

République Algérienne Démocratique et Populaire

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Hassiba Benbouali Chlef



Faculté des Sciences et Sciences de L'ingénieur

Département d'électronique

Mémoire De Magister en Electronique

Option : Nanotechnologie

Thème :

**MODÉLISATION ET SIMULATION DES PROPRIÉTÉS
PHYSIQUES ET ÉLECTRONIQUES DES NANOTUBES
DE CARBONE : APPLICATION AU CNTFET**

Présenté et soutenu par :

M^{elle} : MAHROUG RABIAA

Devant le jury composé de

Président	: Dr KOUADRI MOUSTEFAI SOUMIA	MCA	U.H.B.Chelf
Examineurs	: Pr BENAROUS M ^{ed}	Pr	U.H.B.Chelf
Examineurs	: Dr LOUNIS MOURAD	MCA	U.S.T.Oran
Examineurs	: Mr BOUREMLI MOHAMED	MAA	U.H.B.Chelf
Encadreurs	: Dr AEK ALI BENAMARA	MCA	U.H.B.Chelf

Année universitaire : 2008-2009

Remerciements

Toute ma reconnaissance et mon respect vont à Mr ALI BENAMARA AEK, maître de conférences de l'UHB Chlef, qui a accepté de diriger ce travail et surtout pour la confiance qu'il m'a gracieusement accordée lors de ce travail. Il m'a fait bénéficier de son savoir et de son expérience. Il a su par ses idées, ses conseils, ses explications et ses critiques conduire ce travail à sa fin.

Je tiens à remercier aussi Dr KOUADRI MOUSTEFAI SOUMIA, maître de conférences à l'UHB Chlef, notre enseignante en post-graduation qui a accepté de présider cette soutenance. Je lui exprime ma sincère reconnaissance pour son aide documentaire notamment durant l'année théorique.

J'adresse toute ma gratitude à monsieur BENAROUS MOHAMED professeur à l'UHB Chlef, notre enseignant en post-graduation pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je tiens à remercier monsieur LOUNIS MOURAD, maître de conférences à l'UST Oran, d'avoir accepté de faire partie de mon jury.

Je tiens à remercier monsieur BOUREMLI MOHAMED, maître assistant A à l'UHB Chlef d'avoir accepté de faire partie de mon jury.

Notre gratitude à monsieur ALLOUNE Mohamed Alâa-Eddine maître assistant à l'Ecole Normale Supérieure de Kouba pour son aide et son orientation.

A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin, à tous ceux qui m'ont encadrée, à tous ceux qui m'ont encouragée, à tous ceux qui m'ont accordée leur confiance, à tous ceux qui m'ont montrée leur intérêt, à vous tous MERCI.

Mahroug Rabiaa

Dédicace

Je dédie ce modeste travail

**A mes parents qui m'ont permis d'améliorer la qualité de ce mémoire par leur encouragement et leur soutien moral, que Dieu leur accorde la santé et le bonheur.*

**A mes grands parents*

**A mes frères*

**A mes sœurs*

**A mes neveux*

*Karim et sa famille Cherief. *A mon mari*

**A Karima, Fatima, Mahdia, Hamida, Naima, Kheira, Akila, Zahira, Hassiba, Imene, Soumia, Nawel, Khadidja, Dalila et Aicha.*

**A tous mes amies de :*

--Centre universitaire de Khemis Miliana

-Université de Hassiba Ben Bouali promotion magister 2005/2006 surtout les étudiants de magister nanotechnologie.

**A toute personne ayant participé de loin ou de près pour l'achèvement de ce travail.*

Mahroug Rabiaa

Liste des symboles

A_S et A_D	Fonctions spectrales associées à la source et au drain
n, m	Indices de chiralité
θ	Angle de chiralité
\vec{c}_h	Vecteur chiral
\vec{a}_1, \vec{a}_2 et \vec{a}_3	Vecteurs de base du réseau réel
V	Volume de la maille élémentaire
\vec{b}_1, \vec{b}_2 et \vec{b}_3	Vecteurs de base du réseau réciproque
\vec{k}	Vecteur d'onde
ϕ_j	Orbitales atomiques
E_j	Energies propres
$ \Phi(\vec{k}, \vec{r})\rangle$	Orbitales de Bloch
S	Matrice de recouvrement
γ_1	Paramètre de recouvrement
γ_0	Paramètre de saut
a_{cc}	Distance C-C dans les nanotubes
d_t	Diamètre du nanotube
R	Rayon du nanotube
L_{per}	Longueur d'une période selon l'axe du tube
N_{per}	Nombre d'atomes compris dans une période de nanotube
\vec{T}	Vecteur translation
$\rho(E)$	Densité d'états
R_{DS}	Résistance entre drain et source
b	Largeur du canal
I_{DSS}	Courant maxi
V_P	Tension de pincement
I_{OFF}	Courant inverse

I_{ON}	Courant de conduction directe
h	Constante de Planck
H	Hamiltonien
I	Courant du canal
ID	Courant de drain
KB	Constante de Boltzmann
LG	Longueur du canal
Q	Charge d'électron
t_{OX}	Epaisseur d'oxyde
T	Température
$T_{S,D}$	Coefficient de transmission de la source au drain
VGS	Tension grille-source
VDS	Tension drain-source
VG	Tension du grille
VD	Tension de drain
V	Potentiel électrostatique
μ_D	Niveau de Fermi du drain
μ_S	Niveau de Fermi pour la source
Σ_S et Σ_D	Self-énergies de la source et du drain
ND	Dopage de source (n+ type)
$VCNT$	Potentiel au début du canal
t_{ins}	Epaisseur d'oxyde de grille
V_{pp}	Paramètre de saut
$\epsilon_{ps_{oxd}}$	Constante diélectrique d'oxyde de grille,
N_{band}	Nombre de sous-bandes
L_{sd}	Longueur source/drain
ϵ_r	Constante diélectrique relative
Γ_S, Γ_D	Fonctions spectrales de la source et du drain
D_S, D_D	Densités d'états locaux de la source et du drain
$Q_S(z), Q_D(z)$	Densités de charge de la source et du drain

Σ^{in} et Σ^{out}	Fonctions de diffusion (in/out)
$f(E)$	Distribution de Fermi Dirac
E_S^F et E_D^F	Energies de Fermi de la source et de drain
v	Vitesse des porteurs dans une bande
$\rho(r, z)$	Distribution de densité de charge nette
r_{CNT}	Rayon de nanotube de carbone
Q_{ind}	Charge induite
$n(z)$ et $p(z)$	Concentrations d'électrons et de trous par unité de longueur
N_D^+ et N_A^-	Concentrations ionisées de donneurs et d'accepteurs
U^{tol}	Valeur de tolérance de potentiel
\vec{D}	Champ de déplacement à 2 dimensions
L_x et L_y	Dimensions latérale et transversale du dispositif.
N_x et N_y	Nombres de nœuds de discrétisation latéraux et transversaux.
$V_{m,n}$	Potentiel électrostatique au milieu de l'élément de volume (m,n)
ρ_{1D}	Densité de charge linéaire nette
$g(E)$	Densité d'états effectifs
m_C	Masse d'un atome de carbone
Δz	Distance moyenne d'anneau
$G(E)$	Fonction de Green
D_0	Constante de couplage
$\Sigma_{scat}(E)$	Fonctions de diffusion
$\Sigma_{scat}^{out}(E)$, $\Sigma_{scat}^{in}(E)$	Fonctions de diffusion (in/out)
v_a	Vitesse de son de mode du phonon

LISTE DES TABLEAUX

I.1 Caractéristiques structurales d'un nanotube de carbone monocouche en fonction de sa symétrie. $a_{CC} = 1,42 \text{ \AA}$	12
II.1 Comparaison des trois types de CNTFET.....	53
II.2 Comparaison de V-CNTFET et MOSFET.....	54

LISTE DES FIGURES

CHAPITRE I : Les nanotubes de carbone

I.1 a) Atome de carbone b) Orbitales de l'atome de carbone.....	4
I.2 a) Le graphène : structure et apparence physique. b) le graphite: structure et apparence physique.....	5
I.3 Trois types d'empilement des couches de graphène.....	6
I. 4 a) Vecteurs unitaires, dimensions, maille élémentaire (Partie grisée) et couche graphène b) Distances interatomiques dans les feuillets graphitiques.....	6
I.5 a) Structures du diamant, (b)-(c) forme cubique, (d) forme hexagonale (lonsdaleite).....	7
I.6 Les fullerènes.....	8
I.7 Du C ₆₀ au C ₈₀ : les atomes ajoutés au C ₆₀ pour obtenir le C ₇₀ et le C ₈₀ sont représentés en rouge.....	9
I.8 Le passage du fullerène vers le tube de carbone	9
I.9 Repliement d'un feuillet de graphène et raccordement de manière à former un nanotube zigzag.....	10
I.10 Repliement d'un feuillet de graphène et raccordement de manière à former un nanotube armchair.....	10
I.11 Repliement d'un feuillet graphène, translation d'un bord parallèlement à l'axe du nanotube, puis raccordement de manière à former un nanotube chiral.....	11
I.12 Représentation des couples d'énantiomères (n,m) et (n+m,-m), d'après l'indexation de Hamada.....	11
I.13 Représentation du vecteur \vec{c}_h définissant l'enroulement du feuillet graphitique.....	12
I.14 a) Le modèle poupées russes. b) Le modèle parchemin.....	13
I.15 Représentation des différentes propriétés d'un nanotube de carbone.....	14
I.16 Schéma de principe de la méthode de synthèse par arc électrique.....	17
I.17 Schéma de principe de la méthode de synthèse par ablation laser.....	18
I.18 Coupe schématique du réacteur HiPco.....	19
I.19 a) Couche de graphène. b) Empilement de trois couches de graphène (graphite). c) Structure des orbitales moléculaires du carbone dans un plan de graphite.....	20
I.20 Réseau hexagonal d'un feuillet de graphène avec, en pointillés, sa maille élémentaire. Les vecteurs primitifs du réseau hexagonal \vec{a}_1 et \vec{a}_2	21

I.21 a) Réseau réciproque du feuillet de graphène avec, en ombré, la première zone de Brillouin. b) première zone de Brillouin.....	22
I.22 Zone de Brillouin pour le graphène, avec ses points de hautes symétries	25
I.23 a) Relation de dispersion du graphène, b) Structure de bandes du graphène dans la zone de Brillouin.....	26
I.24 Structure d'une feuille de graphite à 2 dimensions.....	28
I.25 Les trois formes de nanotubes de carbone.....	29
I.26 (a) Zone de Brillouin étendue. (b) dans les directions données par les lignes rouges. (c) Lignes d'égale énergie dans la zone de Brillouin.....	30
I.27 En haut : Zone de Brillouin du graphène avec la famille de droites définissant les valeurs permises pour le vecteur d'onde k dans le nanotube. En bas: Relations de dispersion correspondantes pour trois nanotubes différents.....	32
I.28 Zone de Brillouin autour du point K : a) pour $\nu = 0$, b) pour $\nu = 1$, c) pour $\nu = 2$	34
I.29 Densité d'états électroniques d'un CNT : a) métallique, b) semiconducteur de même diamètre.....	36

CHAPITRE II : Les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone

II.1 Loi de Moore.....	37
II.2 Construction de base d'un transistor à jonction à effet de champ.....	38
II.3 Symboles des deux types de JFET.....	39
II.4 Modulation de conductivité à $V_{DS}=0$	40
II.5 Phénomène de pincement.....	40
II.6 Modulation de conductivité pour V_{DS} non nul.....	41
II.7 Caractéristiques du JFET.....	42
II.8 Schéma de principe d'un MOSFET canal N.....	44
II.9 Phénomène d'inversion.....	45
II.10 Caractéristique de sortie du MOS canal N.....	45
II.11 Caractéristique de transfert du MOS canal N.....	46
II.12 MOSFET N à canal initial.....	46
II.13 Caractéristique de transfert d'un MOS à canal initial	47
II.14 Transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone.....	48
II.15 Bottom gated CNTFET.....	49

II.16 Top-gated CNTFET.....	49
II.17 Vertical CNTFET.....	50
II.18 Schémas des différentes façons d'incorporer une impureté : a) Intercalation, b) Fonctionnalisation, c) Substitution	51
II.19 Types de CNTFETs (a) barrière Schottky, (b) partially-gated and (c) S/D dopé.....	52
II.20 Transistor CNT, image au MEB (droite), à l'AFM (gauche).....	55

CHAPITRE III : Le transport électronique dans les systèmes mésoscopiques

III.1 Evolution de la distribution de Fermi-Dirac pour 0K, 100K et 300K. $E_f=50\text{meV}$	61
III.2 Evolution de la distribution de Fermi-Dirac sous l'influence d'un champ électrique...	63
III.3 Schéma illustrant le transport dans le régime diffusif.....	63
III.4 a) Schéma illustrant le transport dans le régime balistique b) Schéma de principe d'un système balistique.....	65
III.5 Schéma de principe pour un système désordonné.....	66
III.6 Diffusion quantique au sein d'un système désordonné.....	70

CHAPITRE IV : Modélisation et simulation du CNTFET

IV.1 Types de CNTFETs : a) Schéma physique d'un CNTFET à barrière Schottky, b) Schéma de bandes d'énergie associé. c) Schéma physique d'un CNTFET à modulation de hauteur de barrière, d) Schéma de bandes d'énergie associé	74
IV.2 Relation de dispersion d'un nanotube : μ_S et μ_D sont les niveaux de Fermi de la source et du drain.....	75
IV.3 Capacités contribuant à définir le potentiel V_{CNT}	75
IV.4 Deux géométries définissant la capacité de grille MIC (Métal-Isolateur-CNT) : a) capacité MIC planaire ; b) capacité MIC coaxiale.....	76
IV.5 Le transistor générique avec un canal nanométrique molécule ou dispositif relié à la source et au drain.....	77
IV.6 Diagramme schématique du nanotube zigzag (n, 0) (n = 6).....	79
IV.7 Calcul de la self-énergie de source pour un CNT zigzag.	82
IV.8 a) Réseau de l'espace réel à 2 dimensions du CNT zigzag (n, 0), b) réseau de l'espace des modes à 1 dimension.	87
IV.9 (a) Structure de dispositif CNT-MOSFET idéal. (b) modèle de NEGF (c) hamiltonien dans l'espace des modes.....	88
IV.10 Boucle d'auto-cohérence entre les solutions Schrödinger Poisson.....	93

IV.11 Organigramme de la simulation. L'indice i représente le nombre d'itérations de la boucle Schrödinger-Poisson	95
IV.12 Réseau de discrétisation.....	96
IV.13 a) Maillage des différences finies à 2 dimensions pour résoudre l'équation de Poisson dans une géométrie cylindrique symétrique, b) Nœuds autour de l'élément (m,n)	97
IV.14 Plan de discrétisation à la frontière.....	98
IV.15 a) Schéma de principe montrant les 3 premières sous-bandes, b) Densité d'états associées en unités arbitraires en fonction de l'énergie.....	102
IV.16 Organigramme de la procédure numérique de la résolution du système des équations Schrödinger -Poisson	104
IV.17 Mouvements possibles entre les deux atomes d'une maille élémentaire.....	106
IV.18 Branches de dispersion des phonons dans le graphène.....	106
IV.19 Branches de dispersion des phonons dans le graphite obtenues par diffusion inélastique de rayons X (ronds pleins) et calculs ab initio (ronds creux).....	106
IV.20 Dispersion des phonons dans un nanotube chaise $(10,10)$ calculée par deux méthodes différentes (ab initio et méthode du repliement).....	107
IV.21 Mode de phonon dit respirant d'un nanotube de carbone.....	108
IV.22 Sous-bandes dégénérées de la plus basse énergie dans un CNT correspondant aux vallées de K et de K' de la zone de Brillouin à 2 dimensions du graphène. (a) et (b) montrent le processus de diffusion intra-vallée et inter-vallée.....	109
IV.23 Energie de dispersion des modes de phonons dans un CNT $(16,0)$: a) phonons de la zone-centre qui permettent la diffusion intra-vallée, b) phonons de la zone-limite qui permettent la diffusion inter-vallée.....	110
IV.24 (a) Structure de dispositif avec la grille enroulée, (b) modèle de NEGF avec le couplage des phonons.....	111
IV.25 Organigramme de la résolution des équations Schrödinger –Poisson.....	114
IV.26 Organigramme de la procédure numérique de la résolution du système des équations Schrödinger -Poisson	115

CHAPITRE V : Résultats et discussion

V.1 Première zone de Brillouin des nanotubes a) chaise $(14,14)$ et b) zigzag $(14,0)$ superposée à celle du graphène	118
---	-----

V.2 Première zone de Brillouin du nanotube (12,8) et famille de droites définissant les valeurs permises pour le vecteur d'onde k	118
V. 3 Dispersion des bandes de valence (en bas) et de conduction (en haut) des nanotubes chaise (18,18) et zigzag (12,0) en fonction de l'énergie.....	119
V.4 Structure de bandes du graphène dans la zone de Brillouin.....	120
V.5 Structure de bandes dans la zone de Brillouin du nanotube de carbone (12,8) (Relations de dispersion).....	120
V.6 Profils de l'énergie potentielle le long du canal sous une tension de drain $V_{DS}=0.4V$	121
V.7 Densité électronique le long du canal obtenue par le formalisme des fonctions de Green hors équilibre.....	122
V.8 I_D-V_G d'un transistor CNTFET (13.0) dans le cas du transport balistique.....	123
V.9 $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (13.0) dans le cas du transport balistique pour différentes valeurs de V_G	124
V.10 $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas du transport balistique pour différentes valeurs de V_G	124
V.11 $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (19.0) dans le cas du transport balistique pour différentes valeurs de V_G	125
V.12 $I_{DS} - V_{DS}$ simulées à deux températures, a)100K et b) 300K, avec $V_{DS}=0.4V$ et V_G varie de 0 à 0.5V par pas de 0.1V.....	126
V.13 Spectre de la densité de trous pour un CNTFET (16.0).....	127
V.14 Spectre de la densité d'électrons pour un CNTFET (16.0).....	127
V.15 Spectre de la densité d'états pour un CNTFET (16.0).....	127
V.16 $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas du transport diffusif et la diffusion des phonons acoustiques.....	129
V.17 $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas du transport diffusif et la diffusion des phonons optiques.....	130
V.18 $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas des transports balistique et diffusif et la diffusion des phonons optiques et acoustiques (D'après Kozwatta et al et Jing Guo et al).....	130

SOMMAIRE

Introduction

générale.....1

CHAPITRE I : Les nanotubes de carbone

I.1	Introduction.....	4
I.2	Définition.....	4
I.3	Les formes allotropiques du carbone.....	5
I.3.1	Le graphite.....	5
I.3.2	Le diamant.....	6
I.3.3	Les fullerènes.....	7
I.4	Les nanotubes de carbone.....	8
I.4.1	Découverte des nanotubes.....	8
I.4.2	Types de nanotubes de carbone.....	9
I.4.2.1	Les nanotubes monoparois (SWNT).....	9
I.4.2.2	Les nanotubes multicouches (MWNT).....	13
I.4.3	Propriétés des nanotubes de carbone (CNT).....	14
I.4.3.1	Propriétés électriques.....	14
I.4.3.2	Propriétés mécaniques.....	15
I.4.3.3	Propriétés chimiques.....	15
I.4.3.4	Propriétés optiques.....	16
I.4.4	Différentes méthodes de synthèse.....	17
I.4.4.1	L'arc électrique.....	17
I.4.4.2	L'ablation laser.....	18
I.4.4.3	Synthèse par décomposition catalytique de CO.....	18
I.4.4.4	Autres voies de synthèse.....	19
I.4.5	Structure électronique des nanotubes de carbone.....	20
I.4.5.1	Présentation du graphite.....	20
I.4.5.1.1	Structure cristalline du graphite.....	20

I.4.5.1.2	Structure de bandes électroniques du graphène.....	22
I.4.5.1.3	Structure de bandes électroniques des CNT.....	27
I.4.5.3.1	Structure cristalline du CNT.....	27
I.4.5.3.2	Structure de bandes des nanotubes de carbone.....	31
I.4.5.3.3	Densité d'états.....	34
I.5	Conclusion.....	36

CHAPITRE II : Les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone

II.1	Introduction.....	37
II.2	Le transistor à effet de champ.....	38
II.2.1	Définition et types de FET.....	38
II.3	Le transistor à effet de champ à jonction	38
II.3.1	Définition et principe de fonctionnement	38
II.3.2	Constitution d'un FET.....	38
II.3.3	Phénomène de pincement.....	39
II.3.3.1	Tension drain-source nulle.....	39
II.3.3.2	Tension drain-source non nulle.....	40
II.3.4	Caractéristiques.....	41
II.3.4.1	Caractéristiques d'entrée.....	41
II.3.4.2	Caractéristiques de sortie et de transfert.....	42
II.4	Le transistor à effet de champ à grille isolée.....	44
II.4.1	Le MOSFET à canal induit.....	44
II.4.1.1	Description.....	44
II.4.1.2	Principe de fonctionnement.....	45
II.4.1.3	Caractéristiques.....	45
II.4.2	Le MOSFET à canal initial.....	46
II.4.2.1	Description et principe de fonctionnement.....	46
II.4.2.2	Caractéristiques.....	47
II.5	Le transistor à effet de champ à base à nanotube de carbone.....	47
II.5.1	Principe de fonctionnement.....	47
II.5.2	Constitution d'un CNTFET.....	47
II.5.3	Types de CNTFET.....	48

II.5.3.1 Bottom-gated CNTFET.....	48
II.5.3.2 Top-gated CNTFET.....	49
II.5.3.3 Planar-gated CNTFET.....	50
II.5.3.4 Vertical CNTFET.....	50
II.5.3.5 Electrolyte-gate CNTFET.....	50
II.5.4 Conductivité et dopage des CNTs.....	51
II.5.5 Fabrication d'un CNTFET.....	54
II.6 Conclusion.....	55

CHAPITRE III : Le transport électronique dans les systèmes mésoscopiques

III.1 Introduction.....	56
III.1.1 Grandeurs caractéristiques.....	56
III.1.1.1 Longueur d'onde électronique de Fermi.....	57
III.1.1.2 Libres parcours moyens élastique et inélastique.....	57
III.1.1.3 Longueur de cohérence de phase.....	58
III.1.2 Transport électronique au sens classique.....	59
III.1.2.1 Modèle de Drude/Boltzman.....	60
III.1.2.1.1 Modèle de Boltzman.....	60
III.1.2.1.2 Lien avec la diffusion électronique.....	63
III.1.2.2 Modèle de Landauer-Büttiker.....	64
III.1.2.2.1 Transport balistique.....	64
III.1.2.2.2 Conductance d'un système désordonné.....	66
III.1.2.2.3 Transport incohérent.....	67
III.1.2.2.4 Transport cohérent.....	68
III.1.2.3 Transport quantique, localisation faible.....	70
III.1.2.3.1 Correction à la conductivité.....	70
III.1.2.3.2 Fluctuation de la conductivité.....	72

CHAPITRE IV : Modélisation et simulation du CNTFET

IV.1 Introduction.....	73
IV.2 Physique du transistor à base de nanotubes.....	73

IV.3	Formalisme de fonctions de Green hors équilibre NEGF.....	76
IV.3.1	Traitement atomique NEGF de transport dans le CNTFET.....	79
IV.3.1.1	Approche de l'espace réel	79
IV.3.1.2	Self-énergies de la source et du drain dans l'espace réel.....	81
IV.3.1.3	Approche de mode d'espace atomique	83
IV.3.1.4	Hamiltonien du CNTFET dans le mode d'espace.....	83
IV.4	Sans interactions électron-phonon: Traitement NEGF du transport balistique dans les CNTFETs.....	88
IV.4.1	Hamiltonien du CNTFET.....	88
IV.4.2	Équation de Poisson.....	93
IV.4.3	Résolution de l'équation de Poisson par la méthode de différences finies.....	95
IV.4.3.1	Réseau de discrétisation.....	95
IV.4.3.2	Technique de discrétisation.....	96
IV.4.3.3	Discrétisation de l'équation de Poisson.....	97
IV.4.3.4	Linéarisation et résolution des équations.....	99
IV.5	Avec interactions électron-phonon: Traitement NEGF de transport dissipatif dans les CNTFETs.....	105
VI.5.1	Relation de dispersion des phonons dans le graphène.....	105
VI.5.2	Relation de dispersion des phonons dans les CNTs.....	107
VI.5.3	Modes de phonons dans un CNT.....	108
VI.5.4	Traitement NEGF du transport dissipatif dans le CNTTFET.....	111
VI.5.4.1	Diffusion électron-phonon.....	111
VI.5.4.2	Traitement numérique du transport dissipatif.....	113
VI.5.4.2.1	Traitement de la diffusion des phonons optiques.....	113
VI.5.4.2.2	Traitement de la diffusion des phonons acoustiques.....	114
IV.6	Conclusion	116

CHAPITRE V : Résultats et discussion

V.1	Introduction.....	117
V.2	Résultats de simulations.....	117
V.2.1	Structure électronique du CNT.....	117
V.2.2	Résultats de simulation des propriétés électroniques d'un CNTFET sans interactions électron-phonon.....	120

V.2.2.1 Profils de l'énergie potentielle le long du canal.....	121
V.2.2.2 Influence des variations paramétriques des dispositifs CNTFETs.....	22
V.2.2.2.1 Influence de la variation du diamètre.....	124
V.2.2.2.2 Influence de la variation de la température.....	125
V.2.3 Résultats de simulation des propriétés électroniques d'un CNTFET avec interactions électron-phonon.....	128
V.2.3.1 Diffusion des phonons acoustiques.....	128
V.2.3.2 Diffusion des phonons optiques.....	129
V.3 Conclusion.....	131

Conclusion

générale	132
-----------------------	-----

Bibliographie	133
----------------------------	-----

Résumé

Introduction générale

INTRODUCTION GENERALE

Les dernières années ont vu l'émergence des applications des nanotubes de carbone, alors que dans un avenir proche il est raisonnable de prévoir que les nanotechnologies vont pénétrer des domaines d'applications principaux comme l'énergie, les matériaux, les dispositifs électroniques, etc.

Découverts en 1991 par Sumio Iijima, les nanotubes de carbone (CNTs) sont devenus rapidement les fanions de la nanotechnologie avec les nanoparticules, les nanofils, les fullerènes et les couches moléculaires. Les nanotubes existent en plusieurs variétés et peuvent être classifiés par leur hélicité (chiralité), nombre de feuillets, la présence des pentagones-heptagones dans leur structure, etc. La forme la plus simple est le nanotube de carbone monofeuillet, qui peut être visualisé comme une feuille de graphène, ressemblant à un nid d'abeilles, roulée dans un cylindre.

Si les nanotubes de carbone occupent le rôle qu'ils ont aujourd'hui, cela est exclusivement dû à leurs exceptionnelles propriétés structurales, mécaniques, électroniques et optiques. Du point de vue électronique, un simple changement de la direction de roulement du graphène, peut donner des tubes métalliques ou semi-conducteurs. Les tubes métalliques sont des conducteurs balistiques sur des longueurs de l'ordre du micromètre, capables de ce fait de supporter très efficacement des courants sans perte de puissance par effet Joule. Ceci signifie également que les nanotubes peuvent soutenir des densités de courant énormes environ de $25\mu\text{A}$. Les tubes semiconducteurs ont un gap dépendant de leur diamètre, et possèdent des mobilités de porteurs surpassant de loin ceux du matériau archétype de l'électronique, le silicium.

Les nanotubes de carbone sont plus durs que le diamant. Ils peuvent aussi supporter des déformations de quelques pourcents tout en restant élastiques. La liste de leurs avantages ne doit pas s'arrêter ici, puisque les nanotubes de carbone possèdent des propriétés optiques, thermiques, électromécaniques et magnétiques également intéressantes.

Bien que de mieux en mieux contrôlée, la synthèse des nanotubes de carbone implique des mécanismes qui ne sont pas parfaitement compris à l'heure actuelle. Cette chaîne manquante est directement responsable de l'incapacité de synthétiser des nanotubes avec des propriétés contrôlées, et est probablement la raison principale pour laquelle les nanotubes de carbone ne sont pas employés sur une plus grande échelle.

Hormis ceci, un aspect essentiel laissant envisager la conception de dispositifs à base de nanotubes de carbone est l'accord toujours meilleur entre les prévisions théoriques et les données expérimentales. Comme note latérale, c'est par des calculs théoriques simples que la nature métallique-semiconducteur des nanotubes, leurs modules de Young et les transitions optiques ont été prédits dès le tout début. Tandis qu'une partie importante des efforts de recherches sur les nanotubes de carbone se concentre sur l'amélioration des techniques de fabrication et de manipulation, une autre partie augmente sans interruption, c'est la compréhension du point de vue physique des nanotubes alors que d'autres essayent de développer des applications.

Une courte analyse de l'activité de brevetage sur des applications à base de nanotubes de carbone indique que les zones principales sont occupées par l'émission de champ, le stockage d'énergie, les composites, la nanoélectronique, les capteurs et les actionneurs, etc. Dans chacune de ces applications possibles, les nanotubes sont loin de réaliser leur potentiel. D'ailleurs, d'autres applications sont rajoutées à cette liste chaque jour. Nous pouvons alors sans risque dire que le secteur de recherches d'applications à base de nanotubes est toujours dans sa petite enfance offrant beaucoup d'occasions de développement.

Dans ce mémoire, nous nous sommes focalisés sur l'application possible des nanotubes de carbone dans les transistors à effet de champ. Notre but principal est d'avancer les modèles théoriques des nanotubes et de les employer en tant qu'outils prédictifs, non pas dans le but de calculer des propriétés fondamentales, mais plutôt pour concevoir des potentiels dispositifs d'intérêt pratique. De ce fait, l'objectif principal de cette thèse consiste à modéliser les propriétés électroniques et électriques d'un transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone.

Le contenu de cette thèse est divisé en cinq chapitres. Le chapitre I présente une brève introduction à l'historique des nanotubes de carbone, les différents types de nanotubes de carbone, leurs méthodes de synthèses et leurs différentes propriétés électriques, mécaniques, optiques et chimiques. La dernière partie de ce chapitre présente une introduction à la structure et aux propriétés électroniques des nanotubes de carbone. Des éléments cristallographiques de base comme les vecteurs de translation, la première zone de Brillouin etc. sont établis à partir de ceux du graphite. La structure électronique du graphène basée sur le modèle classique de liaisons fortes sera employée pour arriver à la structure de bande des nanotubes en imposant des conditions aux limites périodiques.

Le chapitre II explique le principe de fonctionnement du transistor FET et les différents types de transistors à effet de champ (JFET – MOSFET), On a ensuite étudié les nouveaux transistors à effet de champs à base de nanotube de carbone (CNTFET). Le chapitre III présente une introduction sur le transport électronique dans les systèmes mésoscopique et les différents régimes de transport.

Le chapitre IV présente le formalisme à la base des calculs modernes de transport dans les nanostructures, le formalisme des fonctions de Green hors équilibre (NEGF). La théorie de transport résultante est construite sur les fondements rigoureux des statistiques quantiques de non-équilibre. Cette fonction de Green est résolue pour obtenir la densité d'électrons dans le dispositif et le courant sur les bornes dans la limite balistique. Dans des conceptions balistiques, le formalisme des fonctions de Green hors équilibre est mathématiquement équivalent à la résolution de l'équation de Schrödinger avec des conditions aux limites ouvertes. Cette dernière résolution nous permet d'obtenir les niveaux d'énergies et les fonctions d'ondes dans la direction du confinement quantique.

Dans un deuxième temps, une analyse du transport en régime dissipatif sera menée. En particulier on s'intéressera aux effets du couplage électron-phonon sur le transport, et on évaluera les longueurs de cohérence en fonction de la qualité structurale du nanotube, de ses propriétés géométriques et des modes de phonons considérés (acoustiques, optiques, bord de zone).

Les résultats de simulation et les discussions sont présentés au chapitre V.

CHAPITRE I :

Les nanotubes de carbone

Le carbone est l'élément certainement le plus étudié au monde, cet élément a pour particularité de pouvoir être métallique, semi-conducteur ou isolant. Ces propriétés particulières en font un matériau de choix pour la nanoélectronique, mais également dans de nombreux domaines industriels ou de technologies de pointes pour ses propriétés physicochimiques, mécaniques, ou électroniques [1][2].

Les formes les plus connues sont le diamant, le graphite, les fullerènes découverts en 1985 par Richard Smalley et al [2]. Puis la découverte des nanotubes en 1991 par Iijima a suscité des perspectives d'un très large spectre [1][2]. Les nanotubes de carbone sont des systèmes modèles à la frontière entre la physique microscopique et nanoscopique. Les nanotubes de carbone sont très étudiés. Ils sont à l'intersection du monde des chimistes et du monde des physiciens [3]. Ces nano-objets à 1 dimension ne cessent de révéler des propriétés physiques remarquables. Les nanotubes de carbone ont des qualités mécaniques (robustesse, élasticité) exceptionnelles, auxquelles s'ajoutent une excellente conduction de la chaleur et de l'électricité. Les nanotubes de carbone sont donc des composants élémentaires idéaux pour la réalisation de nano-dispositifs mécaniques, électroniques ou électromécaniques.

Dans ce chapitre, nous présentons une brève introduction à l'histoire des nanotubes de carbone, les différents types de nanotubes de carbone, leurs nombreuses propriétés et leurs méthodes de synthèses. Finalement, nous détaillerons la structure géométrique des nanotubes parfaits, leur structure de bande électronique associée. Par la suite, nous rappellerons en premier lieu les propriétés du graphite, ce qui se révélera très utile pour comprendre celles des nanotubes de carbone.

I.7 Définition

Le carbone est un élément chimique non métallique (symbole C), de numéro atomique 6, de masse atomique 12,01 ; appartenant au groupe 14 de la classification de Mendeleïev [1][2][3].

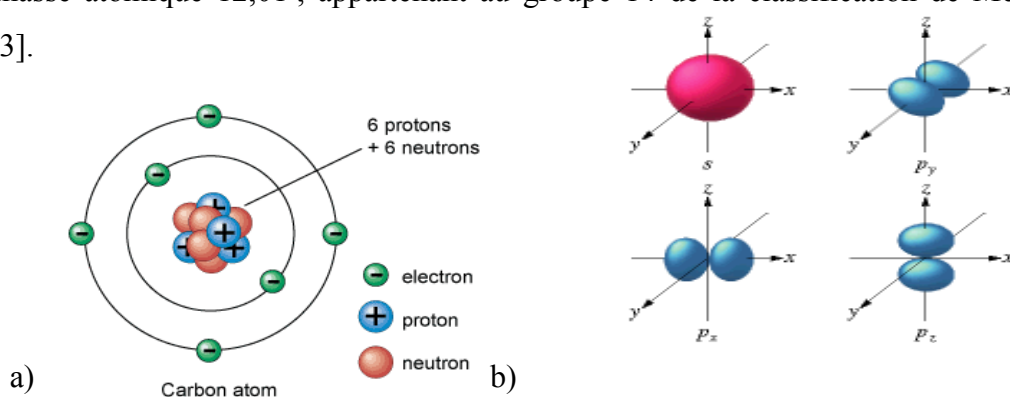


Figure I.1 : a) Atome de carbone b) Orbitales de l'atome de carbone

La couche externe du carbone (figure I.1.a) $n=2$ est caractérisée par 4 états propres différents, appelées aussi orbitales, que l'on peut noter $2s$, $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$ (figure I.1.b); elles correspondent à 4 états électroniques possibles des quatre électrons de valence [1].

Le carbone à l'état pur et dense existe, principalement, sous deux formes cristallines : le graphite et le diamant [1][32]. En 1985, une nouvelle forme de structure formée uniquement d'atomes de carbone est découverte, ce sont les fullerènes ; on les trouve dans les suies. Leurs liaisons chimiques sont de type sp^2 [4][5]. En 1991, le nanotube de carbone est identifié comme structure tubulaire de carbone ; la liaison chimique est de type sp^2 , imposant une structure localement hexagonale et plane [32].

I.8 Les formes allotropiques du carbone

I.3.4 Le graphite

Le graphite est la forme commune naturelle du carbone. Le graphite naturel est un minéral noir luisant se présentant sous forme de paillettes et de filons (Figure I.2.a), constitué de carbone seulement [5][16].

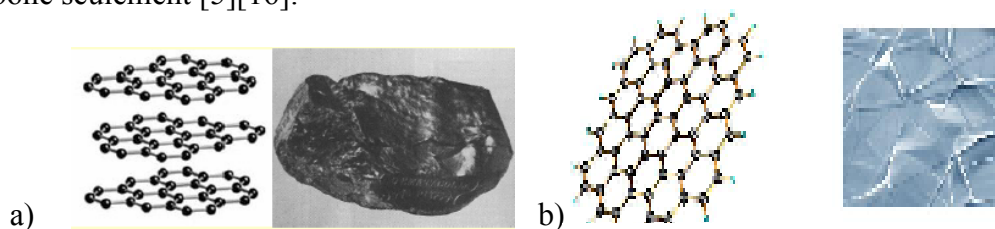


Figure I.2 : a) Le graphite: structure et apparence physique. b) Le graphène : structure et apparence physique

Le graphite en paillettes est opaque, flexible, gras et relativement tendre ; il possède une dureté de 1 à 2 sur l'échelle de Mohs et une densité de $2,26 \text{ g/cm}^3$. Le graphite se révèle un excellent conducteur d'électricité et de chaleur, et il a un point de fusion élevé (3500°C). C'est un semi-métal, c'est-à-dire qu'il possède des propriétés métalliques mais avec un très petit nombre de charges libres, porteuses du courant électrique, par unité de volume. Ceci provient du fait que la bande de valence et la bande de conduction du graphite se recouvrent très peu. Il est extrêmement résistant aux acides, chimiquement inerte et fortement réfractaire [12][13][14].

Du point de vue cristallographique, le graphite est un cristal lamellaire de symétrie hexagonale, qui se clive facilement perpendiculairement à son axe de symétrie hexagonale. C'est un empilement de couches graphitiques, appelée aussi graphènes (Figure I.2.b). La

distance entre plans, notée d_{p-p} , vaut 0.335 nm. Les liaisons C-C dans le plan sont covalentes de type sp^2 [19][29].

Les liaisons entre couches graphènes sont faibles et produites essentiellement par l'interaction des électrons des liaisons π , il s'agit d'interactions de type van der Waals. On peut ainsi obtenir plusieurs types d'empilements des couches graphènes (Figure I.3) [19][36] :

- ☀ AAA (hexagonal simple) 0% (énergétiquement défavorable)
- ☀ ABA (hexagonal) 85% (que l'on appellera contact graphitique)
- ☀ ABC (rhomboédrique) 15%

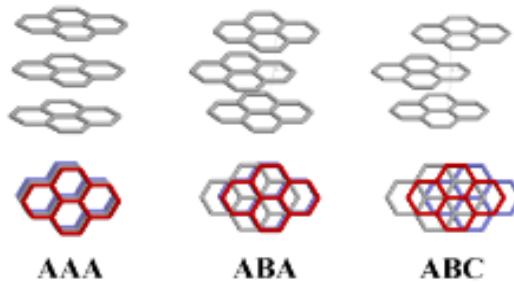


Figure I.3 : Trois types d'empilement des couches de graphène

La couche graphitique ou graphène

C'est un plan atomique avec un arrangement hexagonal des atomes de carbone, distants de $a = 1,42 \text{ \AA}$ (Figure I.4.a). Il contient 2 atomes par maille (zone grisée sur la figure (I.4.a)) en position $O(0,0)$ et $A(2/3,2/3)$ dans la base (\vec{u}, \vec{v}) ($\|\vec{u}\| = \|\vec{v}\| = \sqrt{3}a$ et $(\vec{u}, \vec{v}) = \pi/3$).

Les coordonnées des atomes se déduisent de ces points par translation d'une combinaison linéaire des vecteurs de base. Ainsi, tout point M du pavage est repéré par deux indices (h,k) [25][29] :

$$\vec{OM}_{h,k} = \vec{OO}(\text{ou } \vec{OA}) + h\vec{u} + k\vec{v}$$

Où h et k sont des entiers.

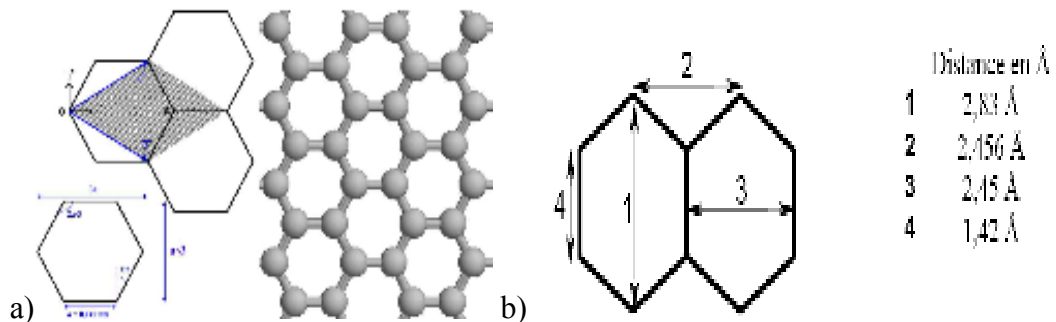


Figure I. 4 : a) Vecteurs unitaires, dimensions, maille élémentaire (Partie grisée) et couche graphène. b) Distances interatomiques dans les feuillets graphitiques.

I.3.5 Le diamant

Le diamant est un minéral transparent le plus dur qui existe à l'heure actuelle (figure I.5.a). Il a été identifié comme étant une forme cristalline de carbone par Lavoisier et Tenant à la fin du XIX^{ième} siècle. Le diamant est métastable à pression atmosphérique, et forme une structure compacte, qui peut être décrite comme deux structures cubiques faces centrées (cfc), décalées d'un quart de maille dans la direction (111). Cette structure est commune aux éléments de la colonne IV de la table périodique des éléments de Mendeleïev (C, Ge, Si ...). Les atomes constituant le diamant sont tous tétraédriquement interconnectés impliquant les orbitales moléculaires sp^3 et formant un angle entre eux de $109^{\circ}28'$ [16][32].

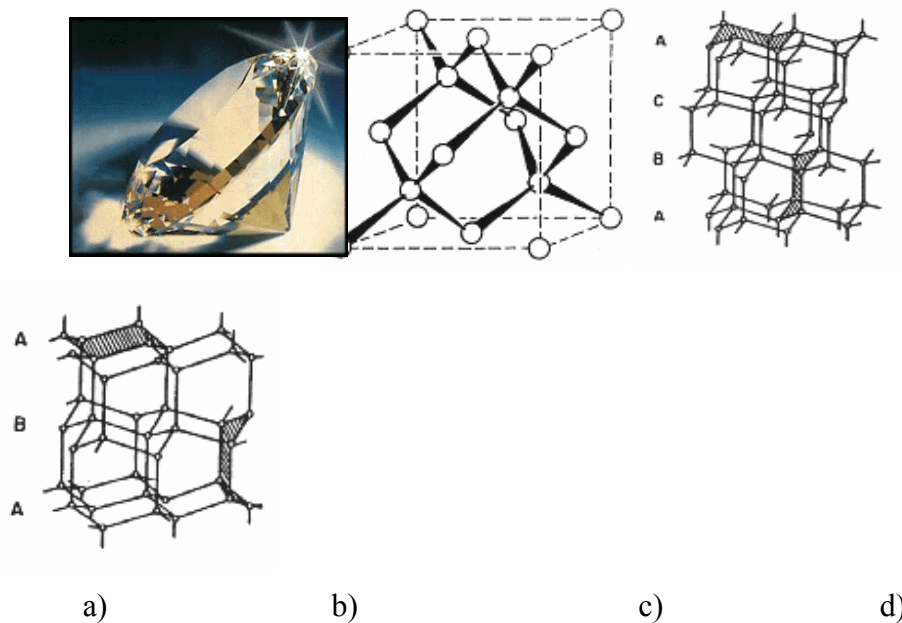


Figure I.5 : a) Diamant, (b)-(c) Structures d'une forme cubique, (d) forme hexagonale (lonsdaleite).

Le diamant est caractérisé par une structure où chaque atome de carbone, hybridé sp^3 , se trouve au centre d'un tétraèdre et distant de $1,54\text{\AA}$ de ses quatre voisins (figure I.5.b). Les liaisons sont de nature covalente à $109^{\circ}28'$ l'une de l'autre. Sa dureté exceptionnelle s'explique par la résistance de ces liaisons covalentes [12][13]. Le diamant peut présenter deux structures cristallines différentes selon la séquence d'empilement de plans suivant l'axe $\langle 111 \rangle$ et par la configuration des cycles carbonés formés. La forme cubique est la plus commune et la plus stable. Elle correspond à un empilement ABCABC selon la direction $\langle 111 \rangle$ avec des cycles carbonés en configuration type chaise (figure I.5.c). L'autre forme est hexagonale. Nommée lonsdaleite, elle n'est pas observée dans la nature. Elle est formée d'un empilement ABAB de plans, les cycles carbonés correspondants sont en configuration chaise et bateau (figure I.5.d). La structure hexagonale (lonsdaleite) peut apparaître, lors d'une croissance diamant, par un défaut d'empilement appelé macle [38].

Par ailleurs, le diamant ne possédant pas d'électrons à caractère π , il est facile de comprendre sa faible conductivité.

I.3.6 Les fullerènes

Les fullerènes (du nom de l'architecte Richard Buckminster Fuller qui a bâti des dômes de structure semblable) ont été découverts par Harold W. Kroto, Robert. F. Curl et Richard E. Smalley ainsi que leurs étudiants. Ce sont des structures surfaciques fermées (en "cages") dont la paroi est formée d'hexagones et de douze pentagones exactement permettant la fermeture de la structure par introduction de concavité. Par rapport au pavage hexagonal, l'introduction d'heptagones permet d'obtenir des surfaces à courbure négative, l'introduction de pentagones permet d'obtenir des surfaces à courbure positive. La fermeture des fullerènes est régie par la formule d'Euler reliant le nombre de sommets S , le nombre d'arêtes A et le nombre de faces F , soit $S-A+F=2$. Leur formule chimique est C_{2n} ($11 \leq n \leq 480$), le plus connu est le C_{60} appelé aussi footballène ou "bucky ball". C'est un assemblage de 20 hexagones et de 12 pentagones, chaque pentagone y est entouré par 5 hexagones. C'est aussi le plus symétrique car il est sphérique de diamètre environ 7Å. C'est le plus stable, suivi du C_{70} qui a une forme ovale d'où son nom de "rugby ball" (figure I.6)[4][14][16].

