

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE LARBI BEN M'HIDI -OUM EL BOUAGHI-
FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET DES SCIENCES DE LA NATURE
ET DE LA VIE
DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE

N° d'ordre :.....

Série :.....

THESE
POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT LMD
SPECIALITE
PHYSIQUE DES SEMI CONDUCTEURS ET MATERIAUX
THEME

**Etude des Propriétés des nano Transistors à Effet
de Champ**

Présenté Par :

KHIAL AICHA

Soutenue le : / / 2018

Devant le jury:

Président :	M.ZAABAT	Prof	Univ. Larbi Ben M'hidi-Oum El Bouaghi
Rapporteur :	C.AZIZI	Prof	Univ. Larbi Ben M'hidi-Oum El Bouaghi
Co- Rapporteur:	D. RECHEM	M.C.A	Univ. Larbi Ben M'hidi-Oum El Bouaghi
Examineur :	Y. SAIDI	Prof	Univ. Constantine 1
Examineur :	M.S. Benbouza	M.C.A	Univ. El Hadj-Lakhdar Batna

Remerciement

Mes remerciements vont en premier lieu et avant tous à Dieu « Allah », le tout puissant et miséricordieux, qui m'a donné la volonté, la santé et la patience durant toutes ces années d'études pour accomplir ce modeste travail. « الحمد و الشكر لله »

*Je tiens énormément à remercier ma directrice de thèse, Madame **C. AZIZI** professeur à l'université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi et directrice de laboratoire des composants actifs et matériaux LCAM, d'avoir accepté de diriger et d'encadrer cette thèse, en me faisant bénéficier de ses compétences, ses connaissances variées, ses précieux conseils, ses orientations, sa constante disponibilité et ses qualités humaines.*

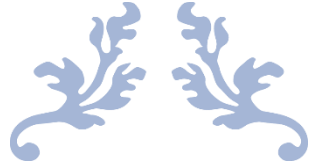
*Je remercie également les membres du jury, Monsieur **M. ZAABAT**, Professeur à l'université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi, Monsieur **D. RECHEM**, Professeur à l'université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi, Madame **Y. SAIDI**, Professeur à l'université des Frères Mentouri–Constantine et Monsieur **M.S. BENBOUZA**, Professeur à l'université El Hadj Lakhdar–Batna, d'avoir bien voulu examiner mes travaux de thèse en acceptant de faire partie du jury de ma soutenance et de l'enrichir par leurs propositions.*

*Un immense merci à mon Co-encadreur **D. RECHEM**, Professeur à l'université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi, pour les conseils, la confiance, les connaissances variées, le soutien scientifique et moral qui m'a permis de réaliser cette thèse de doctorat.*

*Je remercie aussi vivement l'équipe du laboratoire LCAM, département de physique, université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi pour les conseils, la confiance, le soutien scientifique et moral qui m'a permis de réaliser ce travail, en particulier : **S. Benzitouni, A. Benaboud, T. Saidani, Fairouz, Dikra, Halima, Hanen, T. Ounis, Noura, Meriem, Amel, N. Touzari, Y. Zaidi et N. Boukhalfa.***

Les derniers remerciements vont également à mes amies et collègues pour leur soutien et leurs conseils et tous ceux que j'ai côtoyé de près ou de loin, et qui m'ont aidé à terminer cette thèse.

Aicha KHAL



Je dédie la présente thèse :

À ma mère Djamaa et mon père Allah yerhmo Abd El Salam pour leur affection et amour, la confiance et le soutien moral dont ils ont fait preuve tout au long de ces années d'étude.

À mes chères sœurs Sihem, Laila, Samiha, Hayete, khadija et mes chers frères Mouhamed, Elaid et Salah Eldine pour leurs encouragements et leur soutien.

À mes chères : Rahim, Chamsse Eldine, Iness, Aridje, Ahmed, Yanis, Taha, Rama, Raid, Allaa...

À mes Chères amies.

À tous les membres de ma grande famille : Khial et Bouras.

A tous ceux que j'aime de près comme de loin.



