiN by x-ray photoelectron spectroscopy and contact resistance measurements. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, volume 4, numéro 6, p. 2784.
- Field, M., Smith, C., Pepper, M., Ritchie, D., Frost, J., Jones, G. et Hasko, D. (1993). Measurements of Coulomb blockade with a noninvasive voltage probe. *Physical Review Letters*, volume 70, numéro 9, p. 1311–1314.
- Fonseca, L. R. C., Korotkov, A. N., Likharev, K. K. et Odintsov, A. A. (1995). A numerical study of the dynamics and statistics of single electron systems. *Journal of Applied Physics*, volume 78, numéro 5, p. 3238.
- Franssila, S. (2010). *Introduction to Microfabrication*, 2^e édition. Wiley, 534 p.
- Fulton, T. A. et Dolan, G. J. (1987). Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions. *Physical Review Letters*, volume 59, numéro 1, p. 109–112.
- Gloos, K., Koppinen, P. J. et Pekola, J. P. (2003). Properties of native ultrathin aluminium oxide tunnel barriers. *Journal of Physics : Condensed Matter*, volume 15, numéro 10, p. 1733–1746.

- Grant, J. T. et Briggs, D. (2003). *Spectroscopy, Surface Analysis by Auger and X-ray Photoelectron*. IM Publications, 900 p.
- Griveau, D. (2013). *Mise en oeuvre de l'aspect démonstrateur des transistors mono-électroniques*. Mémoire de maîtrise, Université de Sherbrooke, 136 p.
- Guilmain, M. (2013). *Fabrication de mémoire monoélectronique non volatile par une approche de nanogrille flottante*. Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke, 173 p.
- Guilmain, M., Labbaye, T., Dellenbach, F., Nauenheim, C., Drouin, D. et Ecoffey, S. (2013). A damascene platform for controlled ultra-thin nanowire fabrication. *Nanotechnology*, volume 24, numéro 24, p. 245305.
- Haider, M., Pitters, J., DiLabio, G., Livadaru, L., Mutus, J. et Wolkow, R. (2009). Controlled Coupling and Occupation of Silicon Atomic Quantum Dots at Room Temperature. *Physical Review Letters*, volume 102, numéro 4, p. 2–5.
- Hänninen, I. et Takala, J. (2007). Binary multipliers on quantum-dot cellular automata. *Facta universitatis - series : Electronics and Energetics*, volume 20, numéro 3, p. 541–560.
- Hanson, G. W. (2008). Coulomb Blockade and the Single-Electron Transistor. Dans *Fundamentals of nanoelectronics*, chapitre 7, 1^{re} édition. Pearson Prentice Hall, p. 212–258.
- Haq, K. E. (1969). Adhesion Mechanism of Gold-Underlayer Film Combinations to Oxide Substrates. *Journal of Vacuum Science and Technology*, volume 6, numéro 1, p. 148.
- Harvey-Collard, P. (2013). *Fabrication de transistors mono-électroniques en silicium pour le traitement classique et quantique de l'information : une approche nanodamascène*. Mémoire de maîtrise, Université de Sherbrooke, 170 p.
- Hashemi, S. et Navi, K. (2015). A Novel Robust QCA Full-adder. *Procedia Materials Science*, volume 11, numéro 2005, p. 376–380.
- Huang, M. L., Chang, Y. C., Chang, C. H., Lin, T. D., Kwo, J., Wu, T. B. et Hong, M. (2006). Energy-band parameters of atomic-layer-deposition Al₂O₃/InGaAs heterostructure. *Applied Physics Letters*, volume 89, numéro 1, p. 012903.
- Imre, A., Csaba, G., Ji, L., Orlov, A., Bernstein, G. H. et Porod, W. (2006). Majority logic gate for magnetic quantum-dot cellular automata. *Science (New York, N.Y.)*, volume 311, p. 205–208.