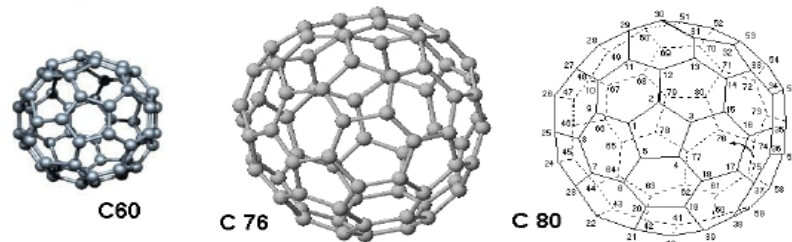


Figure I.6 : Les fullerènes

Les fullerènes ont de bonnes propriétés mécaniques, électriques, optiques et catalytiques. Ils résistent à une pression de 3000atm sans déformation irréversible, augmentent le rendement de la réaction de conversion de l'éthylbenzène en benzène, remplacent la membrane polymère dans les piles à combustibles, possèdent des propriétés optiques non-linéaires, piègent les radicaux libres responsables de la destruction du tissu vivant, sont supraconducteurs à quelques dizaines de degrés kelvin, . . . [1][4][36].

I.9 Les nanotubes de carbone

I.4.6 Découverte des nanotubes

C'est en 1991 que la structure de nanotube a été découverte par le Dr. Sumio Iijima (NEC Corporation, Tsukusba, Japon), six années après la découverte des fullerènes par Richard Smalley et al, une structure sphérique et creuse de carbone pur [6].

Le nanotube est une feuille de graphite formée d'atomes de carbone et enroulée sur elle même, comme un cigare. Les atomes de carbone sont disposés en réseau hexagonal, en nid d'abeilles. La fermeture du tube, à chaque extrémité, est assurée par l'accrochage respectant les lois des liaisons atomiques d'une demi molécule de fullerène, autre structure sphérique ou ovoïdale d'atomes de carbone [17][22].

On constate bien que pour passer d'un fullerène à un nanotube, il suffit de rajouter une ligne d'hexagones (figure I.7). En coupant en deux parties égales le C_{60} et en ajoutant des atomes de carbone avant de refermer la structure (figure I.7), on peut construire le C_{70} (25 hexagones, 12 pentagones) et le C_{80} (30 hexagones, 12 pentagones) [6][20].

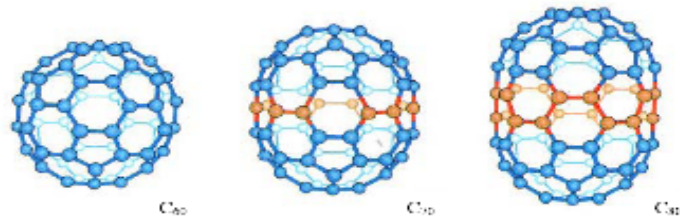


Figure I.7: Du C_{60} au C_{80} : les atomes ajoutés au C_{60} pour obtenir le C_{70} et le C_{80} sont représentés en rouge.

En ajoutant encore des carbonnes, on arrive à un fullerène allongé avec plusieurs centaines à plusieurs millions d'hexagones et 12 pentagones : on obtient un nanotube de carbone monocouche (figure I.8).

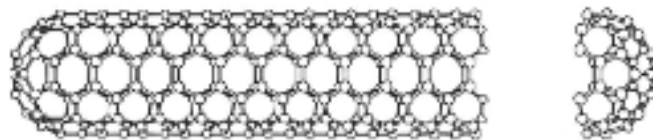


Figure I.8 : Le passage du fullerène vers le tube de carbone.

I.4.7 Types de nanotubes de carbone

I.4.2.3 Les nanotubes monoparois (SWNT)

L'acronyme SWNT (Single-Walled carbon NanoTube) est couramment employé pour désigner les nanotubes monofeuillets qui ont été découverts simultanément par deux équipes : D.S. Bethune et al, au centre de recherche d'IBM, aux Etats-Unis et S. Iijima et T. Ichihashi, à NEC, au Japon, en 1993, soit deux ans après la découverte des nanotubes multifeuillets [23]. Les nanotubes monofeuillets n'avaient jamais été observés auparavant. Leur structure a

largement été décrite dans la littérature : il s'agit d'un feuillet de graphène enroulé et refermé sur lui-même. La façon dont ce feuillet est enroulé va déterminer l'hélicité du tube. Le diamètre et l'hélicité des tubes sont des paramètres importants car ils sont reliés à un certain nombre de leurs propriétés : métallique, semi-conducteur. Le nanotube monofeuillet est une structure tubulaire parfaitement rectiligne de diamètre nanométrique (0,4 à 5nm) et de longueur micrométrique (jusqu'à plusieurs microns). Il peut être considéré comme le premier objet unidimensionnel jamais observé [23][28].

On prend un feuillet graphène fini et on le replie de manière à former un tube, comme schématisé sur la figure (I.9). Le feuillet graphène possède deux types de bord, nommés armchair et zigzag du fait de leur apparence. Traçons une ligne parallèlement au bord zigzag (figure I.9), replions le feuillet graphène en un rouleau et raccordons ses deux bords armchair de manière à former un tube : on obtient un **nanotube zigzag**. Les hexagones décrivent des cercles perpendiculaires à l'axe du tube [6][12][14].

On peut également prendre un feuillet graphène où le bord long est le bord zigzag (figure I.10, on conserve notre ligne repère tracée parallèlement au bord zigzag). On replie le feuillet et on raccorde ses deux bords zigzag : on obtient alors un deuxième type de tube, un nanotube armchair. Les hexagones s'alignent parallèlement à l'axe du tube [17][19][20].

On peut enfin effectuer **une translation d'un bord du feuillet graphène par rapport à l'autre**, parallèlement à l'axe du tube (figure I.11), avant de raccorder les bords pour former le tube. **Un nanotube chiral** est alors obtenu. La chiralité de cet objet vient du fait que l'on a introduit une hélicité en combinant deux opérations de symétrie : une translation le long de l'axe du tube (le glissement d'un bord du feuillet par rapport à l'autre) combinée à une rotation autour de ce même axe (le raccordement des deux bords). Les hexagones s'enroulent donc autour de l'axe du nanotube de manière hélicoïdale [7][16][18].

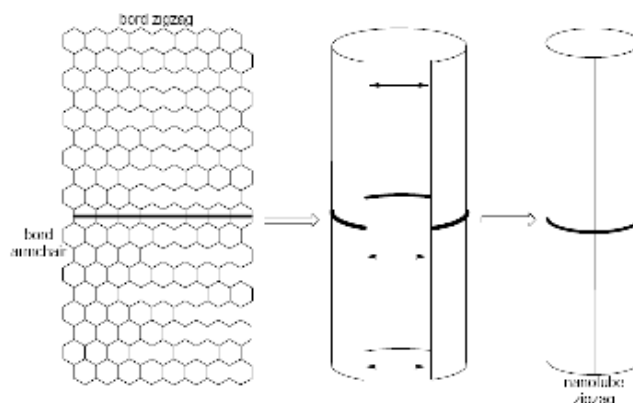


Figure I.9 : Repliement d'un feuillet de graphène et raccordement de manière à former un nanotube zigzag.

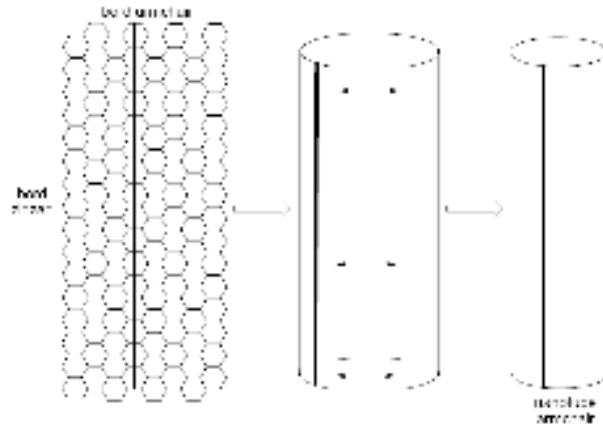


Figure I.10 : Repliement d'un feuillet de graphène et raccordement de manière à former un nanotube armchair.

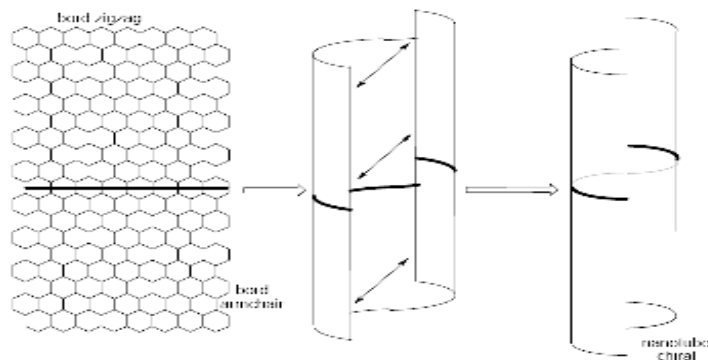


Figure I.11: Repliement d'un feuillet de graphène, translation d'un bord parallèlement à l'axe du nanotube, puis raccordement de manière à former un nanotube chiral. Cette chiralité provient de son caractère hélicoïdal.

La notion d'hélicité des SWNTs est associée à l'angle θ qui découle des indices (n,m) . Les nanotubes pour lesquels $\theta=0^\circ$ (nanotubes zigzag) et $\theta=30^\circ$ (nanotubes chaise) sont achiraux. Ils ne présentent donc pas d'hélicité. Les nanotubes pour lesquels $0^\circ < \theta < 30^\circ$ sont chiraux, c'est-à-dire qu'ils ne sont pas superposables à leur image par un miroir. Le repère de Hamada ne représente cependant qu'un seul énantiomère des tubes chiraux (indices m positifs). Pour représenter l'ensemble des nanotubes, il faut considérer les angles θ négatifs (figure I.12). Alors, l'énantiomère du tube (n,m) est le tube $(n+m,-m)$ et les angles d'hélicité sont respectivement θ et $-\theta$. Deux nanotubes énantiomères ont ainsi une hélicité opposée, ou gauche et droite [40].

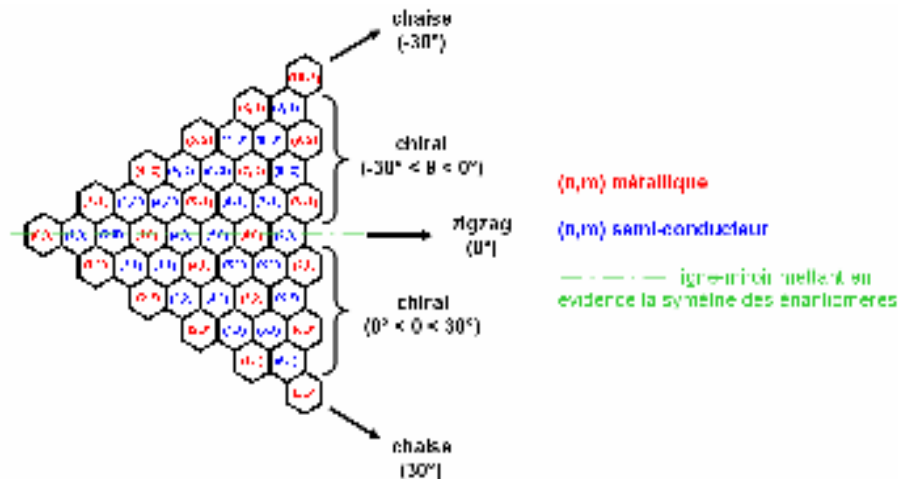


Figure I.12: Représentation des couples d'énantiomères (n,m) et $(n+m,-m)$, d'après l'indexation de Hamada.

Pour cela, on définit une base (\vec{a}_1, \vec{a}_2) dans le plan du graphène. Prenons un point quelconque O sur la surface du nanotube et faisons le tour du tube dans un plan perpendiculaire à son axe de manière à revenir à notre point de départ (trajet $O \rightarrow M$, (figure I.13)[29]. Pour définir la symétrie de l'enroulement du feuillet graphène autour de l'axe, il suffit alors de décomposer le vecteur $\vec{OM} = \vec{c}_h$ dans la base précédemment définie [7][28]: $\vec{c}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$

Où n et m sont des entiers. Il s'agit des indices de chiralité.

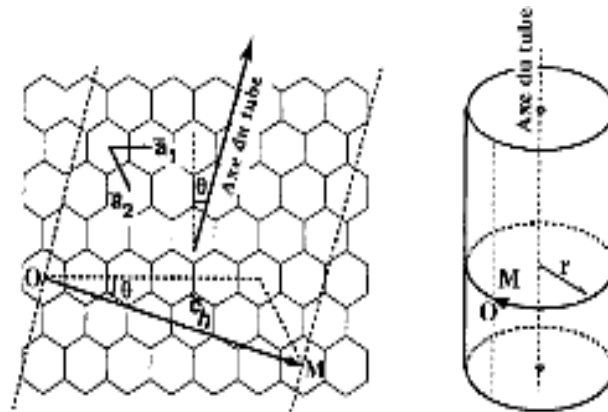


Figure I.13 : Représentation du vecteur \vec{c}_h définissant l'enroulement du feuillet graphitique.

On nomme θ l'angle entre les vecteurs \vec{c}_h et \vec{a}_1 (appelé angle de chiralité). La symétrie d'un nanotube (n,m) peut également être caractérisée par la valeur de cet angle, comprise entre 0 et 30° [6][7][17][28]:

- $\theta = 0^\circ$: $n = 0$ ou $m = 0 \Rightarrow$ Nanotube de configuration zigzag

- $\theta = 30^\circ$: $n = m \Rightarrow$ Nanotube de configuration armchair
- $0 < \theta < 30^\circ \Rightarrow$ Nanotube chiral

Récapitulons ces données concernant les différents types de symétrie de nanotubes monocouches (a_{cc} est la longueur de la liaison C-C dans ces composés, soit 1,42Å) dans le tableau suivant :

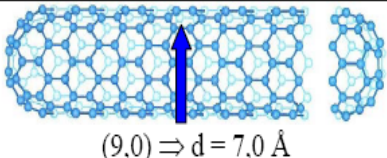
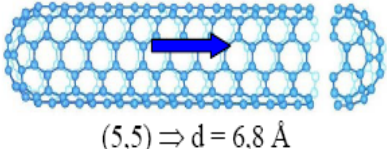
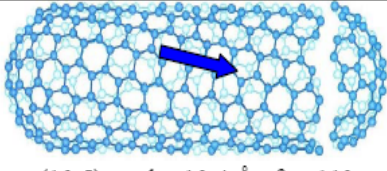
Symétrie	Indices	Angle de chiralité	Diamètre	Exemple
zigzag	$(n,0)$ $n = 0$ ou $m = 0$	$\theta = 0^\circ$	$d = a_{cc} \frac{\sqrt{3} m}{\pi}$	 $(9,0) \Rightarrow d = 7,0 \text{ \AA}$
armchair	(n,n) $n = m$	$\theta = 30^\circ$	$d = a_{cc} \frac{3n}{\pi}$	 $(5,5) \Rightarrow d = 6,8 \text{ \AA}$
chirale	(n,m) $n \neq m$	$0 < \theta < 30^\circ$ $\theta = \text{Arctan} \left(\frac{m\sqrt{3}}{2n+m} \right)$	$d = a_{cc} \frac{\sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi}$	 $(10,5) \Rightarrow d = 10,4 \text{ \AA} ; \theta = 11^\circ$

Tableau I.1 : Caractéristiques structurales d'un nanotube de carbone monocouche en fonction de sa symétrie. $a_{cc} = 1,42 \text{ \AA}$.

En ce qui concerne les extrémités, la fermeture des tubes est permise par l'introduction de pentagones. En effet, ceux-ci ont pour effet de courber la surface du tube vers l'intérieur (courbure sphérique positive). Il faut six pentagones à chaque extrémité pour fermer complètement le nanotube. Les nanotubes peuvent être fermés par des extrémités coniques, polygonales ou même sphériques. Dans ce dernier cas, à titre d'exemple citons le nanotube (5, 5) qui peut être clos par un demi- C_{60} , ou encore le (9,0) qui peut être fermé par un demi- C_{70} [11].

I.4.2.4 Les nanotubes multicouches (MWNT)

Les nanotubes multicouches (ou MWNT, Multi Walled carbon NanoTube) sont constitués de plusieurs tubes concentriques (figure I.14) n'ayant pas la même chiralité, créant ainsi une structure turbostratique. En effet, on appelle graphite turbostratique un empilement désordonné de plans graphènes.

Un nanotube multifeuillet parfait est constitué de plusieurs cylindres imbriqués les uns dans les autres à la manière des poupées russes (figure I.14.a). Le tube central détermine le diamètre interne, et les autres tubes s'arrangent concentriquement autour de lui. Le diamètre

du feuillet externe peut aller de 1,4 nm à plus de 100 nm, et au delà, on parle de filaments ou de fibres de carbone. Le diamètre du feuillet interne diffère également d'un tube à l'autre, mais dans des proportions plus restreintes : de 2 à 50 nm environ. Les longueurs sont de l'ordre du micron, mais peuvent atteindre le centimètre [23]. Le nombre de feuillets constituant ces nanotubes varient de 2 à plus de 50. La distance inter-tubes est de l'ordre de 3,4 Å, proche de la valeur inter-plan du graphite. L'influence de la courbure et du nombre de plans, sur la distance intertubes a été étudiée par Kiang[32], et peut varier de 3,4 à 3,9 Å. On parle habituellement de nanotubes quand les parois graphitiques sont parallèles entre elles [23] (figure I.14). Mais, les nanotubes multifeuillets possèdent une grande diversité de structures que l'on peut décrire par 2 modèles:

- Le modèle poupées russes: les plans de graphène sont arrangés en cylindres concentriques.
- Le modèle parchemin: un seul feuillet de graphène est enroulé sur lui même, comme une feuille de papier (figure I.14) [10].

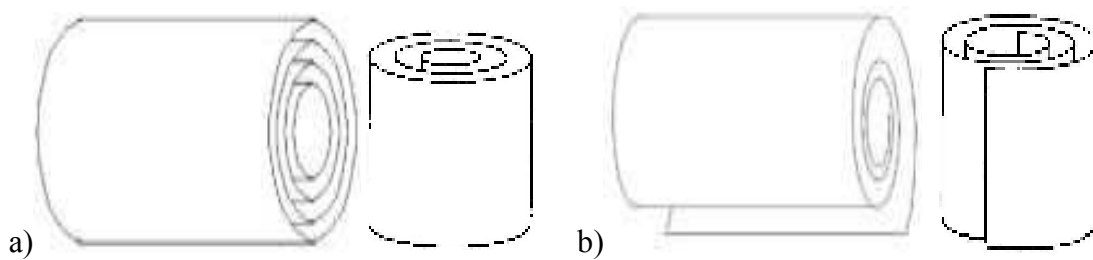


Figure I.14 : a) Le modèle poupées russes. b) Le modèle parchemin

I.4.8 Propriétés des nanotubes de carbone (CNT)

Depuis leur découverte, les nanotubes ont révélé d'extraordinaires propriétés physiques qui ont motivé de très nombreuses études scientifiques. Un grand nombre d'applications ont d'ores et déjà été envisagées.

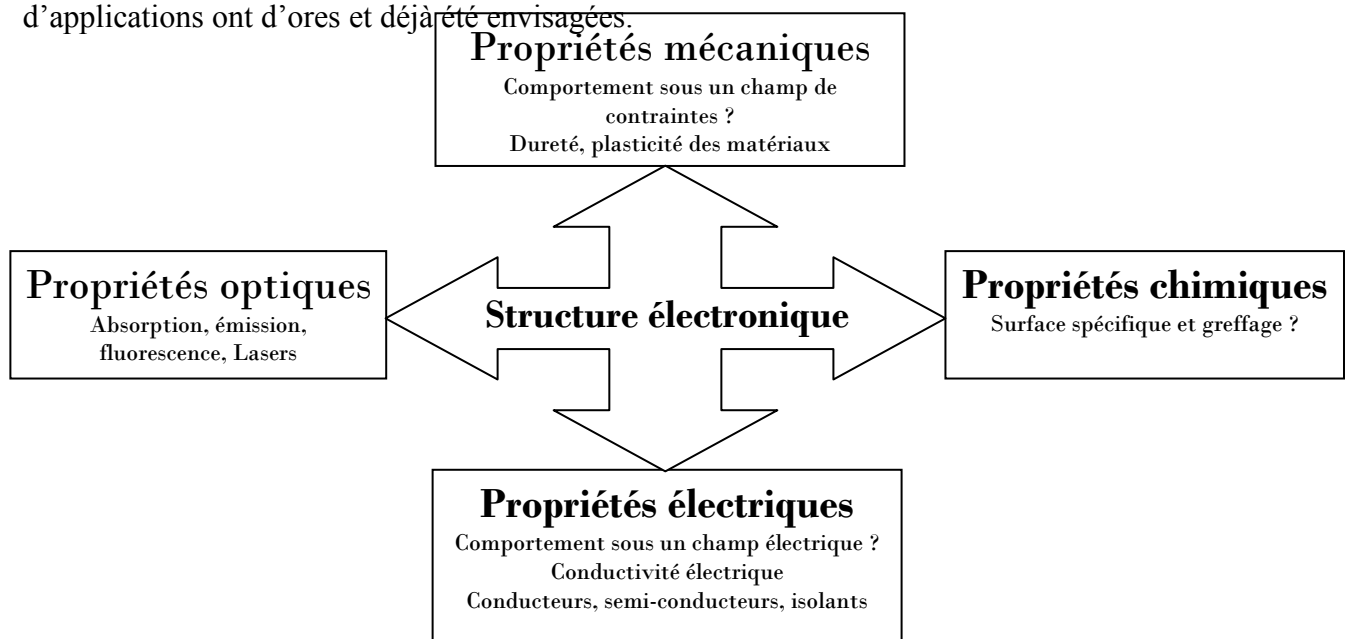


Figure I.15 : Représentation des différentes propriétés d'un nanotube de carbone

I.4.3.1 Propriétés électriques

Des études théoriques sur les propriétés électroniques des nanotubes montrent que tous les nanotubes en configuration « armchair » sont métalliques, ainsi que les nanotubes en configuration « zigzag » dont les valeurs de m et n sont des multiples de trois. Il est ainsi possible d'exprimer la condition de transport métallique pour ces structures par la relation [21][36]:

$$(2m + n) = 3q \quad ; \text{ où } q \text{ est un nombre entier.}$$

Il est remarquable que les nanotubes de carbone monoparois présentent un caractère métallique ou semi-conducteur selon les valeurs des paramètres de structures m et n , alors que les liaisons chimiques entre les atomes de carbone sont identiques. Les conditions sont résumées ci-après [7][9][22][26]:

- Si $n = m$, les nanotubes ont un comportement métallique,
- Si $n-m = 3q$ (q entier), les nanotubes sont semi-conducteurs à gap étroit,
- Si $n-m \neq 3q$, les nanotubes sont des semi-conducteurs à gap large ou sont isolants.

Bien évidemment les applications pour les nanotubes de carbone monoparois au comportement semi-conducteur sont rapidement apparues. Ainsi des transistors ont-ils été expérimentés de même que des circuits logiques tels que des inverseurs, des oscillateurs ou des mémoires [11][14][28].

I.4.3.2 Propriétés mécaniques

Les nanotubes de carbone présentent une très grande rigidité, comparable à celle de l'acier, tout en étant extrêmement légers. Les principales caractéristiques sont [16][21]:

La dureté

La dureté est une propriété qui est étroitement liée à la résistance d'un matériau. La dureté est une mesure de la capacité d'un matériau à résister à la pénétration. Certains nanotubes sont plus durs que le diamant [11][26].

La résistance des nanotubes de carbone devrait être (théoriquement) environ 200 fois supérieure à celle de l'acier pour un poids 6 fois moindre (à section équivalente) grâce à leur géométrie hexagonale qui permet une répartition uniforme des contraintes et des déformations. Ces propriétés varient aussi selon la nature du nanotube. Les nanotubes multifeuillets sont beaucoup plus résistants que les nanotubes monofeuillets [37][41].

La conductivité thermique

La conductivité thermique est le transfert d'une certaine quantité de chaleur par unité de temps [11]. Les nanotubes de carbone ont une conductivité thermique plus grande que celle du diamant (de 6 à 20 W.cm⁻¹.K⁻¹) [9][26][37].

L'élasticité

L'élasticité est la contrainte mécanique qui engendre un allongement de 100% de la longueur initiale d'un matériau (il double donc de longueur). Le nanotube se déforme de façon permanente, ou se casse, bien avant que cette valeur soit atteinte [11].

Ils ont aussi une forte rigidité en raison de la solidité de la liaison C-C (sp²) et une grande résistance à la rupture soulignée par l'absence de défauts étendus. Le module d'élasticité des nanotubes de carbone est dix fois celle de l'acier ($E \geq 1 \text{TPa}$) [9][37]. Le nanotube de carbone présente une grande élasticité et une grande flexibilité [31].

I.4.3.3 Propriétés chimiques

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés chimiques très attrayantes. Il est en effet possible :

- ✳ De fonctionnaliser leur surface par greffage moléculaire afin, par exemple, de procéder au tri des nanotubes selon leurs caractéristiques électroniques ;
- ✳ D'intercaler des atomes ou des molécules (dopage) entre les nanotubes monofeuillet d'un faisceau (intercalation inter-tubulaire) ainsi qu'entre les différentes parois d'un nanotube multifeuillet (intercalation inter-planaire) afin par exemple de contrôler les propriétés électroniques des nanotubes semiconducteurs ;
- ✳ De remplir par capillarité le canal central des nanotubes de carbone mono et multifeuillets par des atomes ou des composés cristallins de façon à obtenir des nanofils encapsulés.

La surface spécifique des nanotubes de carbone est de surcroît élevée, ce qui leur confère une très bonne capacité d'adsorption (stockage de gaz) et une large utilisation comme catalyseurs (voisine de 2700 m²/g pour les nanotubes multifeuillets).

Par ailleurs, les nanotubes de carbone présentent une excellente inertie chimique et une très bonne stabilité à haute température sous atmosphère inerte. Ils sont ainsi insolubles dans les solvants organiques et dans l'eau [13][16].

De plus, une chimie de greffage de nanotubes s'est développée: matériaux nanocomposites, adsorption de tensioactifs, enroulement de polymères, stockage d'hydrogène et d'autres gaz, etc....

I.4.3.4 Propriétés optiques

L'électroluminescence est une émission de lumière qui résulte de l'action d'un champ électrique. Des chercheurs d'IBM ont indiqué avoir réussi à faire émettre de la lumière infrarouge par des nanotubes de carbone. Les nanotubes non dopés et soumis à un champ électrique généré par une grille peuvent conduire le courant par l'intermédiaire d'électrons (tension de grille négative) ou de trous (tension de grille positive) [9][14].

Propriété d'absorption de la lumière

Le matériau le plus noir jamais conçu par l'homme est un tapis de nanotubes disposés verticalement, réalisé par des chercheurs l'Université Rice autour du professeur Pulickel Ajayan ; avec un indice de réflexion de 0,045%, il est 30 fois plus sombre que le carbone, ce qui lui permet d'absorber 99,9 % de la lumière qu'il reçoit. C'est 3 fois « mieux » que ce que permettait l'alliage de nickel-phosphore qui était le matériau réputé le plus sombre. Ces inventions pourraient intéresser les secteurs militaires, de la communication, de l'énergie (solaire notamment), de l'observation, des colorants, etc.[9][14].

Les nanotubes possèdent des propriétés de limitation optique dans une large gamme de longueurs d'onde, depuis le visible jusqu'au proche infrarouge. Des seuils faibles de non linéarité et de grandes densités optiques ont été obtenues lors de l'étude de dispersions aqueuses de nanotubes monocouches. Ces performances égalent ou surpassent celles d'autres bons limiteurs optiques, comme le C₆₀ ou le noir de carbone, que ce soit dans le visible ou le proche infrarouge. Les dispersions liquides de nanotubes monocouches apparaissent donc comme des systèmes prometteurs pour une limitation optique à bande large. Il est à noter que des MWNTs dispersés dans un film de polymère, en l'occurrence du PMMA, ont montré également des propriétés de limitation optique large bande[11][14].

I.4.9 Différentes méthodes de synthèse

Les nanostructures de carbone telles que les nanotubes mono- et multicouches, les fullerènes ou encore les « oignons » de carbone peuvent être produits par de nombreuses méthodes. Beaucoup d'entre elles sont basées sur la sublimation de carbone sous atmosphère inerte telles que la synthèse par arc électrique, par voie solaire ou par ablation laser. Les méthodes chimiques sont aujourd'hui en pleine expansion et notamment la décomposition catalytique de précurseurs carbonés. Cette variété de méthodes semble aboutir à des systèmes très ressemblants, mais une inspection détaillée de leurs caractéristiques montre de subtiles différences, dont on ne connaît pas très bien l'origine, au niveau de la nature et la quantité des

impuretés, de la distribution des longueurs et des diamètres des nanotubes, de la cristallinité des parois, etc.[22][26].

Malgré cette variété de méthodes, les recherches sur les nanotubes, visant des applications à grande échelle, sont encore limitées par l'étape de production et un objectif demeure : mettre au point une technique capable de produire en masse et à faible coût des nanotubes aux propriétés parfaitement contrôlées [9][34].

Parmi les méthodes de synthèse nous avons les suivantes:

I.4.4.1 L'arc électrique

Son principe est basé sur la création d'une décharge entre deux électrodes de graphite sous atmosphère inerte. Les hautes températures engendrées entre ces électrodes durant le processus entraînent la sublimation du graphite. En creusant un trou dans l'anode en son centre, on peut y introduire un mélange de métaux finement divisés et de poudre de graphite. Un grand nombre de paramètres tels que la nature des catalyseurs et leurs concentrations, la pression et la nature de l'atmosphère inerte, le courant ou encore la géométrie du réacteur interviennent lors de la production (Figure I.16) [16][22][43].

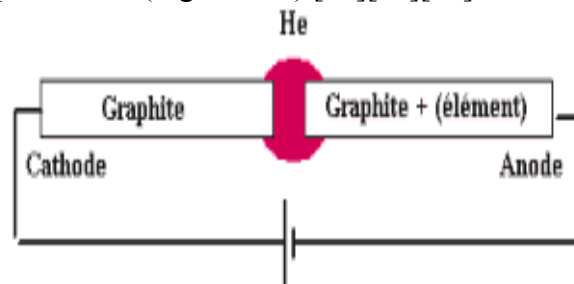


Figure I.16 : Schéma de principe de la méthode de synthèse par arc électrique.

I.4.4.2 L'ablation laser

Une seconde technique performante pour la synthèse de nanotubes monocouches est l'ablation laser. Rappelons que l'ablation laser fut historiquement la première méthode pour générer des fullerènes en phase gazeuse. La sublimation du carbone est provoquée par un laser pulsé et focalisé à la surface d'un disque de graphite sous un flux de gaz inerte. La cible de graphite est placée au centre d'un four permettant de contrôler la température autour de 1200°C. Les vapeurs de carbone sublimé sont entraînées jusqu'à un collecteur où elles se condensent (figure I.17) [16][33][34].

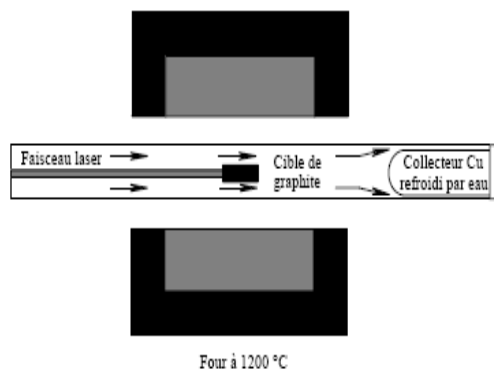


Figure I.17 : Schéma de principe de la méthode de synthèse par ablation laser

I.4.4.3 Synthèse par décomposition catalytique de CO

La méthode consiste à faire passer, dans un four sous pression atmosphérique, un flux de précurseurs carbonés gazeux sur un support solide (une céramique par exemple) contenant des particules de catalyseur. Cette méthode peut présenter deux gros avantages [22][26][33] :

Dans certaines méthodes, les nanotubes croissent perpendiculairement au support contenant le catalyseur, d'où l'obtention d'échantillons orientés.

- La croissance des nanotubes peut se faire suivant des motifs prédéfinis, en répartissant le catalyseur suivant un motif.

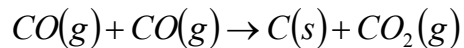
La décomposition catalytique est une méthode très étudiée car elle semble la plus apte à être transposée un jour à une échelle industrielle, et notamment les synthèses où précurseur et catalyseur sont tous deux gazeux [22][27][34].

La méthode HiPco

Cette méthode consiste en la décomposition catalytique de CO en présence de $\text{Fe}(\text{CO})_5$. Elle fait suite à de nombreuses études sur la production, en flux continu et en phase gazeuse, de fibres de carbone ou de nanotubes de carbone. De telles méthodes de synthèse peuvent en effet produire de larges quantités de nanotubes en introduisant en continu à la fois la source de carbone et le catalyseur. Les particules catalytiques sont formées in situ par l'introduction d'espèces organométalliques dans le flux et leur condensation en clusters de taille appropriée [27][34][35].

Comme son nom l'indique, le procédé HiPco consiste en la dismutation de CO à haute pression. Du $\text{Fe}(\text{CO})_5$ est injecté dans un courant de CO à hautes température et pression (10 atm, 1200°C, (Figure I.18). Les produits de la décomposition thermique de $\text{Fe}(\text{CO})_5$ (des complexes intermédiaires $\text{Fe}(\text{CO})_n$, $0 \leq n \leq 4$) réagissent pour former des clusters de fer en phase gazeuse. Ces derniers agissent comme des sites de nucléation pour la croissance de nanotubes

monocouches, le carbone solide étant produit par la réaction de Boudouard (catalysée à la surface des particules de fer) [27][35]:



Cette réaction donne naissance à des dépôts noirs sur les parois du tube de quartz à l'extérieur du four. Ils consistent essentiellement en des nanotubes monocouches et des nanoparticules (3 à 5 nm) d'oxyde de fer recouvertes de feuillets graphitiques [20][27][42].

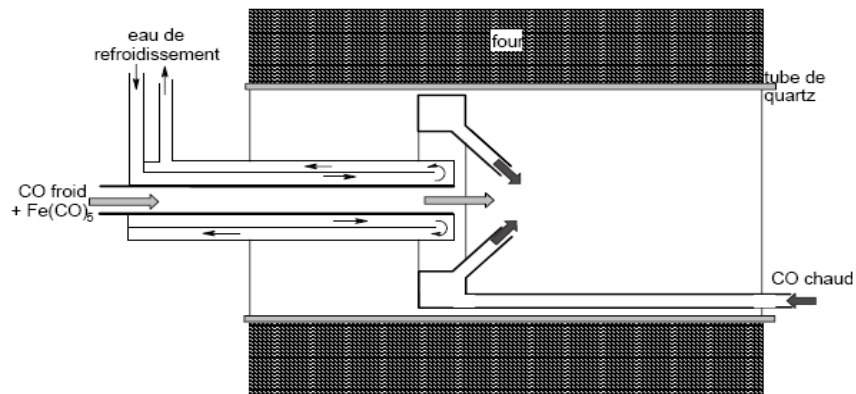


Figure I.18 : Coupe schématique du réacteur HiPco, montrant la tuyère d'injection refroidie à l'eau et le mélangeur de type « pommeau de douche ». Le four maintient une température de 1200°C [32][34].

I.4.4.4 Autres voies de synthèse

La voie solaire, comparable à l'ablation laser, consiste à concentrer le rayonnement solaire sur un creuset rempli de poudre de graphite et de catalyseur métallique, dans une enceinte en Pyrex sous atmosphère inerte. Après sublimation du carbone, les vapeurs produites sont entraînées par un flux d'hélium ou d'argon et se condensent dans une zone refroidie du réacteur. Au four solaire d'Odeillo, la lumière solaire est collectée par un miroir plat pour être réfléchi vers un miroir parabolique qui focalise le rayonnement directement sur la cible. Elle peut, dans de bonnes conditions, atteindre une température de 3000K. Les diamètres des SWNTs produits sont autour de 1,3nm [26][32][43].

I.4.10 Structure électronique des nanotubes de carbone

L'une des caractéristiques les plus emblématiques des nanotubes de carbone est le lien étroit existant entre leur structure spatiale et leurs propriétés électroniques. Ainsi, selon sa structure, un nanotube de carbone peut être métallique ou semiconducteur.

I.4.5.1 Présentation du graphite

I.4.5.1.4 Structure cristalline du graphite

Le graphite, état le plus stable des composés carbonés, est un système bidimensionnel (2D). Il se présente dans sa forme la plus simple selon une monocouche à 2 dimensions de cycles hexagonaux de carbones hybridés sp^2 (figure I.19.a)) appelé graphène. En général, le graphite se trouve sous la forme d'un empilement de couches de graphène liées par des liaisons de type Van der Waals (figure I.19.b)). La distance carbone-carbone a_{C-C} dans une couche est de 1.42\AA tandis que la distance inter-plans est de 3.35\AA [46][29][48].

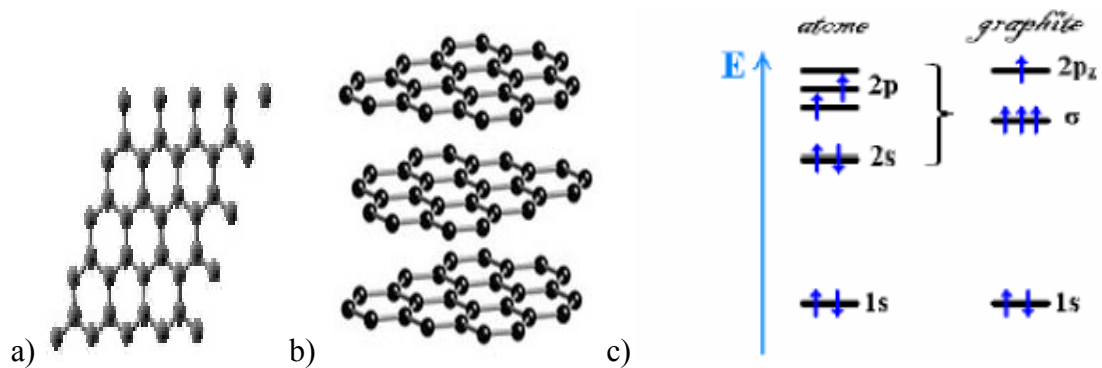


Figure I.19 : a) Couche de graphène. b) Empilement de trois couches de graphène (graphite). c) Structure des orbitales moléculaires du carbone dans un plan de graphite.

Paramètres de maille

On définit le réseau réel du graphite par les vecteurs de base \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 (figure I.20.a)

tels que \vec{a}_1 et \vec{a}_2 font entre eux un angle de $\pi/3$ rad (Figure I.20.b): tel que:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{a}_3 = \vec{c} = c \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (1.1)$$

$$\begin{cases} a = 2,4612 \text{\AA} \\ c = 6,7079 \text{\AA} \end{cases}$$

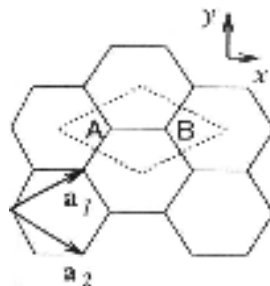


Figure I.20 : Réseau hexagonal d'un feuillet de graphène avec, en pointillés, sa maille élémentaire. Les vecteurs primitifs du réseau hexagonal \vec{a}_1 et \vec{a}_2 .

Le **volume** de la maille élémentaire :

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \left[\frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix} \right] = \frac{a^2 \cdot c \sqrt{3}}{2}$$

(1.2)

L'application numérique : $V \approx 35,11 \text{ \AA}^3$

Réseau réciproque : zone de Brillouin réciproque

Les vecteurs de base du réseau réciproque sont définis de la façon suivante:

$$\vec{b}_i = \frac{2\pi(\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{V}$$

(1.3)

Où i, j, k indiquent les vecteurs par permutation circulaire, et V est le volume de la maille réelle. Les vecteurs du réseau réciproque sont [25][44] :

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{c})}{V} = \frac{4\pi}{a^2 \cdot c \sqrt{3}} \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi(\vec{c} \times \vec{a}_1)}{V} = \frac{4\pi}{a^2 \cdot c \sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix} \times \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{V} = \frac{4\pi}{a^2 \cdot c \sqrt{3}} \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \times \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Pour le graphène: on obtient alors pour le graphène sans l'axe Z ($\vec{c} = \vec{0}$)

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

(1.5)

A partir de \vec{b}_1 et \vec{b}_2 on peut tracer le réseau réciproque du graphène, ainsi que sa première zone de Brillouin avec ses points caractéristiques [17][19][44]:

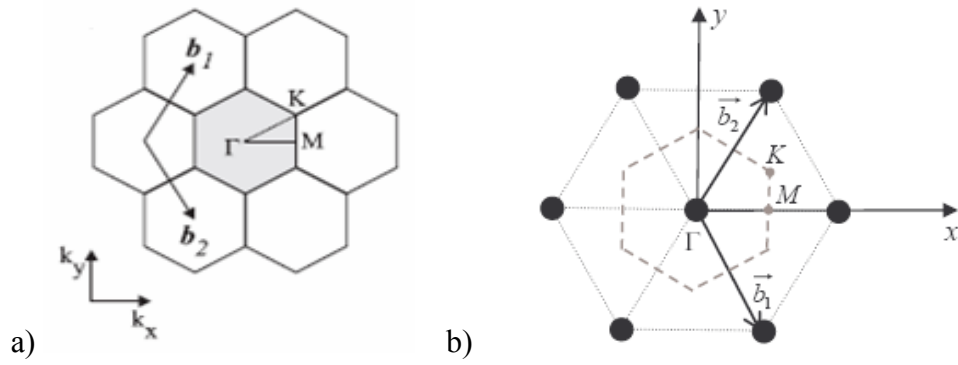


Figure I.21 : a) Réseau réciproque du feuillet de graphène avec, en ombré, la première zone de Brillouin. Les vecteurs primitifs du réseau réciproque \vec{b}_1 et \vec{b}_2 . b) première zone de Brillouin [21][25].

I.4.5.2 Structure de bandes électroniques du graphène

Méthode des liaisons fortes et théorème de Bloch

Pour calculer les états propres électroniques du solide, la méthode des liaisons fortes se base sur les orbitales atomiques. On définit une orbitale de Bloch par :

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_a} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_a} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_a) \quad \text{avec } j = 1, \dots, n$$

(1.6)

Avec N : nombre de cellules unités, ϕ_j les orbitales atomiques, \vec{R}_a la position des atomes de type a dans la cellule unité.

Les états propres électroniques du système sont alors une combinaison linéaire des orbitales de Bloch [36][51][52].

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r})$$

(1.7)

Les énergies propres associées sont égales à :

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle}$$

(1.8)

Avec H hamiltonien du système

$$H_{jj'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle$$

$$S_{jj'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle$$

(1.9)

La détermination des énergies propres E_j du système passe par la résolution de l'équation suivante: $\det[H - E.S] = 0$, les orbitales de Bloch $|\Phi(\vec{k}, \vec{r})\rangle$ servant de base et S étant la matrice de recouvrement entre orbitales de Bloch. Ceci est appelé l'équation séculaire.

Les propriétés de conduction électronique du graphite sont principalement dictées par les liaisons π formées entre les orbitales atomiques p_z perpendiculaires au plan du graphène. D'après la figure (I.20), nous voyons que dans la cellule unité il y a deux sites atomiques A et B. Il existe pour chaque site atomique une orbitale p_z . Nous allons donc obtenir, deux bandes, une liante π et une antiliante π^* . Afin de résoudre l'équation séculaire, les composantes de l'hamiltonien sont déterminées selon les orbitales de Bloch du sites A et B, qui sont données par :

$$\Phi_A(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \phi_{p_z}(\vec{r} - \vec{R})$$

$$\Phi_B(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}'} \phi_{p_z}(\vec{r} - \vec{R}')$$

(1.10)

$$\begin{aligned} H_{AA} &= \langle \Phi_A | H | \Phi_A \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R, R'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{R}')} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}') | H | \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R=R'} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}') | H | \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) \rangle + \frac{1}{N} \sum_{R \neq R'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{R}')} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}') | H | \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R=R'} \varepsilon_{2p} + (\text{termes éloignés de } n.n) \\ &\approx \varepsilon_{2p} \end{aligned}$$

(1.11)

Nous négligeons tous les termes où la distance est supérieure ou égale à une distance interatomique par rapport aux termes d'énergies de sites atomiques ε_{2p} . Ce dernier représente l'énergie d'un électron sur l'orbitale atomique p_z du site A ou B. Pour être plus précis, elle diffère de l'énergie de l'atome isolé puisque le potentiel des autres atomes est compris dans l'hamiltonien du système [50][51][52].

$$\begin{aligned}
H_{AB} = H_{BA}^* &= \frac{1}{N} \sum_{R,R'} e^{i.k.(R-R')} \langle \phi_A(r-R') | H | \phi_B(r-R) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{R=R'} \langle \phi_A(r-R') | H | \phi_B(r-R) \rangle + \frac{1}{N} \sum_{R'=R+a_1} e^{-i.k.a_1} \langle \phi_A(r-R') | H | \phi_B(r-R) \rangle \\
&\quad + \frac{1}{N} \sum_{R'=R+a_2} e^{-i.k.a_2} \langle \phi_A(r-R') | H | \phi_B(r-R) \rangle + (\text{termes éloignés de } n.n)
\end{aligned}$$

(1.12)

En raison de la symétrie :

$$\langle \phi_A(r-R') | H | \phi_B(r-R) \rangle = \langle \phi_A(r-(R+a_1)) | H | \phi_B(r-R) \rangle = \langle \phi_A(r-(R+a_2)) | H | \phi_B(r-R) \rangle$$

Et ceci sera noté γ_1 . Il convient de noter qu'en raison de la symétrie c.-à-d.,

$$\langle \phi_A(r-R) | H | \phi_B(r-R) \rangle = \langle \phi_B(r-R) | H | \phi_A(r-R) \rangle$$

γ_1 est un nombre réel. Le dernier terme dans l'équation (1.11) est petit et avec l'approximation des liaisons fortes nous le négligerons. Utilisant ceci et γ_1 que nous obtenons maintenant:

$$H_{AB} = H_{BA}^* = \gamma_1 (1 + e^{-ik.a_1} + e^{-ik.a_2}) = \gamma_1 g(K)$$

(1.13)

$$\text{Avec } g(K) = (1 + e^{-ik.a_1} + e^{-ik.a_2})$$

Avec l'utilisation des vecteurs unité \vec{a}_1 et \vec{a}_2 , on trouve :

$$\begin{aligned}
g(K) &= 1 + e^{-i \left(\frac{k_x a}{2} + k_y \frac{\sqrt{3} a}{2} \right)} + e^{-i \left(-\frac{k_x a}{2} + k_y \frac{\sqrt{3} a}{2} \right)} \\
&= 1 + e^{-ik_y \frac{\sqrt{3} a}{2}} 2 \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right)
\end{aligned}$$

(1.14)

Pour obtenir l'équation séculaire que nous devons maintenant trouver la matrice intégrante S .