Khial Aicha

Sommaire

Table des matières

Introduction générale.....	06
Chapitre I : État de l'art des Nanotubes de Carbone	
I.1. Introduction.....	08
I.2. Le carbone.....	08
I.3. Les formes classiques du Carbone.....	09
I.3.1. Graphite.....	09
I.3.2. Le Diamant.....	10
I.4. Les nouvelles formes du carbone.....	11
I.4.1. Le Graphène.....	11
I.4.2. Fullerènes.....	11
I.5. Les nanotubes de carbone.....	12
I.5.1. Structure géométrique.....	12
I.5.2. Les nanotubes multi parois (MWNT).....	13
I.5.3. Les nanotubes mono-paroi (SWNT).....	14
I.5.3.1. Zone de Brillouin du nanotube.....	18
I.5.4. Nanotube de carbones semi-conducteurs et métalliques.....	19
I.6. Propriétés des Nanotubes de Carbone.....	20
I.6.1. Propriétés physiques.....	20
I.6.2. Propriétés électriques.....	21
I.6.3. Propriétés mécaniques.....	22
I.6.4. Propriétés thermiques.....	22
I.6.5. Propriétés optiques.....	23
I.6.6. Propriétés chimiques.....	24
I.7. Applications des nanotubes de carbone.....	25
I.7.1. Transistor à effet de champ.....	26
I.7.2. Source d'émission par effet de champ.....	26

Table des matières

I.7.3. Autres applications électroniques.....	27
---	----

Chapitre II : les composants électroniques à base de nanotubes de carbone

II.1. Introduction.....	29
II.2 Les transistors FET à base de nanotube de carbone : CNTFET.....	29
II.2.1 Procèdes de fabrication des CNTFET.....	29
II.2.1.1 Configuration en grille arrière.....	30
II.2.1.2 Autres types de configurations.....	33
II.2.2 Caractéristiques électriques des CNTFET.....	33
II.3 Les différents types des transistors à nanotube de carbone.....	36
II.3.1 Transistor à effet de champ conventionnel (CNTFET).....	36
II.3.2 Le transistor à double-grille : DG-CNTFET.....	40
II.3.3ransistor à effet de champ à barrière Schottky (SB-CNTFET).....	41
II.3.4 Transistor à effet de champ commandé optiquement (OG-CNTFET).....	44

Chapitre III : Etude analytique du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

III.1 Introduction.....	45
III.2. Transport balistique dans les dispositifs ultracourts.....	45
III.2.1 La longueur moyenne libre de l'électron (libre parcours moyen).....	45
III.2.2 Transport balistique.....	46
III.3. Description du transport électronique par la mécanique quantique.....	47
III.3.1. Effets quantiques.....	47
III.3.2. Confinement quantique.....	47
III.4. Modèle Auto cohérente Schrödinger-Poisson.....	49

Table des matières

III.4.1. Résolution auto-cohérent des équations de Schrödinger et de Poisson.....	49
III.5. La simulation des CNTFET basée sur le formalisme de la Fonction de Green Non Equilibre (NEGF).....	51

Chapitre IV. Résultats et Interprétations

IV.1. Introduction.....	57
IV.2. L'effet de DIBL.....	57
IV.2.1. caractéristique des transferts.....	58
IV.2.2. Influence de la longueur de la grille sur le DIBL.....	58
IV.2.3. Influence du diamètre du nanotube sur le DIBL.....	59
IV.2.4. Influence de l'épaisseur de l'oxyde de grille sur le DIBL....	60
IV.2.5. Influence de la permittivité du diélectrique de grille sur le DIBL.....	61
IV.2.6. Influence du dopage du canal sur le DIBL.....	62
IV.3. l'effet de tension de seuil (V_{TH}).....	63
IV.3.1. Influence de la longueur du canal de grille sur la tension de seuil (V_{TH}).....	64
IV.3.2. Influence de la longueur du diamètre des nanotubes sur la tension de seuil (V_{TH}).....	64
IV.3.3. Influence de l'épaisseur de l'oxyde de grille sur la tension de seuil (V_{TH}).....	65
IV.3.4. Influence de la permittivité du diélectrique de grille sur la tension de seuil (V_{TH}).....	66
IV.3.5. Effet de dopage du canal sur la tension de seuil (V_{TH}).....	68
IV.4. Performances statiques et dynamiques du CNTFET.....	68
IV.4.1. Caractéristiques statiques $I_D(V_{GS})$	68
IV.4.2. Caractéristiques dynamiques.....	69
IV.4.2.1. Rapport I_{ON}/I_{OFF} en fonction de la permittivité du diélectrique de grille.....	69
IV.4.2.2. Effet du diélectrique de grille sur la bande de conduction et de la pente sous le seuil.....	71