- Irwin, M. D., Buchholz, D. B., Hains, A. W., Chang, R. P. H. et Marks, T. J. (2008). p-Type semiconducting nickel oxide as an efficiency-enhancing anode interfacial layer in polymer bulk-heterojunction solar cells. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, volume 105, numéro 8, p. 2783–2787.
- ITRS (2007). *International Technology Roadmap for Semiconductors : Emerging Research Devices* (Rapport technique). Semiconductor Industry Associations, Disponible en ligne : www.itrs.net, 55 p.

- ITRS (2011). *International Technology Roadmap for Semiconductors : Lithography* (Rapport technique). Semiconductor Industry Associations, Disponible en ligne : www.itrs.net, 20 p.
- ITRS (2013). *International Technology Roadmap for Semiconductors : Executive summary* (Rapport technique). Semiconductor Industry Associations, Disponible en ligne : www.itrs.net, 17 p.
- Jaouad, A., Aimez, V., Aktik, C., Bellatreche, K. et Souifi, A. (2004). Fabrication of (NH₄)₂S passivated GaAs metal-insulator-semiconductor devices using low-frequency plasma-enhanced chemical vapor deposition. *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, volume 22, numéro 3, p. 1027.
- Jin, Z. (2006). *Fabrication and measurement of molecular quantum cellular automata (QCA) device*. Thèse de doctorat, University of Notre Dame, 74 p.
- Kar, S., Gendt, S. D., Houssa, M., Landheer, D., Misra, D. et Iwai, H. (2007). Physics and Technology of High-k Gate Dielectrics 5. Dans Kar, S., Gendt, S. D., Houssa, M., Landheer, D., Misra, D. et Iwai, H., *ECS Transactions : 212th ECS Meeting October 7 - October 12, 2007*. volume 11.
- Karafyllidis, I. (1998). Determination of lowest energy state in single-electron circuits. *Electronics Letters*, volume 34, numéro 25, p. 2401.
- Kim, S. J., Lee, J. J., Kang, H. J., Choi, J. B., Yu, Y.-S., Takahashi, Y. et Hasko, D. G. (2012). One electron-based smallest flexible logic cell. *Applied Physics Letters*, volume 101, numéro 18, p. 183101.
- Kulik, I. O. et Shekhter, R. (1975). Kinetic phenomena and charge discreteness effects in granulated media. *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, volume 62, numéro 2, p. 623–640.
- Lafarge, P., Pothier, H., Williams, E. R., Esteve, D., Urbina, C. et Devoret, M. H. (1991). Direct observation of macroscopic charge quantization. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, volume 85, numéro 3, p. 327–332.
- Lambson, B., Carlton, D. et Bokor, J. (2011). Exploring the Thermodynamic Limits of Computation in Integrated Systems : Magnetic Memory, Nanomagnetic Logic, and the Landauer Limit. *Physical Review Letters*, volume 107, numéro 1, p. 010604.
- Lee Sang, B. (2016). *En rédaction*. Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke.
- Lee Sang, B., Gour, M.-J., Darnon, M., Ecoffey, S., Jaouad, A., Sadani, B., Drouin, D. et Souifi, A. (2016). Selective dry etching of TiN nanostructures over SiO₂ nanotrenches using a Cl₂/Ar/N₂ inductively coupled plasma. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics : Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, volume 34, numéro 2, p. 02M102.
- Lent, C. et Tougaw, P. (1997). A device architecture for computing with quantum dots. *Proceedings of the IEEE*, volume 85, numéro 4, p. 541–557.

- Lent, C. S. (2000). MOLECULAR ELECTRONICS :Bypassing the Transistor Paradigm. *Science*, volume 288, numéro 5471, p. 1597–1599.
- Lent, C. S., Tougaw, P. D., Porod, W. et Bernstein, G. H. (1993). Quantum cellular automata. *Nanotechnology*, volume 4, numéro 1, p. 49–57.
- Likharev, K. (1987). Single-electron transistors : Electrostatic analogs of the DC SQUIDS. *IEEE Transactions on Magnetics*, volume 23, numéro 2, p. 1142–1145.