$S_{AA} = S_{BB} = 1$, Sous l'hypothèse que la fonction d'onde est normalisée. Les termes non-diagonaux dans la matrice intégrante sont semblables à ceux calculé aux termes non-diagonaux dans la matrice de transfert et nous obtenons:

$$\begin{aligned}
S_{AB} &= S_{BA}^* = \frac{1}{N} \sum_{R,R'} e^{i.k.(R-R')} \langle \phi_A(r-R') | \phi_B(r-R) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{R=R'} \langle \phi_A(r-R') | \phi_B(r-R) \rangle + \frac{1}{N} \sum_{R'=R+a_1} e^{-i.k.a_1} \langle \phi_A(r-R') | \phi_B(r-R) \rangle \\
&\quad + \frac{1}{N} \sum_{R'=R+a_2} e^{-i.k.a_2} \langle \phi_A(r-R') | \phi_B(r-R) \rangle + (\text{termes éloignés de } n.n)
\end{aligned}$$

(1.15)

Encore nous avons :

$$\langle \phi_A(r-R) | \phi_B(r-R) \rangle = \langle \phi_A(r-(R=a_1)) | \phi_B(r-R) \rangle = \langle \phi_A(r-(R+a_2)) | \phi_B(r-R) \rangle$$

Ces quantités seront désormais désignées par γ_0 . En négligeant le dernier terme dans l'équation (1.15) nous obtenons :

$$S_{AB} = S_{BA}^* = \gamma_0 f(k)$$

(1.16)

Après avoir calculé tous les éléments de matrice nous pouvons maintenant écrire la matrice de transfert et la matrice intégrante comme:

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} & \gamma_1 g(K) \\ \gamma_1 g^*(K) & \varepsilon_{2p} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_0 g(K) \\ \gamma_0 g^*(K) & 1 \end{pmatrix}$$

(1.17)

Ce qui nous donne l'équation séculaire pour le graphite:

$$\det[H - E_i S] = \det \begin{bmatrix} \varepsilon_{2p} - E_i & (\gamma_1 - E_i \gamma_0) g(K) \\ (\gamma_1 - E_i \gamma_0) g^*(K) & \varepsilon_{2p} - E_i \end{bmatrix} = 0$$

(1.18)

Maintenant, pour trouver la relation de dispersion est une question de faire un calcul simple où nous obtenons:

$$E_i(K) = \frac{\varepsilon_{2p} \pm |g(K)| \gamma_1}{1 \pm |g(K)| \gamma_0}$$

(1.19)

Ici $|g(K)|$ est donné par:

$$|g(K)| = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right)}$$

(1.20)

La zone de Brillouin du graphite bidimensionnel est montrée comme secteur ombré sur la figure (I.22) où Γ, K, K' et M représentent les points de symétrie élevée. Les vecteurs du réseau réciproque sont donnés par [55]:

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right), \vec{b}_2 = \left(-\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right)$$

(1.21)

La première zone de Brillouin du graphène est dessinée à la figure (I.22) sous la forme d'un hexagone ombré. Les trois points de haute symétrie Γ, K et M correspondent respectivement au centre de la première zone de Brillouin [49][50], à un coin et au milieu du bord de la zone. La structure de bandes d'une feuille de graphène peut être calculée, en première approximation, par la méthode des liaisons fortes. Les trois électrons formant les liaisons coplanaires n'intervenant pas dans la conductivité, seul l'électron p_z est responsable des propriétés électroniques du graphène à faible tension [17][29].

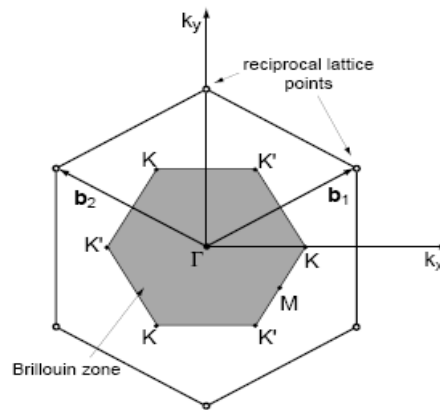


Figure I.22 : Zone de Brillouin pour le graphène, avec ses points de symétrie élevée.

La figure (I.23) représente la relation de dispersion de graphène, où les deux signes + correspondent à la bande d'énergie π liante et les deux signes - à la bande π^* anti-liante. γ_1 et γ_0 sont deux paramètres appelés respectivement paramètre de recouvrement et paramètre de saut. Le premier vaut 0.129eV et le second -3.033eV [19]. Un graphe des relations de dispersion de ces deux bandes selon les directions du triangle ΓKM est représenté à la figure (I.23.b), de même qu'un schéma à trois dimensions montrant leur énergie en fonction de \vec{k} dans la zone de Brillouin (figure I.23.a). Les points Γ, K et M correspondants y sont représentés. On observe que les bandes π et π^* sont dégénérées au niveau de Fermi aux six sommets de la zone de Brillouin. La surface de Fermi se réduit donc à 6 points et la bande π correspond à la bande de valence tandis que la bande π^* coïncide

avec la bande de conduction. Etant donné qu'aucune autre bande ne se trouve à proximité, ce ne sont que les zones proches des points K qui seront impliquées dans les phénomènes de transport électronique. Le graphène est donc un semi-conducteur de gap nul comme l'ont montré d'autres travaux [19][21][49].

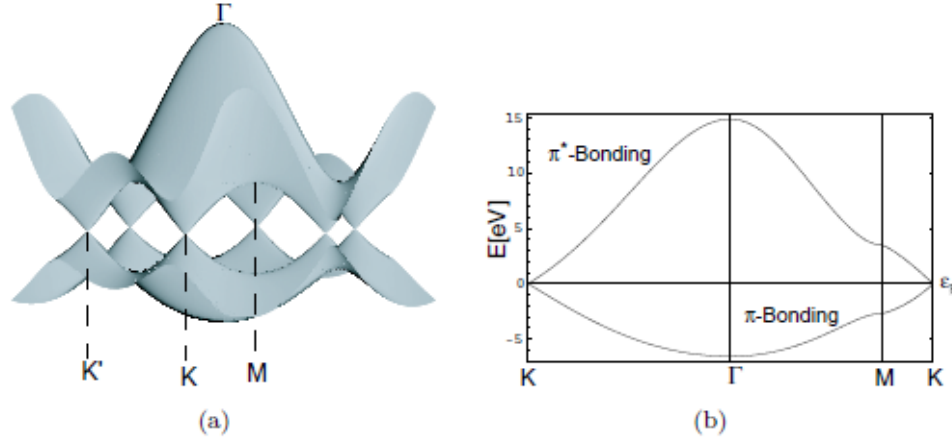


Figure 1.23 : a) Relation de dispersion du graphène, b) Structure de bandes du graphène dans la zone de Brillouin.

Si on néglige γ_0 dans la relation de dispersion, l'équation (1.19) devient:

$$E_i(K) = \pm\gamma_1 |g(K)| = \pm\gamma_1 \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

(1.22)

Cette approximation s'appelle le modèle de Slater-Koster [6][48] et est utilisée comme une approximation simple pour la structure électronique du graphène.

Pour le terme de saut H_{AB} , les sauts au-delà du plus proche voisin sont également négligés. De plus, si on néglige les recouvrements entre les orbitales p_z du site A et celles du site B, le calcul de l'équation séculaire donne l'expression simple suivante pour l'énergie des orbitales π .

$$E_\pi(k_x, k_y) = \pm\gamma_1 \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

(1.23)

Il existe deux électrons p_z dans une cellule unité provenant de chaque atome. La liaison π possédant deux états de spins est donc pleine et la liaison π^* vide. Le même principe est appliqué aux orbitales atomiques p_x , p_y et s comprises dans le plan du graphène. Elles vont former 3 liaisons σ pleines en électron et 3 liaisons σ^* vides. Comme on peut le

voir d'après le schéma de bandes électroniques de la figure (I.23), ce sont bien les liaisons π , états électroniques proches de E_F , qui déterminent les propriétés de conduction du graphite. Un point important à noter, les bandes π et π^* sont dégénérées aux points K et K', vecteurs d'onde de Fermi du graphite. Le graphène est neutre à l'énergie E_F . Ce point est couramment appelé le point de neutralité de charge. Maintenant que la structure électronique du graphite est précisée, il est aisé d'obtenir les propriétés électroniques des nanotubes de carbone comme nous allons le voir dans ce qui suit.

I.4.5.3 Structure de bandes électroniques des CNT

I.4.5.3.4 Structure cristalline du CNT

Comme son nom l'indique, un nanotube monoparoie est formé d'un unique feuillet de graphène enroulé sur lui-même. Dans l'espace réel, ce réseau hexagonal est défini par la base (\vec{a}_1, \vec{a}_2) . On note $a = |a_1| = |a_2|$. Dans la base (x,y), ces vecteurs ont pour coordonnées:

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad ; \quad \vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)$$

$$\text{Où } a = \sqrt{3}a_{C-C} = 0.246 \text{ nm}$$

Le nanotube « déroulé » représenté sur la figure (I.24) est obtenu en repliant la feuille de graphène de façon à faire coïncider deux sites cristallographiques équivalents reliés par le vecteur chiral \vec{C}_h . Dans la base (\vec{a}_1, \vec{a}_2) , il s'écrit:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$$

(1.24)

Les entiers n et m sont appelés indices chiraux du nanotube. En fonction des valeurs de m et n, il existe deux structures particulières pour les nanotubes de carbone : les nanotubes chaises (n,n), les nanotubes zig-zag (n, 0). Les autres nanotubes sont dits chiraux.

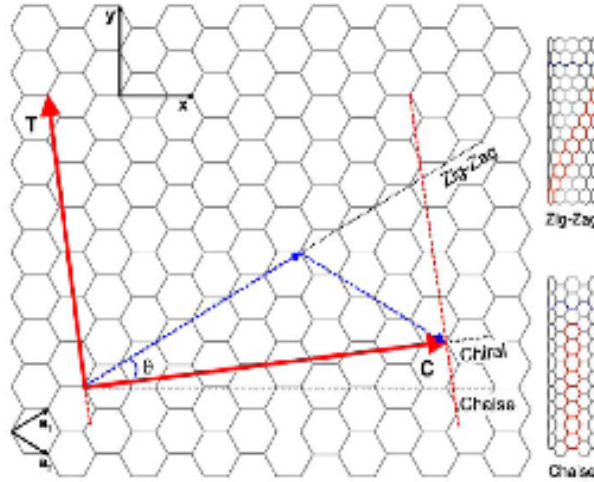


Figure I.24 : Structure d'une feuille de graphène à 2 dimensions. La cellule élémentaire d'un nanotube (6,4), déterminée par C_h et T. Le vecteur T définit l'axe du nanotube. Les motifs caractéristiques des structures chaise et zig-zag sont représentés [42] :

La circonférence du nanotube n'est autre que la norme du vecteur chiral.

Le diamètre: du nanotube est défini par [19][49]:

$$d_t = \frac{|C_h|}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad , \quad |C_h| = a \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (1.25)$$

Le rayon :

$$R = \frac{1}{2\pi} a_{cc} \sqrt{(n^2 + m^2 + nm)}$$

Avec a_{cc} de l'ordre de 1,44 Å la distance C-C dans les nanotubes

L'angle chiral θ

$$\theta = \arcsin \left| \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \right| \quad |\theta| \in [0, 30^\circ] \quad (1.26)$$

La longueur d'une période selon l'axe du tube est [25][46]:

$$L_{per} = \frac{3a_{cc} \sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{d_r}$$

Avec $d_r = 3d$ si $(n-m)$ est multiple de 3 et d sinon ; $d = \text{PGCD}(n, m)$

Le nombre d'atomes compris dans une période de nanotube [20][41][54] :

$$N_{per} = \frac{4(n^2 + m^2 + nm)}{d_r}$$

(1.27)

On définit également, l'angle chiral θ entre le vecteur chiral \vec{C}_h et le vecteur de base \vec{a}_1

$$\cos(\theta) = \frac{C_h \cdot a_1}{|C_h \cdot a_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}$$

(1.28)

Du fait de la symétrie hexagonale du réseau, cet angle varie entre 0° et 30° . Pour $m=0$, on a $\theta = 0^\circ$; on obtient alors un nanotube de type zig-zag. Pour un nanotube de type chaise $\theta = 30^\circ$ [1][32][54].

Afin de définir la cellule élémentaire d'un nanotube de carbone, nous introduisons le vecteur translation \vec{T} . Ce vecteur est perpendiculaire au vecteur chiral (donc parallèle à l'axe du nanotube) et joint les deux premiers sites équivalents dans le réseau réel. Ses coordonnées sont (t_1, t_2) dans la base (a_1, a_2) . D'après la définition de \vec{T} ,

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2$$

(1.29)

$\vec{T} \cdot \vec{C}_h = 0$, et nous voulons $|T|$ pour être aussi petite que possible nous obtenons la relation:

$$t_1 = \frac{2m + n}{d_R} \quad ; \quad t_2 = -\frac{2n + m}{d_R}$$

(1.30)

t_1 et t_2 n'ont pas de diviseur commun [1][7][46], où d_R est le plus grand commun diviseur (PGCD) de $2m+n$ et $2n+m$. Le nombre d'atomes de carbone n_c contenus dans la cellule élémentaire du nanotube est le double du nombre N d'hexagones de graphite qu'elle contient.

$$n_c = 2N = 2 \frac{|\vec{C}_h \times \vec{T}|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} = \frac{4(n^2 + m^2 + nm)}{d_R}$$

(1.31)

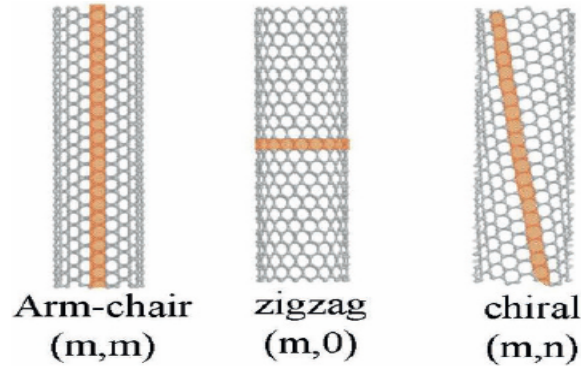


Figure I.25 : Trois formes de nanotubes de carbone.

Représentation d'un CNT dans l'espace réciproque

Les vecteurs de base (\vec{b}_1, \vec{b}_2) du réseau réciproque sont définis par (Figure I.26.a):

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi \quad , \quad \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = 0 \quad (1.32)$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = 2\pi \quad , \quad \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0 \quad (1.33)$$

Nous introduisons les vecteurs (\vec{K}_1, \vec{K}_2) de l'espace réciproque, correspondant aux vecteurs (\vec{C}_h, \vec{T}) de l'espace réel.

$$\vec{C}_h \cdot \vec{K}_1 = 2\pi \quad , \quad \vec{C}_h \cdot \vec{K}_2 = 0 \quad (1.34)$$

$$\vec{T} \cdot \vec{K}_2 = 2\pi \quad , \quad \vec{T} \cdot \vec{K}_1 = 0 \quad (1.35)$$

Nous obtenons les expressions suivantes:

$$\vec{K}_1 = \frac{1}{N} (-t_2 \vec{b}_1 + t_1 \vec{b}_2) \quad , \quad \vec{K}_2 = \frac{1}{N} (m \vec{b}_1 - n \vec{b}_2) \quad (1.36)$$

Où N est le nombre d'hexagones contenus dans la cellule élémentaire du nanotube.

Le vecteur \vec{K}_2 , parallèle à l'axe du nanotube, définit la première zone de Brillouin de cet objet unidimensionnel dont la longueur est supposée infinie. Dans la direction transverse, le repliement du nanotube impose des conditions aux limites périodiques. Les valeurs du vecteur d'onde transverse sont donc quantifiées. Le vecteur $N\vec{K}_1 = (-t_2 \vec{b}_1 + t_1 \vec{b}_2)$ est un vecteur du réseau réciproque du graphite. Par conséquent, deux vecteurs qui diffèrent de $N\vec{K}_1$

sont équivalents. En revanche, comme t_1 et t_2 n'ont pas de diviseur commun, aucun des vecteurs μK_1 ($\mu = 1, \dots, N-1$) n'est un vecteur du réseau réciproque. Les N vecteurs d'onde μK_1 ($\mu = 1, \dots, N-1$) donnent lieu à autant de valeurs discrètes du vecteur d'onde transverse (Figure I.26.a).

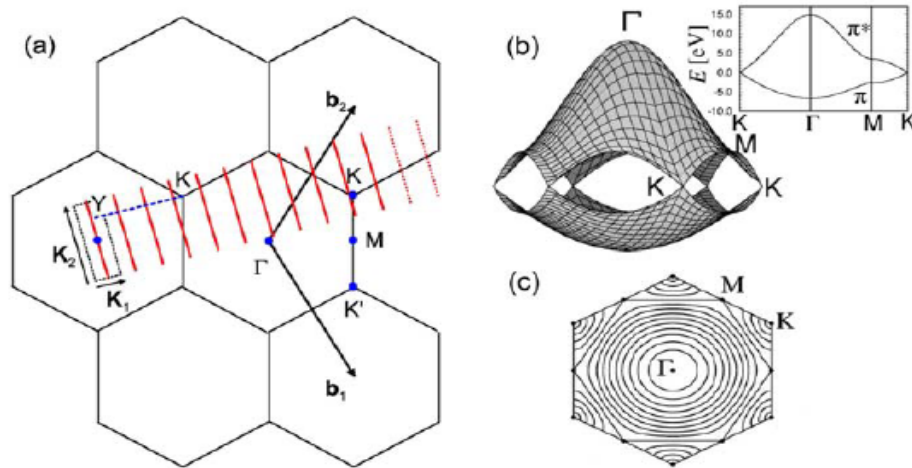


Figure I.26 : (a) Zone de Brillouin étendue. La cellule élémentaire d'un nanotube de carbone dans l'espace réciproque est déterminée par les vecteurs K_1 et K_2 . Le vecteur NK_1 reliant deux points Γ équivalents du réseau réciproque n'est pas représenté sur ce schéma. Les relations de dispersion des bandes d'énergie du nanotube s'obtiennent en faisant des coupes dans la courbe de dispersion du graphite (b) dans les directions données par les lignes rouges. (c) Lignes d'égal énergie dans la zone de Brillouin [7][18].

I.4.5.3.5 Structure de bandes des nanotubes de carbone

La structure électronique d'un nanotube monofeuillet est obtenue de manière très simple à partir de celle de la feuille de graphène. Lorsqu'on ne considère pas les effets de courbure, la grande différence entre eux est le confinement radial dans le cas du nanotube. En effet, pour les ondes voyageant dans la direction axiale du tube, toutes les valeurs du vecteur d'onde \vec{K} sont possibles. Par contre, dans la direction circumférentielle, le vecteur chiral \vec{C}_h impose une condition périodique à la fonction d'onde. Le vecteur d'onde associé \vec{K} est donc quantifié dans la direction de \vec{C} [27][42][55]:

$$\vec{K} \cdot \vec{C}_h = \frac{2\pi l}{2\pi R}$$

(1.37)

Avec l : entier et R : le rayon du tube

Le lieu de ces points dans l'espace réciproque est une famille de droites perpendiculaire à la direction du vecteur chiral. Ces droites sont donc parallèles à l'axe du tube, et dans cette direction axiale, le vecteur d'onde peut varier de manière continue. Elles sont dessinées pour trois tubes différents à la figure (I.27).

Si, pour un nanotube (m,n), ces droites passent par un des points K de la zone de Brillouin du graphène, c'est-à-dire en un point où les bandes π et π^* sont dégénérées, alors, le nanotube est métallique. Ces conditions sont satisfaites lorsque

$$m - n = M(3) \quad (1.38)$$

Où $M(3)$ est l'ensemble des multiples entiers de trois.

Tous les nanotubes perpendiculaires (m,m) sont donc métalliques tandis que les nanotubes parallèles ne sont métalliques que si m est multiple de trois. Quand m-n n'est pas un multiple de trois, le nanotube est un semi-conducteur. Il en résulte qu'un tiers des nanotubes sont métalliques, les autres étant semi-conducteurs [44][45][50].

Pour obtenir les relations de dispersion et, par la suite, la structure de bandes des nanotubes de carbone monofeuillets, le modèle le plus simple consiste à remplacer le vecteur d'onde k par ses valeurs quantifiées dans la relation de dispersion du graphène. On ne tient alors pas compte de la courbure du réseau. Regardons de plus près le cas particulier des nanotubes achiraux [29][36].

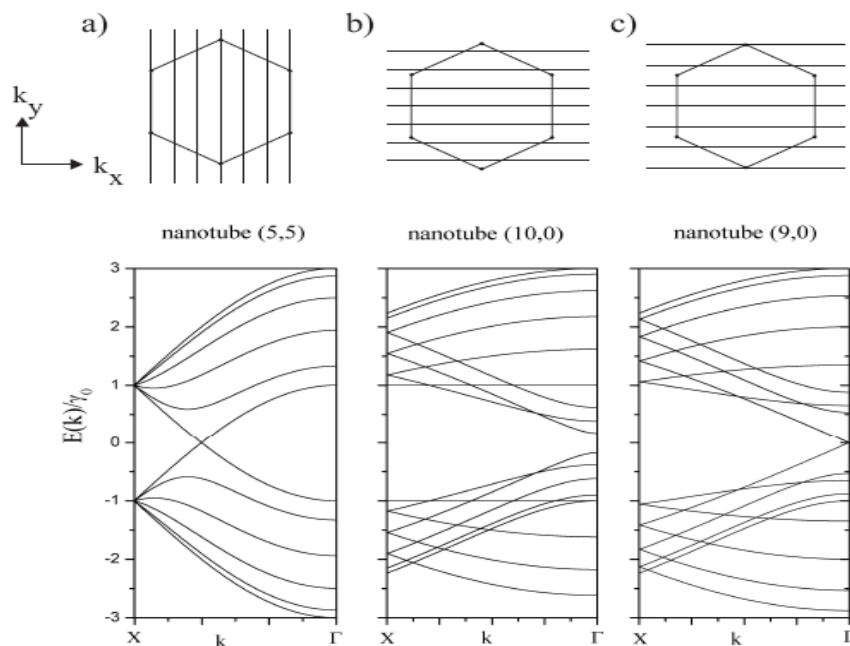


Figure I.27 : En haut : Zone de Brillouin du graphène avec la famille de droites définissant les valeurs permises pour le vecteur d'onde k dans le CNT. En

bas: Relations de dispersion correspondantes pour trois CNTs différents [32][33].

Pour un nanotube **perpendiculaire** (m,m), en posant s=0 (approximation de Slater-Koster[6]) on obtient:

$$E(\vec{k}) = \pm \gamma_1 \times \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)}$$

(1.39)

Avec k_y un vecteur d'onde unidimensionnel (le long de l'axe du tube). La figure (I.27.a) montre cette relation pour un nanotube (5,5). On observe que deux bandes se croisent au niveau de Fermi, en $k = \pm 2\pi/(3\sqrt{3}a)$ rendant le nanotube métallique.

Dans le cas des nanotubes parallèles (m,0), les relations de dispersion deviennent [20][33] :

$$E_l(k_x) = \pm \gamma_1 \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{l\pi}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{l\pi}{m}\right)}$$

(1.40)

Dans l'approximation des liaisons fortes, la structure de bandes et les propriétés électroniques d'un nanotube monoparoï sont directement issues de la structure de bandes du graphite, en tenant compte de la quantification du vecteur d'onde transversal. La dispersion $E_{g2D}(k)$ des bandes correspondant aux électrons π du graphite est représentée sur la figure (I.27.b). Au voisinage des points K de la zone de Brillouin, les bandes π et π^* se croisent en $E_{g2D}=0$. Le graphite est donc un semi-métal (ou semiconducteur à gap nul). La dispersion des bandes d'énergie de valence et de conduction issues de la quantification du vecteur d'onde transverse s'obtient en effectuant des coupes dans la dispersion de la feuille de graphite (figure I.27) le long des N segments définis par [27][52][54]:

$$k_\mu = k \frac{K_2}{|K_2|} + \mu K_1$$

(1.41)

Avec $k \in [-\pi/|T|, \pi/|T|]$ selon l'axe du nanotube et $\mu \in [0, N-1]$

La dispersion de la bande d'indice μ s'obtient en injectant l'équation (1.41) dans l'expression de la dispersion du graphite:

$$E_{\mu}(k) = E_{g2D} \left(k \frac{K_2}{|K_2|} + \mu K_1 \right)$$

(1.42)

Cas particulier: CNT métallique et CNT semiconducteur

Comme nous l'avons signalé dans l'introduction, une des caractéristiques remarquables des nanotubes de carbone est de pouvoir être métalliques ou semiconducteurs, en fonction de leurs indices chiraux (n,m). La nature, (semi-conductrice ou métallique) d'un nanotube dépend directement de la position des lignes de coupes par rapport aux points remarquables de la zone de Brillouin (figure I.28). Ainsi, lorsque l'une de ces lignes passe par le point K de la zone de Brillouin du graphite à 2 dimensions, le nanotube est un semi-métal. Dans le cas contraire, il y a ouverture d'un « gap » dans la dispersion et le nanotube est semiconducteur [17][25][53].

Il est possible de déterminer la nature d'un nanotube à l'aide d'un critère simple. En considérant la figure (I.10.a), il apparaît clairement qu'un nanotube est métallique à condition que la distance YK soit un multiple de $|K_1| = 2/d_t$. A l'aide d'un calcul géométrique, il est facile de montrer que:

$$YK = \frac{2n+m}{3} |K_1|$$

(1.43)

Par conséquent un nanotube (n,m) est métallique si $2n+m$ est un multiple de 3, ou, de manière équivalente si $n-m$ est un multiple de 3. On notera par la suite $\nu = \text{mod}(n-m, 3)$. Un nanotube tel que:

$$\begin{cases} \nu = 0 & \text{le nanotube est métallique} \\ \nu = 1 \text{ ou } 2 & \text{le nanotube est semi-conducteur} \end{cases}$$

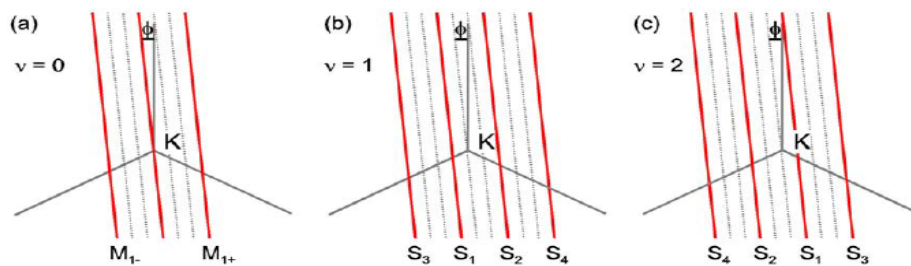


Figure I.28 : Zone de Brillouin autour du point K : a) pour $\nu = 0$, b) pour $\nu = 1$, c) pour $\nu = 2$ [16][46].

Dans la figure (I.28), K est représenté en gris, et l'angle $\phi = \pi/6 - \theta$ correspond à la déviation de l'axe du nanotube par rapport à un nanotube chaise. Les lignes en trait plein espacées de $|K_1| = 2/d_t$ représentent les états accessibles déterminés par les conditions aux limites périodiques. (a) Lorsque l'une des lignes coupe le point K (pour $\nu = 0$) (figure I.28.a), le nanotube est métallique. Dans le cas contraire, le point K se situe à une distance $2/3d_t$ (pour $\nu = 1$ (figure I.28.b)) ou $4/3d_t$ (pour $\nu = 2$ (figure I.28.c)) du plus proche vecteur k_μ . Il y a alors ouverture d'un gap et le nanotube est semiconducteur. Les lignes pointillées espacées de $2/3d_t$ ont été ajoutées pour plus de clarté.

I.4.5.3.6 Densité d'états

Un nanotube de carbone est un système unidimensionnel. En conséquence, dans chaque bande d'énergie, la densité d'états électroniques varie comme $1/\sqrt{E}$ au voisinage du point K. La densité d'états est caractérisée par des divergences appelées singularités de van Hove. Dans un nanotube, la contribution d'une bande $E_\mu(k)$ à la densité d'états $\rho(E)$ s'écrit [6][17][46]:

$$\rho_\mu(E) = \frac{2}{Nd_t} \sum_i \int dk \delta(k - k_i) \left| \frac{\partial E_\mu}{\partial k} \right|^{-1} \quad (1.44)$$

Où les points k_i sont les solutions de l'équation $E - E_\mu(k_i) = 0$. L'intégrale $\int k = 2/d_t$ correspond à la longueur de la zone de Brillouin du nanotube [6][32][50].

En première approximation, on peut considérer que la dispersion des bandes d'énergies est linéaire en k au voisinage du niveau de Fermi, i.e. du point K de la zone de Brillouin. Pour une bande d'énergie $E_\mu(k)$, on a donc [27][42]:

$$|E_\mu(k)| \approx \frac{\sqrt{3}}{2} a\gamma_0 |K_\mu - K_F| \quad (1.45)$$

Où nous avons introduit k_F , le vecteur d'onde de Fermi et γ_0 , l'énergie d'interaction entre plus proches atomes de carbone voisins. Pour une bande μ n'ayant pas d'intersection avec le point K, il existe une valeur de $K_{\mu,0}$ pour laquelle la distance $|K_{\mu,0} - K_F|$ est minimale. Ce point correspond à un maximum (minimum) local d'énergie dans la dispersion

de la bande à 1 dimension, qui se traduit par l'existence d'une singularité de van Hove dans la densité d'états occupés (resp. vacants) [7][19][25].

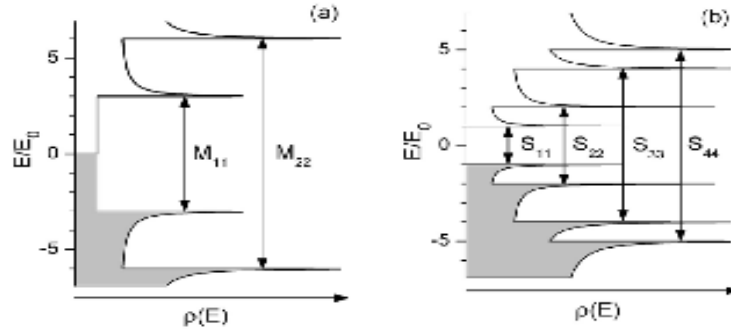


Figure I.29 : Densité d'états électroniques d'un CNT :a) métallique, b) semiconducteur de même diamètre [21][32].

D'après l'expression universelle (I.44). Les énergies sont exprimées en unités de $E_0 = \frac{\gamma_0 a}{\sqrt{3}d_t}$. Les transitions optiques permises (M_{ii} et S_{ii}), prédites sans tenir compte de l'interaction électron/trou, sont indiquées.

En explicitant l'expression $|K_\mu - K_F|$, on obtient la densité d'états d'un nanotube au voisinage de l'énergie de Fermi. Celle-ci peut être exprimée en fonction du diamètre du tube (des indices (n,m)) à l'aide d'une formule universelle:

$$\rho(E) = \frac{4a}{\pi^2 d_t \gamma_0} \sum_{\mu} g(E, E_{\mu}) \quad (1.46)$$

Avec

$$E_{\mu} = |3\mu - (n + m)| \frac{a\gamma_0}{\sqrt{3}d_t} \quad (1.47)$$

Et

$$g(E, E_{\mu}) = \begin{cases} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - E_{\mu}^2}} & \text{si } |E| > |E_{\mu}| \\ 0 & \text{si } |E| < |E_{\mu}| \end{cases} \quad (1.48)$$

La densité d'états totale (figure I.29) s'écrit donc comme une somme de contributions variant comme $1/\sqrt{E}$, associées à chaque bande de valence et de conduction. Pour un nanotube métallique (figure I.29.a), il existe une valeur de μ telle que $E_{\mu} = 0$, et donc $g=1$. Il n'y a donc pas de bande interdite et la densité d'états ne s'annule jamais. Dans le cas d'un

nanotube semiconducteur (figure I.29.b), il existe une bande interdite séparant les deux premières singularités de van Hove. En unités de $E_0 = \frac{\gamma_0 a}{\sqrt{3}d_t}$, les singularités de van Hove se situent à $E/E_0 = 1,2,4,5,\dots$ pour les nanotubes semiconducteurs et à $E/E_0 = 3,6,9,\dots$ pour les nanotubes métalliques.

I.10 Conclusion

Les nanotubes de carbone sont d'une simplicité chimique et d'une singularité structurale absolument uniques. Leurs caractéristiques dimensionnelles associées à des propriétés physiques, mécaniques et électriques remarquables ouvrent à l'industrie des perspectives d'innovations nombreuses et prometteuses.

Nous avons vu que les propriétés des nanotubes de carbone sont tout à fait particulières. Ils peuvent être métalliques ou semi-conducteurs, sont très résistants aux contraintes, acceptent des déformations élastiques importantes sans signes de fatigue...Mais les nombreuses applications envisageables ne seront réalisables qu'à condition de résoudre certains problèmes.

Les méthodes de synthèse des nanotubes ont évolué et permettent d'obtenir des structures différentes. La production à grande échelle, le bruit électronique, le caractère aléatoire de leur fabrication...restent des difficultés à surmonter.

Mais ce qui distingue les nanotubes des autres systèmes mésoscopiques c'est leur structure géométrique unique à la base de propriétés électroniques exceptionnelles. En effet, leur structure cylindrique dérivée de la structure bidimensionnelle du graphène leur confère entre autre, la possibilité de passer d'un état semi-conducteur à gap modulable à un état métallique en ajustant simplement le diamètre. Ceci reste jusqu'à aujourd'hui, une propriété unique aux nanotubes de carbone.

La structure électronique et les différentes propriétés des nanotubes de carbone nous conduisent à étudier dans le chapitre suivant les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone.

CHAPITRE II :

**Les transistors à effet de champ
à base de nanotubes de carbone**

II.7 Introduction

Depuis les années 60, la capacité d'intégration en microélectronique suit une évolution exponentielle, avec une densité de transistors par microprocesseur doublée tous les 3 ans. Cette évolution, connue sous le nom de loi de Moore [60][69], a conduit à la fabrication de microprocesseurs de plus de 400 millions de transistors et à la réalisation de mémoires dont la densité dépasse le Gbit. L'augmentation de la densité d'intégration et l'amélioration des performances sont rendues possibles par la diminution de la taille des transistors. La grandeur caractéristique d'un transistor qui distingue une génération de transistors de la suivante est la longueur de grille L_G [71][72].

La course effrénée à la miniaturisation des puces électroniques basées sur le silicium arrivera, d'après la loi de Moore, à son terme dans quelques années, et ceci à cause des limitations propres au silicium et aux technologies associées. Les nanotubes seraient alors un excellent candidat à son remplacement, les métalliques seraient utilisés pour l'interconnexion et les semiconducteurs comme transistors [29].

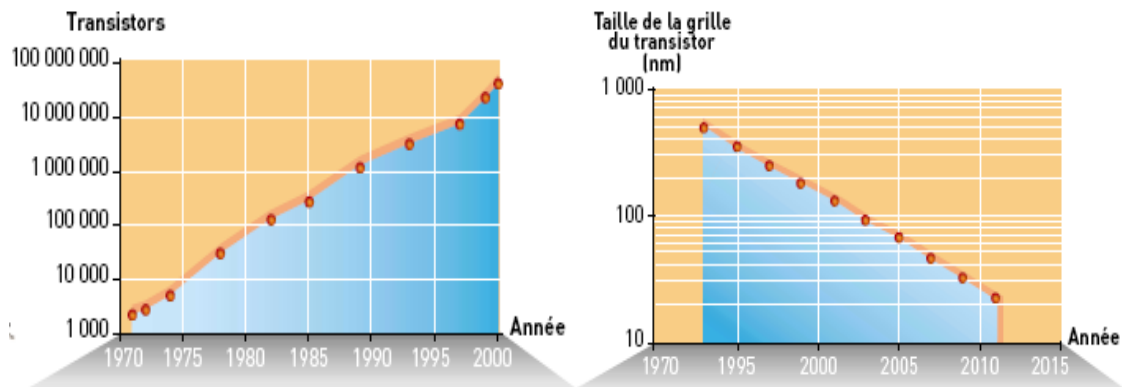


Figure II.1 : Loi de Moore : tous les 18 mois, le nombre des transistors sur la surface des puces électroniques double et la taille de leur grille diminue par un facteur 1,3[60][69].

Dispositif semi-conducteur à deux jonctions mis au point, en 1948, par trois chercheurs (J. Bardeen, W.B. Shockley et W.H. Brattain) auxquels on décerna le prix Nobel de physique en 1956, le transistor est à la base du formidable développement de l'électronique et des disciplines connexes (informatique, micro-électronique). Associé à d'autres composants, il permet de réaliser les fonctions essentielles de l'électronique que sont la génération de signaux, l'amplification, la modulation-démodulation, la commutation, les circuits logiques...[63][64]

Les deux types principaux de transistors utilisés aujourd'hui sont les transistors bipolaires (transistors NPN et PNP), et les transistors à effet de champ (FET ou TEC : Field

Effect Transistor). Nous allons décrire à travers ce chapitre les catégories de FET existantes : le FET à jonction (appelé aussi JFET) et le FET à grille isolée (appelé aussi MOSFET ou Transistor MOS) [71][72].

II.8 Le transistor à effet de champ

II.2.2 Définition et types de FET

Les transistors à effet de champ sont des composants unipolaires, ne mettant en jeu qu'un seul type de porteurs, et dans lesquels le courant circulant entre les électrodes source et drain est contrôlé par variation de la conductivité d'un canal conducteur, soit par modification de sa section (MOSFET, JFET), soit par accumulation plus ou moins importante de porteurs le long d'une interface (MISFET, TEGFET), cette variation étant commandée par une troisième électrode, la grille [66][73].

Les types de transistors à effet de champ les plus courants sont : JFET, MOSFET, etc.....

II.9 Le transistor à effet de champ à jonction

II.3.5 Définition et principe de fonctionnement

Le transistor à effet de champ à jonction (JFET) est un dispositif semi-conducteur qui repose sur un contrôle du courant de drain à l'aide d'un champ généré par une polarisation entre grille et source [61]. Il est basé sur l'existence d'un canal conducteur dont la conductance peut être modulée à l'aide d'une tension appliquée à la grille. Ce type de composant semiconducteur présente l'avantage de ne faire intervenir qu'un seul type de porteurs dans le processus de conduction du courant et pour cela il est transistor 'unipolaire' [61], par opposition au transistor bipolaire.

II.3.6 Constitution d'un FET

La construction de base d'un transistor à effet de champ à jonction (JFET ou Junction Field Effect Transistor) est donnée à la figure (II.2). Le JFET peut être considéré comme un barreau de silicium qui agirait comme une résistance. La borne par laquelle les porteurs de charge entrent est appelée la source, la borne opposée est appelée drain. A l'aide d'un matériau semi-conducteur de l'autre type, on crée une jonction. Cette jonction constitue la grille (gate).

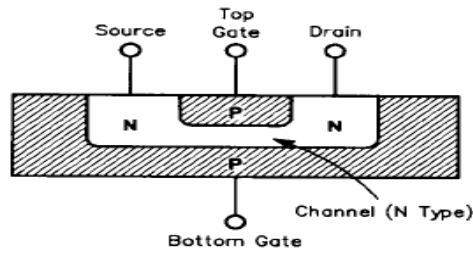


Figure II.2 : Construction d'un transistor à effet de champ à jonction

On forme ainsi un canal. En fait il existe deux types de JFET, le JFET à canal N et le JFET à canal P, selon le type de matériau utilisé pour le matériau qui forme le drain-source.

Les symboles des deux types de JFET sont donnés par la figure (II.3)

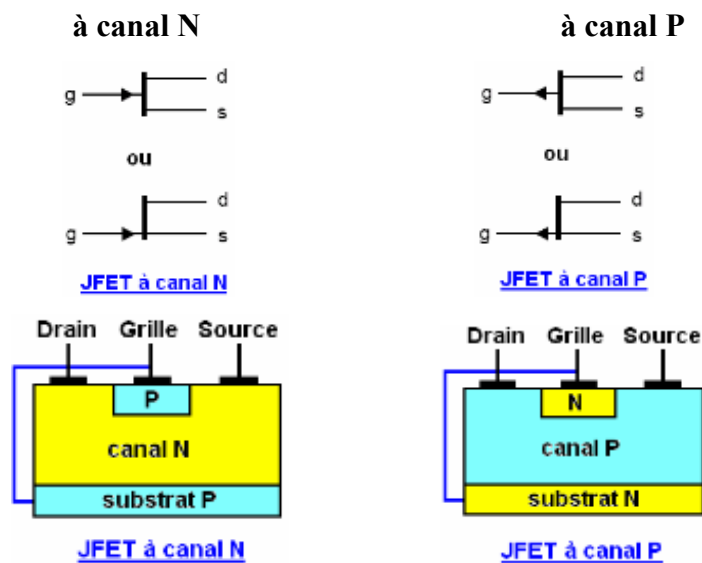


Figure II.3 : Symboles des deux types de JFET

Le FET à jonction canal N est constitué d'une mince plaquette de silicium N qui va former le canal conducteur principal. Cette plaquette est recouverte partiellement d'une couche de silicium P de manière à former une jonction PN latérale par rapport au canal (Figure II.2)[68].

Le courant circulera dans le canal, rentrant par une première électrode, le drain et sortant par une deuxième, la source. L'électrode connectée à la couche de silicium P sert à commander la conduction du courant dans le canal ; on l'appelle la grille, par analogie avec l'électrode du même nom présente sur les tubes à vides. Le transistor FET fonctionnera toujours avec la jonction grille-canal polarisée en inverse [65][68].

II.3.7 Phénomène de pincement

II.3.3.3 Tension drain-source nulle

Pour simplifier le raisonnement, nous allons considérer dans un premier temps un montage (Figure II.4) où le canal est court-circuité ($V_{DS}=0$) et où la grille est à un potentiel négatif par rapport au canal (jonction polarisée en inverse) [71][74].

Le fait de polariser la jonction en inverse crée une zone vide de porteurs, appelée zone de déplétion : les trous de la zone P se recombinent avec les électrons de la zone N, créant ainsi une zone neutre (il n'y a plus de porteurs pour assurer la conduction électrique) d'épaisseur $w = k|V_{GS}|$.

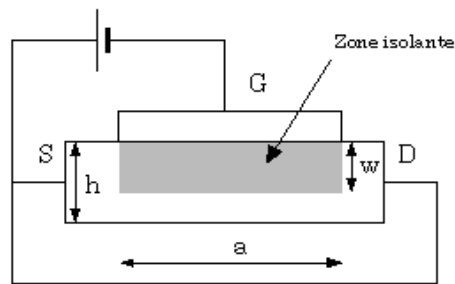


Figure II.4 : Modulation de conductivité à $V_{DS}=0$.

Il reste dans le canal N une zone conductrice d'épaisseur $(h-w)$. La résistance entre drain et source sera alors égale à :

$$R_{DS} = \rho \frac{a}{b(h-w)} \quad (2.1)$$

Où b est la largeur du canal et ρ sa résistivité. La résistance R_{DS} varie donc avec la tension (inverse) appliquée sur la jonction grille-canal. A la limite, pour $V_{GS} = V_P$, appelée tension de pincement, la zone de déplétion ferme le canal : il n'y a plus de porteurs, et la résistance entre source et drain tend vers l'infini (figure II.5) : c'est le phénomène de pincement [63][65].

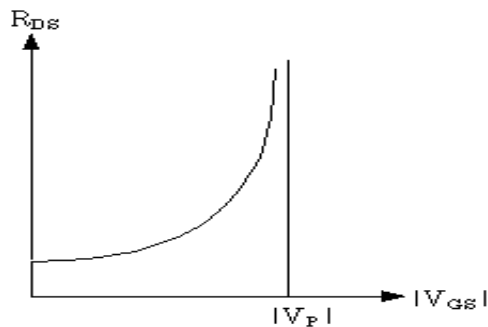


Figure II.5 : Phénomène de pincement.

II.3.3.4 Tension drain-source non nulle

Si on reprend le montage précédent, et qu'en plus on applique une tension positive entre le drain et la source, le gradient de potentiel présent tout le long du barreau de silicium constituant le canal va modifier le profil de la zone de déplétion. Vers le drain, la tension grille-canal sera supérieure (en valeur absolue) à ce qu'elle est vers la source. En effet, on a la relation (attention, tous les termes sont négatifs)[65-67] :

$$V_{GD} = V_{GS} + V_{SD} \quad (2.2)$$

En conséquence, la zone isolante présente une forme similaire à celle donnée sur la figure (II.6).

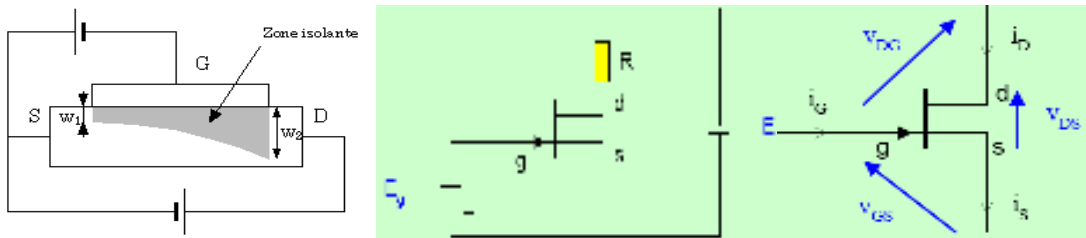


Figure II.6 : Modulation de conductivité pour V_{DS} non nul.

Sur cette figure, le canal n'est pas complètement bouché. Si on augmente la tension V_{DS} , à V_{GS} donnée, l'épaisseur isolante W_2 va augmenter ; à partir d'une certaine tension V_{DS} , correspondant à une largeur du canal très faible, le courant va tendre vers une valeur constante, car deux phénomènes contradictoires vont s'équilibrer [66] :

Une augmentation de V_{DS} devrait entraîner un accroissement du courant dans le canal (loi d'Ohm), mais cette augmentation de V_{DS} va accroître la tension V_{DG} , qui aura pour effet d'agrandir la zone de déplétion et entraîner une diminution de la largeur du canal, donc, de sa résistivité.

Un accroissement de la tension V_{DS} ne va pas donc entraîner une augmentation du courant dans le canal (le courant de drain), mais une augmentation de la résistivité de ce canal. Le courant de drain va tendre vers une valeur constante.