Table des matières

IV.4.2.3. Retard intrinsèque des porteurs dans le canal de CNTFET.....	73
--	----

Liste des figures

Figure	Chapitre I : État de l'Art des Nanotubes de Carbone	Page
Figure I.1	Structure du graphite hexagonal.	09
Figure I.2	Structure du diamant.	10
Figure I.3	Structure du graphène.	11
Figure I.4	Le fullerène C ₆₀ possède 60 atomes de carbone et le C ₇₆ possède 16 atomes	12
Figure I.5	Structure d'un nanotube de carbone.	13
Figure I.6	Structure d'un nanotube de carbone avec différents fullerènes.	13
Figure I.7	Structure de MWCNT sous forme concentrique.	14
Figure I.8	Nanotubes multi-feuillets sous forme spirale.	14
Figure I.9	Structure d'un nanotube de carbone : a) SWCNT. b) images TEM du fagot de nanotube de carbone.	15
Figure I.10	Définition des vecteurs de chiralité et de translation.	16
Figure I.11	Chiralité des nanotubes de carbone.	17
Figure I.12	La zone de Brillouin 1D d'un nanotube de carbone.	19
Figure I.13	Schémas des nanotubes métalliques et semi-conducteurs.	20
Figure I.14	Réflexion R et transmission T d'un film de nanotubes de carbone mono paroi.	24
Figure I.15	a) Vue en coupe transversale d'un CNTFET. b) caractéristique électrique d'un CNTFET.	26
Figure I.16	Émission par effet de champ de films CNT.	27
Figure I.17	Concept de NRAM en CNT.	28

Figure	Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone	Page
Figure II.1	Coupe transversale d'un transistor à nanotube de carbone en configuration de grille arrière. Le nanotube de carbone relie les deux électrodes en "Au" de la source et du drain.	31
Figure II.2	Procédé de fabrication de CNTFET.	32
Figure II.3	(a) Image de microscopie à force atomique d'un nanotube de carbone mono-paroi synthétisé sur un substrat tranché de platine (Pt). (b) Image de microscopie à effet tunnel de la partie suspendu du nanotube.	32
Figure II.4	Deux configurations de transistors CNTFET. (a) en grille avant. (b) en grille cylindrique dans le cas d'un canal formé par plusieurs nanotubes mis en parallèle.	33
Figure II.5	Caractéristiques I_D en fonction de V_{DS} d'un CNTFET de type p en grille avant ($L=260\text{nm}$) pour différents V_{GS} et une caractéristique I_D en fonction de V_{GS} de ce transistor pour $V_{DS} = -0,6\text{V}$.	34
Figure II.6	Diagrammes d'énergie d'un CNTFET type N.	37

Liste des figures

Figure II.7	a) Procédé de fabrication auto-aligné d'un CNTFET "top gate" avec oxyde de grille en HfO ₂ . b) Schéma de configurations de CNTFET avec grille arrière en haut (back gate) et avec grille avant en bas (top gate).	38
Figure II.8	a) Schéma de l'inverseur avec un p-CNTFET et un n-CNTFET. b) Photo du circuit oscillateur en anneau à 5 étages.	40
Figure II.9	Vue en coupe du DG-CNFET. Les flèches rouges et vertes représentent l'effet de la grille avant et de la grille arrière respectivement.	41
Figure II.10	Caractéristiques symétriques $I_D - V_{GS}$ simulées du modèle compact (courbe continue) et de Monte-Carlo (symboles) d'un SB-CNTFET avec un nanotube (11, 0) pour trois barrières Schottky : 300, 500 et 600 meV, $V_{DS} = 100$ mV.	42
Figure II.11	Diagrammes de bande d'énergie qui expliquent pour le même V_{DS} . a) le comportement de type P donnant lieu à un courant de trous (V_{GS} négatif), b) le comportement de type N donnant lieu au courant d'électrons (V_{GS} positif).	43
Figure II.12	Caractéristiques $I_D - V_{GS}$ mesurées pour un SB-CNTFET avec un SWNT (14, 0) avec SiO ₂ de 10 nm et les contacts métalliques en Ti pour trois V_{DS} , -0.1, -0.4 et -0.7 V. La symétrie des caractéristiques se décale selon la variation de V_{DS} .	43
Figure II.13	OG-CNFET sous insolation. Les charges en rouge représentent le dopage de type P induit par le dépôt du polymère P3OT (poly3-octylthiophene-2,5-diyl) celles en bleu les charges photogénérées.	44