- Likharev, K. (1999). Single-electron devices and their applications. *Proceedings of the IEEE*, volume 87, p. 606–632.
- Likharev, K. (2003). Electronics Below 10 nm. Dans *Nano and Giga Challenges in Microelectronics*. Elsevier, p. 27–68.
- Liu, S., Hu, X. S., Niemier, M. T., Nahas, J. J., Csaba, G., Bernstein, G. H. et Porod, W. (2013). Exploring the Design of the Magnetic–Electrical Interface for Nanomagnet Logic. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, volume 12, numéro 2, p. 203–214.
- Maeda, K., Okabayashi, N., Kano, S., Takeshita, S., Tanaka, D., Sakamoto, M., Teranishi, T. et Majima, Y. (2012). Logic operations of chemically assembled single-electron transistor. *ACS nano*, volume 6, numéro 3, p. 2798–803.
- Mahapatra, S., a.M. Ionescu et Banerjee, K. (2002). A quasi-analytical SET model for few electron circuit simulation. *IEEE Electron Device Letters*, volume 23, numéro 6, p. 366–368.
- Matsumoto, K., Ishii, M., Segawa, K., Oka, Y., Vartanian, B. J. et Harris, J. S. (1996). Room temperature operation of a single electron transistor made by the scanning tunneling microscope nano-oxidation process for the TiOx/Ti system. *Applied Physics Letters*, volume 68, numéro 1, p. 34.
- Matsumoto, K., Ishii, M., Shirakashi, J.-i., Segawa, K., Oka, Y., Vartanian, B. et Harris, J. (1995). Comparison of experimental and theoretical results of room temperature operated single electron transistor made by STM/AFM nano-oxidation process. *Proceedings of International Electron Devices Meeting*, p. 363–366.
- McCafferty, E. et Wightman, J. (1999). An X-ray photoelectron spectroscopy sputter profile study of the native air-formed oxide film on titanium. *Applied Surface Science*, volume 143, numéro 1-4, p. 92–100.
- Michaelson, H. B. (1977). The work function of the elements and its periodicity. *Journal of Applied Physics*, volume 48, numéro 11, p. 4729–4733.
- Morissette, J.-F. (2010). *Fabrication par lithographie hybride et procédé damascène de transistors monoélectroniques à grille auto-alignée*. Mémoire de maîtrise, Université de Sherbrooke, 99 p.
- Nabors, K. et White, J. (1991). FastCap : A multipole accelerated 3-D capacitance extraction program. *IEEE transactions on computer-aided design*, volume 10, numéro 11.

- Nabors, K. et White, J. (1992). Multipole-accelerated 3-D capacitance extraction algorithms for structures with conformal dielectrics. Dans *Proceedings 29th ACM/IEEE Design Automation Conference*. IEEE Comput. Soc. Press, p. 710–715.
- Oliver, M. R., Evans, D., Stein, D., Tucker, T., James, D. B., Robinson, K., de Larios, J., Boning, D. et Hetherington, D. (2004). *Chemical-Mechanical Planarization of Semiconductor Materials*, 1^{re} édition. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 425 p.
- Orlov, A., Amlani, I., Toth, G., Lent, C. S., Bernstein, G. H. et Snider, G. L. (1999). Experimental demonstration of a binary wire for quantum-dot cellular automata. *Applied Physics Letters*, volume 74, numéro 19, p. 2875–2877.
- Orlov, A., Kummamuru, R., Timler, J., Lent, C. S., Snider, G. L. et Bernstein, G. H. (2004). Experimental Studies of Quantum-dot Cellular Automata Devices. Dans Nakashima, H., *Mesoscopic Tunnelling Devices*, chapitre 6. Numéro 219, University of Notre Dame, Notre Dame, p. 29.
- Orlov, A. O., Amlani, I., Kummamuru, R. K., Ramasubramaniam, R., Toth, G., Lent, C. S., Bernstein, G. H. et Snider, G. L. (2000). Experimental demonstration of clocked single-electron switching in quantum-dot cellular automata. *Applied Physics Letters*, volume 77, numéro 2, p. 295.