II.3.8 Caractéristiques

A partir du paragraphe précédent, on peut déduire ce qui suit :

Si $V_{GS} = V_P$, dans tous les cas, quelle que soit la tension V_{DS} , le courant dans le canal sera nul. En effet, une tension V_{DS} non nulle ne fera que renforcer le phénomène de pincement.

Le courant de drain deviendra d'autant plus vite constant que la tension $|V_{GS}|$ sera plus élevée. Le courant constant maximum sera obtenu pour une tension grille-source nulle. Les caractéristiques du FET s'en déduisent aisément [73-75].

II.3.4.3 Caractéristiques d'entrée

Nous avons vu que le FET sera toujours utilisé avec une polarisation grille-canal négative, soit $V_{GS} < 0$. La caractéristique correspondante est donc celle d'un interrupteur ouvert : courant nul quelque soit la tension appliquée. En pratique, on aura un très léger courant de fuite caractéristique d'une jonction diode polarisée en inverse. Ce courant double tous les 6°C pour le silicium. A température ambiante, il sera inférieur au μA , et plutôt de l'ordre de quelques nA[74].

II.3.4.4 Caractéristiques de sortie et de transfert

La figure (II.7) représente les caractéristiques de transfert $I_{DS} = f(V_{GS})$ à gauche, et de sortie $I_{DS} = f(V_{DS}, V_{GS})$ à droite.

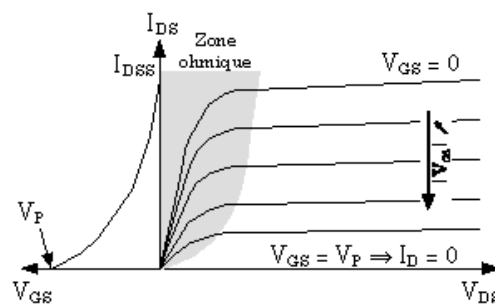


Figure II.7 : Caractéristiques du FET à jonction.

La caractéristique de sortie peut être décomposée en deux grandes zones :

La partie correspondant au fonctionnement à courant constant (zone de pincement), et qui servira à l'amplification de petits signaux de la même manière que pour le transistor bipolaire [77][80].

La zone ohmique (en grisé sur la figure (II.7)) : dans cette zone, le FET est assimilable à une résistance dont la valeur est fonction de la tension V_{GS} . On ne représente que la partie positive de la caractéristique, mais en fait, le canal conducteur peut laisser passer le courant dans les deux sens (c'est juste un barreau de silicium conducteur, ce n'est pas une jonction. Le

seul défaut qui limite les valeurs négatives de V_{DS} est le fait qu'au delà d'une certaine tension négative de drain, la tension grille-drain devient positive, la jonction grille-canal étant alors polarisée en direct; le FET ne fonctionne plus correctement. Néanmoins, et à condition de rester dans le domaine des petits signaux (quelques dizaines à quelques centaines de mV), on peut considérer le FET comme une résistance dont la valeur est pilotée en tension [76].

On notera que les caractéristiques de sortie ont une allure connue : on retrouve celles du transistor bipolaire. La principale différence provient du mode d'attaque, comme indiqué en introduction : le FET est commandé en tension, et non en courant, comme l'est le bipolaire.

Ce réseau de courbes est borné en bas ($I_D = 0, V_{GS} = V_P$), et en haut ($I_D = I_{DSS}, V_{GS} = 0$). I_{DSS} est la valeur maxi de courant de drain qui pourra circuler dans le composant. Cette valeur est de l'ordre de quelques mA à quelques dizaines de mA pour les FETs courants. La tension de pincement V_P est de l'ordre de quelques volts (typiquement de -2 à -8V). La zone ohmique est sensiblement différente de la zone de saturation du transistor bipolaire. La fonction résistance commandée est spécifique au FET et ne peut pas être réalisée de cette façon avec un transistor bipolaire [68][72][76].

Pour une même référence de FET (2N3819 par exemple), la dispersion de I_{DSS} et V_P sera très importante, plus encore que la dispersion observée pour les caractéristiques des transistors bipolaires. Ceci fait que ces transistors ne pourront pas être utilisés sans précautions dans des montages pointus, ni à plus forte raison, dans des montages de précision [77][78].

La caractéristique de transfert $I_{DS}=f(V_{GS})$ résume bien les limites du FET : courant de drain nul pour une tension V_{GS} égale à la tension de pincement V_P , et courant maxi I_{DSS} pour une tension V_{GS} nulle. La courbe est assez bien approximée par une parabole d'équation :

$$I_{DS} = I_{DSS} \left(1 - \frac{V_{GS}}{V_P} \right)^2$$

(2.3)

La dérivée de cette loi va nous renseigner sur l'aptitude du transistor à amplifier. En effet, pour un courant I_{DS} donné, la dérivée (qu'on appelle judicieusement la pente du FET) va être égale à [29][78] :

$$g = \frac{\Delta I_{DS}}{\Delta V_{GS}} = 2 \frac{I_{DSS}}{|V_P|} \left(1 - \frac{|V_{GS}|}{|V_P|} \right)$$

(2.4)

Cette pente est le rapport de la variation du paramètre de sortie (I_{DS}) et du paramètre d'entrée (V_{GS}) ; elle est bien représentative de l'amplification d'un signal d'entrée. La valeur maximum, atteinte pour $V_{GS}=0$, vaut :

$$g_M = 2 \frac{I_{DSS}}{|V_P|}$$

(2.5)

On peut alors exprimer l'équation (2.4) sous la forme condensée suivante :

$$g = g_M \left(1 - \frac{|V_{GS}|}{|V_P|} \right)$$

(2.6)

La pente du FET est en moyenne relativement faible, soit quelques mA/V , au mieux quelques dizaines de mA/V . Elle dépend de la tension V_{GS} (la tension de polarisation) : comme pour le transistor bipolaire, l'amplification ne sera pas linéaire ; on fera là aussi des hypothèses de fonctionnement en petits signaux [75][82].

On peut d'ailleurs faire un parallèle avec l'amplification du transistor bipolaire. A elle seule, la caractéristique de transfert du FET correspond à la caractéristique globale entrée + transfert du bipolaire. En effet, dans ce dernier, la vraie caractéristique de transfert est une transformation courant-courant $I_C = f(I_B)$, la caractéristique d'entrée opérant la conversion tension-courant. De ce point de vue, on peut considérer le bipolaire comme un générateur de courant commandé en tension (la différence avec le FET est qu'il consomme du courant). La pente du transistor bipolaire (le rapport $\Delta I_C / \Delta V_{BE}$) vaut alors [29][66][78] :

$$\frac{\Delta I_C}{\Delta V_{BE}} = \frac{\Delta I_C}{\Delta I_B} = \frac{\Delta I_B}{\Delta V_{BE}} = \frac{\beta}{h_{11e}}$$

(2.7)

Pour un courant collecteur de 1,3mA et un β de 150, le h_{11e} vaut $3k\Omega$, ce qui fait une pente d'environ $50 mA/V$.

La pente du transistor bipolaire est environ 5 à 10 fois plus élevée que celle d'un FET typique. L'amplification qu'on pourra attendre d'un FET sera plus faible que celle obtenue dans les mêmes conditions avec un bipolaire [76].

II.10 Le transistor à effet de champ à grille isolée

Les transistors à grille isolée (MOSFET) reprennent plusieurs caractéristiques des FETs à jonction : ils se déclinent en deux versions, le canal N et le canal P, et les électrodes vont aussi s'appeler drain, source et grille, leur fonction étant la même que pour les JFETs[72].

II.4.3 Le MOSFET à canal induit

II.4.1.4 Description

Dans un substrat faiblement dopé P, on insère deux zones N fortement dopées (figure II.8). Ces deux zones seront la source et le drain du MOSFET ; elles sont distantes d'une dizaine de μm (séparées par le substrat P). La source est généralement reliée au substrat.

La grille n'est pas directement reliée au substrat P ; elle en est isolée par l'intermédiaire d'une très fine (quelques nm) couche d'isolant (de l'oxyde de silicium). Cette caractéristique donne son nom au MOSFET : Metal Oxyde Semiconductor.

La grille est ainsi isolée du substrat : le courant de grille sera nul en continu.

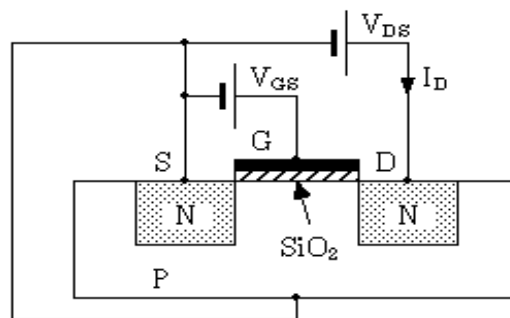


Figure II.8 : Schéma de principe d'un MOSFET canal N.

II.4.1.5 Principe de fonctionnement

Si $V_{GS}=0$ (figure II.9), aucun courant de drain ne passera, car le circuit source-drain est composé de deux jonctions en série, l'une PN, l'autre NP : il y en aura toujours une en inverse.

Lorsqu'on applique une tension V_{GS} positive, l'électrode de grille, l'isolant et le substrat P forment un condensateur.

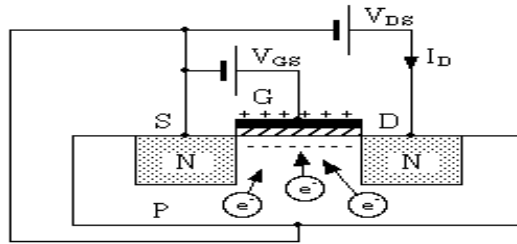


Figure II.9: Phénomène d'inversion.

Les électrons (porteurs minoritaires du substrat P) sont alors attirés vers la grille. Pour une tension V_{GS} suffisamment élevée (tension de seuil), la concentration en électrons dans le substrat est supérieure à la concentration en trous au voisinage de la grille ; on a alors une couche N dite couche d'inversion entre les zones N de la source et du drain. Les deux jonctions disparaissent, on n'a plus qu'un canal N, et le courant peut passer entre drain et source.

Mais, pour une tension V_{DS} supérieure à V_{GS} , on annule la tension grille-drain, et donc l'effet condensateur : on a un phénomène de pincement du canal induit N comme pour le JFET. Le courant de drain tend alors vers une valeur constante, de la même manière que pour le JFET.

Ce mode de fonctionnement est appelé à enrichissement, car une tension V_{GS} positive enrichit le canal en porteurs minoritaires, permettant le passage du courant [78][66].

II.4.1.6 Caractéristiques

La caractéristique de sortie est similaire à celle d'un JFET (figure II.10), sauf que le courant de drain pourra atteindre plusieurs ampères pour des composants de puissance. On note la zone en fonctionnement ohmique, tout à fait similaire à celle des JFETs, et permettant les mêmes applications [79].

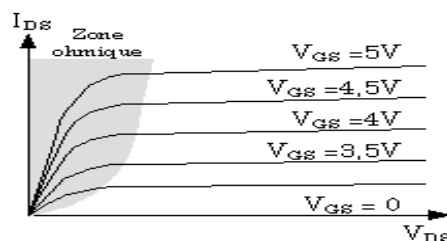


Figure II.10 : Caractéristique de sortie du MOS canal N [79].

La caractéristique de transfert a la forme suivante :



Figure II.11 : Caractéristique de transfert du MOS canal N.

Cette caractéristique de transfert est appelée la transconductance du MOS, et est exprimée en siemens (S). Pour des MOS de puissance, elle vaut plusieurs siemens (1 à 10 typiquement), soit des valeurs beaucoup plus importantes que pour les JFETs (quelques mS).

II.4.4 Le MOSFET à canal initial

II.4.2.3 Description et principe de fonctionnement

Le MOSFET à canal initial a la même structure que le MOS à canal induit (figure II.12), avec en plus, un canal faiblement dopé N entre la source et le drain.

Pour V_{GS} nulle, ce transistor fonctionne comme un JFET : un courant de drain pourra circuler ; quand V_{DS} augmente, un phénomène de pincement se produit, qui obstrue le canal : le courant de drain devient constant.

Si V_{GS} est inférieure ou égale à 0, on accélère le pincement (le condensateur formé par la grille, l'isolant et le canal attire des trous dans le canal initial qui neutralisent les électrons de cette zone N) : on fonctionne en régime d'appauvrissement.

Au contraire, pour V_{GS} supérieure à 0, on retrouve le fonctionnement du MOS à canal induit, et le courant de drain va croître [80].

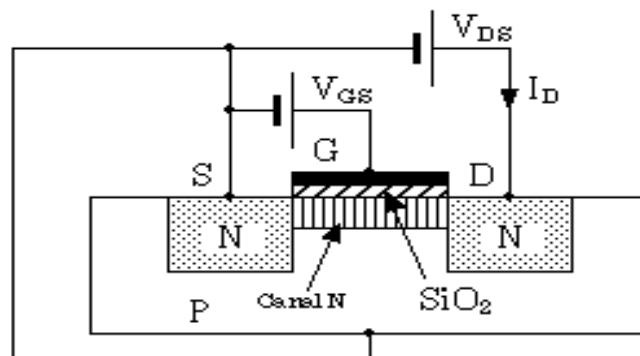


Figure II.12 : MOSFET N à canal initial

II.4.2.4 Caractéristiques

La caractéristique de transfert est la suivante :

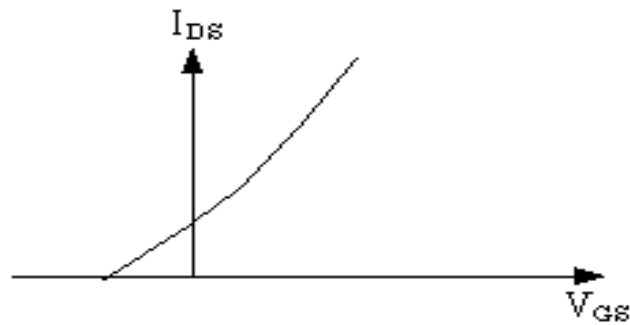


Figure II.13 : Caractéristique de transfert d'un MOS à canal initial

II.11 Le transistor à effet de champ à base à nanotube de carbone

II.5.6 Principe de fonctionnement

L'évolution de la microélectronique vers les technologies nanoélectroniques, bien engagée ces dernières années, devrait conduire à une nouvelle révolution au sein des industries électroniques d'ici 2020. Cette évolution pourrait se faire par des approches aussi diverses que l'utilisation dans les systèmes de calcul de molécules spécifiques, ou de l'ADN, l'implantation de « bits quantiques », etc. Les dispositifs à base de transistors FET construits sur des supports de type nanotubes de carbone ou CNTFET (Carbon NanoTube Field Effect Transistor) sont considérés des candidats très prometteurs, du fait de leur grande densité d'intégration, leur grande ressemblance aux dispositifs à base de MOSFETs en ce qui concerne les caractéristiques I-V, leur niveau important de courant de conduction directe I_{ON} , leur faible courant inverse I_{OFF} (on note au passage un rapport important entre les courants en conduction directe et inverse I_{ON}/I_{OFF}), ainsi que leur faible consommation de puissance [23][43].

Ces nouveaux dispositifs ont des probabilités de défautuosité très élevées lors de la fabrication. De manière globale, ces nouvelles technologies ont une fiabilité beaucoup plus faible par rapport à celle des dispositifs CMOS utilisés aujourd'hui. En plus des défauts de fabrication, ces dispositifs ont également une grande dispersion de caractéristiques, étant très sensibles au bruit (air,....etc.). Pour l'instant l'utilisation de ces dispositifs dans la conception des portes logiques et des systèmes complexes reste discutable [43][85][89].

II.5.7 Constitution d'un CNTFET

Un nanotube, déposé sur un substrat isolant (SiO_2 sur Si), relié à deux contacts, se comporte comme un transistor à effet de champ (FET) dans lequel le courant entre les deux

contacts est modulé par une tension de grille extérieure. Tous les FET ainsi formés sont de type p. La conductivité peut être modulée sur plus de cinq ordres de grandeur [19]. Depuis cette première démonstration des FET à base de nanotubes de carbone, d'immenses progrès ont été réalisés afin d'améliorer leurs caractéristiques électriques. Un des inconvénients de l'expérience de Tans et al [19] était la composition de la grille constituée d'une épaisse couche d'oxyde de silicium. Bachtold et al [84] ont remplacé la couche d'oxyde de silicium par une mince couche d'alumine (Al_2O_3) déposée sur une grille en aluminium, ce qui a permis de minimiser la tension de grille, et d'augmenter la transconductance. Une étape supplémentaire a été franchie par Wind et al [30] en utilisant un dispositif avec une grille en surface (ou top gate) : ils ont fabriqué le premier transistor de type MOSFET à base de nanotube [30]. L'amélioration de la géométrie de la grille a permis d'augmenter le champ électrique du nanotube, et le choix judicieux du matériau de contact de diminuer la résistance de contact.

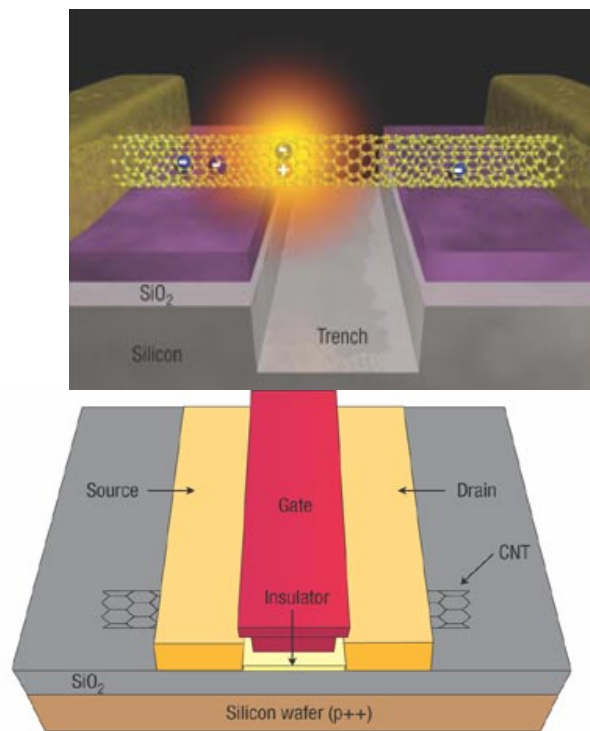


Figure II.14 : Transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone

Un transistor à effet de champ comprend deux électrodes “source” et “drain” connectées par un SWNT (Figure II.14). Le nanotube joue le rôle de canal. Une troisième électrode, la grille, est séparée du canal par un film isolant mince. En fonction de la position de la grille, il y a cinq types de CNTFET : bottom-gated CNTFET, top-gated CNTFET, planar-gated CNTFET, vertical CNTFET et electrolyte-gated CNTFET [15].

II.5.8 Types de CNTFET

II.5.3.6 Bottom-gated CNTFET

Dans cette structure, un seul SWNT est utilisé pour relier deux électrodes (Figure II.15) en étal noble (Au ou Pt) préfabriquées par lithographie.

Le SWNT joue le rôle de canal, tandis que les deux électrodes métalliques fonctionnent comme source et drain. Le substrat hautement dopé en silicium est employé comme grille (bottom-gate) [85][89].

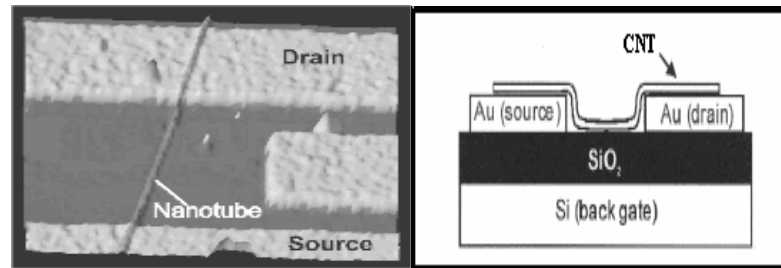


Figure II.15: Bottom gated CNTFET

Cependant, le layout du bottom-gated CNTFET ne permet pas l'intégration de dispositifs multi-connectés parce que la tension de grille est connectée à tous les transistors sur la puce. Le bottom-gated CNTFET a des inconvénients : une résistance de contact élevée et de mauvaises caractéristiques, même si elles peuvent être améliorées de différentes façons.

II.5.3.7 Top-gated CNTFET

Ils ressemblent aux dispositifs CMOS silicium. Shengdong Li et al [15]. de l'université de Californie ont développé et démontré en 2004, un procédé de fabrication de top-gated CNTFET (Figure II.16) en utilisant le nitrure de silicium (Si_3N_4) comme isolant de grille. Les CNT sont obtenus par CVD. Les diamètres des CNT formés par ce procédé vont de 1 à 4nm. Pour réaliser les contacts source-CNT et drain-CNT, une microscopie par balayage électronique (SEM) fut utilisée pour localiser les CNT. Et le motif de catalyse fut utilisé comme un marqueur d'alignement pour aligner les contacts métalliques avec les CNT. Les électrodes source et drain, faites d'un film mince de Ti/Au, furent réalisées par lithographie optique conventionnelle et évaporation du faisceau d'électrons. A ce jour, trois sortes d'isolants de grille ont été développés : SiO_2 , ZrO_2 et Si_3N_4 [15].

Le Top-gated CNTFET est un candidat prometteur pour les circuits logiques d'intégration parce que ce dispositif a une grille locale et des performances supérieures : basse

tension de grille, possibilité de commutation à grande vitesse, intégration à haute densité. La tension de seuil est très basse (-0.5V) [43][85].

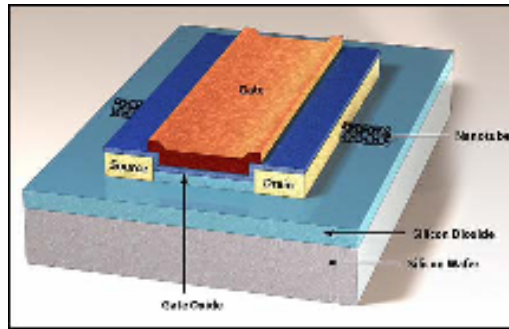


Figure II.16: Top-gated CNTFET

II.5.3.8 Planar-gated CNTFET

Ce planar-gated CNTFET a une grille locale qui est isolée du nanotube par une couche d'oxyde de grille (Al_2O_3) de seulement quelques nanomètres d'épaisseur. Le CNT semiconducteur est électriquement connecté à deux électrodes d'or. Comparé aux bottom-gated transistors, les planar-gated transistors ont des grilles locales (Al) qui permettent l'intégration de multiples CNTFET sur la même puce.

Ce transistor est produit en trois étapes [85]:

Etape 1 : les grilles Al sont réalisées par lithographie sur substrat silicium. La couche isolante est formée par oxydation superficielle de l'aluminium. L'épaisseur précise de la couche est difficile à déterminer, mais est de l'ordre de quelques nanomètres.

Etape 2 : les SWNT produits par ablation laser sont dispersés sur le substrat. Avec un microscope à force atomique (AFM), ces nanotubes sélectionnés ont un diamètre d'environ 1nm et sont situés au sommet des fils de grille Al.

Etape 3 : les électrodes et les fils d'interconnexion sont fabriqués par lithographie.

II.5.3.9 Vertical CNTFET

Le concept de vertical CNTFET est introduit par G.S. Dusberg et al [15]. de l'Infineon. L'idée est née du modèle de transistor vertical, fabriqué par IBM. Le concept de vertical CNTFET rend possible les circuits 3D (Figure II.17). Dans ces réseaux CNT, les interconnexions et les dispositifs (transistors) sont tous basés sur le CNT [46][87].

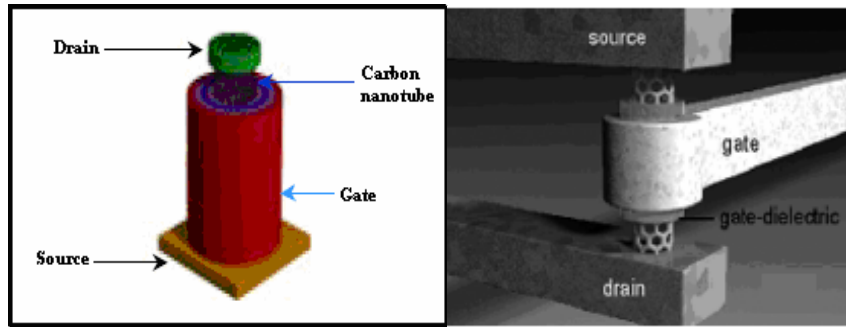


Figure II.17 : Vertical CNTFET

II.5.3.10 Electrolyte-gate CNTFET

S. Rosenblatt et al. de l'université Cornell (USA), ont fabriqué, en 2002, un transistor CNT avec une grille électrolyte (electrolyte-gate). Le nanotube de carbone est produit par CVD et un électrolyte (solution de NaCl) agit comme une grille. Les mesures montrent que l'électrolyte-gated CNTFET a une mobilité élevée, une haute transconductance et une faible résistance de contact [43].

II.5.9 Conductivité et dopage des CNT

Les propriétés électroniques des matériaux peuvent changer de façon très importante en présence d'impuretés. Quand une impureté est ajoutée à un système, une légère modification est observée au niveau des bandes d'énergie. D'un point de vue électronique, deux types d'impuretés peuvent être présentes : donneur ou accepteur. Un dopage par donneurs ou dopage n apporte des électrons supplémentaires qui formeront une bande donneuse de plus haute énergie que les électrons de valence : c'est par exemple le cas d'un dopage à l'azote ou à l'arsenic d'un composé carboné ou du silicium. Lors d'un dopage accepteur ou dopage p, le dopant possède un électron de moins que la matrice [19], et il laisse un état inoccupé dans la bande de valence. Des atomes dopants introduisent des trous qui forment donc une bande acceptrice située au-dessus de la bande pleine : c'est le cas du bore ou du gallium dans une matrice de carbone.

D'un point de vue chimique, l'impureté, l'atome ou l'espèce moléculaire peut être incorporé dans la structure cristalline par [43][87]:

1. Substitution dans le réseau cristallin d'un atome de carbone par un hétéroatome : (Figure II.18.a).

2. Intercalation entre les couches de carbone : les plans du graphite étant distants les uns des autres de $3,35\text{\AA}$, le graphite peut servir de composé d'intercalation pour des espèces donneuses (réductrices : potassium) ou acceptrices (oxydants) (Figure II.18. b).

3. Greffage chimique (ou fonctionnalisation) (Figure II.18.c).

4. Physisorption (adsorption de molécules).

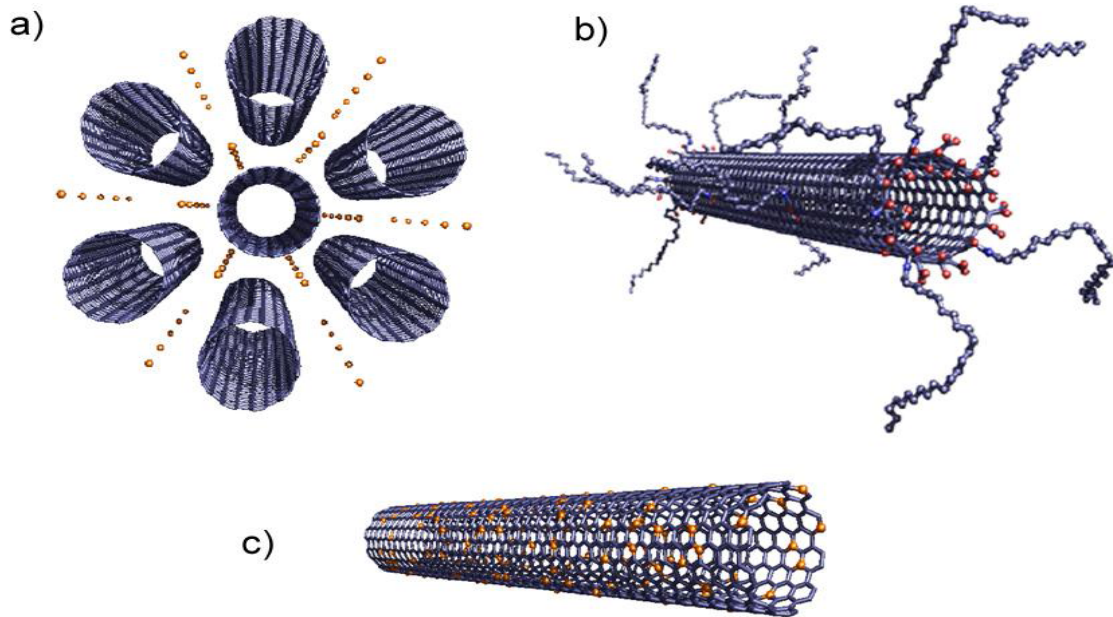


Figure II.18: Schémas des différentes façons d'incorporer une impureté : a) Intercalation, b) Fonctionnalisation, c) Substitution (Images de M. Holzinger) [19].

Le transport des électrons dans les CNTs métalliques est balistique par nature, ce qui signifie que les électrons se déplacent avec une plus grande vitesse que celle attendue dans des conditions d'équilibre thermique. La conductivité des CNT semi-conducteurs est généralement décrite par les lois de la diffusion physique classique. Les premiers CNTFET ont été de type P, les porteurs étant des trous et les composants sont en conduction directe lorsqu'ils sont polarisés avec une tension négative [15][17-19].

Les CNT peuvent être dopés de plusieurs manières avec des porteurs positifs pour devenir des semi-conducteurs de type N. Les nanotubes de type P peuvent être exposés sur un composé qui fournit des électrons, par exemple des métaux alcalins. Le moyen le plus facile de réaliser la transformation est de chauffer le nanotube de type P. La structure d'un CNTFET est montrée en figure (II.19.a). Il nécessite un alignement précis des barrières Schottky (SB) et de l'électrode de porte, qui peut poser un certain problème de fabrication [15].

Dans ce type de CNTFET, la porte va moduler la transmission de tunnel entre la source –métal et le canal du nanotube. Les SB-CNTFETs présentent une caractéristique ambipolaire qui limite l'utilisation de ces transistors dans des implémentations de type CMOS classiques, car les CNTFETs vont convertir leurs fonctionnalités du n-type vers p-type et vice versa en fonction de la polarisation de la porte.

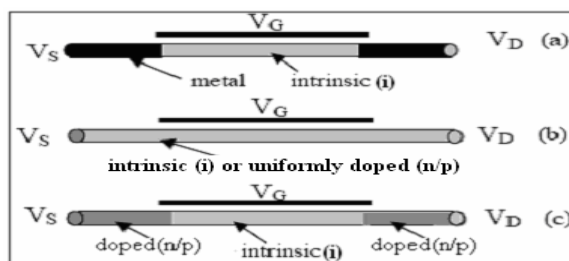


Figure II.19: Types de CNTFETs, a) barrière Schottky, b) partially-gated and, c) S/D dopé.

Les transistors « Partially Gated » (PG-CNTFETs) sont présentés en figure (II.19.b). Ils sont uniformément dopés (soit n soit p) et possèdent des contacts ohmiques. Ils fonctionnent en mode déserté, par une tension appliquée positive, la porte dessert localement les porteurs et arrête la conduction du nanotube. Pour un CNTFET intrinsèque, il fonctionne en mode accumulation et relève un comportement de type unipolaire n ou p [15].

Les CNTFETs dopés S/D présentés dans la figure (II.19.c) sont composés de deux portions légèrement ou fortement dopés n/p. Le courant ON est limité par la quantité de charge qui pourrait être introduite dans le canal par la porte, et non pas par le dopage de la source. Ils opèrent dans un mode purement d'accumulation n ou p, ou dans le mode déserté en se basant sur le principe classique de modulation de la hauteur de la barrière de potentiel par une source de tension appliquée sur la porte. Ces derniers CNTFETs sont les plus prometteurs [15][18]:

Ils n'ont qu'une caractéristique unipolaire. L'absence de la barrière Schottky réduit le courant de fuite; Ils sont plus facilement scalables que les CNTFETs avec barrière Schottky, En conduction directe, la jonction source- canal a un courant direct plus important.

Ils ont toutefois des inconvénients car le dopage contrôlé est difficile à mettre en place pour l'instant, car les ions dopants peuvent détruire le maillage du tube de carbone.

En fonction du profil de dopage du nanotube, il existe deux types de CNTFET. En premier lieu, des CNTFETs avec des dopages p/i/p ou n/i/n qui ressemblent aux CMOS conventionnels, aussi appelés C-CNTFETs. Le problème de ces transistors est le phénomène de pile dans le canal, lorsque le nanotube est réduit, qui peut réduire à son tour le rapport I_{ON}/I_{OFF} .

Un deuxième CNTFET avec un dopage n/i/p, appelé aussi tunneling (T) CNTFETs, fonctionne par le mécanisme de tunnelling band-to-band. Ce dispositif élimine le phénomène de pile ayant comme avantage une meilleure vitesse de commutation et une puissance consommée acceptable [15][18]. Le tableau (II.1) montre une brève comparaison de ces types

de transistors CNTFET, où toutes les données ont été mesurées sur un seul transistor CNTFET et normalisées à une largeur de transistor de (2d).

Propriétés	SB-CNTFET	PG -CNTFET	C- CNTFET
Diamètre	~1.4nm	~1.4nm	~1.6nm
Position de la grille	Top	local	Top
Tox (nm)	15	4	8
p-type:3125	Vth(V) n-type:0.3	p-type:-0.5	p-type:-0.5 n-type:~-0.6
Diélectrique	ZnO ₂	Al ₂ O ₃	HfO ₂
S/D métal	Ti	Ti	Pd
CNT longueur	260nm	600nm	80nm
Vds (V)	0.5	0.5	0.5
ION (Ma/μm)	535	71	2500
Ion/Ioff	104	104	106
S (mV/dec)	n-type:312 p-type:130	p-type:63	n-type:80 p-type:70
gm(S/μm) p	type:1160	–	n-type:6250 p-type:3125
Vth(V)	n-type:0.3 p-type:-0.5	p-type:-0.5	n-type:~-0.6 p-type:~-0.5

TABLEAU (II.1) : Comparaison des trois types de CNTFET [78]

A part les structures planaires présentées précédemment, quelques auteurs proposent un concept de transistor vertical, ou V-CNTFET réalisé sur une porte coaxiale.

Ce transistor est très prometteur, il permet la réalisation des circuits 3D. La comparaison entre un V-CNTFET et un transistor MOS est donnée dans le tableau (II.2). Toutes les données du CNTFETs dépassent celles du transistor Si MOSFET. Un V-CNTFET fournit deux fois plus de courant direct par rapport au Si-CMOS à 0.4V et une transconductance 15 fois plus importante.

Caractéristique	V-CNTFET	MOSFET
V _{dd} (V)	0.4	0.4
Drive curent (μA/μm)	2500	1500
gm (μS/μm)	15000	1000
t (C _{gate} *V _{dd} /I _{dd}) (ps)	0.08	0.15
S (mV/dec)	65	70
Leakage (μA/μ m)	2.5	10

Effective t_{ox} (nm)	1	0.4–0.5
-------------------------	---	---------

TABLEAU (II.2). Comparaison de V-CNTFET et MOSFET [78]

Les transistors basés sur le C-CNT ont d'excellentes propriétés par rapport à celles des MOSFET. La stabilité et la conductivité élevées des SWNT produisent un excellent comportement des CNTFET. Les densités élevées de courant direct sont de 2100mA/mm, par rapport aux 650 mA/mm des MOSFET dans les mêmes conditions.

La longueur de canal d'un CNTFET peut être réduite jusqu'à 5 nm. Au delà, à température ambiante, le courant de fuite est trop grand, à cause de l'effet tunnel. La tension de seuil d'un CNTFET est beaucoup plus basse que celle d'un MOSFET. Un autre avantage du CNTFET est que le rapport I_{ON}/I_{OFF} atteint 10^6 [43][85].

II.5.10 Fabrication d'un CNTFET

Généralement plus performant, les transistors à base d'un nanotube monoparoi constituant le canal sont aussi plus difficiles à réaliser. La fabrication d'un tel transistor peut s'effectuer de la manière suivante. Les électrodes sont d'abord gravées sur le substrat, avant que des nanotubes en solutions ne soient dispersés sur la surface. Ensuite, généralement à l'aide d'une pointe AFM, ils sont choisis et correctement positionnés [90]. Le nanotube utilisé comme canal conducteur, c'est le substrat en face arrière qui assure le potentiel électrique de grille.

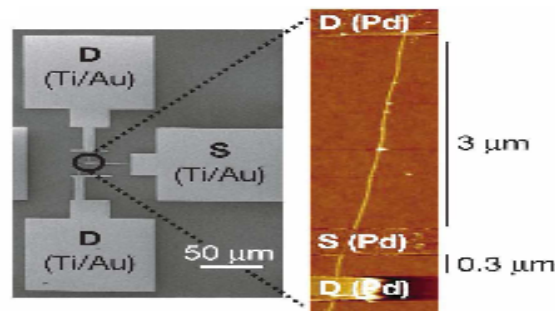


Figure II.20 : Transistor CNT, image au MEB (droite), à l'AFM (gauche)

Les transistors utilisant un nanotube semi-conducteur comme canal sont toujours de type p par défaut. On suppose que ceci est dû à une réaction de l'oxygène de l'air avec les contacts métal-nanotube, contrôlant ainsi l'injection des porteurs de charge dans le dispositif [30].

Une technique pour obtenir des transistors de type n consiste à doper chimiquement le nanotube. Un autre procédé consistant en un recuit du transistor dans un environnement vidé d'air [85].

Cependant, quelle que soit la méthode, cette transformation n'est pas définitive, une fois exposé à l'air, le transistor redevient de type p. Une solution consiste alors à encapsuler le transistor sous un film isolant. Afin d'améliorer les caractéristiques électriques des transistors, les contacts électrodes-nanotubes doivent être améliorés [23][86].

II.12 Conclusion:

Parmi les dispositifs étudiés dans le cadre des évolutions vers la nanoélectronique, les nanotubes de carbone et les CNTFETs font partie des prétendants les plus prometteurs.

Un nanotube de carbone mono-paroi semi-conducteur individuel peut être utilisé comme canal d'un transistor à effet de champ (CNTFET). Depuis les premières démonstrations expérimentales en 1998 [13], les performances de ces composants n'ont cessé de s'améliorer aujourd'hui [13]. De plus, la synthèse des nanotubes a montré que les transistors à base de ces derniers peuvent être fabriqués avec des technologies compatibles avec celles de la microélectronique actuelle [13]. Ainsi, les transistors à nanotubes semblent être parmi les nano-dispositifs les mieux positionnés pour succéder au transistor MOSFET dans les applications nano-électroniques du futur.

Dans ce chapitre, nous avons présenté les fondements de la nanoélectronique basée sur le nanotube de carbone. Nous avons passé en revue la bibliographie sur les différentes structures des transistors à nanotube. Dans le chapitre suivant, nous nous intéresserons aux différents régimes de transport dans ces systèmes mésoscopiques.

CHAPITRE III :
Le transport électronique
dans les systèmes mésoscopiques

IV.7 Introduction

L'aspect non linéaire des équations de transport et de Poisson rend impossible la résolution analytique du système d'équations régissant le comportement des dispositifs à nanotubes de carbone. Les difficultés s'accroissent lorsque l'on considère des modèles physiques très précis et des structures géométriques pour lesquelles l'étude devrait être en toute rigueur bidimensionnelle ou encore tridimensionnelle. Des moyens importants de calculs informatiques s'imposent dans ces conditions. La tâche principale d'une simulation du fonctionnement d'un dispositif est de résoudre les équations précédentes par les méthodes d'analyses numériques en utilisant un ensemble d'approximations qui sont justifiées par les hypothèses tirées des considérations physiques et des conditions de fonctionnement du dispositif.

En général, l'étude bidimensionnelle conduit à un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires de type elliptique. L'existence et l'unicité de la solution ont été étudiées par plusieurs auteurs [91].

Dans les CNTs, le transport balistique a été expérimentalement démontré pour des conditions de basse polarisation aux basses températures. Expérimentalement, des rendements élevés de transistors à CNT fonctionnant près de la limite balistique à la température ambiante ont été également rapportés et des mobilités des porteurs ont été obtenues de l'ordre de $10^4 \sim 10^5$ cm²/Vs [91]. Le transport du courant dans les CNTs métalliques longs arrive à saturation environ 25μA aux polarisations élevées, et le mécanisme de saturation est attribué à la diffusion des phonons. Par ailleurs, pour les nanotubes métalliques courts, le courant au lieu de se saturer augmente bien au-delà de la limite ci-dessus. Néanmoins, le transport de porteurs dans ces courts nanotubes est encore influencé par la diffusion des phonons. Ce chapitre décrit la procédure de la simulation pour les modes de transport balistique et dissipatif dans les CNTFETs.

IV.8 Physique du transistor à base de nanotubes

Le fonctionnement du CNTFET est basé sur le transport balistique. Le schéma physique (présence d'un drain, d'une grille et d'une source) et la création d'une charge sous la grille

(par augmentation de la tension V_{GS}) sont les seuls points communs avec le MOSFET Si. Lorsque l'on dépose les électrodes de source et drain sur le nanotube intrinsèque (figure IV.1.a), on obtient un transistor avec deux barrières Schottky : un côté source et un côté drain (figure IV.1.b). Pour obtenir un CNTFET fonctionnant comme un MOSFET (MOS-CNTFET), c'est-à-dire à modulation de hauteur de barrière (figure IV.1.d), un dopage n^+ ou p^+ du nanotube, de part et d'autre du « corps » du nanotube et « avant » les électrodes de source et de drain (soit la partie non recouverte par les électrodes), est nécessaire (figure IV.1.c). Les parties de nanotubes ainsi dopées sont similaires aux zones dopées n^+ ou p^+ sous les électrodes de source et de drain d'un MOSFET silicium [63].

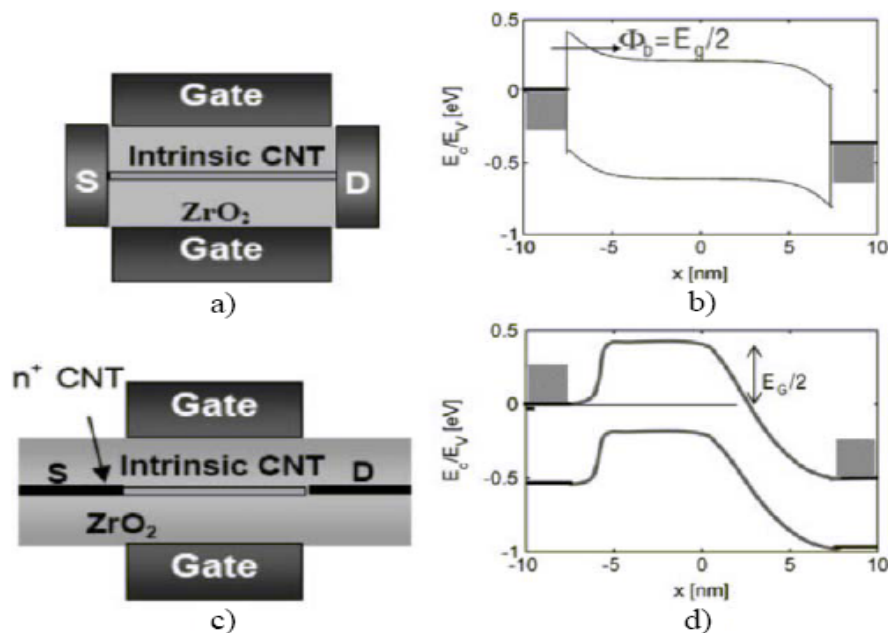


Figure IV.1 : Types de CNTFETs: a) Schéma physique d'un CNTFET à barrière Schottky, b) Schéma de bandes d'énergie associé. c) Schéma physique d'un CNTFET à modulation de hauteur de barrière, d) Schéma de bandes d'énergie associé [64].

Les CNTFETs à modulation de hauteur de barrière ont pour avantage par rapport aux CNTFETs à barrière Schottky d'avoir des caractéristiques unipolaires, un plus faible courant de fuite, un courant à l'état passant plus important et une pente sous le seuil inverse plus faible. Les transistors à nanotube avec modulation de hauteur de barrière sont donc plus prometteurs par rapport aux CNTFETs à barrière Schottky. Pour cette raison, nous allons modéliser le nanotube utilisé dans une configuration de transistor à effet de champ à modulation de hauteur de barrière [63][64][65].

Pour s'assurer que le MOS-CNTFET fonctionne en régime balistique, il faut satisfaire les trois hypothèses suivantes:

- Les dispersions des porteurs sont supprimées dans le nanotube intrinsèque jouant le rôle du canal du transistor. Les porteurs qui traversent le canal du drain à la source ne reviennent donc pas en arrière vers la source (cela signifie que la réflexion des porteurs au drain est négligée).

- Le courant du drain devant rester constant le long du canal, il est calculé au début du canal avec le potentiel V_{CNT} . Au début du canal, les électrons venant de la source remplissent des états « +k » et les électrons venant du drain remplissent des états « -k » (figure IV.2).

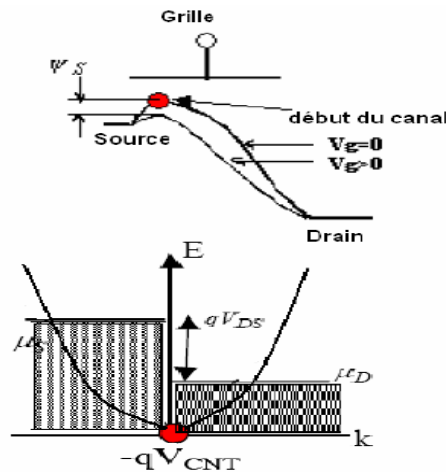


Figure IV.2 : Relation de dispersion d'un nanotube : μ_S et μ_D sont les niveaux de Fermi de la source et du drain

Le courant est limité par la somme des charges introduites dans le canal par la grille. De plus, le courant du drain est exprimé par les paramètres physiques du CNTFET (par exemple, la longueur et le diamètre du nanotube, correspondant à la longueur et à la largeur du canal du transistor traditionnel). Le courant du drain n'est pas dépendant de la mobilité des porteurs.

- Le potentiel V_{CNT} est défini par quatre capacités C_D , C_S , C_Q (capacité quantique –qui n'est pas montrée dans la figure IV.3) et en particulier C_G . Car la capacité totale de la grille du CNTFET (C_T) se compose de deux C_Q et C_G intrinsèques en série, C_T est donc calculée: $1/C_T = 1/C_G + 1/C_Q$. En effet, C_G étant beaucoup plus grande que les trois autres capacités, la capacité totale C_T du CNTFET est inférieure à (ou limitée supérieurement à) la capacité quantique C_Q , particulièrement en cas d'utilisation d'un matériau diélectrique de grille « high- κ ».