	Chapitre III : Etude du Transport Balistique dans les Transistors à Nanotube de Carbone	
Figure III.1.	Schéma d'une trajectoire typique d'un porteur avec ses interactions dans a) un transistor long et b) un transistor ultracourt. lpm: libre parcours moyen des porteurs.	46
Figure III.2	Niveaux d'énergie dans une capacité MOS en forte inversion.	48
Figure II.3	Concentration d'électrons dans une capacité MOS en régime de forte inversion.	49
Figure III.4	Organigramme général de la Méthode de couplage Poisson – Schrödinger	50
Figure III.5	Schéma d'une tranche Schrödinger est hachurée	51

Liste des figures

Figure III.6	(a) Croquis schématique d'un nano ruban de graphène de type fauteuil avec 12 dimères de carbone ($n = 12$). (b) Chaîne unidimensionnelle pour le q ième mode utilisé dans la représentation en mode d'espace. (c) Vue d'ensemble du formalisme NEGF incluant les quantités utilisées: le dispositif est défini par le Hamiltonien H, qui est relié aux réservoirs gauche et droit par les self-énergies Σ_S et Σ_D, respectivement.	52
Figure III.7	Organigramme de l'algorithme auto-cohérent 2D Poisson-NEGF.	55

	Chapitre IV. Résultats et Interprétations	
Figure IV.2.1	Caractéristiques des transferts pour différente températures.	58
Figure IV.2.2	L'effet de (DIBL) en fonction de la longueur de la grille à différentes températures	59
Figure IV.2.3	Abaissement de la barrière de potentiel induite par le drain (DBIL) par rapport au diamètre des nanotubes à différentes températures	60
Figure IV.2.4	Les variations de DIBL avec l'épaisseur d'oxyde de grille à différentes températures	61
Figure IV.2.5	Les variations de DIBL avec la permittivité diélectrique de grille à différentes températures.	62
Figure IV.2.6	Présente la variation DIBL avec le dopage de canal à différentes températures variant de 77 K à 400 K.	63
Figure IV.3.1	Variation la tension de seuil par rapport au diamètre des nanotubes pour diverses températures.	64
Figure IV.3.2	Variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur d'oxyde à différentes températures.	65
Figure IV.3.3	Variations de la tension de seuil avec la perméabilité diélectrique de grille à différentes températures.	66
Figure IV.3.4	L'effet du dopage du canal dans un transistor CNTFET sur la tension de seuil pour différentes température.	67
Figure IV.3.5	L'effet du dopage de canal dans un transistor CNTFET sur la tension de seuil pour différentes température	68
Figure IV.4.1	Comparaison des caractéristiques IDS - VGS obtenues à partir du modèle NEFF avec celles obtenues à partir des simulations de Boltzmann et Wigner, pour la longueur de la porte $L = 10$ nm à $DS = 0,4$ V	69

Liste des figures

Figure IV.4.2.1.a	le rapport I_{ON}/I_{OFF} par rapport à la perméabilité diélectrique de grille pour Températures divers.	70
Figure IV.4.2.1.b	Courant I_{ON} en fonction de la permittivité diélectrique de la grille pour différentes températures. Dans l'ensemble, le courant I_{OFF}.	70
Figure IV.4.2.2.a	La bande de conduction obtenue pour différents diélectriques de grille à $V_{GS} = 0,4 \text{ V}$, $V_{DS} = 0,4 \text{ V}$	71
Figure IV.4.2.2.b	Variation de la pente sous- le seuil en fonction de la permittivité diélectrique de la grille et de la température.	72
Figure IV.4.2.3.a	Retard intrinsèque des porteurs dans le canal en fonction de la permittivité diélectrique de la grille à différentes températures.	73
Figure IV.4.2.3.b	Retard intrinsèque des porteurs dans le canal en fonction de rapport I_{ON}/I_{OFF} pour diverses températures.	74