- Park, J. (2006). Optical Reactivity of Epitaxially Grown Nitrogen-Doped Titanium Oxide (TiO₂) Films. *Journal of the Korean Physical Society*, volume 49, numéro 5, p. 2147–2150.
- Perez-Martinez, F., Farrer, I., Anderson, D., Jones, G. a. C., Ritchie, D. a., Chorley, S. J. et Smith, C. G. (2007). Demonstration of a quantum cellular automata cell in a GaAs/AlGaAs heterostructure. *Applied Physics Letters*, volume 91, numéro 3, p. 032102.
- Prager, A. A., George, H. C., Orlov, A. O. et Snider, G. L. (2011). Experimental demonstration of hybrid CMOS-single electron transistor circuits. *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures*, volume 29, numéro 4, p. 041004.
- Prager, A. A., Orlov, A. O. et Snider, G. L. (2009). Integration of CMOS, single electron transistors, and quantumdot cellular automata. Dans *2009 IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference*. volume 2. IEEE, p. 54–58.
- Qi, H., Sharma, S., Li, Z., Snider, G. L., Orlov, A. O., Lent, C. S. et Fehlner, T. P. (2003). Molecular Quantum Cellular Automata Cells. Electric Field Driven Switching of a Silicon Surface Bound Array of Vertically Oriented Two-Dot Molecular Quantum Cellular Automata. *Journal of the American Chemical Society*, volume 125, numéro 49, p. 15250–15259.
- Rao, K. V. et Smakula, A. (1965). Dielectric Properties of Cobalt Oxide, Nickel Oxide, and Their Mixed Crystals. *Journal of Applied Physics*, volume 36, numéro 6, p. 2031.
- Richard, J.-P. (2013). *Fabrication de transistors monoélectroniques pour la détection de charge*. Mémoire de maîtrise, Université de Sherbrooke, 118 p.

- Robertson, J. (2004). High density plasma enhanced chemical vapor deposition of optical thin films. *The European Physical Journal Applied Physics*, volume 28, p. 265–291.
- Roche, B., Voisin, B., Jehl, X., Wacquez, R., Sanquer, M., Vinet, M., Deshpande, V. et Previtali, B. (2012). A tunable, dual mode field-effect or single electron transistor. *Applied Physics Letters*, volume 100, numéro 3, p. 032107.
- Saadi, L. (2012). *Étude de l'Adsorption des molécules simples sur WO₃ : application à la détection des gaz*. Thèse de doctorat, Université Aix-Marseille, 139 p.
- Scherer, H., Weimann, T., Hinze, P., Samwer, B. W., Zorin, A. B. et Niemeyer, J. (1999). Characterization of all-chromium tunnel junctions and single-electron tunneling devices fabricated by direct-writing multilayer technique. *Journal of Applied Physics*, volume 86, numéro 12, p. 6956.
- Schmidt, J. et Kerr, M. (2001). Highest-quality surface passivation of low-resistivity p-type silicon using stoichiometric PECVD silicon nitride. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, volume 65, numéro 1-4, p. 585–591.
- Shin, S. J., Jung, C. S., Park, B. J., Yoon, T. K., Lee, J. J., Kim, S. J., Choi, J. B., Takahashi, Y. et Hasko, D. G. (2010). Si-based ultrasmall multiswitching single-electron transistor operating at room-temperature. *Applied Physics Letters*, volume 97, numéro 10, p. 103101.
- Shirakashi, J.-I., Matsumoto, K., Miura, N. et Konagai, M. (1997). Room temperature Nb/Nb oxide-based single-electron transistors. Dans *International Electron Devices Meeting. IEDM Technical Digest*. IEEE, p. 175–178.
- Sichel, E. K., Gittleman, J. I. et Zelez, J. (1977). Electrochromism in the composite material Au-WO₃. *Applied Physics Letters*, volume 31, numéro 2, p. 109.