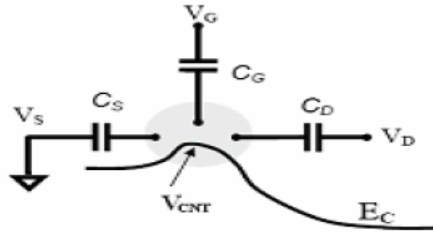


Figure IV.3: Capacités contribuent à définir le potentiel V_{CNT} : E_C est le niveau de Fermi de la bande de conduction, V_S et V_D sont la tension à la source et au drain.

Paramètres physiques du CNTFET

Pour un transistor MOSFET traditionnel, les paramètres physiques principaux sont les dimensions du canal de silicium (longueur, largeur) et la capacité de la grille qui est déterminée aussi par l'épaisseur d'oxyde [14]. Pour un transistor CNTFET, nous avons :

- Les dimensions du canal du transistor CNTFET: en fait, ce sont les dimensions du nanotube (diamètre, longueur).
- La capacité de la grille (C_G): cette capacité MIC (Métal-Isolateur-CNT) dépend de deux géométries différentes - planaire ou coaxiale, comme illustré en figure (IV.4).

Le CNTFET avec la grille planaire constitue la majorité des transistors à base de nanotube fabriqués jusqu'à aujourd'hui, en raison de leur simplicité et de leur compatibilité avec les technologies existantes. Dans le cas de la capacité MIC planaire (figure IV.4.a), le C_G

est calculé ainsi :
$$C_G = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}{\cosh^{-1}(t_{ins}/r)}$$

où r est le rayon du nanotube, t_{ins} est l'épaisseur d'oxyde, ϵ_r est la constante diélectrique.

Le CNTFET avec la grille coaxiale est une forme idéale ; il est spécialement intéressant parce que sa géométrie permet une électrostatique meilleure que son homologue planaire. Dans le cas de la capacité MIC coaxiale (figure IV.4.b), le C_G est calculé comme suit :

$$C_G = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_r L_G}{\ln[2(t_{ins} + r)/r]} \quad , \quad \text{où } L_G \text{ est la longueur de la grille.}$$

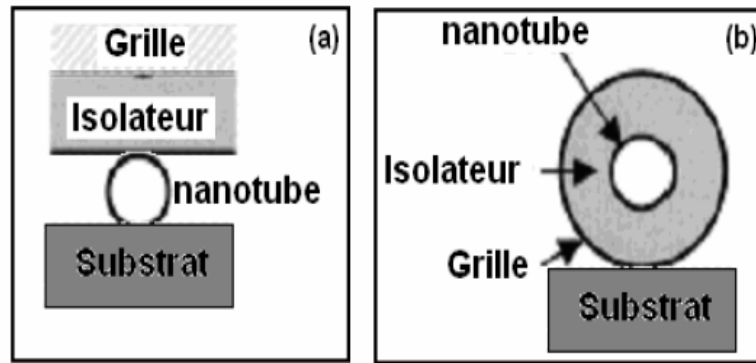


Figure IV.4 : Deux géométries définissant la capacité de grille MIC (Métal-Isolateur-CNT) : a) Capacité MIC planaire ; b) Capacité MIC coaxiale

A ce niveau de miniaturisation, les effets quantiques ne sont plus négligeables et modifient ostensiblement les propriétés de transport des matériaux. Dans ce contexte, le formalisme des fonctions de Green hors équilibre constitue une méthode pertinente pour décrire le comportement quantique des transistors à effet de champ à base de nanotube de carbone. Cette approche permet en effet de modéliser les systèmes ouverts.

IV.9 Formalisme de fonctions de Green hors équilibre NEGF

Le problème à N-corps tient compte des effets dynamiques des interactions. Les fonctions de Green sont la base du langage et des concepts nécessaires à analyser les problèmes où les interactions entre particules ne peuvent être négligées. Dans cette partie, nous donnons un bref aperçu de la procédure de simulation par NEGF [95][118][125][140].

Le schéma (IV.5) montre un transistor générique et définit quelques termes pour la simulation par NEGF. La méthode de simulation par NEGF s'effectue selon les étapes suivantes:

1) Choix d'une base appropriée dans laquelle tous les opérateurs sont discrétisés, et d'une matrice hamiltonienne pour un canal isolé. Le potentiel électrostatique, qui est une partie de la matrice hamiltonienne, est inclus dans cette étape.

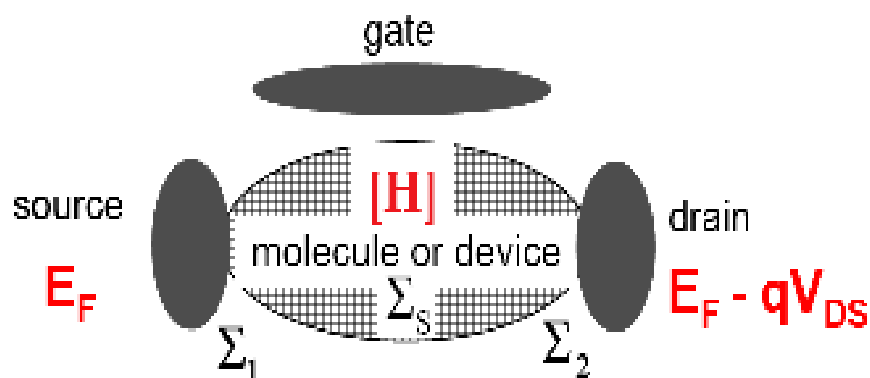


Figure IV.5 : Transistor générique avec un canal nanométrique molécule ou dispositif relié à la source et au drain. Le courant source-drain est modulé par une troisième électrode, la grille (gate).

2) Calcul des matrices de self-énergie Σ_1 , Σ_2 et Σ_S qui décrit l'effet du couplage du canal balistique avec les contacts de drain et de source et les processus de diffusion dans le canal.

3) Après identification de la matrice hamiltonienne et des self-énergies, calcul de la fonction de Green retardée :

$$G(E) = \left[(E + i0^+)I - H - \Sigma_1 - \Sigma_2 \right]^{-1} \quad (4.1)$$

4) Détermination des grandeurs physiques qui nous intéressent à partir de la fonction de Green.

Dans la limite balistique, les états dans le dispositif peuvent être divisés en deux types:

1)- les états qui sont occupés par des porteurs provenant de la source en conformité avec le niveau de Fermi de la source,

2)- les états qui sont occupés du drain en conformité avec le niveau de Fermi de drain.

Une fois la fonction de Green retardée calculée, nous déterminerons alors la densité d'électrons et le courant de drain.

Pour ce faire, définissons deux nouvelles quantités, fonctions des self-énergies:

$$\Gamma_S = i(\Sigma_1 - \Sigma_1^+) \quad \text{et} \quad \Gamma_D = i(\Sigma_2 - \Sigma_2^+)$$

où $i^2 = -1$, et Σ_1^+ (resp Σ_2^+) est la matrice transposée de Σ_1 (resp Σ_2)

Physiquement, les fonctions Γ fixent la vitesse à laquelle un électron initialement dans un état particulier du canal se propage vers la source ou le drain. Les densités d'états locaux (LDOS) associées à la source et au drain sont alors exprimées par [125][122]:

$$D_S = G\Gamma_S G^+ \quad \text{et} \quad D_D = G\Gamma_D G^+$$

La densité de charge dans le dispositif est calculée en intégrant l'expression LDOS. La source contribue à la charge du canal à travers le contact par la quantité $Q_S(z)$ donnée par:

$$Q_S(z) = (-e) \int_{E_N}^{+\infty} D_S(E, z) f(E - E_{FS}) dE + e \int_{-\infty_N}^{E_N} D_S(E, z) \{1 - f(E - E_{FS})\} dE \quad (4.2)$$

où e est la charge électronique, et E_N le niveau de neutralité de charge. La charge totale est donnée par :

$$Q(z) = Q_S(z) + Q_D(z) = (-e) \int_{-\infty_N}^{+\infty} dE \cdot \text{sgn}[E - E_N(z)] \{ D_S(E, z) f(\text{sgn}[E - E_N(z)](E - E_{FS})) + D_D(E, z) f(\text{sgn}[E - E_N(z)](E - E_{FD})) \} \quad (4.3)$$

où $\text{sgn}(E)$ est la fonction signe, E_{FS} et E_{FD} sont respectivement les niveaux de Fermi de la source et du drain. Pour une solution auto-cohérente, l'équation de transport NEGF est résolue itérativement avec l'équation de Poisson jusqu'à ce que l'auto-cohérence soit atteinte, après quoi le courant source-drain est calculé à partir de la formule suivante:

$$I = \frac{4e}{h} \int T(E) [f_S(E) - f_D(E)] dE \quad (4.4)$$

où $T(E) = \text{trace} (G_1 G_2 G^+)$ est la transmission source/drain et le facteur supplémentaire 2 vient de la dégénérescence de vallée dans la structure de bandes d'énergie des nanotubes de carbone [118][122][140].

La partie coûteuse du calcul de la simulation NEGF est de trouver la fonction de Green retardée, selon l'équation (4.1), qui exige l'inversion d'une matrice pour chaque point du réseau d'énergie. La manière directe est d'inverser explicitement la matrice, dont la taille est la taille de l'ensemble de base. Cependant, ceci est irréalisable pour une simulation atomique d'un transistor à nanotube de carbone. Dans la limite balistique, le problème est simplifié parce que seulement quelques colonnes de la fonction de Green sont nécessaires. Aussi, la réduction de la taille de la matrice hamiltonienne et le développement d'approches de calculs efficaces sont d'une grande importance pour une simulation atomique.

IV.3.2 Traitement atomique NEGF du transport dans le CNTFET

IV.3.1.5 Approche de l'espace réel

Dans cette partie, nous décrivons une simulation NEGF de CNTFETs balistiques en utilisant une base d'espace réel. La première étape est d'identifier un ensemble d'orbitales atomiques adéquates pour décrire la physique essentielle du transport de porteurs et pour, ensuite, écrire la matrice hamiltonienne du canal isolé. Cette méthode peut s'étendre facilement à tout type de CNT.

Soit un nanotube zigzag $(n,0)$ (figure (IV.6)). Il y a quatre orbitales dans la couche externe d'un atome de carbone (s , p_x , p_y , et p_z). Une orbitale p_z est souvent suffisante parce

que les bandes impliquant les orbitales p_z sont en grande partie découplées des bandes impliquant les autres orbitales, et les bandes dues aux orbitales s , p_x et p_y sont bien au-dessous ou bien au-dessus du niveau de Fermi, en conséquence, sans importance pour le transport de porteurs. Avec une orbitale p_z par atome de carbone comme ensemble de base [91], la taille de la matrice hamiltonienne est le nombre d'atomes de carbone dans le canal du transistor. Un transistor à nanotube de carbone est composé de plusieurs milliers d'atomes de carbone. Nous utilisons l'approximation de liaisons fortes pour décrire l'interaction entre les atomes de carbone, et nous ne considérons que le couplage entre les plus proches voisins [109].

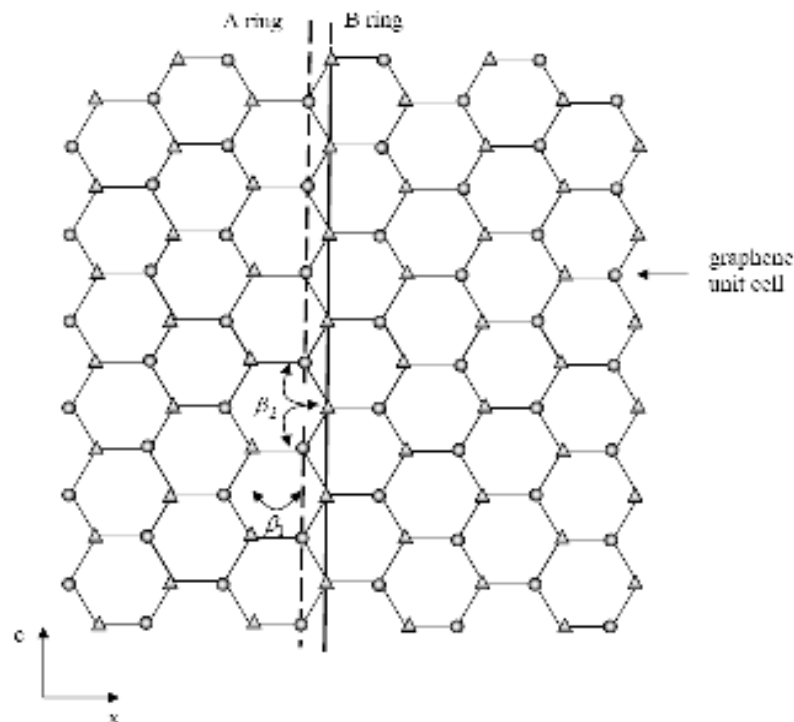


Figure IV.6 : Diagramme schématisé du nanotube zigzag (6,0). Les cercles constituent le sous-réseau de l'atome de carbone de type A, et les triangles constituent le sous-réseau de l'atome de carbone de type B. C est la direction circulaire, et x est la direction de transport de porteurs.

La figure (IV.6) montre qu'un nanotube zigzag se compose d'anneaux d'atomes de carbone dans les sous-réseaux d'atomes A et B. Chaque anneau dans le sous-réseau d'atomes A est adjacent dans la direction x à un anneau dans le sous-réseau d'atomes B. Il y a n atomes de carbone dans chaque anneau et le nombre total d'atomes dans le canal est N. Alors, la matrice hamiltonienne $N \times N$ pour le canal entier est tridiagonale par bloc [25][109][110][125],

$$H = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2^+ & & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_1 & & & & \\ & \beta_1 & \alpha_3 & \beta_2 & & & \\ & & \beta_2^+ & \alpha_4 & \beta_1 & & \\ & & & \beta_1 & \alpha_5 & \cdots & \\ & & & & & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

(4.5)

Où la sous-matrice $[\alpha_i]_{n \times n}$ décrit le couplage dans un anneau de carbone de type A ou de type B, et les matrices $[\beta]_{n \times n}$ décrivent le couplage entre les anneaux adjacents [125][95].

Dans l'approximation des liaisons fortes entre les plus proches voisins, les atomes de carbone dans un anneau sont découplés entre eux de sorte que $[\alpha_i]$ est une matrice diagonale. La valeur d'une entrée diagonale est le potentiel en ce site d'atome de carbone. Si le nanotube et coaxialement porté le potentiel est invariable autour du nanotube. La matrice $[\alpha_i]$ est, donc, le produit du potentiel du $i^{\text{ème}}$ anneau de carbone par la matrice identité: $[\alpha_i] = U_i [I]$.

Il y a deux types de matrices de couplage entre les anneaux de carbone les plus proches $[\beta_1]$ et $[\beta_2]$. Comme montré dans la figure (IV.6), le premier type $[\beta_1]$, couple seulement un atome de carbone A (resp B) à ses contre parties de B (resp A) dans l'anneau voisin. La matrice de couplage est le produit du paramètre de couplage de l'orbitale p_z t par la matrice identité:

$$[\beta_1] = t [I]$$

(4.6)

Le deuxième type de matrice de couplage $[\beta_2]$ couple un atome A (resp B) à deux voisins de B (resp A) dans l'anneau adjacent. La matrice de couplage s'écrit:

$$[\beta_2] = t \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \\ & 1 & 1 \\ & & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

(4.7)

Pour comprendre l'équation (4.5), il faut signaler que le numéro impair de $[\alpha]$ se rapporte aux anneaux de type A et le même numéro pour les anneaux de type B. Chaque anneau de type A se couple à l'anneau suivant de type B par $[\beta_2]$ et à l'anneau précédent de type B par $[\beta_1]$. Chaque anneau de type B se couple à l'anneau suivant de type A par $[\beta_1]$ et à l'anneau précédent de type A par $[\beta_2]$.

IV.3.1.6 Self-énergies de la source et du drain dans l'espace réel

Après la détermination de la matrice hamiltonienne pour le canal, l'étape suivante est de calculer les matrices de self-énergie $N \times N$ pour les électrodes de contact la source et le drain $[\Sigma_S]$ et $[\Sigma_D]$. Les self-énergies décrivent les conditions aux limites ouvertes pour l'équation de Schrödinger. Donc, seuls les atomes de carbone sur le premier et le dernier couples d'anneaux aux contacts sont pris en compte, alors $[\Sigma_S]$ et $[\Sigma_D]$ sont clairsemées, et s'écrivent :

$$(4.8) \quad [\Sigma_S] = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad [\Sigma_D] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Sigma_{nn} \end{bmatrix}$$

Où Σ_{11} et Σ_{nn} sont des sous-matrices $n \times n$.

Les matrices self-énergies pour les contacts de la source et du drain ont la même taille que la matrice hamiltonienne du canal, mais les matrices self-énergies sont fortement clairsemées. Par exemple, seul un anneau de carbone intervient à la limite du couple entre le canal et la source, ainsi seulement une sous-matrice (1.1) est différente de zéro pour la self-énergie de source Σ_S .

De même, seulement une sous-matrice est différente de zéro pour la self-énergie de drain Σ_D , l'élément non nul de self-énergie peut être calculé par la relation récursive pour la fonction de Green de la surface. Ici, nous calculons la self-énergie pour une source semi-infinie de nanotube. L'approche de self-énergie peut s'étendre facilement pour traiter n'importe quel type de contact, par exemple, le contact métal/nanotube [109].

La figure (IV.7) montre comment les anneaux de carbone sont couplés pour une source semi-infinie de nanotube. Chaque cercle (triangle) représente un anneau de carbone de type A, et chaque triangle représente un anneau de carbone de type B. Les anneaux de carbone et leurs plus proches voisins sont couplés par la matrice de couplage β_1 ou β_2 , et g_m est la fonction de Green de la surface pour le $m^{\text{ième}}$ anneau sur l'extension de la source, commandée par l'interface source/canal. La relation récursive rapporte les fonctions de Green de la surface,

$$g_m = \left[(E + i0^+)I - \alpha_m - \tau g_{m+1} \tau^+ \right]^{-1}$$

(4.9)

où τ est la matrice de couplage entre le $m^{\text{ième}}$ et $(m+1)^{\text{ième}}$ anneaux de carbone, et α_m est la

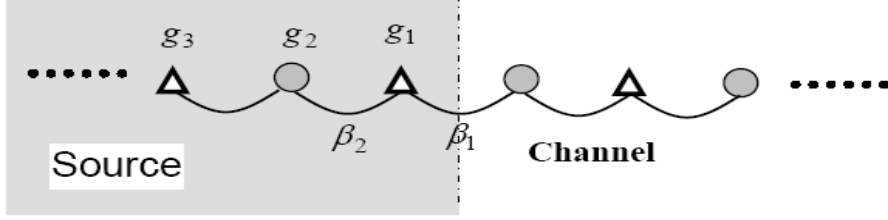


Figure IV.7 : Calcul de la self-énergie de source pour un nanotube zigzag. Les cercles représentent les anneaux de carbone de type A et les triangles représentent les anneaux de carbone de type B. g_i est la fonction de Green de la surface pour le $i^{\text{ème}}$ anneau de carbone à l'intérieur de la source. β_1 et β_2 sont la première et la deuxième matrices de couplage entre les anneaux voisins.

matrice hamiltonienne du $m^{\text{ième}}$ anneau. Si nous appliquons cette relation récursive dans le nanotube (figure (V.3)), nous obtenons :

$$g_1 = \left[(E + i0^+)I - \alpha_1 - \beta_2^+ g_2 \beta_2 \right]^{-1}$$

(4.10)

$$g_2 = \left[(E + i0^+)I - \alpha_2 - \beta_1^+ g_3 \beta_1 \right]^{-1}$$

Notons que le potentiel est invariable à l'intérieur de la source, ainsi $\alpha_1 = \alpha_2$. De plus, $g_1 = g_3$ dû à la périodicité du réseau de nanotube. En utilisant ces relations, le couple d'équations. (4.10) devient deux équations couplées de matrices avec deux inconnues, g_1 et g_2 . La fonction de Green de la surface peut être numériquement résolue par l'équation (4.10). La sous-matrice différente de zéro de la matrice self-énergie de la source est $\Sigma_S^{1,1} = \beta_1 g_1 \beta_1^+$ où l'indice supérieur est relatif à la sous-matrice (1.1) de la matrice globale self-énergie de source. La self-énergie pour le contact de drain peut être calculée d'une manière similaire.

Revenons, maintenant au calcul de la fonction de Green retardée, elle s'exprime par:

$$G^r = \left[(E + i0^+)I - H - \Sigma_S - \Sigma_D \right]^{-1}$$

(4.11)

Elle représente le corps du nanotube de carbone par H et les deux contacts par les matrices self-énergies Σ_S et Σ_D . Toutes les matrices sont de taille $N \times N$ où N est le nombre total d'atomes de carbone dans le dispositif.

La solution de l'équation (4.11) est équivalente à la solution de l'équation $AG^r = I$ où $A = [(E + i0^+)I - H - \Sigma_S - \Sigma_D]$

Après le calcul de la fonction de Green, la densité locale des états peut être obtenue, et les états peuvent être remplis selon les niveaux de Fermi des deux contacts de sorte que la densité de charge dans le dispositif peut être trouvée par l'équation. (4.3).

Par l'itération entre les équations NEGF pour trouver la densité de charge et l'équation de Poisson pour trouver le potentiel d'auto-cohérence, une solution auto-cohérente est obtenue. Le courant est alors évalué à partir de l'équation (4.4), où la probabilité de transmission du courant, est obtenue à partir du premier bloc diagonal de la fonction de Green retardée,

$$T(E) = \text{trace}_S \left(G^r_D G^{r+} \right) \\ = \text{trace} \left(\Gamma_{S(1,1)} \left\{ i \left[G^r_{(1,1)} - G^{r+}_{(1,1)} \right] - G^r_{(1,1)} \Gamma_{S(1,1)} G^{r+}_{(1,1)} \right\} \right) \quad (4.12)$$

Tel que $\Gamma_S = i(\Sigma_S - \Sigma_S^+)/2$ et $\Gamma_D = i(\Sigma_D - \Sigma_D^+)/2$ sont les extensions de la source et du drain et (1,1) indique le premier bloc diagonal de la matrice.

IV.3.1.7 Approche atomique de l'espace des modes

L'approche d'espace réel atomique produit une matrice dont la taille est le nombre total d'atomes de carbone dans le nanotube, ce qui signifie que les calculs sont très importants. Une approche des l'espace des modes réduit de manière significative la taille de la matrice hamiltonienne. L'idée est d'exploiter le fait que dans un nanotube de carbone, les conditions aux limites périodiques doivent être appliquées autour de la circonférence du nanotube, ainsi $k_C C = 2\pi q$, où C est la circonférence du nanotube et q un nombre entier.

Le transport peut être décrit en termes de ces modes circulaires. Si les M modes contribuent au transport, et si $M < n$, alors la taille du problème est réduite de $(n \times N_C)$ inconnues à $(M \times N_C)$ inconnues. Si, de plus, la forme des modes ne change pas le long du nanotube, alors les M modes circulaires sont découplés, et nous pouvons résoudre les M problèmes unidimensionnels de taille N_C qui est le nombre d'anneaux de carbone le long du

nanotube. Mathématiquement, on fait un changement de base sur le nanotube zigzag (n,0) pour découpler le problème en n réseaux unidimensionnels dans l'espace des modes.

Quand un nanotube zigzag est porté coaxialement, les modes autour du tube sont de simples ondes planes avec des vecteurs d'onde satisfaisant la condition aux limites périodique, et l'approche dans l'espace des modes reproduit exactement les résultats de l'approche dans l'espace réel.

IV.3.1.8 Hamiltonien du CNTFET dans l'espace des modes

Le changement de base de l'espace réel autour du nanotube en une base de l'espace des modes effectué sur la matrice hamiltonienne exprimée dans l'espace réel donne:

$$H' = \begin{bmatrix} V & & & & & & \\ & V & & & & & \\ & & V & & & & \\ & & & V & & & \\ & & & & V & & \\ & & & & & \dots & \\ \dots & & & & & & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2^+ & & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_1 & & & & \\ & \beta_1 & \alpha_3 & \beta_2 & & & \\ & & \beta_2^+ & \alpha_4 & \beta_1 & & \\ & & & \beta_1 & \alpha_5 & \dots & \\ & & & & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & & & & & & \\ & V & & & & & \\ & & V & & & & \\ & & & V & & & \\ & & & & V & & \\ & & & & & \dots & \\ \dots & & & & & & \dots \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \alpha_1' & \beta_2^{'+} & & & & & \\ \beta_2' & \alpha_2' & \beta_1' & & & & \\ & \beta_1' & \alpha_3' & \beta_2' & & & \\ & & \beta_2^{'+} & \alpha_4' & \beta_1' & & \\ & & & \beta_1' & \alpha_5' & \dots & \\ & & & & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

(4.13) Tel que

$$\begin{aligned} \alpha_i' &= V^+ \alpha_i V \\ \beta_1' &= V^+ \beta_1 V \\ \beta_2' &= V^+ \beta_2 V \end{aligned}$$

(4.14)

Où V est la matrice transformée de la base de l'espace réel d'un anneau d'atome de carbone dans la base de l'espace des modes. Notre but est de découpler les modes après le changement de base, c'est-à-dire, rendre nuls les éléments de la matrice hamiltonienne entre différents modes. Ceci exige que α_i' , β_1' et β_2' deviennent des matrices diagonales après le changement de base.

Notons que α_i ou β_1 est la constante de temps de la matrice identité. Ces matrices restent inchangées et diagonales après n'importe quel changement de base

$$\alpha_i' = \alpha_i = U_i I$$

$$\beta_1' = \beta_1 = tI$$

(4.15)

Maintenant, le problème est de trouver les vecteurs propres et les valeurs propres correspondantes pour :

$$\beta_2 = t \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \\ & 1 & 1 \\ & & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

(4.16)

Les $q^{\text{ième}}$ vecteurs propres de β_2 est l'onde plane autour du nanotube.

$$\psi_q(n_y) = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{ik_q n_y}$$

(4.17)

Où le $q^{\text{ième}}$ vecteur d'onde k_q satisfait la condition aux limites périodique $k_q = 2\pi q / n [0 \leq q \leq (n-1)]$, et la $q^{\text{ième}}$ valeur propre est $b_{2q} = 2te^{-\pi q i / n} \cos(\pi q / n)$. Après le changement de base, β_2 devient :

$$\beta_2' = V^+ \beta_2 V = \begin{bmatrix} b_{21} & & & \\ & \dots & & \\ & & b_{2q} & \\ & & & \dots \end{bmatrix}$$

(4.18)

Toutes les sous-matrices, α , β_1' et β_2' sont diagonales, et il n'y a aucun élément de matrice entre différents modes autour du nanotube après le changement de base. Si nous réarrangeons de nouveau la base selon les modes, la matrice hamiltonienne est :

$$H' = \begin{bmatrix} H_1' & & & \\ & H_2' & & \\ & & \dots & \\ & & & H_q' \\ & & & & \dots \end{bmatrix}$$

(4.19)

Où H_q' est la matrice hamiltonienne pour le $q^{\text{ième}}$ mode :

$$H'_q = \begin{bmatrix} U_1 & b_{2q}^+ & & & \\ b_{2q} & U_2 & t & & \\ & t & U_3 & b_{2q} & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix}$$

(4.20)

Toutes les sous-matrices non-diagonales de H' sont nulles parce que tous les modes sont découplés après le changement de base. Chaque mode peut être séparément traité dans l'espace des modes, réduisant ainsi considérablement la taille de la matrice hamiltonienne. De plus, pour des conditions de polarisations typiques aux extrémités, seuls quelques modes interviennent dans le transport de porteurs, ce qui réduit de nouveau le volume des calculs. Le facteur de phase du nombre complexe, b_{2q} , n'a aucun effet sur les résultats tels que la densité de charge et le courant. Il peut donc être négligé et nous utiliserons seulement $b_{2q} = 2t \cos(\pi q / n)$ au lieu du nombre complexe b_{2q} .

Les self-énergies de la source et du drain dans l'espace des modes peuvent être calculées en utilisant la même relation récursive que pour le calcul de la fonction de Green de la surface. Pour le $q^{\text{ième}}$ mode, la matrice β_1 dans l'équation (4.9) est remplacée par t et β_2 est remplacée par b_{2q} ,

$$g_{1q} = \left[(E + i0^+)I - U_1 - b_{2q}^+ g_{2q} b_2 \right]^{-1}$$

$$g_{2q} = \left[(E + i0^+)I - U_1 - b_1^+ g_{1q} b_1 \right]^{-1}$$

(4.21)

où g_{1q} et g_{2q} sont les fonctions de Green de la surface pour les premier et deuxième nœuds à l'intérieur de la source Figure IV.8, et U_1 est le potentiel de la source. Les équations récursives dans l'espace des modes sont des équations numériques et peuvent être analytiquement résolues,

$$g_{1q} = \frac{(E - U_1)^2 + b_1^2 - b_{2q}^2 \pm \sqrt{[(E - U_1)^2 + b_1^2 - b_{2q}^2]^2 - 4(E - U_1)^2 b_1^2}}{2b_1^2 (E - U_1)}$$

(4.22)

La fonction de Green de la surface retardée pour le premier nœud à l'intérieur de la source, g_{1q}^r , est l'une des équations avec une partie imaginaire négative, et la self-énergie de la source pour le $q^{\text{ième}}$ mode est $\Sigma_{Sq} = b_1^2 g_{1q}$

Comme le montre la figure (IV.8). Après le changement de base, le réseau bidimensionnel du nanotube est transformé en n réseaux unidimensionnels découplés dans l'espace des modes. La matrice hamiltonienne pour le $q^{\text{ième}}$ mode est

$$H_q = \begin{bmatrix} U_1 & b_{2q} & & & \\ b_{2q} & U_2 & t & & \\ & t & U_3 & b_{2q} & \\ & & & & \dots \end{bmatrix}$$

(4.23)

où U_i est le potentiel électrostatique dans le $i^{\text{ième}}$ anneau de carbone, t est le paramètre de saut entre plus proches voisins C-C (est l'énergie de couplage entre les points adjacents dans le canal), et $b_{2q} = 2t \cos(\pi q / n)$. L'équation (4.23) devrait être comparée avec l'équation (4.4). Dans l'équation (4.23), chaque élément est un nombre, mais dans l'équation (4.4) chaque élément est une sous-matrice $n \times n$. Comme dans l'équation (4.4), les entrées diagonales impaires se rapportent à la sous-matrice de type A et même numéro à la sous-matrice de type B. Chaque anneau de type A se couple à l'anneau suivant de type B avec le paramètre b_{2q} (analogue à β_2 dans l'équation (4.4)) et à l'anneau précédent de type B avec le paramètre t (analogue à β_1 dans l'équation (4.4)). De même, chaque anneau de type B se couple à l'anneau suivant de type A avec le paramètre t et à l'anneau précédent de type B avec le paramètre b_{2q} .

Pour un nanotube $(n,0)$, il y a $M=n$ modes circulaires, mais le coût de calcul est réduit quand les modes sont découplés. Le coût de calcul peut être encore réduit en notant qu'en général seul un ou quelques modes interviennent dans le transport de porteurs. Les modes dont les bords des bandes sont bien au-dessus ou au-dessous des niveaux de Fermi de la source et du drain sont sans influence sur le transport de porteurs. La relation $E(k)$ pour le $q^{\text{ième}}$ mode qui est déterminée à partir de l'équation (4.23) est:

$$E(k) = \pm \sqrt{t^2 + b_{2q}^2 + 2tb_{2q} \cos(3ka_{CC}/2)}$$

(4.24)

où $a_{CC} \approx 1.42 \text{ \AA}$ est la distance de liaison C-C. Le $q^{\text{ième}}$ mode produit une bande de conduction et une bande de valence avec $E(k)$ symétrique, et une bande interdite de:

$$E_g = 2|t| \{1 + \cos(\pi q/n)\}$$

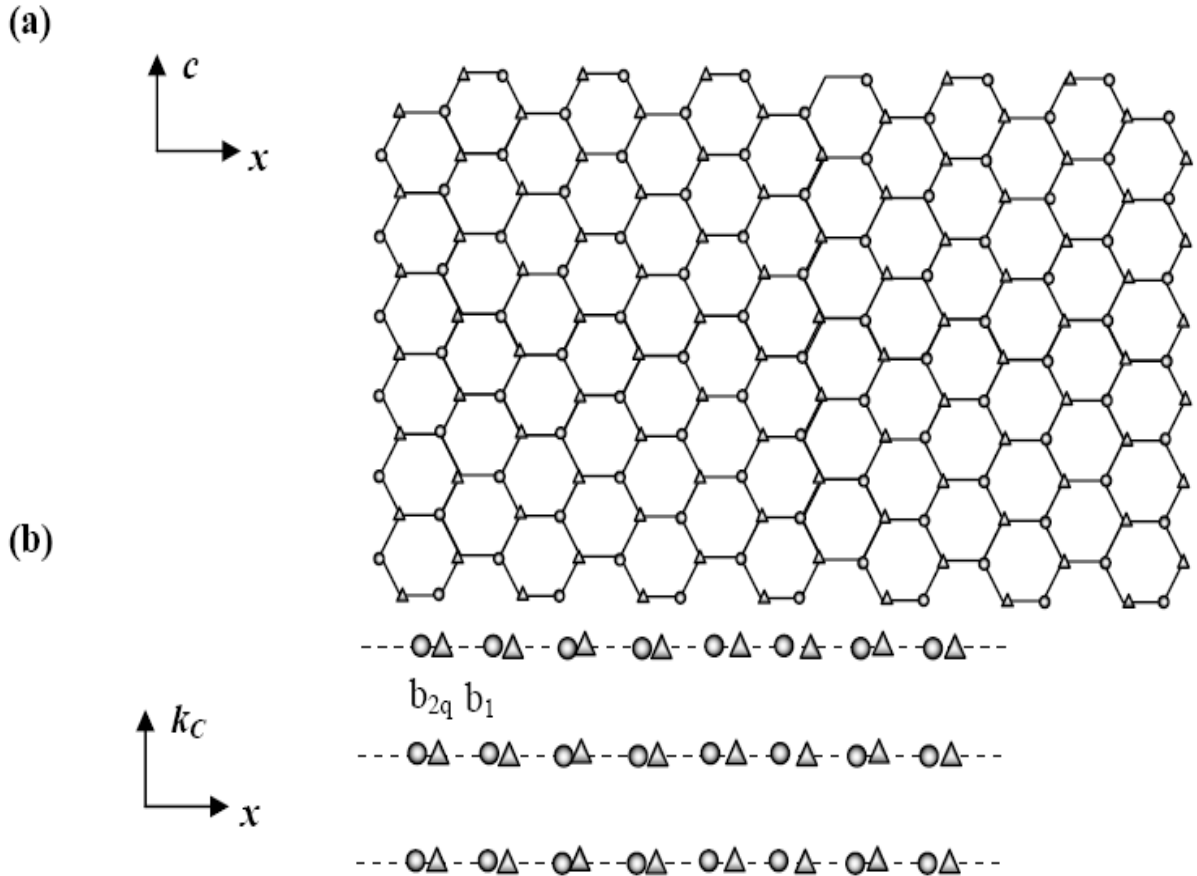


Figure IV.8 : a) Réseau de l'espace réel à 2 dimensions du nanotube zigzag $(n,0)$, b) réseau de l'espace des modes à 1 dimension.

Quand $n \div 3 = 0$, le plus bas indice de sous-bande est $q = 2n/3$, comme conséquence de $b_{2q} = -t$ et un gap nul. Autrement, le nanotube est semi-conducteur et le plus bas indice de sous-bande est le nombre entier le plus proche de $2n/3$. En gardant seulement ces modes dont la population des porteurs change avec la polarisation du dispositif ou la température de fonctionnement, la taille du problème est significativement réduite.

IV.10 Sans interactions électron-phonon: Traitement NEGF du transport balistique dans les CNTFETs

Ici, nous présentons une brève vue d'ensemble du modèle de CNTFET étudié. L'hamiltonien du dispositif utilisé dans cette étude est basé sur l'approximation de liaisons fortes entre les plus proches voisins selon l'orbitale P_z . Le dispositif représenté sur la figure (IV.9.a), est un transistor CNT-MOSFET où les électrodes source et drain sont des régions du CNT dopées (L_{SD}), la grille étant métallique et cylindrique enveloppe la région intrinsèque du CNT (L_{ch}). L'oxyde de grille d'épaisseur t_{ox} couvre totalement le nanotube. Nous utilisons des extensions du CNT qui sont fortement dopées, L_{ext} qui n'ont pas d'influence sur le

transport propre au transistor, mais sont utiles pour réaliser une meilleure convergence numérique quand il y a diffusion par les phonons(cependant, inutile pour des simulations de transport balistique).

La symétrie due à la géométrie cylindrique de notre dispositif simplifie de manière considérable le traitement du transport d'électrons dans l'espace des modes. Il permet également le traitement électrostatique auto-cohérent en utilisant la méthode des différences finies à 2 dimensions. Les électrodes source et drain sont traitées comme des réservoirs quasi-continus en équilibre thermique et sont modélisés par les fonctions de self-énergie de contact.

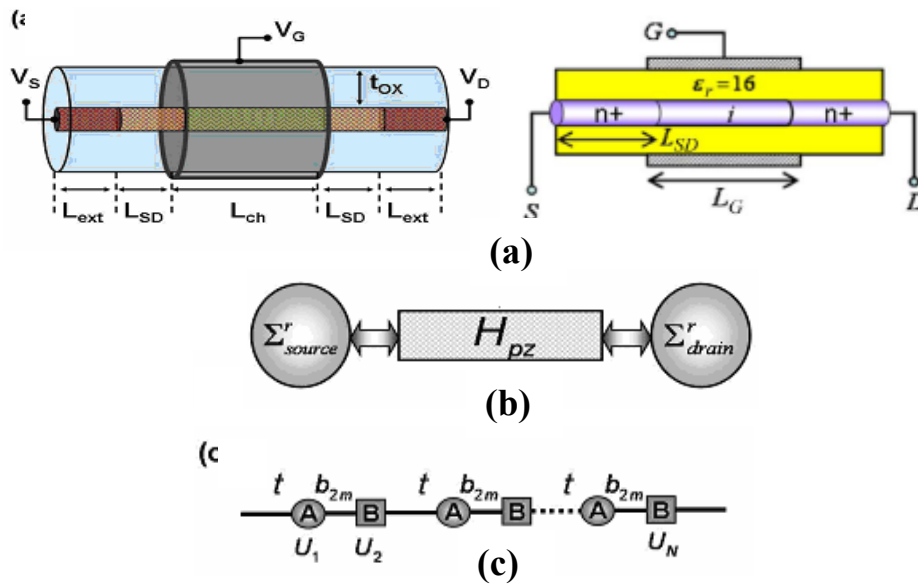


Figure IV.9 : a) Structure de dispositif CNT-MOSFET idéal, b) modèle de NEGF, c) Hamiltonien dans l'espace des modes.

IV.4.4 Hamiltonien du CNTFET

La figure IV.9.b illustre le modèle NEGF du CNTFET utilisé pour les simulations de transport. Ici, H_{pz} est l'hamiltonien du dispositif, Σ_s et Σ_D les fonctions self-énergie représentent les contacts semi infinis idéaux de source/drain. Finalement, la fonction de Green retardée pour le dispositif sous sa forme matricielle est donnée par :

$$G(E) = \left[(E + i\eta^+)I - H_{pz} - \Sigma(E) \right]^{-1} \quad (4.25)$$

où η^+ est une valeur positive infinitésimale, et I la matrice identité, la self-énergie contient les contributions de tous les mécanismes de relaxation ; la source et le drain [109]:

$$\Sigma(E) = \Sigma_s(E) + \Sigma_D(E) \quad (4.26)$$

Il faut noter que dans l'équation (4.26), les fonctions self-énergie sont généralement dépendantes de l'énergie.

Dans l'espace des modes d'un CNT zigzag (n,0), la dépendance de l'état électronique de l'angle le long de la circonférence du tube, φ , est développée en une série d'harmoniques circulaires $\exp(im\varphi)$ avec le nombre quantique angulaire m. Il couvre les valeurs entières de 1 à 2n, ou d'une manière équivalente de -n +1 à n. Les valeurs entières de m en dehors de cette gamme produiraient des harmoniques équivalents aux sites du réseau cristallin. L'hamiltonien total se divise en matrices indépendantes pour des sous-bandes associées à chaque valeur de m, donnant lieu à un hamiltonien 1D avec une cellule unitaire à deux sites, figure (IV.9.c); où chaque site correspond à un des deux anneaux de carbone non équivalents de l'espace réel, A ou B. La période du nanotube zigzag dans la direction longitudinale contient 4 anneaux, ABAB, avec une longueur de $3a_{cc}$ où $a_{cc} = 0.142nm$ est la longueur de la liaison carbone-carbone dans le graphène. Par conséquent, la distance moyenne entre les anneaux est :

$$\Delta z = \frac{3a_{cc}}{4}$$

(4.27)

Le diamètre du nanotube zigzag est :

$$d_t = \frac{n\sqrt{3}a_{cc}}{\pi}$$

(4.28)

Les deux sites de la cellule unitaire comme prévu, donnent naissance à deux sous bandes correspondant aux bandes de conduction et de valence. La matrice hamiltonienne pour les sous bandes avec le nombre quantique angulaire m dans un CNT zigzag (n,0) est alors donnée par :

$$H_{pz} = \begin{bmatrix} U_1 & b_{2m} & & & & & \\ b_{2m} & U_2 & t & & & & 0 \\ & t & U_3 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & & & \\ & 0 & & t & U_{N-1} & b_{2m} & \\ & & & & b_{2m} & U_n & \end{bmatrix}_{N \times N}$$

(4.29)

où $b_{2m} = 2t \cos(\pi m / n)$, $t \approx 3eV$ est le paramètre de saut des plus proches voisins, N est le nombre total d'anneaux de carbone le long du dispositif. Ici, les éléments diagonaux U_j

correspondent au potentiel électrostatique le long de la surface du nanotube. Toutes les sous bandes électroniques dans un CNT sont 4 fois dégénérées : en raison des deux états de spin et d'une dégénérescence de vallée de deux. La dégénérescence de vallée vient de deux sous bandes avec la même énergie de dispersion, avec des valeurs différentes de m . Chaque sous-bande peut être représentée comme une coupe de la zone de Brillouin à 2 dimensions du graphène par une ligne avec un moment constant K_y . Ici, nous assimilons le moment avec le vecteur d'onde ayant la dimension de l'inverse d'une longueur. Les coupes les plus proches des points K du graphène correspondent aux sous-bandes de conduction de plus basse énergie aussi bien qu'aux sous-bandes de valence de haute énergie, et correspondent dans les nanotubes zigzag aux moments angulaires: $m_{l1} =$ la partie entière de $(2n/3)$ et $m_{l2} =$ partie entière de $(4n/3)$. Il peut être démontré que le niveau d'extension est défini par [79]:

$$\Gamma(E) \equiv i[\Sigma(E) - \Sigma^+(E)] = \Sigma^{in}(E) + \Sigma^{out}(E) \quad (4.30)$$

où Σ^+ représente le conjugué Hermitien de la matrice Σ définie par l'équation (4.26), et Σ^{in} et Σ^{out} sont les fonctions de diffusion in/out. Les mêmes relations s'appliquent séparément à chaque mécanisme de relaxation. Pour une structure stratifiée comme les nanotubes de carbone, tous les éléments de la fonction self-énergie de la source Σ_{source} sont nuls sauf l'élément (1,1), alors:

$$\Sigma_s(i \neq 1, j \neq 1) = 0 \quad (4.31)$$

$$\Sigma_s(1,1) = \alpha_{source} - \sqrt{\alpha_{source}^2 - t^2}$$

et

$$\alpha_{source} = \frac{(E - U_1)^2 + t^2 - b_{2m}^2}{2(E - U_1)}$$

$$(4.32)$$

De même, les éléments de la fonction self-énergie de drain Σ_D sont nuls, sauf l'élément (N,N) qui est donné par des équations similaires à (4.31) et (4.32) avec U_1 remplacé par U_N . Comme nous l'avons mentionné précédemment, les self-énergies Σ_S et Σ_D reflètent rigoureusement l'effet des contacts semi-infinis sur le dispositif. Ainsi nous pouvons définir les fonctions de diffusion in/out pour le couplage de contact [125].

$$\begin{cases} \sum_S^{in}(E) = \Gamma_S(E)f(E - E_S^F) \\ \sum_D^{in}(E) = \Gamma_D(E)f(E - E_D^F) \end{cases}$$

(4.33)

$$\begin{cases} \sum_S^{out}(E) = \Gamma_S(E)[1 - f(E - E_S^F)] \\ \sum_D^{out}(E) = \Gamma_D(E)[1 - f(E - E_D^F)] \end{cases}$$

(4.34)

où $f(E)$ est la distribution de Fermi, ainsi E_S^F et E_D^F sont les énergies de Fermi de la source et du drain. Les fonctions de corrélation des électrons et des trous sont données par [125]:

$$G^n = G[\sum_S^{in} + \sum_D^{in}]G^+$$

(4.35)

$$G^p = G[\sum_S^{out} + \sum_D^{out}]G^+$$

(4.36)

La distribution d'électrons et de trous dans tout le dispositif est déterminée par l'occupation respective des densités d'états locaux LDOS_S et LDOS_D, par les fonctions de Fermi f_S et f_D du réservoir correspondant. La fonction spectrale est [125] :

$$A(E) \equiv i(G(E) - G^+(E)) = G^n(E) + G^p(E)$$

(4.37)

Dans les conditions balistiques, les contributions de la source et du drain à la fonction spectrale sont respectivement [125];

$$\begin{cases} A_S = G\Gamma_S G^+ \\ A_D = G\Gamma_D G^+ \end{cases}$$

(4.38)

où les éléments diagonaux de A_S et A_D sont liés aux densités locales d'états (LDOS_S, LDOS_D) évoluant du contact correspondant. Il faut noter que les fonctions de corrélation d'électrons et de trous $G_{i,j}^n(E,m)$ et $G_{i,j}^p(E,m)$ sont des matrices définies dans la base de numéros d'anneaux i, j et de sous-bandes m . Ainsi, les éléments diagonaux $G_{j,j}^n(E,m)$ et $G_{j,j}^p(E,m)$, correspondent à la densité d'énergie d'occupation des porteurs dans ces sites de la base (anneau de carbone unique, A ou B, dans une sous-bande

spécifique) avec une énergie donnée E . Ainsi, les densités totales d'électrons et de trous (par unité de longueur) en un site z_j sont données par:

$$n(z_j) = \sum_{m,s} \frac{1}{\Delta z} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G_{j,j}^n(E, m)}{2\pi} dE \quad (4.39)$$

$$p(z_j) = \sum_{m,s} \frac{1}{\Delta z} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G_{j,j}^p(E, m)}{2\pi} dE \quad (4.40)$$

où la sommation effectuée sur le spin et les variables de la sous-bande produit le facteur de dégénérescence 4 (pour chaque sous-bande non-équivalente). Selon l'équation (4.37) on reconnaît que la fonction spectrale définie séparément pour chaque sous-bande est proportionnelle à la densité d'états.

$$g_{1D}(E, z_j) = \frac{A_{j,j}(E, m)}{\pi \Delta z} \quad (4.41)$$

Finalement, la circulation du courant du site z_j à z_{j+1} dans le plan de liaisons fortes entre les plus proches voisins peut être déterminé par [95] :

$$I_{j \rightarrow j+1} = \sum_{m,s} \frac{ie}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} [H_{j,j+1}(m)G_{j+1,j}^n(E, m) - H_{j+1,j}(m)G_{j,j+1}^n(E, m)] \quad (4.42)$$

où les termes non diagonaux de l'hamiltonien (équation (4.29)) ne contiennent que les contributions du saut. L'équation (4.42) est une relation générale, parce qu'elle est valide même pour le transport dissipatif. Dans des conditions balistiques, l'équation (4.42) peut encore se simplifier (pour chaque sous-bande non équivalente) et on obtient:

$$I = \frac{4e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} T(E) [f(E - E_S^F) - f(E - E_D^F)] \quad (4.43)$$

Avec $T(E)$ le coefficient de transmission, donné par:

$$T(E) = \text{Trace}[\Gamma_S(E)G^r(E)\Gamma_D(E)G^{r+}(E)] \quad (4.44)$$

L'équation (4.43) est l'équation de Landauer utilisée dans le transport mésoscopique.