Liste des Tableaux

Tableau	LISTE DES TABLEAUX	Page
Tableau I.1	Propriétés des différents types de liaison carbone-carbone.	09
Tableau I.2	La classification des nanotubes.	18
Tableau I.3	Les caractéristiques géométriques des nanotubes de carbone.	20
Tableau I.4	Quelques propriétés mécaniques des nanotubes de carbone.	22
Tableau I.5	Quelques caractéristiques thermiques des nanotubes de carbone.	23
Tableau I.6	Des applications électroniques réalisées avec des CNT dans divers domaines.	25
Tableau II.1	Caractéristiques des différents procédés de synthèse des nanotubes de carbone.	30
Tableau II.2	Performances électriques d'un CNTFET comparées avec ceux d'un 15nm Si p-MOSFET et un 50nm SOI p-MOSFET.	35

Introduction générale

Introduction Générale

La microélectronique a presque atteint ses limites de miniaturisation, par l'apparition des effets quantiques, qui sont insurmontables, et qui altèrent le bon fonctionnement des structures de faibles dimensions. De plus, les étapes de réalisation la rendent très coûteuse pour l'industrie des circuits intégrés qui nécessitent des améliorations de leurs propriétés physiques et chimiques, par la réalisation de nouveaux matériaux au niveau presque moléculaire ou à l'échelle du nanomètre [1].

La nanotechnologie représente un nouveau domaine en pleine expansion de la recherche scientifique et de l'industrie. Le développement extrêmement rapide de cette discipline de nanomatériaux touche une population de plus en plus importante de travailleurs, aussi bien en milieu industriel que de chercheurs dans les laboratoires de recherche [1,2].

L'histoire de la nanotechnologie est récente, mais sur le plan industriel et économique, les analystes estiment que le marché des produits à base de nanotechnologie dépassera les milliards de Dollars vers les années 2025. Les Nanosciences et Nanotechnologies (N&N) auront un impact sur la majorité des domaines technologiques: médecine et santé, technologies de l'information, production et stockage de l'énergie, sciences des matériaux, alimentation, eau, environnement, instrumentation, métrologie et sécurité [2].

Le terme « nanoélectronique » décrit une branche de l'industrie nano technologique électronique qui se consacre à la fabrication des composants ayant des dimensions nanométriques (de 1nm à 1 μ m). On pourrait tracer schématiquement la frontière entre la nanoélectronique et la microélectronique par la séparation entre le monde classique et le monde quantique lors de la réduction de la taille des composants. En effet, la diminution de la taille des composants électroniques vers l'échelle nanométrique s'accompagne de l'apparition de nouveaux effets électrostatiques et quantiques qui sont indétectables dans le cas de matériaux massifs [3].

Depuis leur découverte, ces nano-objets unidimensionnels (1D) ne cessent de révéler des propriétés physiques remarquables. Parmi ces nano-objets on trouve les nanotubes de carbone (CNT), qui ont des propriétés exceptionnelles.

Les nanotubes de carbone sont donc des composants élémentaires idéaux pour la réalisation de nano-dispositifs mécaniques, électroniques ou électromécaniques. Selon leur structure, les nanotubes de carbone (CNT) ont notamment la possibilité de pouvoir être semi-conducteurs ou métalliques. Cette propriété unique fait du nanotube de carbone un candidat intéressant pour la fabrication d'un nouveau composant

Introduction Générale

électronique à base de nanotubes, le CNTFET (Carbon NanoTube Field Effect Transistor) [4].

Dans ce contexte, plusieurs chercheurs ont mené de nombreux travaux pour tenter de modéliser les CNTFET, afin de simuler leurs performances électriques à partir des caractéristiques physiques. Les résultats de ces travaux ont permis de clarifier dans certaines mesures, les phénomènes intervenant dans le fonctionnement du transistor. En général, ces modélisations sont regroupées selon les méthodes numériques adoptées à leurs études.

Ce travail entre dans le cadre de la modélisation et de la simulation des transistors à effet de champ à base de nanotube de carbone dit CNTFET dont le but est l'étude des propriétés et l'amélioration des performances du transistor à effet de champ.

Pour ce faire, notre travail est présenté dans quatre chapitres :

Le chapitre I présente une brève introduction sur l'historique des nanotubes de carbone, les différents types de nanotubes de carbone, leurs méthodes de synthèse et leurs différentes propriétés électriques, mécaniques, optiques et chimiques. Une introduction sur la structure et ces éléments cristallographiques de base, comme les vecteurs de chiralité C_h , est présentée ainsi que les domaines d'application des nanotubes de carbone.