- Simmons, J. G. (1963a). Electric Tunnel Effect between Dissimilar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film. *Journal of Applied Physics*, volume 34, numéro 9, p. 2581.
- Simmons, J. G. (1963b). Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film. *Journal of Applied Physics*, volume 34, numéro 6, p. 1793.
- Simmons, J. G. (1964). Generalized Thermal J-V Characteristic for the Electric Tunnel Effect. *Journal of Applied Physics*, volume 35, numéro 9, p. 2655.
- Snider, G. L., Orlov, A., Joshi, V., Joyce, R. a., Qi, H., Yadavalli, K. K., Bernstein, G. H., Fehlner, T. P. et Lent, C. S. (2008). Electronic quantum-dot cellular automata. Dans *2008 9th International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology*. IEEE, p. 549–552.
- Song, S.-H. et Xiao, P. (2003). An impedance spectroscopy study of oxide films formed during high temperature oxidation of an austenitic stainless steel. *Journal of Materials Science*, volume 38, numéro 3, p. 499–506.

- Srivastava, S., Asthana, A., Bhanja, S. et Sarkar, S. (2011). QCAPro - An error-power estimation tool for QCA circuit design. *2011 IEEE International Symposium of Circuits and Systems (ISCAS)*, p. 2377–2380.
- Takahashi, Y., Nagase, M., Namatsu, H., Kurihara, K., Iwdate, K., Nakajima, Y., Horiguchi, S., Murase, K. et Tabe, M. (1995). Fabrication technique for Si single-electron transistor operating at room temperature. *Electronics Letters*, volume 31, numéro 2, p. 136.
- Takechi, K. et Otsuki, S. (2006). Simulations for the Effect of Chamber Geometry on Oxygen Plasma Characteristics for Very Large Plasma Sources. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, volume 19, numéro 3, p. 286–291.
- Thorbeck, T., Fujiwara, A. et Zimmerman, N. M. (2012). Simulating Capacitances to Silicon Quantum Dots : Breakdown of the Parallel Plate Capacitor Model. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, volume 11, numéro 5, p. 975–978.
- Timler, J. et Lent, C. S. (2002). Power gain and dissipation in quantum-dot cellular automata. *Journal of Applied Physics*, volume 91, numéro 2, p. 823.
- Toffoli, T. et Margolus, N. (1987). *Cellular Automata Machines : A New Environment for Modeling*. MIT press, 254 p.
- Toth, G. et Lent, C. S. (1999). Quasiadiabatic switching for metal-island quantum-dot cellular automata. *Journal of Applied Physics*, volume 85, numéro 5, p. 2977.
- Tougaw, P. D. et Lent, C. S. (1994). Logical devices implemented using quantum cellular automata. *Journal of Applied Physics*, volume 75, numéro 3, p. 1818.
- Tougaw, P. D. et Lent, C. S. (1995). Effect of stray charge on quantum cellular automata. *Japanese journal of applied physics*, volume 34, numéro 8B, p. 4373–4375.
- Tougaw, P. D. et Lent, C. S. (1996). Dynamic behavior of quantum cellular automata. *Journal of Applied Physics*, volume 80, numéro 8, p. 4722.
- Tougaw, P. D., Lent, C. S. et Porod, W. (1993). Bistable saturation in coupled quantum-dot cells. *Journal of Applied Physics*, volume 74, numéro 5, p. 3558.
- Uchida, K., Matsuzawa, K., Koga, J., Ohba, R., Takagi, S.-i. et Toriumi, A. (2000). Analytical Single-Electron Transistor (SET) Model for Design and Analysis of Realistic SET Circuits. *Japanese Journal of Applied Physics*, volume 39, numéro Part 1, No. 4B, p. 2321–2324.
- van der Wiel, W. G., De Franceschi, S., Elzerman, J. M., Fujisawa, T., Tarucha, S. et Kouwenhoven, L. P. (2003). Electron transport through double quantum dots. *Reviews of Modern Physics*, volume 75, numéro 1, p. 1–22.