On peut mieux comprendre la structure de bandes des nanotubes de carbone par le calcul des valeurs propres de l'hamiltonien (4.29) pour un potentiel extérieur nul, et obtenir ainsi les relations de dispersion d'énergie $E(k_z)$, en fonction du moment tout au long du nanotube, pour chaque sous-bande. Pour les sous-bandes de conduction les plus basses et de valence les plus élevées, près des points K le bord de la bande du graphène est approximativement conique, ainsi:

$$\left(\frac{2E}{E_g}\right)^2 = 1 + \left(\frac{k_z}{\Delta k}\right)^2$$

(4.45)

Avec le gap:

$$E_g = 2v_F \hbar \Delta k$$

(4.46)

Et la distance au point-K: $\Delta k = \frac{2}{3d_t}$

La vitesse des porteurs dans la bande est:

$$v = \frac{dE}{\hbar dk_z}$$

(4.47)

Loin du bord de bande, la vitesse tend vers la valeur constante:

$$v_F = \frac{3a_{CC}t}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s}$$

La densité d'états à 1 dimension incluant la sommation sur le spin mais pour une sous-bande (vallée) peut s'exprimer par:

$$g_{1D}(E) = \frac{2}{\pi \hbar v(E)}$$

(4.48)

Ou, en d'autres termes:

$$g_{1D}(E) = \frac{2}{\pi \hbar v_F} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - (E_g/2)^2}}$$

(4.49)

IV.4.5 Équation de Poisson

Cette partie résume la mise en œuvre de l'auto-cohérence électrostatique dans notre simulation. Les éléments diagonaux de l'hamiltonien dans l'équation (4.29) contiennent le potentiel électrostatique sur la surface de nanotube, qui entre dans le calcul par NEGF de la distribution de charge dans les équations (4.39) et (4.40). D'autre part, le potentiel électrostatique et la distribution de charge sont couplés par l'équation de Poisson, assurant l'existence de l'auto-cohérence Poisson-NEGF représentée sur le schéma suivant.

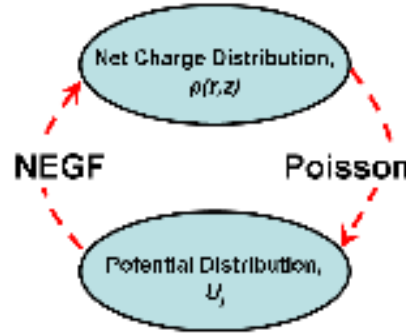


Figure IV.10 : Boucle d'auto-cohérence entre les solutions Poisson-Schrödinger.

L'équation de Poisson à 2 dimensions pour la géométrie cylindrique du transistor représenté sur la figure (IV.6.a) est:

$$\nabla^2 U(r, z) = -\frac{\rho(r, z)}{\varepsilon}$$

(4.50)

où $\rho(r, z)$ est la distribution de densité de charge nette qui inclut aussi bien la densité du dopant. Sur ce point, il convient de noter que bien que les équations (4.39) et (4.40) donnent les densités totales de porteurs distribués sur toute la gamme d'énergie, ce dont nous avons besoin pour déterminer le potentiel auto-cohérent sur la surface de tube, $U_j \equiv U(r = r_{CNT}, z_j)$ est la densité de charge induite (r_{CNT} = le rayon de CNT). Ceci peut être déterminé par le calcul des intégrales dans les équations (4.39) et (4.40) dans une gamme d'énergie limitée définie par rapport à l'énergie de neutralité de charge locale E_N . Dans un CNT semi-conducteur, en raison de la symétrie des bandes de conduction et de valence, E_N est au milieu du gap d'énergie. Finalement, la densité de charge induite au site z_j peut être calculée par:

$$Q_{ind}(z_j) = \frac{4}{\Delta z} \left[(-e) \int_{E_N(j)}^{+\infty} \frac{G_{j,j}^n(E)}{2\pi} dE + (+e) \int_{-\infty}^{E_N(j)} \frac{G_{j,j}^p(E)}{2\pi} dE \right]$$

(4.51)

Où les premier et deuxième termes correspondent aux densités d'électrons et de trous induites, respectivement, et e la charge de l'électron.

Connaissant la charge induite Q_{ind} , alors on peut déterminer la distribution de charge nette $\rho(r, z)$:

$$\begin{aligned}\rho(r = r_{CNT}, z_j) &= Q_{ind}(z_j) + N_D^+ - N_A^- \\ \rho(r \neq r_{CNT}, z) &= 0\end{aligned}$$

(4.52)

Où N_D^+ et N_A^- sont respectivement des concentrations des atomes donneurs et accepteurs. Ici, on suppose que la charge induite et les dopants sont uniformément distribués sur la surface du nanotube. Finalement, l'équation (4.50) est résolue pour déterminer le potentiel électrostatique cohérent U_j le long de la surface du nanotube. Le potentiel calculé U_j^{new} mène à un hamiltonien modifié (équation (4.29)), qui contribue à la boucle d'auto-cohérence entre l'électrostatique et le transport quantique (figure IV.10).

La méthode précédemment décrite est une approche mono-électronique auto-cohérente dans laquelle chaque électron, traité séparément, est soumis à un potentiel électrostatique résultant de son interaction coulombienne avec la densité électronique du système. La boucle d'auto-cohérence consiste à résoudre l'équation de Schrödinger, exprimée dans le formalisme des fonctions de Green, et à la coupler avec l'équation de Poisson. A partir d'un potentiel électrostatique d'essai, l'équation de Schrödinger fournit une densité de charges qui est injectée dans l'équation de Poisson. Par une double intégration, nous obtenons un nouveau potentiel qui servira d'entrée à l'équation de Schrödinger. L'opération est ainsi répétée jusqu'à convergence du potentiel électrostatique c'est-à-dire $\max(|U_j^{old} - U_j^{new}|) \leq U^{tol}$, où U^{tol} est la tolérance sur le potentiel (figure IV.11).

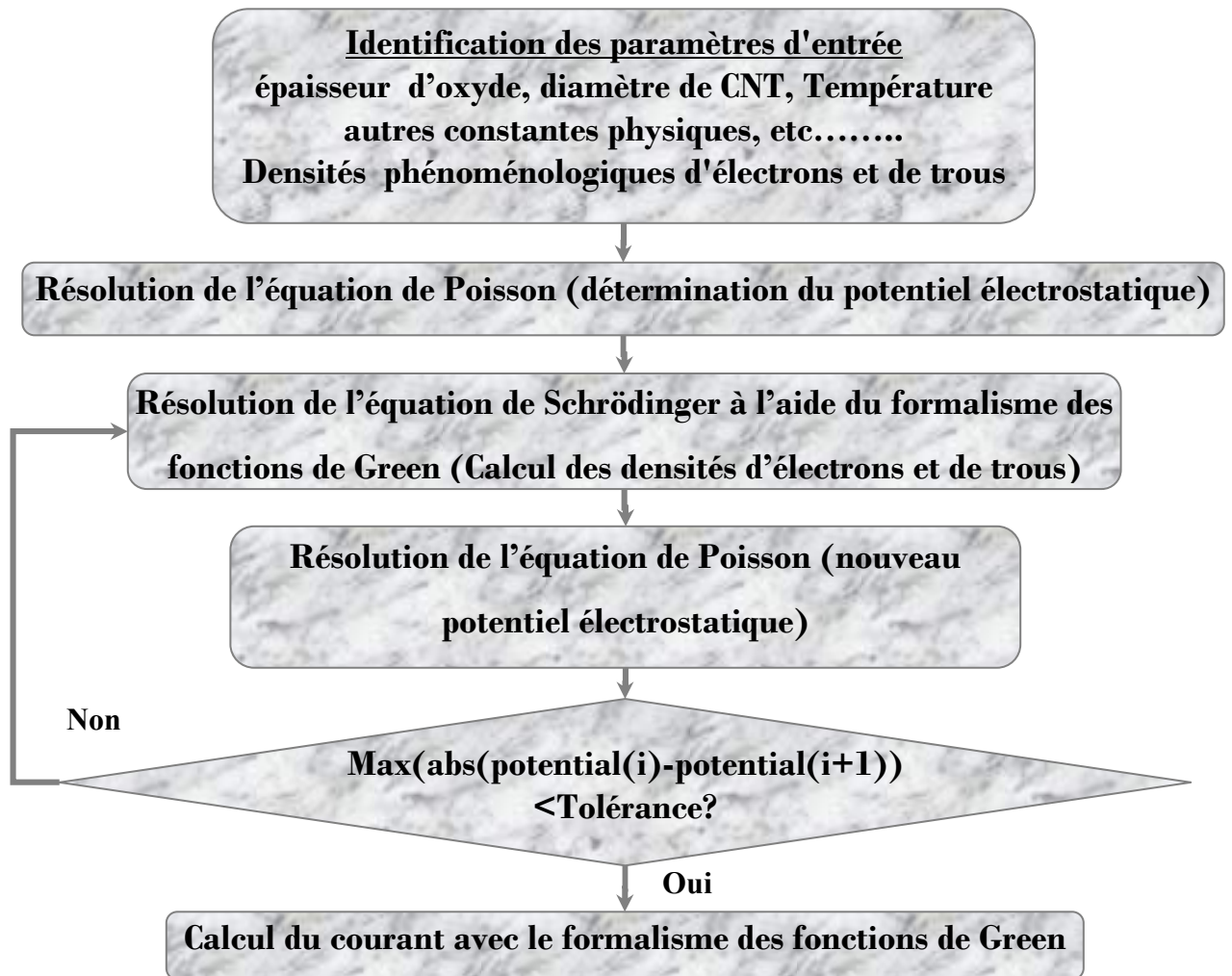


Figure IV.11 : Organigramme de la simulation. L'indice i représente le nombre d'itérations de la boucle Schrödinger-Poisson.

IV.4.6 Résolution de l'équation de Poisson par la méthode de différences finies

Cette partie décrit la méthode de différences finies pour résoudre l'équation de Poisson à 2 dimensions pour un dispositif à symétrie cylindrique (Figure VI.9.a). Afin de discrétiser l'équation de Poisson (4.50) il est conceptuellement simple d'écrire cette équation sous forme intégrale comme suit [122] :

$$\int \vec{D} d\vec{s} = \int \rho dV \quad (4.53)$$

\vec{D} : est le champ de déplacement à 2 dimensions avec les composantes (\hat{r}, \hat{z}) , et la distribution de charge ρ donnée par les équations (4.51) et (4.52).

IV.4.3.5 Réseau de discrétisation

Dans le cas bidimensionnel, le maillage à mettre en œuvre avec la méthode des différences finies consiste à répartir parallèlement aux axes de coordonnées un nombre fini de droites formant ainsi N_x lignes et N_y colonnes un nombre total de points égal à $N_x \cdot N_y$.

Le pas de discrétisation doit être non uniforme pour tenir compte de la non uniformité des grandeurs physiques dans certains endroits de la structure. Citons, par exemple, le potentiel électrostatique, le champ électrique et le dopage au voisinage de la jonction [122].

La répartition des points de discrétisation est une opération importante dans le déroulement de la suite des procédures numériques, elle présente les inconvénients suivants :

- Utiliser un réseau très dense conduit rapidement à un système dont la résolution nécessite des moyens de calcul énormes.
- Ne pas prendre suffisamment de points aux endroits où les inconnues varient rapidement altère la précision des résultats.

Une attention particulière est toujours donnée pour la génération d'un maillage le plus convenable et le plus optimisé. En général, pour tenir compte globalement des propriétés qui s'imposent dans la construction du maillage les critères suivants sont respectés :

- Le nombre total de points doit être inférieur à une limite qui dépend de la structure et de la puissance de la machine.
- Eviter les variations brutales du pas de discrétisation.
- Les positions des jonctions et des bords de la zone de déplétion doivent être préalablement connues.

IV.4.3.6 Technique de discrétisation

Dans le réseau de discrétisation (figure IV.12) chaque point est repéré par ses coordonnées (m,n) avec :

$$\begin{aligned} 0 \leq x_i \leq L_x \quad \text{et} \quad 0 \leq y_j \leq L_y \\ 0 \leq i \leq N_x \quad \text{et} \quad 0 \leq j \leq N_y \end{aligned}$$

L_x et L_y : sont les dimensions latérale et transversale du dispositif (parallèle à l'axe z).

N_x et N_y : sont les nombres de nœuds de discrétisation latéraux et transversaux (parallèle à l'axe x).

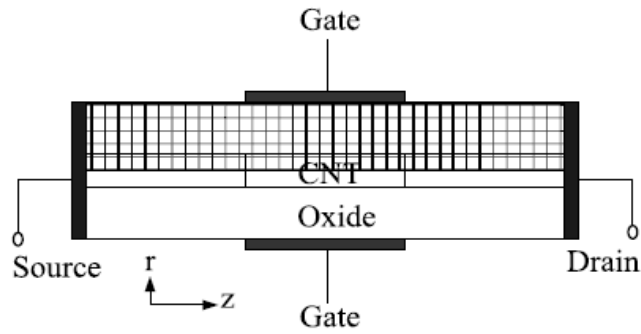


Figure IV.12 : Réseau de discrétisation.

IV.4.3.7 Discrétisation de l'équation de Poisson

Pour un élément de volume (m,n) complètement à l'intérieur d'un milieu diélectrique, la maille à 2 dimensions de différence finie pour un dispositif avec la symétrie cylindrique est indiquée sur Figure (IV.13.a). Dans une région homogène (avec constante diélectrique relative ϵ), comme par exemple à l'intérieur de la région d'oxyde, l'équation (4.53) peut être discrétisée comme suit.

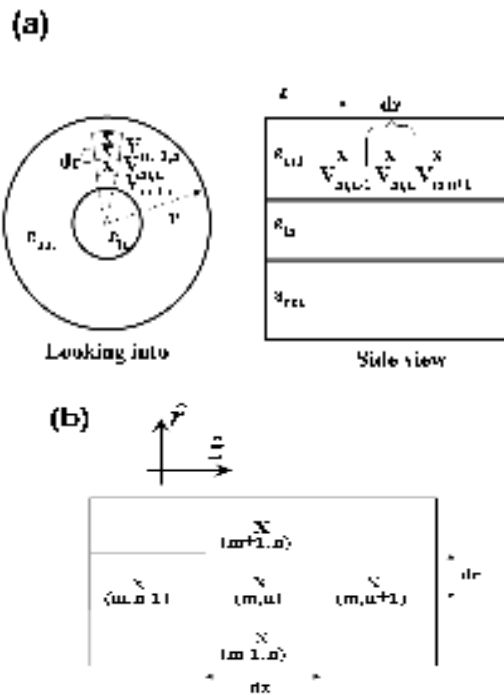


Figure IV.13 : a) Maillage des différences finies à 2 dimensions pour résoudre l'équation de Poisson dans une géométrie cylindrique symétrique b) Nœuds autour de l'élément (m,n) .

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \frac{V_{m,n} - V_{m+1,n}}{dr} \left(r_{m,n} + \frac{dr}{2} \right) && \uparrow \text{ haut} \\
& + \varepsilon \frac{V_{m,n} - V_{m-1,n}}{dr} \left(r_{m,n} - \frac{dr}{2} \right) && \downarrow \text{ bas} \\
& + \varepsilon \frac{V_{m,n} - V_{m,n+1}}{dz} \left(r_{m,n} \frac{dr}{dz} \right) && \rightarrow \text{ gauche} \\
& + \varepsilon \frac{V_{m,n} - V_{m,n-1}}{dz} \left(r_{m,n} \frac{dr}{dz} \right) && \leftarrow \text{ droite} \\
& = 2\pi r_{m,n} dr \rho_{m,n} \frac{1}{2\pi\varepsilon_0} = \frac{\rho_{1D}}{2\pi\varepsilon_0}
\end{aligned}$$

(4.54)

Où $V_{m,n}$ est le potentiel électrostatique au milieu de l'élément de volume (m,n), et $\rho_{m,n}$ est la densité de charge nette (en unités de $1/\text{cm}^3$). Puis, en raison de la symétrie angulaire du dispositif, ρ_{1D} est la densité de charge linéaire nette sur le long de la direction axiale exprimée en unités $1/\text{cm}$. Dans l'équation (4.54), les flèches indiquent l'intégrale de surface du champ de déplacement c'est-à-dire $\vec{D} \cdot d\vec{s}$ dans cette direction en ce qui concerne le noeud (m,n) représenté sur la figure (IV.13.b). Selon les équations (4.51) et (4.52), pour les éléments de volume complètement à l'intérieur du milieu diélectrique $\rho_{m,n}$ est nul, sauf s'il y a d'autres impuretés de charges telles que les charges d'oxyde, etc....

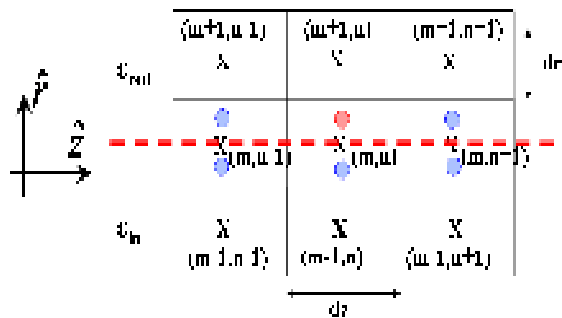


Figure IV.14 : Plan de discrétisation à la frontière de deux régions diélectriques ε_{in} et ε_{out} .

Le plan de discrétisation pour un élément de volume à l'interface de CNT/diélectrique est représenté sur la figure (IV.14). Dans ce cas nous avons besoin des valeurs du potentiel non seulement sur les points x mais également sur la frontière matérialisée par les tirets. Le potentiel sur les points peut être estimé par la méthode des différences finies. Par exemple, le potentiel au point rouge sur la figure (IV.14) peut être estimé par :

Ici, N est le nombre total de points de la grille à 2 dimensions. Il faut signaler que dans le régime non linéaire pour résoudre l'équation de Poisson, la densité de charge locale est calculée à partir des équations de transport, et représentée comme une fonction différentiable du potentiel local

$$\rho_{m,n} = \rho(V_{m,n}) \quad (4.58)$$

La fonction phénoménologique ρ est liée à $V_{m,n}$ par une énergie quasi-Fermi. Ainsi, l'équation (4.57) peut être écrite en général comme:

$$F(\{V\}_{N,1}) = [A]_{N \times N} \{V\}_{N \times 1} - \rho(\{V\}_{N \times 1}) = 0 \quad (4.59)$$

Où $\{V\}_{N \times 1}$ est le vecteur colonne comportant le potentiel électrostatique en tous les nœuds du maillage ; c-à-d. $V_{1,1}, V_{1,2}, \dots$, etc. Ensuite, en utilisant la méthode de Newton-Raphson, la nouvelle distribution de potentiel est liée à l'ancienne par:

$$\{V^{new}\} = \{V^{old}\} + \{\Delta V\} \quad (4.60)$$

Tel que

$$\{\Delta V\} = -F'(\{V^{old}\})_{N \times N} \setminus F(\{V^{old}\})_{N \times 1} \quad (4.61)$$

Ici, l'opérateur ' \setminus ' correspond à la méthode d'élimination gaussienne pour résoudre un système linéaire d'équations. Dans l'équation (4.61), le Jaccobien est donné par:

$$F'(\{V^{old}\})_{N \times N} = [A]_{N \times N} - \text{diag}[\rho'(\{V^{old}\})]_{N \times N} \quad (4.62)$$

Il convient de noter que le dernier terme de l'équation (4.62) est une matrice diagonale de la forme :

$$\text{diag}[\rho'(\{V^{old}\})]_{N \times N} = \begin{bmatrix} \rho'(V_1^{old}) & & & 0 \\ 0 & \rho'(V_2^{old}) & & 0 \\ 0 & & 0 & 0 \\ 0 & & & \rho'(V_N^{old}) \end{bmatrix}_{N \times N} \quad (4.63)$$

Où ρ' désigne la dérivée de la fonction ρ . Dans le cas des CNTs, la fonction phénoménologique ρ est considérée comme étant:

$$\rho = (-q) \left(\frac{8}{3\pi a_{cc} t} \right) (n - p)$$

(4.64)

Maintenant, on calcule la charge totale du nanotube pour ces valeurs données de V_{DS} et de V_{CNT} . La source et le drain apportent tous deux des charges. Rappelons que les états $+k$ sont remplis par la source et les états $-k$ par le drain selon la distribution de Fermi dans les deux cas. La densité linéique de porteurs s'écrit donc, en ne considérant que les porteurs ayant une énergie supérieure à E_C (le bas de la bande de conduction du nanotube intrinsèque) :

$$n_{CNT} = \int_{E_C}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} [f(E - \mu_D)] dE$$

(4.65)

Où $g(E)$ est la densité d'états effectifs, $\mu_{S(D)}$ est le niveau de Fermi de la source (drain), $f(E - \mu_S)$ (resp $f(E - \mu_D)$) est donc la distribution de Fermi de la source (resp drain) soit :

$$f(E - \mu_I) = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E - \mu_I}{k_B T} \right)}}$$

(4.66)

Avec $I = S$ ou D . La densité d'états effectifs dans la bande de conduction vaut :

$$g(E) = \frac{8}{3\pi a_{cc} t} \frac{|E - E_0|}{\sqrt{(E - E_0)^2 - E_C}} h(|E - E_0| - E_C)$$

(4.67)

Avec a_{cc} la distance entre 2 atomes de carbone soit environ 0,142 nm, t l'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone soit 2,5eV, E_0 est l'énergie du milieu de la bande interdite soit $E_C - \frac{E_g}{2}$ et $h(x)$ l'échelon de Heaviside qui vaut 1 si x est positif et 0 sinon [67].

Sur la figure (VI.1.d), on peut voir que la hauteur de la barrière de potentiel côté source a été fixée à $\frac{E_g}{2}$: on a donc $E_0 = \mu_S$. Par la suite, μ_S sera la référence de potentiel et vaudra donc 0. La densité d'états deviendra alors :

$$g(E) = \begin{cases} g_0 \frac{E}{\sqrt{E^2 - E_C^2}} & \text{si } E > E_C \\ 0 & \text{si } E < E_C \end{cases}$$

(4.68)

$$\text{Avec } g_0 = \frac{8}{3\pi a_{cc} t}$$

On peut dissocier les contributions de la source et du drain dans l'intégrale de la densité de charge en considérant que la charge totale est la somme des charges apportées par la source d'une part et des charges apportées par le drain d'autre part, soit :

$$n_{CNT} = n_S + n_D \quad (4.69)$$

Il suffit maintenant de résoudre :

$$n_I = \int_{E_C}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} f(E - \mu_I) dE \quad (4.70)$$

Avec I = S ou D.

Pour intégrer de zéro à l'infini, le changement de variable suivant est nécessaire : E devient $E' + E_C$. La densité de charge s'écrit alors :

$$n_I = \int_0^{+\infty} \frac{g(E'+E_C)}{2} f(E'+E_C - \mu_I) dE' \quad (4.71)$$

En intégrant les équations (4.66) et (4.68) dans l'équation (4.71) :

$$n_I = \int_{0_C}^{+\infty} \frac{g_0}{2} \frac{E + E_C}{\sqrt{(E - E_C)^2 - E_C^2}} \frac{dE}{1 + e^{\frac{E+E_C - \mu_I}{K_B T}}} \quad (4.72)$$

Pour supprimer la racine carrée provenant de la densité d'états, le changement de variable suivant est nécessaire : E devient $\sqrt{Z^2 + E_C^2} - E_C$. L'équation (4.72) devient :

$$n_I = \int_{0_C}^{+\infty} \frac{g_0}{2} \frac{dZ}{\sqrt{Z^2 + E_C^2} - \mu_I} \frac{1}{1 + e^{\frac{Z}{K_B T}}} \quad (4.73)$$

Avant de poursuivre les calculs, une discussion sur la contribution des sous-bandes doit être menée. La principale différence entre le schéma de bande d'énergie du graphite et du nanotube est la discrétisation des bandes de valence et de conduction due au confinement des électrons autour du nanotube. Il en résulte que la bande de conduction est constituée de multiples sous-bandes (figure IV.15).

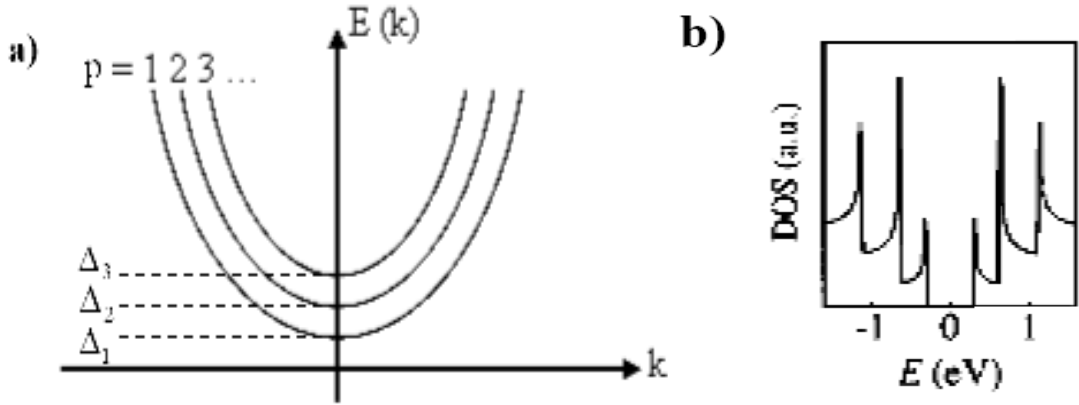


Figure IV.15 :a) Schéma de principe montrant les 3 premières sous-bandes [69],
 b) Densité d'états associée en unités arbitraires en fonction de l'énergie [69].

Nommons Δ_p le bas de la $P^{\text{ième}}$ sous-bande. De plus, rappelons que lorsque l'on augmente V_{CNT} , on courbe les bandes. Ainsi, il nous faut remplacer E_C par $E_{C_p} = \Delta_p - V_{CNT}$ sachant qu'il faut alors faire la somme sur p de la densité de porteurs. La sous-bande p contient n_{I_p} porteurs provenant de la source ou du drain. La densité de porteurs s'écrit donc :

$$n_I = \sum_{p=1}^{+\infty} n_{I_p} \quad (4.74)$$

$$\text{Avec } n_{I_p} = \int_0^{+\infty} \frac{g_0}{2} \frac{dZ}{1 + e^{\frac{\sqrt{Z^2 + (\Delta_p - V_{CNT})^2} - \mu_I}{K_B T}}}$$

$$(4.75)$$

En regroupant les densités de porteurs de source et de drain (l'équation (4.69)) et en simplifiant l'expression obtenue en posant μ_S comme référence de potentiel, on peut écrire $\mu_S - \mu_D = qV_{DS}$, soit $\mu_D = -qV_{DS}$. Avec cette simplification et en utilisant les équations (4.74) et (4.75), on obtient :

$$n_{CNT} = \sum_{p=1}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{g_0}{2} \left[\frac{1}{1 + e^{\frac{\sqrt{Z^2 + (\Delta_p - V_{CNT})^2}}{K_B T}}} + \frac{1}{1 + e^{\frac{\sqrt{Z^2 + (\Delta_p - V_{CNT})^2} + V_{DS}}{K_B T}}} \right] dZ \quad (4.76)$$

Cette équation n'a pas de solution analytique. La démarche consiste donc à la résoudre numériquement pour en déduire des solutions approchées explicitées dans la suite.

Pour de faibles énergies, c'est-à-dire inférieures à 1eV du niveau de Fermi, le minimum de la P^{ième} sous-bande Δ_p est donné par [64]:

$$\Delta_p = \Delta_1 \frac{6p - 3 - (-1)^p}{4} \quad (4.77)$$

Où la densité phénoménologique d'électrons est donnée par:

$$n = \int_0^{\infty} \frac{dx}{1 + \exp\left[\left(\sqrt{(E_g/2)^2 + x^2} - (E_{q-F} - E_n)\right)/k_B T\right]} \quad (4.78)$$

Et la densité phénoménologique de trous donnée par :

$$p = \int_0^{\infty} \frac{dx}{1 + \exp\left[\left(\sqrt{(E_g/2)^2 + x^2} + (E_{q-F} - E_n)\right)/k_B T\right]} \quad (4.79)$$

Dans les équations (4.78) et (4.79) l'énergie quasi-Fermi dépendante de la position est E_{q-F} et le milieu de la bande interdite, E_n , du CNT est liée à la surface de potentiel par, $E_n = -qV_{m,n}$ où $V_{m,n}$ est le potentiel électrostatique aux noeuds de la surface du CNT (figure IV.14). Le point important à noter est que ρ est seulement une fonction phénoménologique qui permet d'établir le schéma de la résolution non linéaire de l'équation de Poisson qui est numériquement plus efficace. Enfin, la dérivée de ρ est :

$$\rho' = \frac{d\rho}{dV_{m,n}} = \left(\frac{-q^2}{4k_B T}\right) \left(\frac{8}{3\pi a_{CC} t}\right) (n' + p') \quad (4.80)$$

Tel que :

$$n' = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\left(\cosh\left\{\left(\sqrt{(E_g/2)^2 + x^2} - (E_{q-F} - E_n)\right)/k_B T\right\}\right)^2} \quad (4.81)$$

$$p' = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\left(\cosh \left\{ \left(\sqrt{(E_g/2)^2 + x^2} + (E_{q-F} - E_n) \right) / k_B T \right\} \right)^2}$$

(4.82)

L'organigramme général de la procédure numérique est donné par la figure IV.16

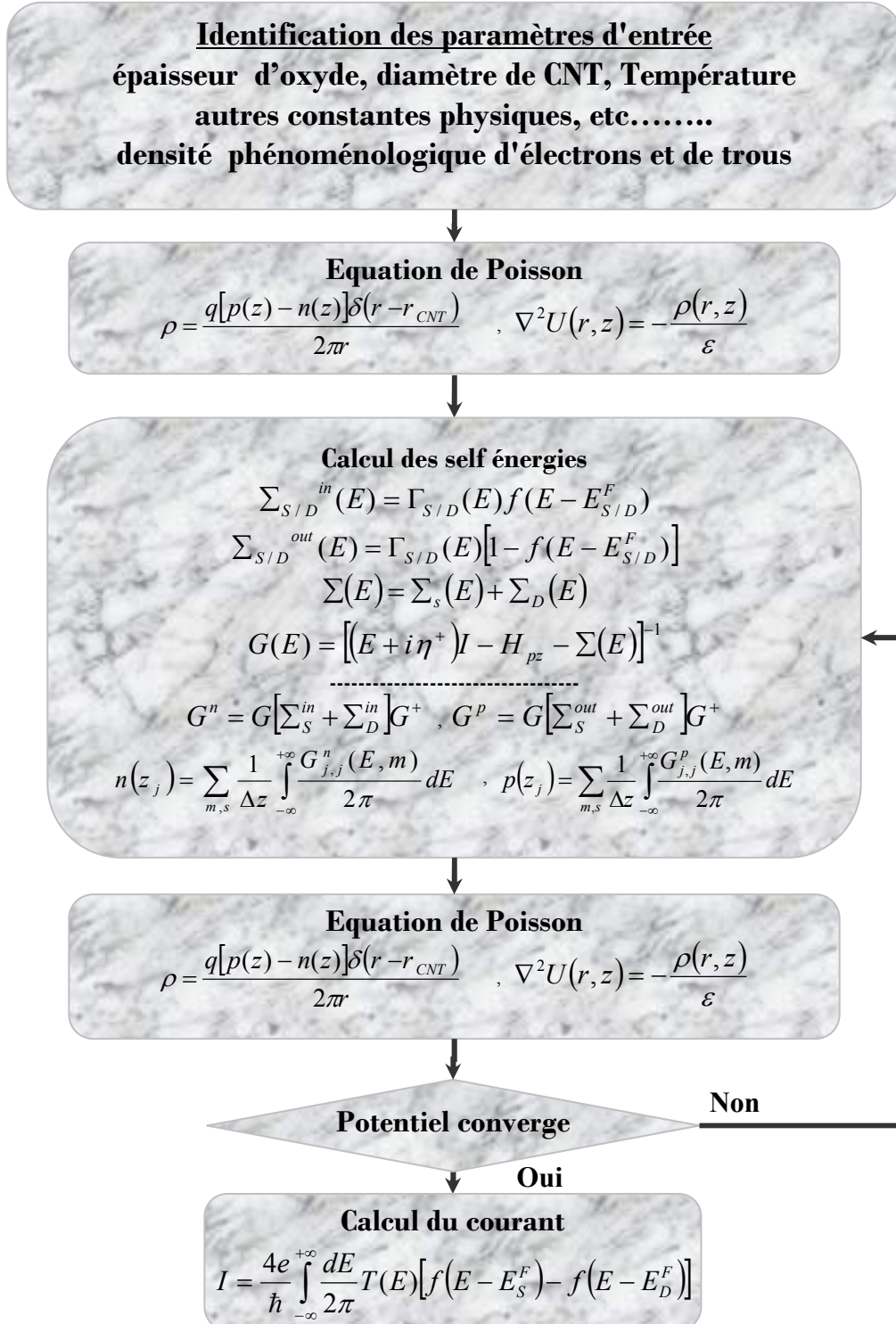


Figure IV.16 : Organigramme de la procédure numérique de la résolution du system des équations Schrödinger -Poisson.

Cette procédure s'est révélée convergente dans tous les cas, même lorsque la solution initiale choisie arbitrairement est très éloignée de la solution finale, au prix d'un grand nombre d'itérations.

IV.11 Avec interactions électron-phonon: Traitement NEGF du transport dissipatif dans le CNTFET:

VI.5.5 Relation de dispersion des phonons dans le graphène

Une démarche analogue à ce qui vient d'être fait pour la structure électronique peut être appliquée afin de trouver les relations de dispersion des phonons dans le graphène et les nanotubes. On cherche les solutions sous la forme :

$$\begin{aligned}\vec{u}_k^1 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} \vec{u}_R^1 e^{(i\vec{k}\vec{R}-\omega t)} \\ \vec{u}_k^2 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} \vec{u}_R^2 e^{(i\vec{k}\vec{R}-\omega t)}\end{aligned}$$

(4.83)

N est le nombre de mailles du réseau. \vec{u}_R^1 et \vec{u}_R^2 représentent respectivement le déplacement par rapport à l'équilibre des atomes 1 et 2 de la maille située en \vec{R} .

La relation de dispersion est obtenue en résolvant

$$\begin{pmatrix} D_{11}(\vec{k}) & D_{12}(\vec{k}) \\ D_{21}(\vec{k}) & D_{22}(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_R^1 \\ \vec{u}_R^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(4.84)

Où $D^{ij}(\vec{k})$ sont les éléments de la matrice dynamique 3×3 :

$$D^{ij}(\vec{k}) = \left[\sum_{j''} K_{ij''} - M\omega^2(\vec{k})I \right] \delta_{ij} - \sum_{j''} K_{ij''} e^{(i\vec{k} \cdot \Delta\vec{R}_{j''})}$$

(4.85)

Avec M la masse d'un atome de carbone et K la matrice 3×3 contenant les constantes de raideur utilisées pour modéliser les interactions atomiques.

La figure IV.17 illustre les différentes courbes de dispersion attendues à partir des mouvements possibles entre les deux atomes d'une maille élémentaire. Ces derniers peuvent se décomposer selon une direction longitudinale dans le plan, tangentielle dans le plan, ou enfin tangentielle hors plan. Ces mouvements se font à l'intérieur d'une même cellule pour donner les branches optiques, ou encore font interagir plusieurs cellules entre elles pour

donner les branches acoustiques. On attend donc au final six branches dont 2+2 branches correspondant à des mouvements dans le plan (TA, TO, LA, LO) et 2 branches pour des mouvements hors plan (ZA, ZO).

La figure (IV.18) montre un des premiers résultats du calcul des branches de dispersion des phonons $\omega(\vec{k})$ basé sur l'équation (4.84) en considérant les quatre plus proches constantes de raideur. Étant donné le nombre de branches, celles-ci sont représentées en découpant la structure à 3 dimensions selon les axes reliant les points de haute symétrie. On distingue bien trois

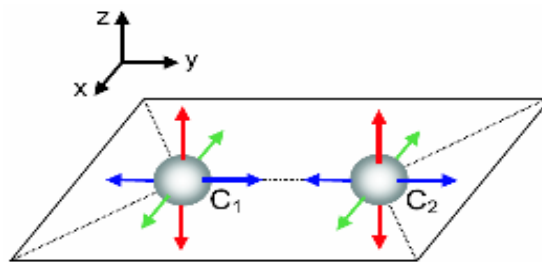


Figure IV.17 : Deux atomes de carbone d'une maille élémentaire. Les mouvements entre atomes peuvent se décomposer sur les directions longitudinal, tangentielle dans le plan et dans la direction tangentielle hors plan.

branches acoustiques qui prennent leur origine au point Γ ainsi que trois autres branches optiques. Les branches acoustiques et optiques correspondant à une vibration des atomes hors plan se distinguant par une relation de dispersion en k^2 .

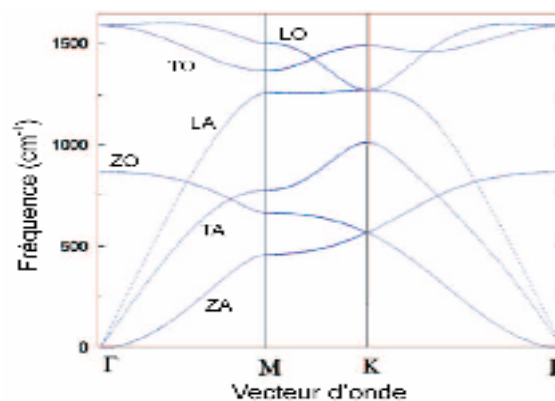


Figure IV.18 : Branches de dispersion des phonons dans le graphène .les branches longitudinales, transverses, optiques ou acoustiques portent respectivement les lettres L, T, O ou A. La lettre Z est utilisée pour les branches liées à des mouvements hors plan.

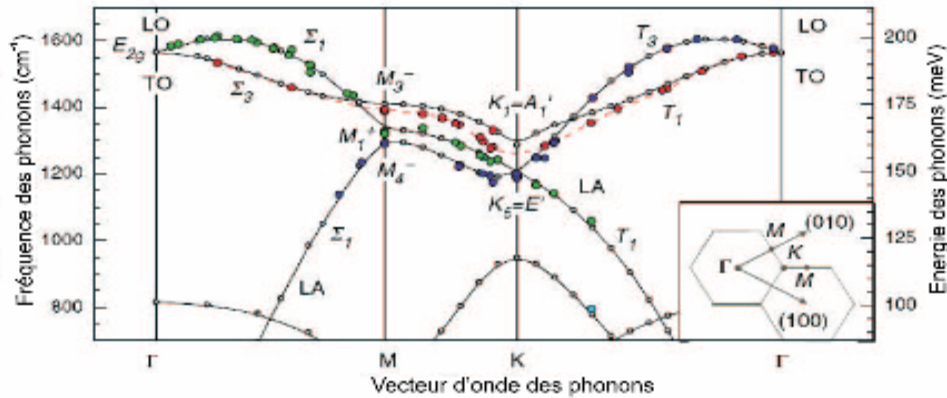


Figure IV.19 : Branches de dispersion des phonons dans le graphite obtenues par diffusion inélastique de rayons X (ronds pleins) et calculs ab initio (ronds creux). Les phonons optiques E_{2g} et au niveau des points Γ et K se couplent fortement aux états électroniques, ce qui se traduit par un abaissement des fréquences.

Paradoxalement, les relations de dispersion des phonons dans le graphite sont encore aujourd'hui un sujet de recherche intense, notamment pour les phonons optiques où les données expérimentales manquent et cela particulièrement sur la branche K-M. Récemment, Maultzsch et al [117] ont cependant réussi à apporter de nouvelles informations expérimentales sur cette branche de symétrie, montrant un adoucissement des fréquences de vibration bien plus important que prévu pour les phonons optiques du mode A_1 au niveau du point K à une énergie d'environ 160meV. Le même phénomène est aussi observé au niveau du point Γ . La raison évoquée, sur laquelle nous reviendrons dans la troisième partie, est la possibilité au niveau de ces points de symétrie d'un couplage très important entre ces phonons optiques et les états électroniques du niveau de Fermi. Sur les SWNTs métalliques, le courant de saturation observé est en effet expliqué par une diffusion des électrons par des phonons optiques d'énergie $\approx 160meV$ [117].

VI.5.6 Relation de dispersion des phonons dans les CNTs

De la même façon que l'on a obtenu la structure de bandes électroniques des nanotubes à partir de celle du graphène, il est possible en première approximation de donner les courbes de dispersion des phonons pour les nanotubes à partir de la relation de dispersion calculée pour le graphène. Les modes de phonons vont donc avoir des propriétés héritées de celles du graphène comme, par exemple, le fort couplage entre électrons et phonons optiques A_1 au point K pour les nanotubes métalliques. La méthode du repliement ne donne cependant pas toujours la relation correcte de dispersion, essentiellement pour les phonons de basse énergie. Une explication est la non prise en compte des effets de courbure qui entraînent par exemple le couplage entre modes qui étaient découplés dans le cas du graphène. D'autres méthodes de

calcul sont alors employées dont des méthodes ab initio. La figure (IV.20) donne un exemple de la comparaison des deux

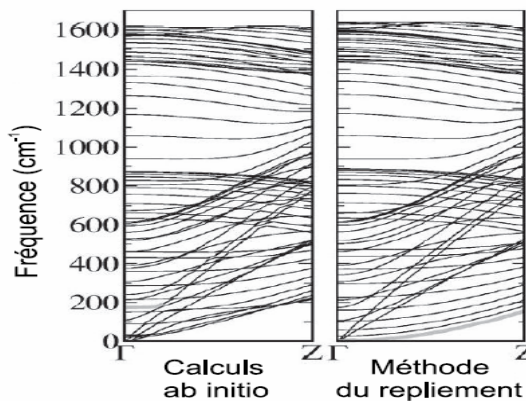


Figure IV.20 : Dispersion des phonons dans un nanotube chaise (10,10) calculée par deux méthodes différentes (ab initio et méthode du repliement). Les résultats diffèrent pour les phonons de basse énergie. La ligne grise correspond au mode de phonon radial dit respirant.

méthodes pour un nanotube chaise (10,10). Le mode dit respirant (figure 12) qui correspond aux mouvements tangentiels hors plan introduits dans la figure IV.17 est particulièrement affecté : les calculs ab initio montrent que son énergie n'est plus nulle au point Γ . Notons enfin qu'il y a ici quatre modes acoustiques : un mode transverse dégénéré (dans les deux directions perpendiculaires à l'axe du tube), un mode longitudinal et un mode de torsion.

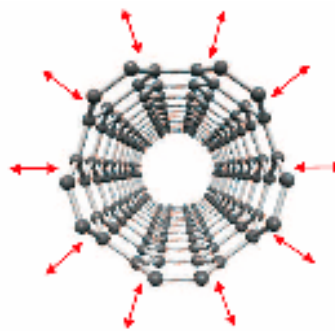


Figure IV.21 : Mode de phonon dit respirant d'un nanotube de carbone

VI.5.7 Modes de phonons dans un CNT

Les paramètres des phonons sont évidemment déterminés par la structure du réseau de nanotube. La densité de masse unidimensionnelle d'un nanotube (n,0) est :

$$\rho_{1D} = \frac{m_C n}{\Delta z} \quad (4.86)$$

m_C est la masse d'un atome de carbone, Δz la distance moyenne d'anneau définie dans l'équation (4.27). L'énergie d'un phonon de moment q (dans la dimension illimitée) est $\hbar\omega_q$. L'indice de sous-bande l du phonon est implicitement combiné avec l'indice du moment ici. La demi-amplitude a_q de vibration pour un phonon dans un tube de longueur L est [119]:

$$a_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_{1D}L\omega_q}}$$

(4.87)

Pour le réservoir dans un équilibre thermique à une température T , l'occupation des modes est donnée par la distribution de Bose-Einstein [107]:

$$n_q = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1}$$

(4.88)

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les états des électrons dans les CNTs semi-conducteurs ont une dégénérescence en double vallée avec les sous-bandes de basse énergie ayant les nombres quantiques angulaires m_{L1} et m_{L2} . La diffusion électron-phonon est régie par les règles de conservation d'énergie et de moment. Ainsi, comme le montre la figure VI.22.a, les électrons peuvent être diffusés dans la même sous-bande (intra-vallée) où ils ne changent pas leur moment angulaire, une telle diffusion est facilitée par les phonons de zone-centre ayant le moment angulaire nul ($l = 0$).

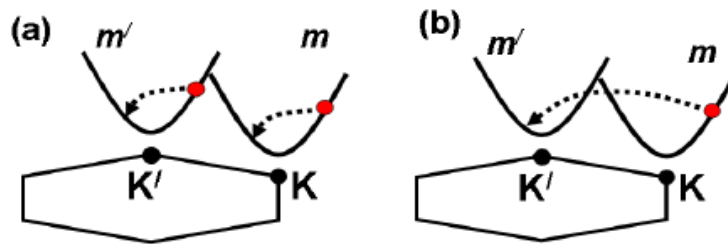


Figure IV.22 : Sous-bandes dégénérées de la plus basse énergie dans un CNT correspondant aux vallées de K et de K' de la zone de Brillouin à 2 dimensions du graphène. (a) et (b) montrent le processus de diffusion intra-vallée et inter-vallée, respectivement.

Il est également possible d'avoir une diffusion inter-vallée (figure IV.22.b) par des phonons de la zone-limite ayant le nombre quantique angulaire $l = |m_{L1} - m_{L2}|$. Il peut également y avoir une diffusion aux sous-bandes de plus haute énergie assistée par des modes de phonons avec $l \neq 0$ et $l \neq |m_{L1} - m_{L2}|$.

Nous avons effectué des calculs de dispersion de phonons en utilisant les méthodes de force constante [91]. En raison de cette analyse, l'élément de matrice pour l'interaction électron-phonon est exprimé par l'intermédiaire du potentiel de déformation, $J_1 = 6eV / \overset{0}{A}$, et l'élément de matrice sans dimensions comme suit : $|K_q| = J_1 |M_q|$

Les courbes de dispersions de phonons de la zone-centre et de la zone-limite pour les CNTs zigzags (16.0) sont représentées sur les figures IV.23.a et b, respectivement. On voit que la représentation des modes de phonons selon des polarisations fondamentales, telles que (l) longitudinale, (t) transversale, et radiale (r), ne peut être faite que pour les modes de la zone-centre comme l'indique la figure IV.23.a. D'autre part, les modes de la zone-limite tendent à être composés d'un mélange de telles polarisations fondamentales, comme le mode du $\sim 180\text{meV}$ mis en évidence dans la figure (IV.23.b), qui est principalement une combinaison des polarisations optiques longitudinales (LO) et acoustiques transversales (TA).

Il convient également de noter que la fréquence du mode de respiration radial (RBM) calculée ici est en bon accord avec la relation qui découle des calculs ab initio :

$$\hbar\omega_{RBM} \approx 28\text{meV} / d_t \quad (4.89)$$

où d_t est le diamètre du CNT en nanomètres.

La forme générale de l'hamiltonien de l'interaction électron-phonon est :

$$V = \sum_q K_q a_q \left(b_q e^{-\omega_q t + iqr} + b_q^+ e^{i\omega_q t - iqr} \right) \quad (4.90)$$

où b_q^+, b_q sont les opérateurs de création et d'annihilation pour des phonons dans le mode q . La sommation sur les moments est généralement définie par l'intermédiaire d'une intégrale sur l'espace des moments :

$$\sum_q = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^D \int d^D q \quad (4.91)$$

où D est le nombre illimité de dimensions. Pour les nanotubes de carbone, $D=1$ et les limites de l'intégrale sont $\pm \infty$.

Nous trouvons que seulement quelques modes de phonons se couplent effectivement aux électrons. Comme le montre la figure (IV.23.a), hors des modes de la zone-centre seuls le LO (190meV), LA, et le mode de respiration radial (RBM) ont suffisamment de couplage, alors

que, les modes de la zone-limite seul le mode de 180meV LO/TA a un couplage significatif. Quoique nous ayons montré des dispersions de phonons pour une grande partie de la zone de Brillouin à 1 dimension, seulement celles près de la zone-centre (c.-à-d: $q \approx 0$) sont impliquées dans le transport d'électrons.

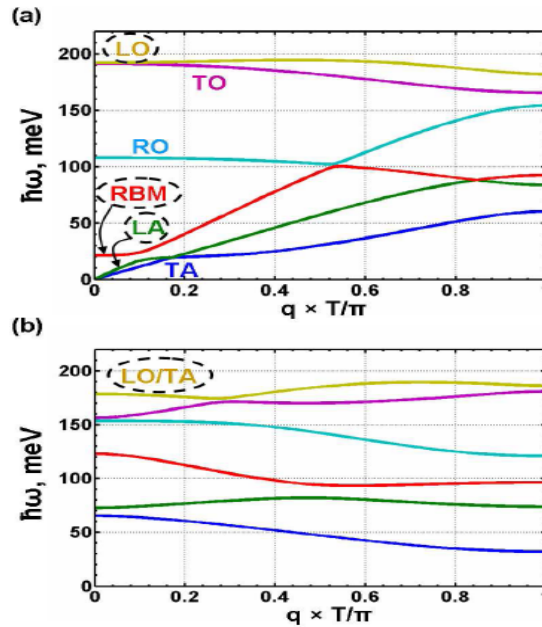


Figure IV.23 : Energie de dispersion des modes de phonons dans un CNT (16.0) : a) phonons de la zone-centre qui permettent la diffusion intra-vallée, b) phonons de la zone-limite qui permettent la diffusion inter-vallée. Les modes qui se couplent effectivement aux électrons sont indiqués par les cercles en pointillés. Les phonons de la zone-limite se composent d'un mélange de polarisations fondamentales.

Dans cette région de la zone de Brillouin, tous les modes optiques se trouvent avoir une énergie de dispersion constante tandis que le mode acoustique a une dispersion linéaire. Ainsi, dans cette étude tous les modes optiques appropriés pour le transport d'électrons sont considérés moins dispersif avec une énergie constante $\hbar\omega_{OP}$, et le mode LA de la zone-centre est considéré comme étant linéaire avec, $\omega_{AP} = v_a q$, où v_a est la vitesse de son de ce mode. L'élément de matrice d'interaction pour les phonons acoustiques est approximé par une fonction linéaire $|K_q| = \tilde{K}(l)q$.

VI.5.8 Traitement NEGF du transport dissipatif dans le CNTTFET

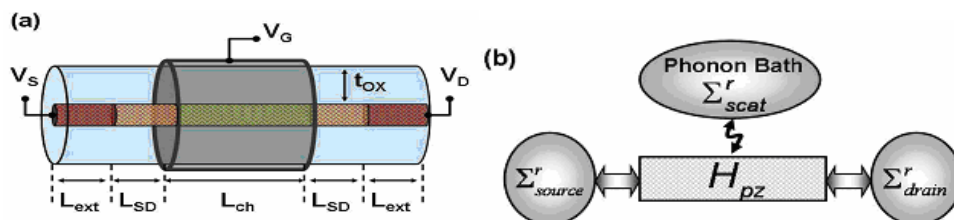


Figure IV.24 : (a) Structure du dispositif avec la grille entourant le nanotube, (b) modèle de NEGF avec couplage de phonons.

La détermination de la force de couplage électron-phonon (e-ph) est effectuée à l'aide des calculs de liaisons fortes ainsi que les techniques de premiers principes. Il a été démontré que l'influence de la diffusion des phonons sur le fonctionnement du dispositif dépend non seulement des modes de phonons et du couplage e-ph, mais également de la géométrie du dispositif.

Par conséquent, afin de déterminer l'impact de la diffusion des phonons sur le fonctionnement du transistor à base de CNT, les calculs ci-dessus doivent être faits dans le cadre de la géométrie spécifique du dispositif. Ainsi, un simulateur du dispositif basé sur le transport dissipatif quantique qui traite rigoureusement les effets de la diffusion des phonons est essentiel pour la bonne évaluation des caractéristiques du transistor à CNT, et pour avoir une compréhension plus profonde du transport de porteurs à l'échelle nanométrique.

Cette partie décrit le traitement détaillé de la diffusion des phonons dans des transistors CNT-MOSFET utilisant le formalisme NEGF (approximation d'auto-cohérence de Born (SCBA)), ainsi que, la détermination rigoureuse des modes de phonons et leur couplage e-ph dans les CNTs en utilisant les méthodes de force constante [91].

IV.5.4.1 Diffusion électron-phonon

La diffusion e-ph est traitée dans l'approximation d'auto-cohérence de Born (SCBA). Dans ce cas, la fonction de Green $G(E)$ dans l'équation (4.25) et la self-énergie de diffusion $\Sigma_{scat}(E)$ dans l'équation (4.26) doivent être déterminées de façon auto-cohérente. Dans ce paragraphe, on décrit le formalisme NEGF de la diffusion des porteurs due aux phonons optiques et acoustiques. Les fonctions de diffusion (in/out) des électrons dans un anneau i de la sous-bande m' et la sous-bande m sont d'après Jing Guo et al [107]:

$$\Sigma_{scat}^{in}(i, i, m, E) = D_0(n_\omega + 1)G^n(i, i, m', E + \hbar\omega) + D_0n_\omega G^n(i, i, m', E - \hbar\omega) \quad (4.92)$$

$$\Sigma_{scat}^{out}(i, i, m, E) = D_0(n_\omega + 1)G^p(i, i, m', E - \hbar\omega) + D_0n_\omega G^p(i, i, m', E + \hbar\omega) \quad (4.93)$$

Nous avons utilisé l'approximation d'interaction locale en écrivant les fonctions de diffusion (in/out) en supposant qu'ils soient diagonaux. Dans les équations (4.92) et (4.93), le premier terme correspond aux processus médians d'émission de phonons tandis que le

deuxième terme à l'absorption de phonons (figure IV.22). La partie imaginaire de la self-énergie, liée au niveau d'élargissement est donnée par:

$$\Sigma_{scat}^{in}(E) = -\frac{i}{2}\Gamma_{scat}(E) = -\frac{i}{2}[\Sigma_{scat}^{in}(E) + \Sigma_{scat}^{out}(E)]$$

(4.94)

La partie réelle de la self-énergie se manifeste par un déplacement des niveaux d'énergie et se calcule en utilisant la transformée de Hilbert :

$$\Sigma_{scat}^{in} = p \int \frac{dE' \Gamma_{scat}(E')}{2\pi E - E'}$$

(4.95)

Afin de simplifier les calculs et parce que les estimations suggèrent une faible influence de la partie réelle de la self-énergie d'interaction e-ph, on néglige cette partie réelle [91]. Pour la diffusion des phonons optiques, la constante de couplage D_0 est :

$$D_0 = \frac{\hbar |K_0|^2}{2\rho_{1D}\omega_0\Delta z}$$

(4.96)

Pour la diffusion élastique, c'est-à-dire dans le cas où il est possible de négliger l'énergie des phonons, les fonctions de diffusion (in/out) sont:

$$\Sigma_{scat}^{in}(i, i, m, E) = D_{el} G^n(i, i, m', E)$$

(4.97)

$$\Sigma_{scat}^{out}(i, i, m, E) = D_{el} G^p(i, i, m', E)$$

(4.98)

Dans ce cas, il n'est pas nécessaire de négliger la partie réelle de la self-énergie, et son expression complète est :

$$\Sigma_{scat}(i, i, m, E) = D_{el} G(i, i, m', E)$$

(4.99)

Pour la diffusion des phonons acoustiques, la constante de couplage est :

$$D_{el} = \frac{\tilde{K}_a^2 k_B T}{\rho_{1D} v_a^2 \Delta z}$$

(4.100)

IV.5.4.2 Traitement numérique du transport dissipatif

VI.5.4.2.3 Traitement de la diffusion des phonons optiques

La détermination des fonctions de diffusion (in/out), équations (4.92) et (4.93), pour la diffusion de phonons optiques exige la connaissance des fonctions de corrélation des électrons et des trous; spécifiquement, les éléments diagonaux d'énergie-résolue de ces fonctions $G_{j,j}^n(E)$ et $G_{j,j}^p(E)$. Il faut noter que seulement les éléments diagonaux sont nécessaires puisque dans l'approximation d'interaction locale, les fonctions de self-énergie de diffusion sont diagonales. Alors, nous utilisons la procédure auto-cohérente suivante pour déterminer $G(E)$ et $\Sigma_{scat}(E)$ [95]:

- 1**) Commencer par des distributions connues de l'énergie résolue $G_{j,j}^{n/p}(E)$: distributions balistiques.
- 2**) Déterminer $\Sigma_{scat}^{in}(E)$, $\Sigma_{scat}^{out}(E)$ et $\Sigma_{scat}(E)$ en utilisant les équations (4.92), (4.93), et (4.33), respectivement, pour une énergie donnée E .
- 3**) Déterminer de nouveau $G(E)$ en utilisant l'équation (4.25).
- 4**) Maintenant, déterminer les nouvelles $G^n(E)$ et $G^p(E)$ à partir des équations (4.35) et (4.36), respectivement.
- 5**) Répéter les étapes 2 à 4 pour toutes les énergies et construire de nouvelles distributions $G_{j,j}^{n/p}$.
- 6**) Répéter les étapes 1 à 5 jusqu'à ce que le critère de convergence soit satisfait. Nous utilisons la convergence de la densité de porteurs induite, équation (4.94) comme critère.

Dans ces calculs, il y a un besoin répétitif pour l'inversion d'une grande matrice, l'équation (4.25), qui peut être une tâche de calcul prohibitif. Toutefois, nous avons seulement besoin de quelques diagonales de l'éventuelle solution comme la diagonale principale de $G^{n/p}$ pour le calcul de la diffusion et des densités de porteurs, et des diagonales supérieures et inférieures de G^n pour le calcul du courant dans l'équation (4.42). La détermination de ces diagonales spécifiques, dans le schéma des liaisons fortes entre les plus proches voisins, peut être effectuée en utilisant les algorithmes efficaces. En conclusion, il convient de noter que la précision globale de la procédure de convergence de Born décrite ci-dessus est confirmée à la fin par l'observation de la continuité du courant dans tout le dispositif.

VI.5.4.2.4 Traitement de la diffusion des phonons acoustiques

Similaire à la méthode précédente, la diffusion des phonons acoustiques est traitée par la procédure suivante:

- 1)** Commencer avec les distributions connues de l'énergie-résolue $G_{j,j}^{n/p}(E)$: les distributions balistiques.
- 2)** Déterminer $\Sigma_{scat}^{in}(E)$, $\Sigma_{scat}^{out}(E)$ et $\Sigma_{scat}(E)$ en utilisant les équations (4.97), (4.98), et (6.), respectivement, pour une énergie donnée E.
- 3)** Déterminer de nouveau G(E) utilisant l'équation (4.25).
- 4)** Déterminer les nouvelles $G^n(E)$ et $G^p(E)$ à partir des équations (4.35) et (4.36), respectivement.
- 5)** Répéter les étapes 2 à 4 jusqu'à ce que le critère de convergence soit satisfait. Ici, nous utilisons la convergence de $G^n(E)$.
- 6)** Répéter les étapes 2 à 5 pour toutes les énergies et construire de nouvelles distributions de $G_{j,j}^{n/p}$.
- 7)** Répéter les étapes 1 à 6 jusqu'à ce que le critère de convergence soit satisfait. Nous utilisons la convergence de la densité de porteurs induite, équation (4.94) comme critère.

Pour le cas de la diffusion des phonons acoustiques nous avons introduit une boucle supplémentaire de convergence (étape 5), contrairement à la diffusion inélastique, ici le calcul auto-cohérent de Born pour une énergie donnée est découplé de celui de toutes les autres valeurs d'énergie. De façon similaire à la diffusion des phonons optiques, nous utilisons les algorithmes efficaces pour les calculs numériques, et confirmons la précision globale de la procédure de convergence en suivant la continuité du courant dans tout le dispositif.

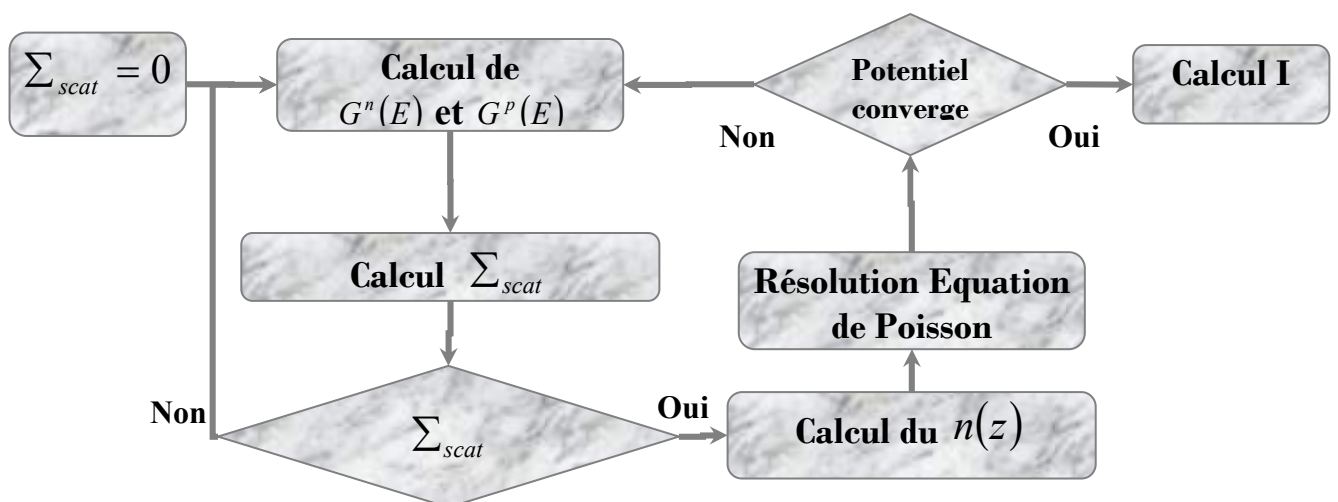


Figure IV.25 : Organigramme de la résolution des équations Schrödinger –Poisson.

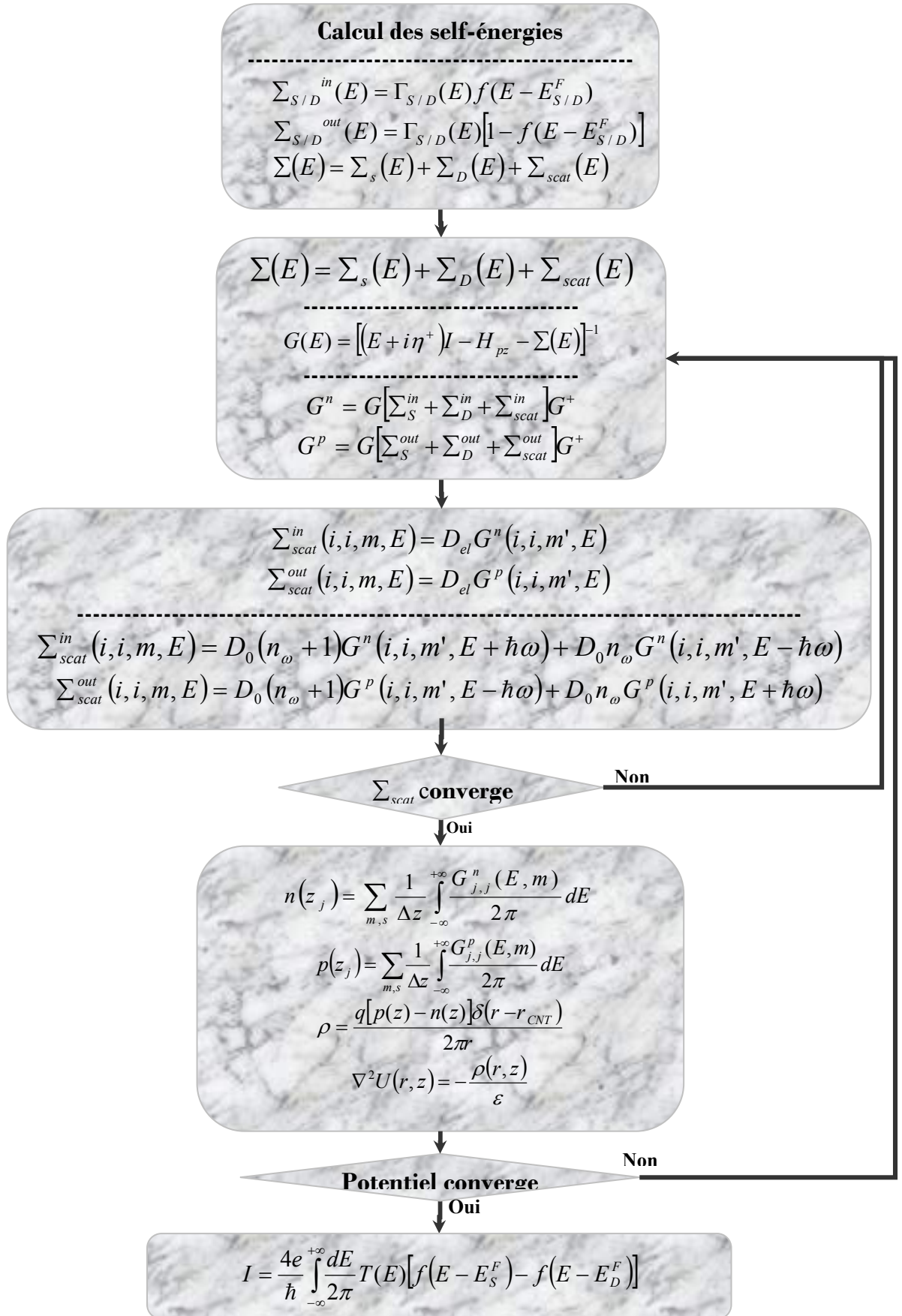


Figure IV.26 : Organigramme de la procédure numérique de la résolution du système des équations Schrödinger -Poisson.

IV.12 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une procédure de modélisation du transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone basée sur le formalisme des fonctions de Green hors équilibre. L'approche de l'espace des modes est adoptée pour décomposer l'hamiltonien et ainsi obtenir un gain significatif du temps de calcul. Enfin, au vu des dernières publications, il semblerait qu'un transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone ne soit pas totalement balistique. Aussi, a-t-on intégré dans notre modèle la diffusion des phonons acoustiques et optiques.

CHAPITRE V :

Résultats et discussion

V.4 Introduction

De nombreuses propriétés des nanotubes peuvent être dérivées de celles du graphène, en particulier la structure de bandes dont il sera question plus loin. Leur structure géométrique est décrite dans la base des vecteurs définissant le maillage hexagonal du graphène. Mais le confinement quantique confère aux nanotubes leurs propriétés particulières, foncièrement différentes du graphène [10].

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats des simulations de l'effet des différents paramètres (épaisseur de l'oxyde de grille, diamètre du CNT, température et aussi l'effet des phonons) sur les performances du transistor CNTFET (courant de drain, tension drain/source, tension grille/source et profils d'énergie). Nous présenterons également le profil d'énergie de sous-bandes le long du canal.

V.5 Résultats de simulations

V.2.4 Structure électronique du CNT

Construction de la première zone de Brillouin dans le cas des nanotubes achiraux

Nous allons construire la première zone de Brillouin (PZB) des nanotubes à partir de celle du graphène. La construction de la première zone de Brillouin est particulièrement simple dans le cas des familles des nanotubes chaise et zigzag. La figure V.1 présente la première zone de Brillouin pour un nanotube chaise (14,14) et un nanotube zigzag (14,0). Les segments sont indexés dans ce cas particulier par $\mu = -n + 1, \dots, n$. A cause de la symétrie de la zone de Brillouin du graphène, les segments d'indices μ et $-\mu$ sont équivalents pour $0 < \mu < n$.

Dans le cas des nanotubes chaise (n,n)(figure V.1.a), la composante \vec{k}_\perp est dans la direction de l'axe ΓM . Dans la direction de \vec{k}_z , les bornes de la première zone de Brillouin sont $-\pi/a_0$ et π/a_0 . Notons que le segment d'indice $\mu = n$ contient toujours un point de haute symétrie M du graphène en $k_z = 0$ et deux points K et K' en $k_z = \pm 2\pi/3a_0$.

Pour les nanotubes zigzag (n,0) (figure V.1.b), \vec{k}_\perp est dans la direction de l'axe ΓK . Dans la direction perpendiculaire \vec{k}_z , les limites de la zone sont $-\pi/\sqrt{3}a_0$ et $\pi/\sqrt{3}a_0$. Remarquons cette fois que la première zone de Brillouin d'un nanotube zigzag ne contient pas nécessairement un point K. Ce n'est vrai que si $|\Gamma K| = 4\pi/3a_0$ est un multiple de $K_\perp = 2\pi/na_0$, i.e. si n est un multiple de 3.

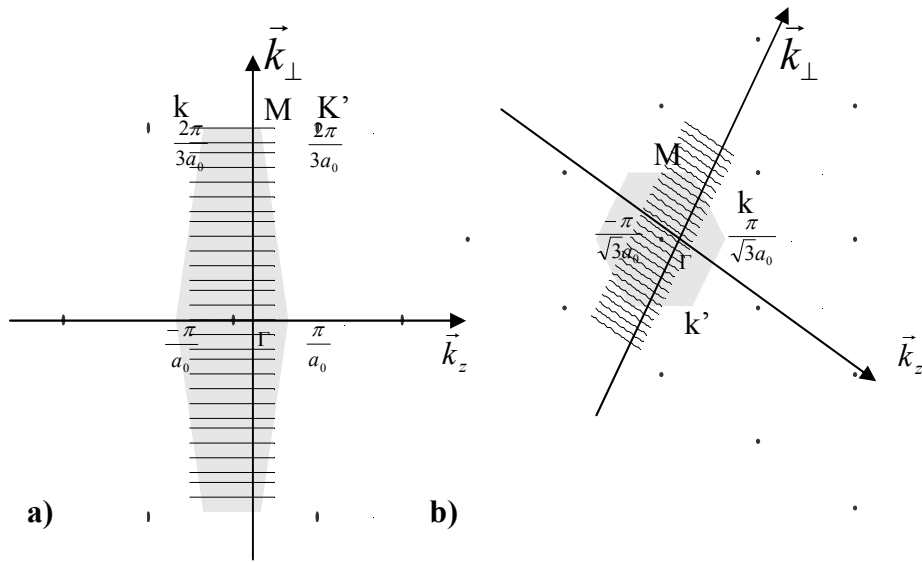


Figure V.1 : Première zone de Brillouin des nanotubes a) chaise (14,14) et b) zigzag (14,0) superposée à celle du graphène. Pour le tube (14,14), on a $N=28$ soit 28 segments dont seulement 15 ne sont pas équivalents par symétrie. Pour le tube (14,0), $N=28$ soit 28 segments dont 15 non équivalents.

Cas des nanotubes chiraux

Les nanotubes chiraux possèdent en général une PZB plus étendue et aux symétries moins nombreuses (figure V.2) puisque \vec{k}_\perp ne correspond pas à une direction privilégiée du graphène. En effet, on a vu que l'angle entre \vec{k}_\perp et $\overrightarrow{\Gamma K_\perp}$ est en fait l'angle chiral θ , et pour un vecteur chiral $0 < \theta < \frac{\pi}{3}$.

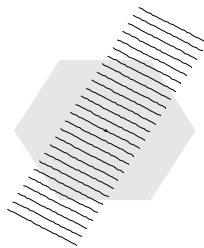


Figure V.2 : Première zone de Brillouin du nanotube (12,8) et famille de droites définissant les valeurs permises pour le vecteur d'onde k .

Structure de bandes du graphène et des nanotubes de carbone

Dans la maille élémentaire du graphène, chacun des deux atomes de carbone apporte un électron de valence $2p_z$ de sorte que le graphène présente deux bandes π d'énergie E^- et E^+ , respectivement bande de valence et bande de conduction.

La figure V.1 représente l'allure de la dispersion dans le plan (k_x, k_y) . Le point Γ de la première zone de Brillouin du graphène est le point de plus haute énergie de la bande de conduction. Au niveau des points K, les bandes de valence et de conduction sont dégénérées en énergie au niveau de Fermi ($\varepsilon = 0$) : ces points apparaissent en haut sur la figure V.3. Au voisinage de ces points, la dispersion a une forme quasi-conique (les courbes iso-énergie sont quasiment des cercles) : la courbure de la dispersion et donc la densité d'états s'annulent aux points K. Le graphène est ce qu'on appelle un semi métal, ou semi-conducteur à gap nul.

La figure V.3 représente la structure de bandes des nanotubes chaise (18,18) et zigzag (12,0). La PZB du tube (18,18) étant constituée de 36 segments dont 17 paires de segments équivalents d'indices $\pm \mu$, il y a 19 bandes de valence et de conduction dont 2 sont non dégénérées et 17 doublement dégénérées. De même, la structure du tube (12,0) contient 13 bandes de valence et de conduction dont 2 sont non dégénérées et 11 doublement dégénérées.

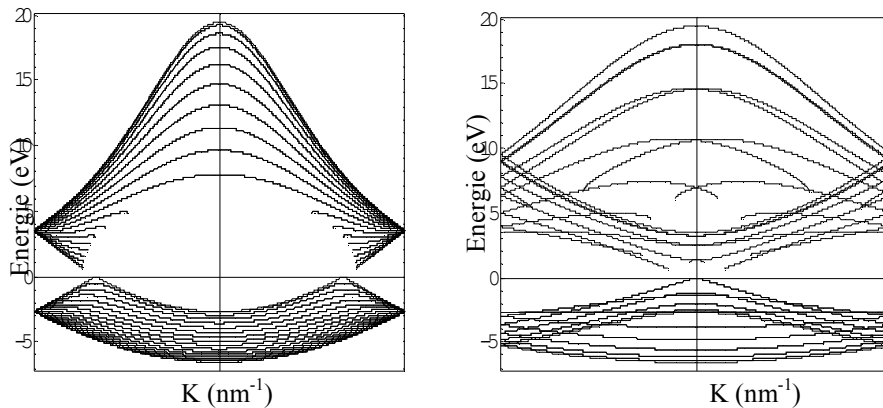


Figure V.3: Dispersion des bandes de valence (en bas) et de conduction (en haut) des nanotubes chaise (18,18) (à gauche) et zigzag (12,0) (à droite) en fonction de l'énergie.

La figure V.4 représente la courbe de dispersion du graphène, la bande de conduction est maximale et la bande de valence est minimale. Au centre de la figure, se trouve le point Γ de la première zone de Brillouin du graphène. Les points d'énergie nulle correspondent aux points K et K'.

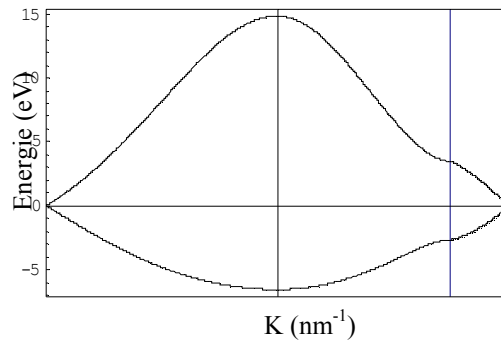


Figure V. 4 : Structure de bandes du graphène dans la zone de Brillouin

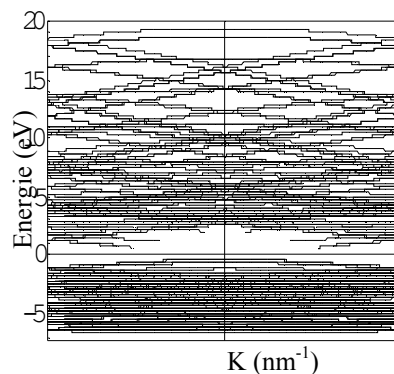


Figure V.5 : Structure de bandes dans la zone de Brillouin d'un nanotube de carbone (12,8) (Relations de dispersion).

V.2.5 Résultats de simulation des propriétés électroniques d'un CNTFET sans interactions électron-phonon

Dans cette section, nous allons présenter et discuter les résultats de simulation du profil énergétique et des caractéristiques I-V du transistor CNTFET sans interaction électron-phonon.

Le dispositif simulé est un CNTFET à grille cylindrique et contacts ohmiques (figure IV.9.a). Il est modélisé dans le simulateur en fixant le potentiel à l'interface et en imposant la densité de charge dans les mailles adjacentes aux contacts. Ces portions de tubes dopées ont une longueur de 20nm. Le CNTFET simulé est de type n et le nanotube est un zigzag (16,0) de 1.5nm de diamètre et de 100 nm de longueur de canal. On considère une grille cylindrique composée d'un oxyde de forte permittivité (HfO_2 de $\epsilon_r = 16$).

Les simulations dans le cas du transport balistique sont effectuées en suivant les procédures décrites dans les chapitres précédents, et les résultats sont comparés à ceux obtenus dans le cas du transport dissipatif dans le CNTFET.

D'abord, nous étudions les caractéristiques du CNTFET en utilisant les nanotubes de carbone appartenant à la famille (mod (n-m, 3)=1), soit (13,0), (16,0) et (19,0) des diamètres ($d_1=1\text{nm}$, $d_2=1.25\text{nm}$ et $d_3=1.5\text{nm}$).

Les paramètres

$V_{pp} = -3.0\text{eV}$: paramètre de saut,

$T = 300\text{K}$: température du réseau

$\epsilon_{\text{ps}_{\text{oxd}}} = 16$: constante diélectrique d'oxyde de grille,

$t_{\text{oxd}} = 2.0\text{e-}9\text{m}$: épaisseur d'oxyde de grille

$N_{\text{band}} = 1$: nombre de sous-bandes,

$a = 2.5\text{e-}10\text{m}$: pas dans la direction Z

$b = 1.0\text{e-}10\text{m}$: pas dans la direction R,

$L_{\text{sd}} = 30.1\text{e-}9\text{m}$: longueur de Source/Drain

$L_g = 15.1\text{e-}9\text{m}$: longueur de la grille,

$N_{\text{sd}} = 15.1\text{e}8\text{ m}^{-1}$: concentration de dopage de la source et du drain

V.2.2.3 Profils de l'énergie potentielle le long du canal

L'évolution de l'énergie potentielle du transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone (CNTFET) pour différentes tensions de grille V_G est représentée sur la figure V.6. Nous observons la diminution usuelle de la barrière de potentiel avec l'augmentation de la tension de grille : le transistor évolue de l'état bloqué vers l'état passant. La densité électronique le long du canal pour des tensions de grille variant de 0 à 0.8 V confirme ce processus.

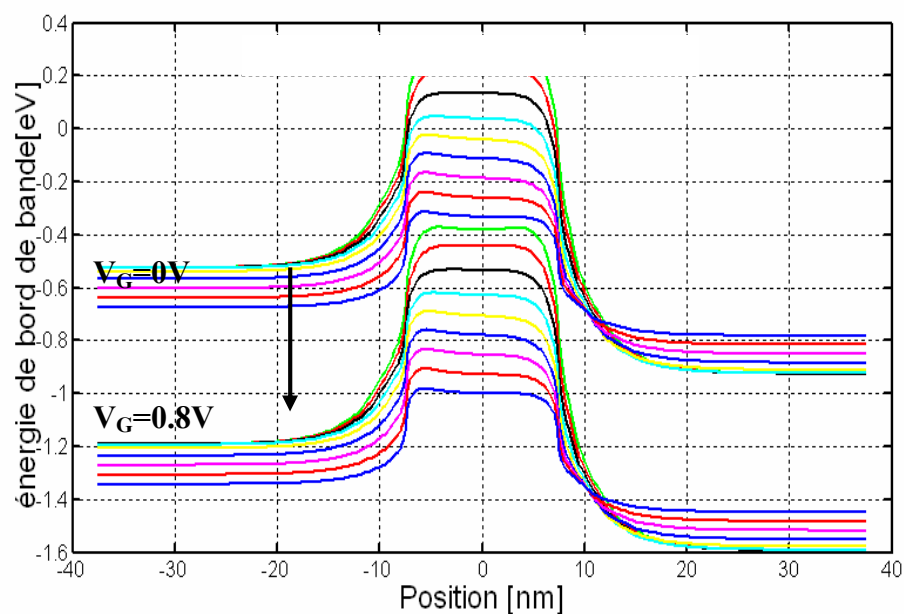


Figure V.6 : Profils de l'énergie potentielle le long du canal sous une tension de drain $V_{DS}=0.4V$. Les régions grisées représentent la source et le drain dont les niveaux de Fermi sont respectivement E_{FS} et E_{FD} . V_G varie de 0 à 0.8 V par pas de 0.1V. (CNT avec $n=16$).

Quand la tension de polarisation est appliquée au transistor, le profil d'énergie le long du canal (du drain à la source) va changer en conséquence. À ce moment, le flux de départ du courant et le courant de drain se produiront.

A faible V_G , la barrière de potentiel du canal s'oppose à la transmission d'électrons entre la source et le drain. La variation exponentielle de la densité électronique le long du canal témoigne d'un transport par effet tunnel à travers la barrière de potentiel, et permet de clairement différencier les électrons provenant de la source de ceux provenant du drain. Lorsque la tension de grille augmente, le transistor devient progressivement passant et la concentration de charges dans le canal augmente.

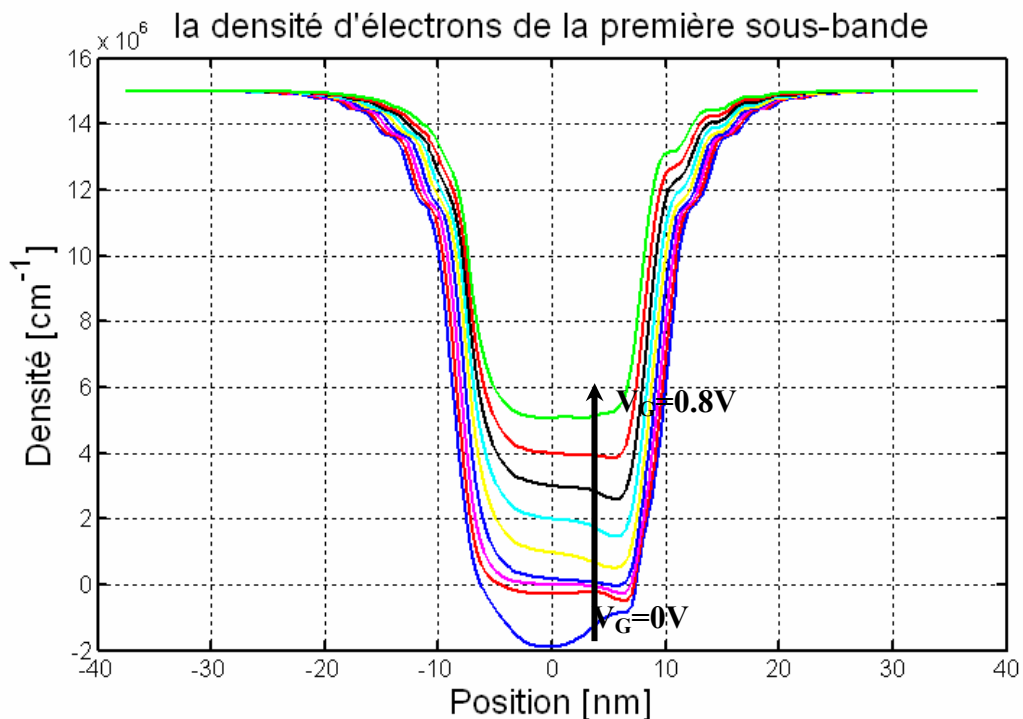


Figure V.7: Densité électronique le long du canal obtenue par le formalisme des fonctions de Green hors équilibre. A faible V_G l'évolution exponentielle du nombre de porteurs dans le canal traduit une domination de l'effet tunnel dans le transport. L'augmentation de V_G fait commuter le transistor et accroît la concentration d'électrons dans le canal. $V_{DS}=0.4V$ et V_G varie de 0 à 0.8 V par pas de 0.1V. (CNT avec $n=16$).

V.2.2.4 Influence des variations paramétriques des dispositifs CNTFETs

Pour le CNTFET, les paramètres physiques principaux sont les dimensions du canal – i.e. les dimensions du nanotube (diamètre, longueur) – la capacité de grille (C_G) et la résistance de contact entre le nanotube de carbone et les deux électrodes source et drain. Parmi ces paramètres, le diamètre du nanotube est le paramètre le plus critique et la résistance de contact aux deux électrodes joue aussi un rôle important pour déterminer les caractéristiques du transistor CNTFET.

Dans cette partie, nous analysons deux caractéristiques électriques importantes d'un CNTFET. Elles sont extraites à partir de la caractéristique $I_{DS}(V_{GS})$ comme suit :

- ❖ La tension de seuil V_{th} est définie comme étant la tension V_{GS} (entre la grille et la source) pour laquelle le transistor passe du mode bloqué au mode passant (c'est-à-dire la tension de création du canal de conduction entre le drain et la source). Lorsque la tension V_{GS} est inférieure à la tension de seuil, V_{th} il n'y a pas de courant entre le drain et la source.

- ❖ Le rapport I_{ON}/I_{OFF} : le courant I_{OFF} est le courant de fuite lorsque le transistor est bloqué ; il est mesuré lorsque V_{GS} est égal à $V_{th}/2$. Le courant I_{ON} est le courant traversant le transistor lorsque le transistor est passant.

Les caractéristiques simulées du courant de drain (I_{DS}) en fonction de V_G d'un CNTFET de longueur $L_G=10nm$ et pour une tension appliquée $V_{DS}=0,4V$ sont représentées sur la figure V.8. On observe une amélioration du courant de drain dans le CNTFET avec l'augmentation de V_G , ceci est dû à une amélioration du contrôle du canal par la grille.

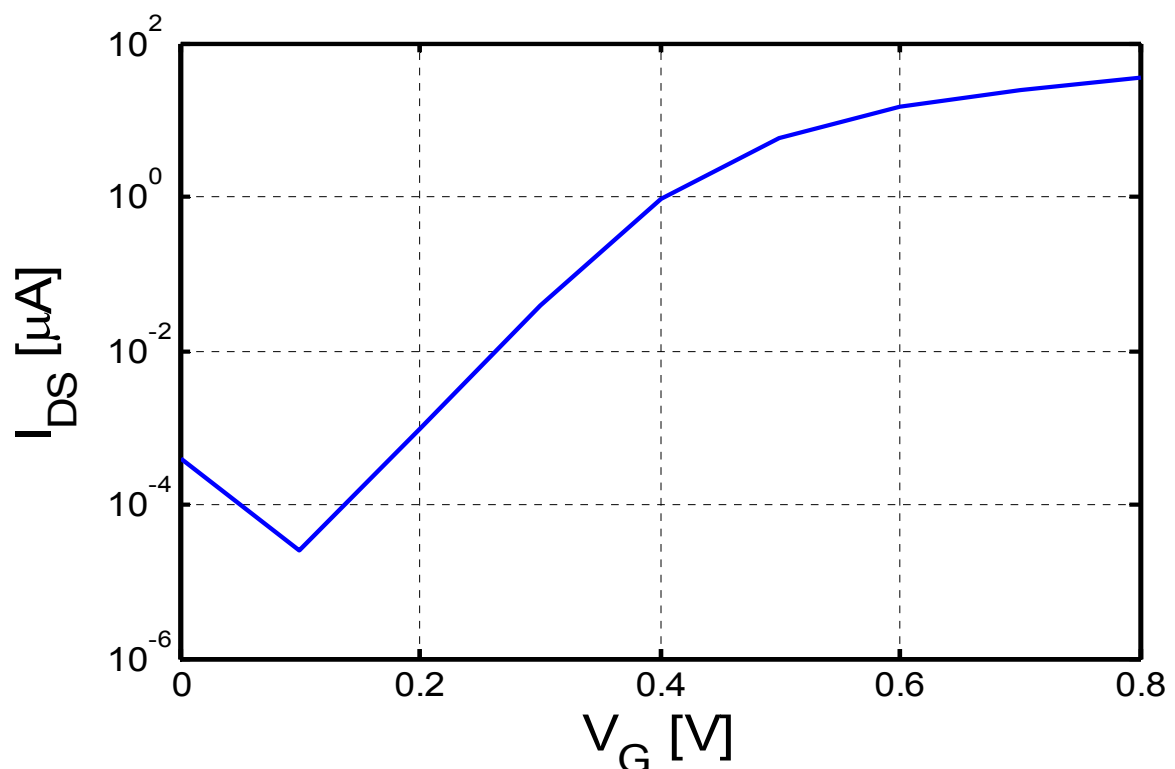


Figure V.8 : I_D - V_G d'un transistor CNTFET (13.0) dans le cas du transport balistique $V_{DS}=0,4V$.

V.2.2.2.3 Influence de la variation du diamètre

Nous avons représenté sur les figures (V.9 à 11) les caractéristiques $I_D(V_{DS})$ pour CNTFET pour 3 nanotubes de carbone ($n=13, 16, 19$) du diamètres ($d_1=1nm, d_2=1.25nm$ et $d_3=1.5nm$).

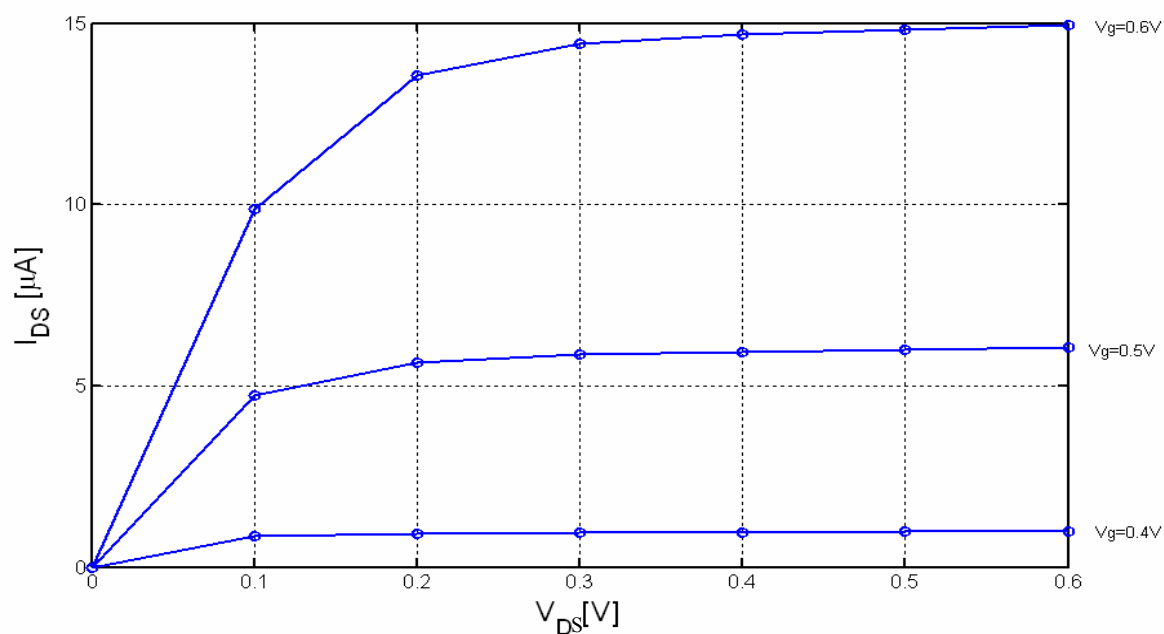


Figure V.9 : $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (13.0) dans le cas du transport balistique pour différentes valeurs de V_G .