- van Wees, B., van Houten, H., Beenakker, C., Williamson, J., Kouwenhoven, L., van der Marel, D. et Foxon, C. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, volume 60, numéro 9, p. 848–850.

- Walter, C. W., Hertzler, C. F., Devynck, P., Smith, G. P. et Peterson, J. R. (1991). Photodetachment of WO₃ : The electron affinity of WO₃. *The Journal of Chemical Physics*, volume 95, numéro 2, p. 824.
- Walus, K., Dysart, T. J., Jullien, G. A. et Budiman, R. A. (2004). QCADesigner : A Rapid Design and Simulation Tool for Quantum-Dot Cellular Automata. *IEEE Transactions On Nanotechnology*, volume 3, numéro 1, p. 26–31.
- Wang, F., Di Valentin, C. et Pacchioni, G. (2011). Electronic and Structural Properties of WO₃ : A Systematic Hybrid DFT Study. *The Journal of Physical Chemistry C*, volume 115, numéro 16, p. 8345–8353.
- Wang, S. Q., Raaijmakers, I., Burrow, B. J., Suthar, S., Redkar, S. et Kim, K. B. (1990). Reactively sputtered TiN as a diffusion barrier between Cu and Si. *Journal of Applied Physics*, volume 68, numéro 1990, p. 5176–5187.
- Wang, X. et Porod, W. (2000). Single-electron transistor analytic I-V model for SPICE simulations. *Superlattices and Microstructures*, volume 28, numéro 5-6, p. 345–349.
- Wang, Z. F. et Liu, F. (2011). Nanopatterned graphene quantum dots as building blocks for quantum cellular automata. *Nanoscale*, volume 3, numéro 10, p. 4201–5.
- Wasshuber, C., Kosina, H. et Selberherr, S. (1997). SIMON-A simulator for single-electron tunnel devices and circuits. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, volume 16, numéro 9, p. 937–944.
- Weissler, G. L. et Carlson, R. W. (1979). *Methods of Experimental Physics. Vol. 14 : Vacuum Physics and Technology*. Academic Press, New York, 593 p.
- Wharam, D. A., Thornton, T. J., Newbury, R., Pepper, M., Ahmed, H., Frost, J. E. F., Hasko, D. G., Peacock, D. C., Ritchie, D. A. et Jones, G. A. C. (1988). One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, volume 21, numéro 8, p. L209–L214.
- Wypych, A., Bobowska, I., Tracz, M., Opasinska, A., Kadlubowski, S., Krzywania-Kaliszewska, A., Grobelny, J. et Wojciechowski, P. (2014). Dielectric Properties and Characterisation of Titanium Dioxide Obtained by Different Chemistry Methods. *Journal of Nanomaterials*, volume 2014, p. 1–9.
- Xuan, W., Beaumont, A., Guilmain, M., Bounouar, M.-A., Baboux, N., Eitzkorn, J., Drouin, D. et Calmon, F. (2012). Static and Dynamic Modeling of Single-Electron Memory for Circuit Simulation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, volume 59, numéro 1, p. 212–220.
- Yu, Y. et Hwang, S. (1999). Macromodeling of single-electron transistors for efficient circuit simulation. *Electron Devices, IEEE*, volume 46, numéro 8, p. 1667–1671.
- Zardalidis, G. et Karafyllidis, I. G. (2008). SECS : a new single-electron-circuit simulator. *Circuits and Systems I : Regular*, volume 55, numéro 9, p. 2774–2784.

- Zhai, H.-J. et Wang, L.-S. (2006). Probing the electronic properties of dichromium oxide clusters Cr_2O_n^- ($n=1-7$) using photoelectron spectroscopy. *The Journal of Chemical Physics*, volume 125, numéro 16, p. 164315.
- Zhang, F., Tang, R. et Kim, Y.-B. (2005). SET-based nano-circuit simulation and design method using HSPICE. *Microelectronics Journal*, volume 36, numéro 8, p. 741–748.