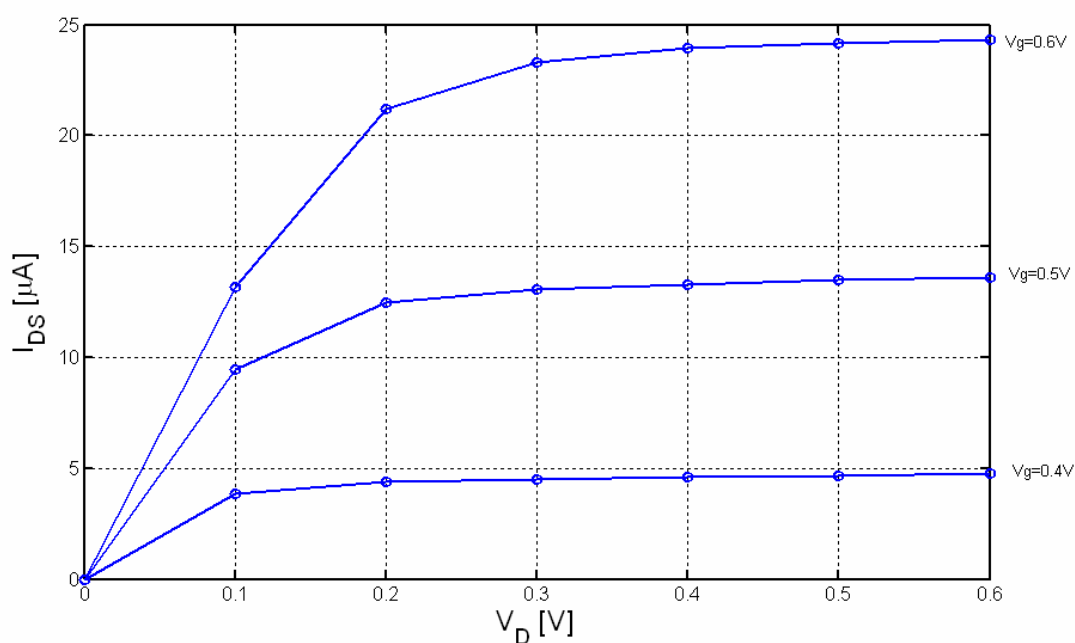


Figure V.10 : $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas du transport balistique pour différentes valeurs de V_G .

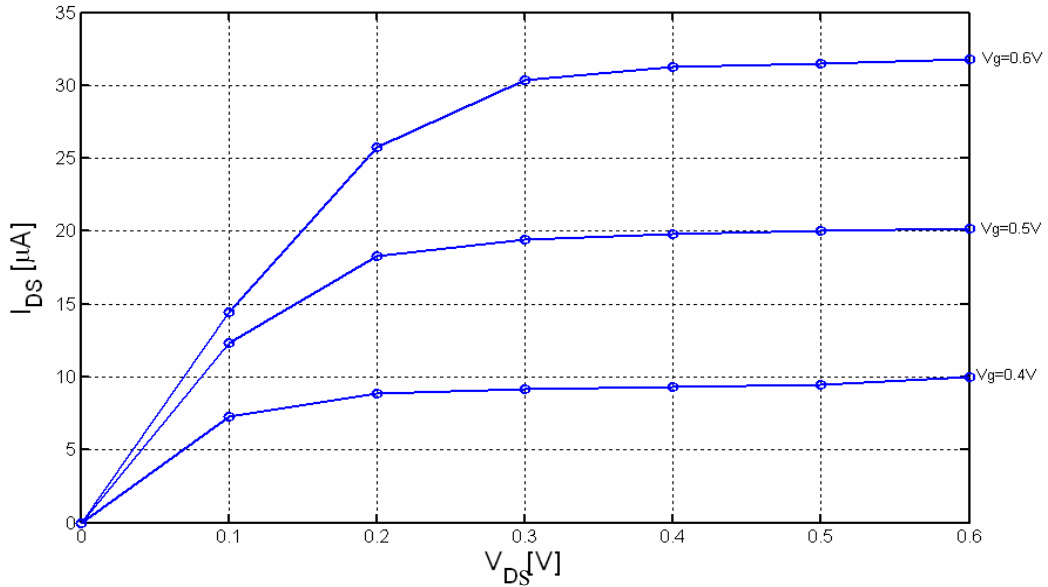


Figure V.11 : $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (19.0) dans le cas du transport balistique pour différentes valeurs de V_G .

La figure V.9 montre les caractéristiques $I_D(V_{DS})$ pour 3 valeurs de tension de grille V_{GS} , (0.4V, 0.5V, 0.6V) et pour des tensions source-drain V_{DS} variant de 0 à 0.6V. On observe une amélioration des performances avec l'augmentation de la tension de polarisation. Ceci est dû à une amélioration du contrôle du canal par la grille. Nous avons remarqué que à hautes polarisations le courant peut prendre des valeurs maximums environ de $\approx 32\mu A$.

Les figures (V.9 à 11) montrent que si on augmente le nombre de chiralité n ($n=13,16,19$) c'est-à-dire le diamètre du nanotube, le courant augmente également.

Les nouvelles générations de transistors CNTFET peuvent fonctionner dans une gamme de V_{DS} (0.5V-0.8V), ce qui meilleur que le transistor MOSFET conventionnel qui fonctionne dans une gamme de (1.1V-1.3V).

V.2.2.2.4 Influence de la variation de la température

Pour un CNTFET, la température joue donc un rôle dans la variation de la tension de seuil. L'évolution du courant de drain du CNTFET en fonction de la température est présentée dans la figure V.12. Ici, nous considérons la température de 100K comme valeur nominale et

nous cherchons à évaluer l'influence d'une augmentation (200k-300K-400k) de la température en cours d'opération.

Les performances et la fiabilité d'un CNTFET sont fortement influencées par la température. La conduction le long du canal étant due aux porteurs majoritaires, elle ne sera modifiée par la température que pour une variation de certains paramètres (mobilité des électrons, la hauteur de barrière Schottky, la vitesse de saturation, la constante diélectrique et même la résistance spécifique des contacts ohmiques).

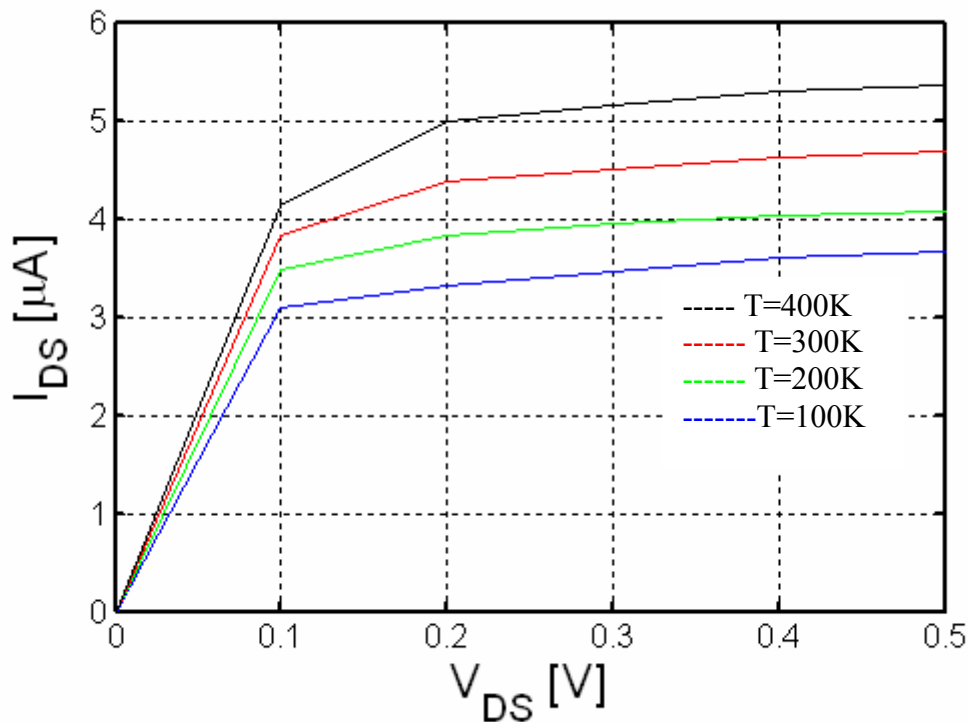


Figure V.12 : $I_{DS} - V_{DS}$ simulées pour différentes températures (100K ,200k ,300K et 400k), avec $V_{DS}=0,4V$ et V_G varie de 0 à 0,5V par pas de 0,1V.

Lorsque la température augmente de 100K à 400K, le courant I_{DS} augmente. On voit donc que la température a un impact très important sur ce paramètre. A température ambiante, le composant opère avec une pente sous le seuil S de 74,1mV/décade. Lorsque la température diminue ($T=100K$), le régime sous le seuil ne présente plus une pente constante en fonction de V_G . Ces deux courbes séparent distinctement la contribution du courant tunnel de celle du courant thermique : la valeur de I_{OFF} (courant à $V_G=0V$) augmente d'un facteur 10^3 entre 100K et 400 K.

Pour un transistor CNTFET, la longueur et le diamètre du nanotube sont les dimensions du canal et sont donc critiques pour définir les caractéristiques du CNTFET.

Les figures V.13 à 15 représentent la distribution des porteurs le long du dispositif simulé.

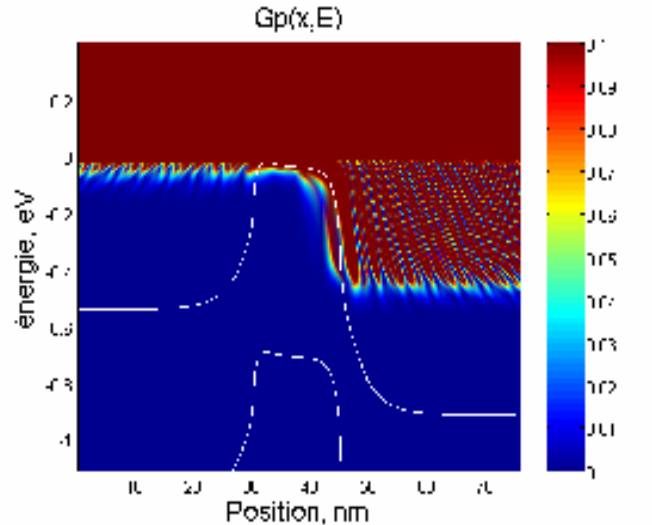


Figure V.13 : Spectre de la densité de trous pour un CNTFET (16.0)

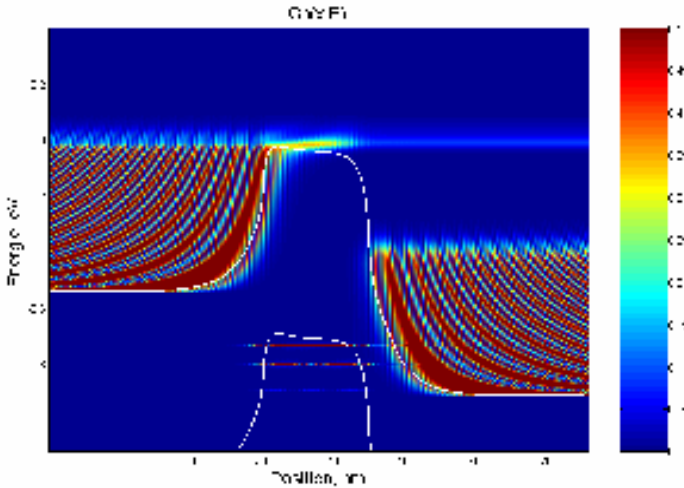


Figure V.14 : Spectre de la densité d'électrons pour un CNTFET (16.0)

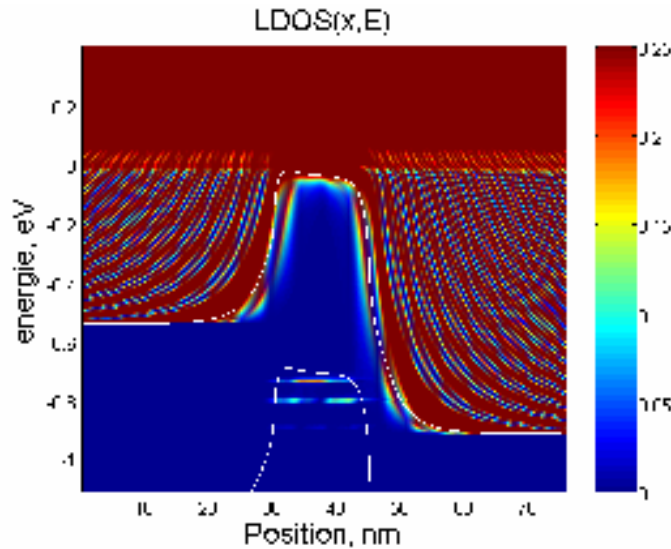


Figure V.15 : Spectre de la densité d'états pour un CNTFET (16,0).

Les CNTFETs sont très sensibles aux variations géométriques diamètre du nanotube, dimension du contact, précision du contact entre le CNT et les électrodes, qualité du matériau diélectrique et épaisseur de celui-ci. Ces variations peuvent influencer plusieurs paramètres de fonctionnement électrique du CNTFET.

V.2.6 Résultats de simulation des propriétés électroniques d'un CNTFET avec interactions électron-phonon

Les simulations dans le cas de transport dissipatif sont effectuées selon les procédures décrites dans les chapitres précédents, et les résultats sont comparés à ceux obtenus dans le cas du transport balistique. Nous étudions d'abord les effets de la diffusion des phonons sur les caractéristiques du CNTFET avec un nanotube (16,0). Les paramètres du dispositif utilisé (figure VI.9.a) pour les simulations de la diffusion des phonons optiques et acoustiques sont : $L_{ch} = 20nm$, $L_{SD} = 30nm$, $L_{ext} = 0$, $t_{ox} = 2nm$ (HfO_2 avec $\epsilon = 16$) et le dopage de source/drain $N_{SD} = 1.5/nm$. Cette concentration de dopage devrait être comparée à la densité d'atomes de carbone de $(4n/3a_{cc})$ dans un CNT zigzag (n, 0), qui est $\approx 150/nm$ dans un tube (16,0).

V.2.3.3 Diffusion des phonons acoustiques

La figure V.16 compare les résultats $I_{DS} - V_{DS}$ pour un CNTFET (16,0) dans lequel le transport est balistique avec la diffusion des phonons acoustiques. On remarque une diminution de potentiel dans le canal, due à l'interaction électron-phonon traitée. On voit que la diffusion des phonons acoustiques peut exercer un effet sur le courant du dispositif. À

$V_{GS}=0.4V$ le courant est réduit, ce qui est dû à la diffusion des phonons, à une grande polarisation c'est-à-dire a partir de $V_{GS}\geq 0.4V$. L'effet de la diffusion des phonons acoustiques devient assez faible et la réduction du courant devient faible.

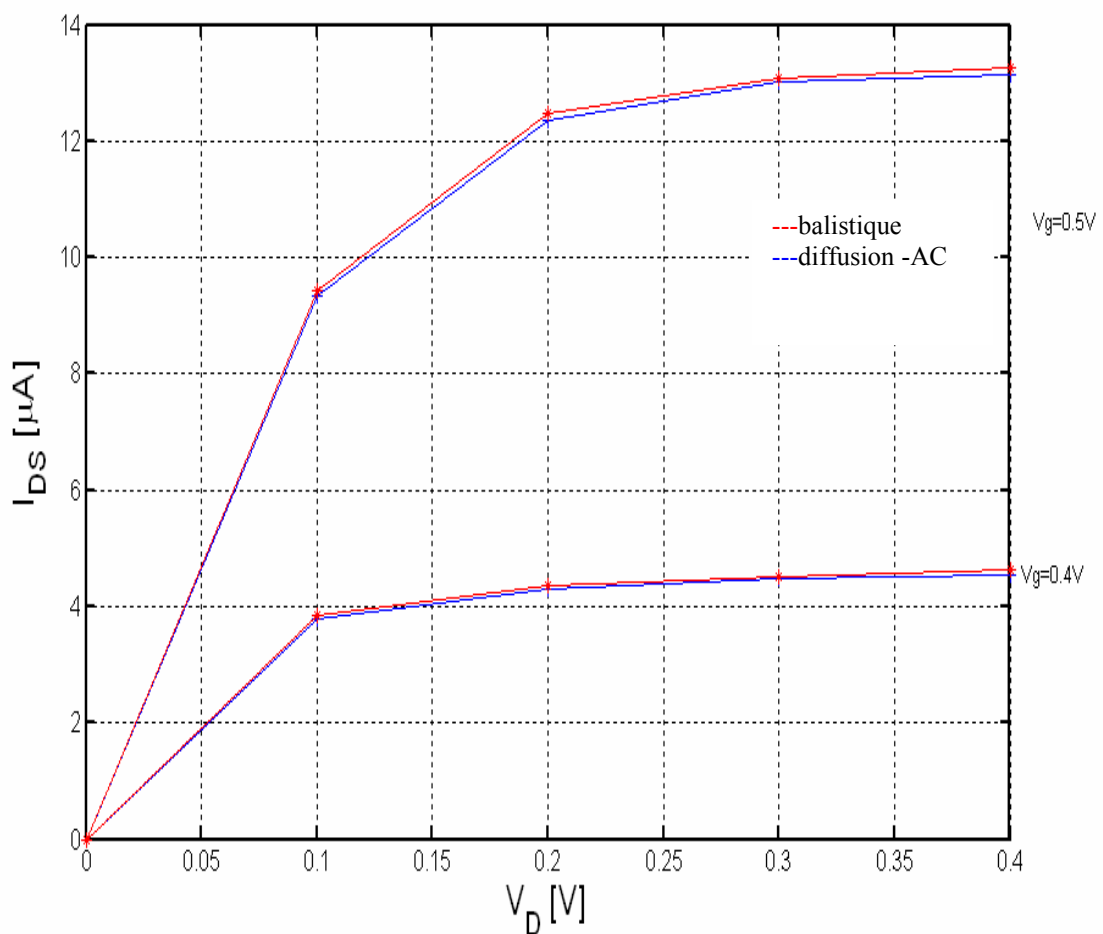


Figure V.16 : $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16,0) dans le cas du transport dissipatif et phonons acoustiques.

V.2.3.4 Diffusion des phonons optiques

La figure V.17 compare les résultats $I_{DS} - V_{DS}$ pour un CNTFET (16,0) dans lequel le transport est balistique et la diffusion des phonons optiques. On remarque une chute de potentiel dans le canal, due à l'interaction électron-phonon traité, On voit que la diffusion des

phonons optiques peut exercer un effet très appréciable sur le courant du dispositif par rapport des l'effet des phonons acoustiques. À $V_{GS}=0.3V$ le courant est réduit dû à la diffusion des phonons, à une grande polarisation c'est-à-dire a partir de $V_{GS}\geq 0.3V$. L'effet de la diffusion des phonons optiques devient fort que les phonons acoustiques et la réduction du courant devient importante.

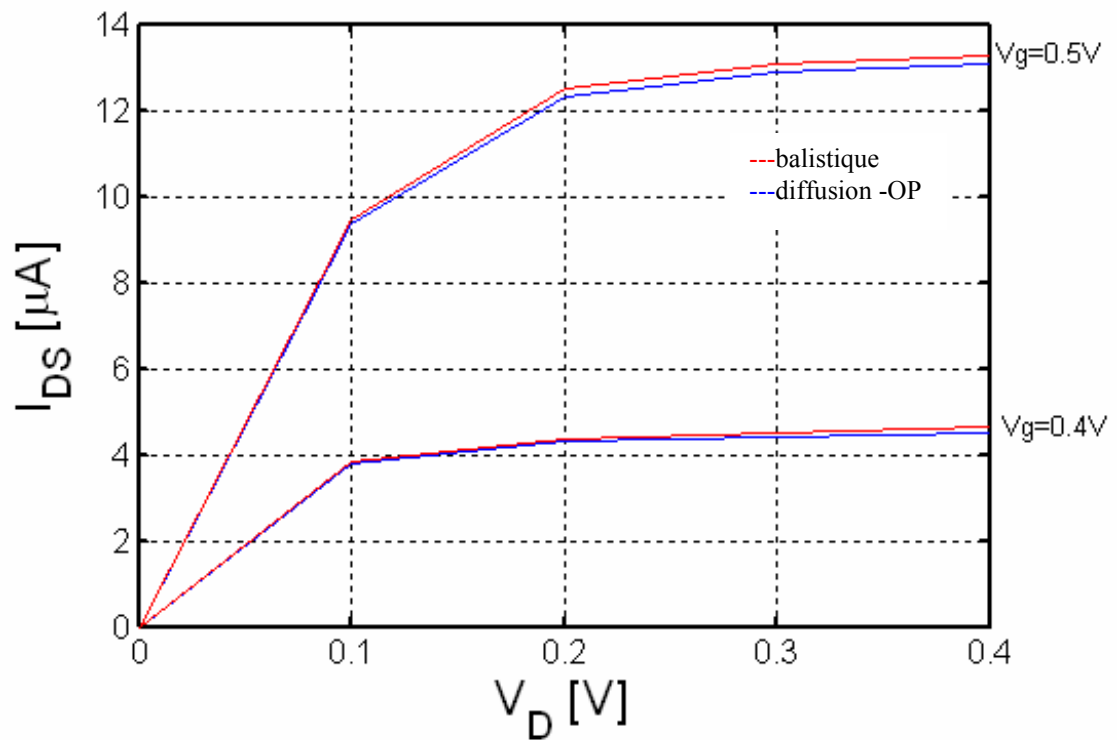


Figure V.17 : $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas du transport diffusif et la diffusion des phonons optiques.

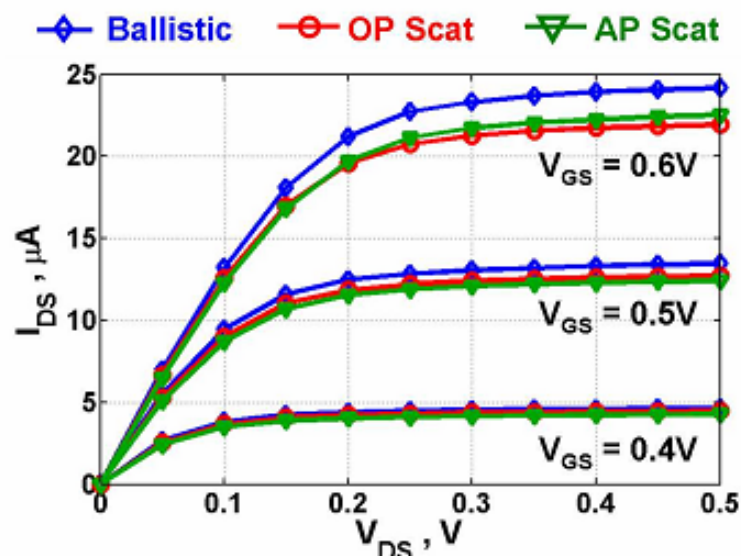


Figure V.18 : $I_{DS} - V_{DS}$ pour CNTFET (16.0) dans le cas des transports balistique et diffusif et la diffusion des phonons optiques et acoustiques (D'après Kozwatta et al et Jing Guo et al)[91].

D'après les figures V.10, V.16 et V.17, nous avons confirmé ou retrouvé des résultats déjà publiés par Kozwatta et al et Jing Guo et al [91] (figure V.18) .

V.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons ensuite analysé l'influence des variations paramétriques (diamètre du nanotube, résistance de contact) et de la température de fonctionnement au niveau des dispositifs CNTFET. Nous avons montré que la variation de la température et du diamètre du nanotube entraîne une grande dispersion des caractéristiques électroniques.

Dans la deuxième partie, nous avons analysé l'influence des phonons acoustiques et optiques sur les performances des transistors à effet de champ à base de nanotube de carbone. On remarque que la diffusion des phonons optiques peut exercer un effet assez important sur le courant du dispositif par rapport des l'effet des phonons acoustiques

Ces résultats et ces conclusions sont un premier pas vers des études plus complètes des diffusions des phonons pour la nanoélectronique à base de nanotubes. Il y aurait encore beaucoup d'autres paramètres à analyser, comme la capacité de grille, la longueur des nanotubes, etc. Ceci est possible avec l'environnement développé lorsque des modèles seront disponibles avec ces paramètres.

Conclusion générale

CONCLUSION GENERALE

Les nanotechnologies sont un secteur innovant et prometteur qui présente de nombreuses perspectives d'applications. Afin que les attentes à leur égard deviennent des réalités, un important effort de recherche fondamentale et appliquée est au préalable nécessaire. Le nanotube de carbone (CNT) est à ce jour l'un des candidats les plus prometteurs pour faire passer le transistor à effet de champ (FET) à l'échelle du nanomètre, Les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone (Carbon NanoTube Field Effect Transistors, CNTFET) figurent aujourd'hui parmi les dispositifs susceptibles de remplacer la technologie CMOS. Des recherches intensives sont en cours afin de déterminer les caractéristiques des transistors à nanotube de carbone (CNTFET).

Dans ce mémoire, nous avons simulé le transport d'électrons dans un transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone (CNTFET) en utilisant la théorie des liaisons fortes exprimée dans le formalisme des fonctions de Green hors équilibre.

On a bien détaillé les équations physiques de la modélisation (équation de Schrödinger et équation de Poisson), afin de déterminer les performances électroniques (courant de drain, tension drain/source, tension grille/source et les profils d'énergie) dans les CNTFETs.

Nous avons ensuite analysé l'influence des variations des paramètres du CNTFET (diamètre du canal, température de fonctionnement, tension drain/source, tension grille/source) sur les performance électroniques déjà étudiées dans les CNTFETs. Plusieurs résultats sont à souligner :

On remarque que l'augmentation de la température et du diamètre du nanotube impliquent une augmentation du courant, donc le CNTFET devient un meilleur conducteur de courant.

À la fin de ce mémoire, nous avons analysé l'influence des phonons optiques et acoustiques sur le CNTFET. On remarque que la diffusion des phonons optiques peut exercer un effet plus appréciable à savoir une diminution du courant de drain du dispositif que la diffusion des phonons acoustiques.

Cette étude pourrait être suivie par d'autres études de différentes structures de CNTFET (CNTFET à barrière Schottky, CNTFET dopé N/I/P,.....) et sur les défauts pouvant apparaître dans ces structures.

Bibliographie

BIBLIOGRAPHIE

- [1] T. Roussel « Simulation numérique de répliques de zéolithes en carbone : structures et propriétés d'adsorption en vue d'une application au stockage d'hydrogène » thèse de doctorat, université de Carolina Etats-Unis, 2007.
- [2] A. Allaoui, « Comportement mécanique et électrique des enchevêtrements de nanotubes de carbone », thèse de doctorat, école centrale Paris, 2005.
- [3] E. O. Sunden, « Carbon nanotubes synthesis for microsystems applications », thèse de master, institut de technologie Georgia, 2006.
- [4] D. Jayhornbaker, « Electronic structure of carbon nanotube systems measured with scanning tunnelling microscopy », thèse de Doctorat, université de Illinois Urbana, 2003.
- [5] M. J. O'Connell, « Carbon Nanotubes; Properties and Applications », thèse de PhD, université de Californie, 2006.
- [6] J. R. Hauptmann « Spin-Transport in Carbon Nanotubes » thèse de master, Université de Copenhague, 2003.
- [7] M. Meyyappan « Carbon nanotubes: science and applications » NASA Ames Research Center Moffett Field, ISBN 0-8493-2111-5 CA, 2004.
- [8] E. Flahaut, « Synthèse par voie catalytique et caractérisation de composites nanotubes de carbone métal oxyde poudres et matériaux denses » thèse de doctorat, université Paul Sabatier de Toulouse, 1999.
- [9] B. Vergne, « Mise en forme de composites nanotubes de Carbone/Alumine et modélisation de leur conductivité thermique », thèse de doctorat, université de Limoges, 2007.
- [10] M. Moreno, « Synthèse en phase gazeuse de nanoparticules de carbone par plasma hors équilibre » thèse de doctorat, école des mines de Paris, 2006.

- [11] J. M. Chehab, « Les nanotubes de Carbone dans le domaine médical » GUILLAUME SAINT-PIERRE, 2007/2008.
- [12] M. Benabdesselam, « Propriétés thermoluminescentes du diamant CVD. Applications à la dosimétrie des rayonnements ionisants », thèse de doctorat, université de Toulouse III, 2007.
- [13] D. T. Trinh, « Portes logiques à base de CNTFETs –Dispersion des caractéristiques et tolérance aux défauts », thèse de doctorat, INP Grenoble, 2008.
- [14] V. Magnin, « contribution à l'étude et à l'optimisation de composants optoélectroniques », thèse de doctorat, université de Lille, 1998.
- [15] P. Avouris, « Carbon nanotube electronics », *Chemical Physics* 281 (2002), pp.429–445
- [16] F. Dalmas, « Composites à matrice polymère et nanorenforts flexibles : propriétés mécaniques et électriques », thèse de doctorat, INP Grenoble, 2005.
- [17] L. L. Ouellette, « Chemical and biological sensing with carbon nanotubes in solution », thèse de PhD, université de Cornell, 2008.
- [18] J. P. Cleuziou, « Propriétés de transport électronique de nanotubes de carbone : des nanotubes hybrides au nano-SQUID », thèse de doctorat, université de Toulouse, 2007.
- [19] P. Simonis « Etude de surfaces de graphite et de nanotubes de carbone, par microscopie à force atomique et par microscopie et spectroscopie à effet tunnel » thèse de doctorat, Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix Belgium, 2003
- [20] M. Ferrier, « Transport électronique dans les fils quasi unidimensionnels: cohérence de phase dans les réseaux de fils quantiques et supraconductivité des cordes de nanotubes de carbone », thèse de doctorat, université de Paris-Sud centre d'Orsay, 2004.
- [21] V. A. Sazonova, « A tunable carbon nanotube resonator », thèse de PhD, université de Cornell, 2006.
- [22] E. Minoux, « Etude et développement de sources électroniques à émission de champ à base de nanotubes de carbone. Application aux tubes hyperfréquences », thèse de doctorat, école polytechnique de Paris, 2006.
- [23] M. Castignolles « Etudes de la synthèse et de la structure par microscopie et spectroscopie électroniques de nanotubes de carbone purs et dopés à l'azote » thèse de doctorat, université Montpellier II, 2004.
- [24] R. Arenal, « Synthèse de nanotubes de nitrure de bore : étude de la structure et des propriétés vibrationnelles et électroniques », thèse de doctorat, université Orsay-Paris, 2005.

- [25] C. I. Roman, « Modélisation de dispositifs à base de nanotubes de carbone pour la détection de biomolécules », thèse de PhD, INP Grenoble, 2006.
- [26] Z. C. Massot, « Synthèse de matériaux composites par co-broyage en voie sèche. Caractérisation des propriétés physico-chimiques et d'usages des matériaux » thèse de doctorat, INP Toulouse, 2004.
- [27] S. Berciaud « Détection photothermique et spectroscopie d'absorption de nano -objets individuels : nanoparticules métalliques, nanocristaux semiconducteurs, et nanotubes de carbone » thèse de doctorat, université de Bordeaux, 2006.
- [28] V. Leon, « Etude des effets de confinement dans la silice mésoporeuse et dans certaines nanostructures carbonées », thèse de doctorat, université d'Orléans, 2006.
- [29] B. Lassagne « Transport électronique dans les nanotubes de carbone, étude sous champ magnétique » thèse de doctorat, INA Toulouse, 2006.
- [30] A. Jalabert, « Architecture de mémoire haute densité à base d'électronique moléculaire tolérante à un très grand nombre de défauts », thèse de doctorat, ENS paris, 2006.
- [31] S. Decossas, « Nanotribologie par microscopie à force atomique (AFM) sur des nanotubes de carbone » thèse de doctorat, université de Grenoble I, 2001.
- [32] S. O. Koswatta, D. E. Nikonov, and M. S. Lundstrom «Computational study of carbon nanotube p-i-n tunnel FETs» Technical Digest - International Electron Devices Meeting, IEDM, pp. 518-521, 2005
- [33] Y. F. Chen «Semiconducting carbon nanotube transistors: electron and spin transport properties» these de PhD, Université de MARYLAND, 2006.
- [34]: M. Daenen et R.D, Fouw et B. Hamers «The wondrous world of carbon nanotubes» a review of current carbon nanotube technologies, 2003.
- [35] T. Dürkop «Electronic properties of carbon nanotubes studied in field-effect transistor geometries», thèse de PhD, université de Maryland, 2004.
- [36] S. Enouz «Etude de nanotubes de carbone dopés à l'azote (CN_x), par microscopie électronique en transmission haute résolution et spectroscopie de pertes d'énergie» thèse de magister, université de Rennes, 2003.
- [37] N. Prakash M «Determination of coefficient of thermal expansion of single walled carbon nanotubes using molecular dynamics simulation», thèse de master, université de Florida, 2005.
- [38] M. M. Larijani «Mise au point d'un procédé de CVD activé par filaments chauds et plasma de décharge pour la nucléation du diamant. Etudes paramétrique et cinétique» thèse de doctorat, université Louis Pasteur de Strasbourg, 2003.

- [39] C. Emmenegger «Nanostructures de carbone comme composants pour le stockage d'énergie dans les condensateurs électrochimiques à double couche (ECDL) » thèse doctorat, université de Fribourg Suisse, 2002.
- [40] R. Marquis «Conception et synthèse de tensioactifs à corps aromatiques pour la séparation sélective des nanotubes de carbone selon leur hélicité» thèse doctorat, université Louis Pasteur de Strasbourg, 2007.
- [41] J. C. Charlier, Xavier Blase et Stephan Roche «Electronic and transport properties of nanotubes» reviews physics, volume 79, avril-june 2007
- [42] S. Berger, «Etude optique de la dynamique des interactions électroniques dans des nanotubes de carbone», thèse de doctorat, université Paris VI, 2007.
- [43] R. B. Sanudin, «Characterization of ballistic carbon nanotube field effect transistor», thèse de master, université de Malaysia, 2005.
- [44] Y. Giret et P. Hirel «Graphite et nanotube de carbone : introduction aux méthodes de calcul de structure de bandes électroniques» TER, université de Rennes, 2004.
- [45] B. Attal-Trétout et A. Loiseau «Diagnostics optiques par LIF au cas de la synthèse de nanotubes monofeuillets : C et BN », Stage de DEA, Unité Diagnostics Optiques et Plasmas, Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales 91761 Palaiseau Cedex, 2005.
- [46] X. Liu, «Synthesis, Devices and Applications of Carbon Nanotubes », thèse de PhD, université de Southern California, 2006.
- [47] C. Thomsen et S. Reich, «Raman scattering in carbon nanotubes », Appl. Physics 108, 115–232 (2007).
- [48] B. Gao, «Multi-terminal electron transport in single wall carbon nanotubes», thèse de doctorat, université de Paris, 2006.
- [49] L. de Camargo e Castro, «Modeling of carbon nanotube field-effect transistors », thèse de PhD, université de British Columbia, 2006.
- [50] A. Verma, «Theoretical and numerical studies of semiconducting carbon nanotubes», these de PhD, institut de technologie Georgia, 2006.
- [51] J. P. Clifford, «A self-consistent numerical model for bipolar transport in carbon nanotube field effect transistors», thèse de master, university of British Columbia, 2003.
- [52] E. D. Minot, «tuning the band structure of carbon nanotubes», thèse de PhD, université de Cornell, 2004.
- [53] V. N. Popov «Carbon nanotubes: properties and application» article R43(2004)61–102.

- [54] S. Ifadir, «Liquid effect on single contacted carbon nanotubes grown by chemical vapor deposition», thèse de PhD, université de Basel, 2005.
- [55] A. M. Lunde «Coulomb drag in multiwall carbon nanotubes» thèse de master, université de Denmark, 2004.
- [56] T. S. Jespersen, «Raman Scattering in Carbon Nanotubes », thèse de master, université de Copenhague, 2003.
- [57] X. Zhou «Carbon nanotube transistors, sensors, and beyond» thèse de PhD, université Cornell, 2008.
- [58] J. M. Marulanda Prado «current transport modeling of carbon nanotube field effect transistors for analysis and design of integrated circuits », these PhD, Louisiana State University, 2008.
- [59] M. Pourfath «Numerical study of quantum transport in carbon nanotube based transistors» thèse de PhD, université de Wien Austria, 2007.
- [60] S. Roche et al, «Transport Properties», Lect. Notes Phys. 677, 335–437 (2006).
- [61] P. Subhash damle «Nanoscale device modeling from MOSFETs to molecules» these de PhD, université de Purdue 2003.
- [62] S. Hasan, M. Ashraful Alam and M. S. Lundstrom, «Simulation of carbon nanotube FETs including hot-phonon and self-heating effects», IEEE Transactions on electron devices, VOL. 54, NO. 9, September 2007
- [63] G. Johnny « La modélisation compacte du transistor à nanotube » thèse de master 2005.
- [64] A. Raychowdhury, S. Mukhopadhyay et K. Roy, « A Circuit-Compatible Model of Ballistic Carbon Nanotube Field-Effect Transistors », IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, vol. 23, no. 10, p. 1411-1420, 2004.
- [65] A. Raychowdhury et K. Roy, « Carbon-Nanotube-Based Voltage-Mode Multiple-Valued Logic Design », IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. 4, no. 2, p. 168-179, 2005.
- [66] S. Wind, J. Appenzeller et P. Avouris, « Lateral scaling in carbon nanotube field-effect transistors », Physical Review Letters, vol. 91, p. 058301-1-058301-4, 2003.
- [67] J. Guo, M. Lundstrom et S. Datta, « Performance projections for ballistic carbon nanotube field-effect transistors », Applied Physics Letters, vol. 80, p. 3192-3194, 2002.
- [68] J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley et C. Dekker, «Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes », Nature, vol. 391, p. 59-62, 1998.
- [69] S. Datta, « Electronic Transport in Mesoscopic Systems », Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering, vol. 3 Cambridge University Press, 1997.

- [70] S. Rosenblatt, « Pushing the limits of carbon nanotube transistors », these de PhD, université de Cornell, 2006.
- [71] M. BESCOND « Modélisation et simulation du transport quantique dans les transistors MOS nanométriques » thèse de doctorat, université de Provence, 2004.
- [72] F. Djeflal, « Modélisation et simulation prédictive du transistor MOSFET fortement submicronique. Application à la conception des dispositifs intégrés », thèse de doctorat, université de Batna, 2006.
- [73] N. Neophytou, A. Shaik, K.Gerhard «Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) Simulation of Metallic Carbon Nanotubes Including Vacancy Defects», Network for Computational Nanotechnology, Electrical and Computer Engineering, 465 Northwestern Ave., Purdue University, West Lafayette, IN, 47906, USA
- [74] D. Llewellyn John, « Simulation Studies of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors », thèse de PhD, university of British Columbia, 2006.
- [75] O. Weber, « Etude, fabrication et propriétés de transport de transistors CMOS associant un diélectrique haute permittivité et un canal de conduction haute mobilité » thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2005.
- [76] S. Hasan, S. Salahuddin, M. Vaidyanathan et M. A. Alam «High-Frequency Performance Projections for Ballistic Carbon-Nanotube Transistors », IEEE Transactions on Volume 5, Issue 1, Jan. 2006: 14 – 22.
- [77] S. Hasan, M. A. Alam, and M. S. Lundstrom «Simulation of Carbon Nanotube FETs Including Hot-Phonon and Self-Heating Effects (+ IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 54, pp. 2352-2361, 2007)
- [78] C. Ortalland « Etude des effets des contraintes mécaniques induites par les procédés de fabrication sur le comportement électrique des transistors CMOS des nœuds technologique 65nm et en deça », thèse de doctorat, INSA de Lyon, 2006.
- [79] S.Datta , «Electrical Resistance: an atomistic view (IOP Publishing Nanotechnology 15, Eds. R.H. Friend et M.A. Reed (2004) S433-S451)
- [80] Mikael Andersson, « GaAs MESFET modeling for digital integrated circuit simulation» thèse de doctorat, University of Technology, Otaniemi, Finland, 1991.
- [81] V.S. Laval, « Physique des semiconducteurs III » Institut d'Electronique Fondamentale, CNRS (URA 022), Bat. 220. Université de Paris Sud, F-91405 Orsay Cedex, France, cours d'électronique.

- [82] F. Lallement, « Etude, développement et caractérisation de procédés de dopage plasma appliqués aux technologies électroniques avancées » thèse de doctorat, L'institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, 2005
- [83] H. Cazin d'Honincthun, S. Galdin-Retailleau Influence « des effets capacitifs sur les performances dynamiques du CNTFET par simulation Monte Carlo » Appl. Phys. Lett. 87, 172112 (2005).
- [84] L. Anghel, « Conception robuste dans les technologies CMOS avancées et post-CMOS », thèse de doctorat, université de Bordeaux, 2007.
- [85] T. DANG « Nanotubes de carbone, SET et QCA en logique : modélisation de fautes », stage de master, Laboratoire TIMA-Grenoble, 2005.
- [86] C. Maneux et T. Zimmer « La modélisation compacte du transistor à nanotube », thèse de master, université de Bordeaux 2005.
- [87] K. Alam, « Quantum theory, modeling, analysis, and design of carbon nanotube field effect transistors », thèse de PHD, université de California 2006.
- [88] J. Maultzsch « Vibrational properties of carbon nanotubes and graphite », thèse de doctorat, 2004.
- [89] P. Avouris, M. Radosavljevic, and Shalom J. Wind, « Carbon nanotube electronics and optoelectronics », Phys. Rev. Lett. 92, 226802 (2004).
- [90] H. Lin « novel silicon and carbon nanotube electronic devices: technology , structure and properties », thèse de PhD, Université de Cornell, 2007.
- [91] S. O. Koswatta « Inelastic transport in carbon nanotube electronic devices », thèse de PhD, université de Purdue, 2008.
- [92] C. Kergueris « Transport électrique à travers une jonction métal-molécule-métal », thèse de doctorat, Université de Paris, 1998.
- [93] M. Creux « Détections des corrélations de courant à haute fréquence à l'aide d'un circuit résonnant », thèse de doctorat, 2007.
- [94] T. Xia « Simulation Study of Deep Sub-micron and Nanoscale Semiconductor Transistors », these de PhD, Universite de Texas Austin, 2005.
- [95] M. P. Anantram, M. S. Lundstrom, and D. E. Nikonov « Modeling of Nanoscale Devices », <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0610247>.
- [96] B. Bourlon « Physique Interfeuillet dans les nanotubes de carbone multifeuillets », thèse de doctorat, université Paris VI, 2005.

- [97] J. D. PICON « L'effet de la polarisation électronique sur le transport de charge dans les semi-conducteurs moléculaires », thèse de doctorat, école polytechnique fédérale de Lausanne, 2006.
- [98] S. Sassine, « Transport électronique contrôlé par micro-ondes dans des microstructures asymétriques : Effet ratchet mésoscopique », thèse de doctorat, université de Toulouse, 2007.
- [99] C. Pasquier, « Transport quantique balistique et mono-électronique dans des nanostructures d'arséniure de galium », thèse de doctorat, université de Paris-Sud 1994.
- [100] L. Angers, « Rectification et supraconductivité de proximité dans des anneaux mésoscopiques », thèse de doctorat, université de Paris-Sud, 2007.
- [101] J. Rahlf Hauptmann « Spin-Transport in Carbon Nanotubes » thèse de master 2003.
- [102] E. Dupont « Etude du transport à un électron dans des structures mésoscopiques avec blocage de Coulomb » Rapport pré-doctoral, 2003.
- [103] J. Salomez, « Effet Kondo dans une géométrie tri-terminale » thèse de doctorat, Université Joseph Fourier Grenoble I, 2006.
- [104] P. W. Chiu « Towards carbon nanotube-based molecular electronics » thèse de doctorat, université de München, 2003.
- [105] T. N. Quang, « Effets de spin dans les nanostructures semi-conductrices : modélisation et expériences de magnéto-transport » thèse de doctorat, école polytechnique de Paris, 2006.
- [106] H. C. d'Honinckun, S. Galdin-Retailleau, A. Bournel, P. Dollfus, J. P. Bourgoin « Monte Carlo study of coaxially gated CNTFETs: capacitive effects and dynamic performance » *C. R. Physique* 9 (2008) 67–77
- [107] J. Van Meter Cline, « Characterization of Schottky Barrier Carbon Nanotube Transistors and their Applications to Digital Circuit Design », thèse de master, université de Brown, 2004.
- [108] T. Pan, « Carbon nanotube field effect transistors for power application », thèse de master, institut de Massachusetts 2007.
- [109] J. Guo, « Carbon nanotube electronics: modeling, physics, and applications », thèse de PhD, université de Purdue, 2004.
- [110] J. Guo, S. Datta, M. Lundstrom, and M. P. Anantram « Toward Multiscale Modeling of Carbon Nanotube Transistors » *Int.Jl.for Multiscale Computational Engineering*, vol. 2, p. 60, 2004

- [111] M. Paulsson et arXiv, «Non Equilibrium Green's Functions for Dummies: Introduction to the One Particle NEGF equations», cond-mat/0210519 v2 3 Jan 2006
- [112] S. O. Koswatta, N. Neophytou, D. Kienle, G. Fiori, and M. S. Lundstrom «Dependence of DC characteristics of CNT MOSFETs on bandstructure models » IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. 5, pp. 368-372, Jul 2006)
- [113] S. O. Koswatta, S. Hasan, M. S. Lundstrom, M. P. Anantram, and D. E. Nikonov «Non-equilibrium Green's function treatment of phonon scattering in carbon nanotube transistors» IEEE Transactions on Electron Devices vol. 54, pp. 2339-2351, 2007.
- [114] S. O. Koswatta, S. Hasan, M. S. Lundstrom, M. P. Anantram, et D. E. Nikonov «Ballisticity of nanotube field-effect transistors: Role of phonon energy and gate bias», Applied Physics Letters, vol. 89, p. 023125, Jul 2006.
- [115] S. O. Koswatta, M. S. Lundstrom, M. P. Anantram, et D. E. Nikonov «Simulation of phonon-assisted band-to-band tunneling in carbon nanotube field effect Transistors» Applied Physics Letters, vol. 87, p. 253107, Dec 2005.
- [116] S. O. Koswatta, M. S. Lundstrom, et D. E. Nikonov «Band-to-Band Tunneling in a Carbon Nanotube Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor Is Dominated by Phonon-Assisted Tunneling» Nano Lett., vol. 7, pp. 1160-1164,2007.
- [117] S. O. Koswatta, M. S. Lundstrom, and D. E. Nikonov « Influence of phonon scattering on the performance of p-i-n band-to-band tunneling transistors » Applied Physics Letters, vol. 92, p. 043125, 2008.
- [118] F. Léonard et D.A. Stewart «Properties of short channel ballistic carbon nanotube transistors with ohmic contacts » arXiv:cond-mat/0608616 v1 28 Aug 2006.
- [119] Y. Yooh, Y. Ouyang, et J. Guo «Effect of phonon scattering on intrinsic delay and cutoff frequency of carbon nanotube FETs » IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 53, pp. 2467-2470, Oct 2006
- [120] X. J. Zhou, J. Y. Park, S. M. Huang, J. Liu, and P. L. McEuen «Band structure, phonon scattering, and the performance limit of single-walled carbon nanotube transistors» Physical Review Letters, vol. 95, p. 146805, Sep 2005