Au chapitre II, nous présentons les propriétés des composants électroniques à effet de champ à base de nanotube de carbone. une attention particulière est effectuée sur le composant CNTFET, objet principal de notre travail.

Au troisième chapitre nous présentons une étude analytique du transport balistique dans les transistors à nanotube de carbone. Pour cela nous résolvons l'équation de Schrödinger et de Poisson avec le formalisme de Green en non équilibre noté NEGF.

Dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats de la simulation numérique du composant d'étude par le programme élaboré. Les résultats obtenus sont relatifs à l'abaissement de la barrière induite par le drain DIBL (Drain Induced Barrier Lowering DIBL). Le DIBL peut être trouvé dans des dispositifs à deux dimensions tels que les CNTFET. Cependant, en raison des propriétés structurales et électrostatiques du CNTFET, l'effet DIBL joue un rôle important sur les performances de ce composant.

Nous terminons notre manuscrit par une conclusion générale et les perspectives de ce travail.

Chapitre I

I.1. Introduction

Le développement des nanotubes de carbone (CNT : Carbon NanoTube) a commencé en 1991 par un groupe de chercheur japonais. Selon leur structure il y a les nanotubes multi-parois (Multy Wall CNT) qui ont été observés pour la première fois en microscopie électronique à transmission (TEM) par Iijima en 1991[5], et les nanotubes mono-parois (Single Wall CNT) qui ont été observés indépendamment par Iijima et Béthune en 1993 [6]. Ces nanotubes ont un diamètre de l'ordre du nanomètre et une longueur de quelques micromètres. Différentes méthodes de synthèse spécifiques ont été mises au point et ont permis l'étude en laboratoire de ces structures et de leurs propriétés physico-chimiques, ce qui laisse entrevoir de nombreuses applications, notamment dans les domaines de la microélectronique et nanoélectronique [7]. Comme on le verra dans ce qui suit, certains nanotubes de carbone peuvent être métalliques ou quasi-métalliques et d'autres peuvent être semi-conducteurs.

Nous avons consacré ce chapitre aux nanotubes de carbone. La structure des nanotubes est comparée à la structure des autres formes de carbone, que ce soit les formes traditionnelles, ou les nouvelles formes récemment apparues. Les différentes techniques de synthèse sont brièvement passées en revue, avant d'évoquer les principales méthodes de fonctionnalisation des nanotubes. Nous discuterons également les propriétés électroniques, thermiques et optiques, des nanotubes de carbone mono-parois (SWCNT) et leurs applications.

I.2. Le carbone

Le carbone est un ancien mais nouveau matériau pour la nanotechnologie. Il a été employé pendant des siècles allant du présent jusqu'à l'antiquité, mais pourtant beaucoup de nouvelles formes cristallines de carbone tout récemment ont été expérimentalement découvertes dans les dernières décennies [4]. C'est le quatrième élément le plus abondant dans notre système solaire, après l'hydrogène, l'hélium et l'oxygène, le carbone possède la particularité d'exister sous différentes structures physiques (polymorphisme) appelées allotropies. Il fut accepté pendant une longue période que cette famille de composés de carbone ne comportait que deux membres, le diamant et le graphite, auxquels d'autres structures, plus exotiques et issues de l'invention humaine, pouvaient être assimilées [8]. Le carbone ($Z=6$) possède quatre électrons de valence et présente une structure électronique $1s^2 2s^2 2p^2$. Les liaisons

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

chimiques que forme le carbone, tant dans ses allotropies que dans les molécules qu'il peut former avec d'autres éléments, ne peuvent être représentées, dans le modèle de l'électron localisé, que par l'incorporation du concept d'orbitales hybrides, issues du mélange d'orbitales atomiques [9,10] (tableau I.1).

Liaison	Hybridation	Energie de liaison (kJ/mol)	Longueur de liaison (nm)
C-C	sp ³	370	0,15
C=C	sp ²	680	0,14
C≡C	sp	890	0,12

Tableau I.1. Propriétés des différents types de liaison carbone-carbone [8].

I.3. Les formes classiques du Carbone.

I.3.1. Graphite

A pression atmosphérique et à la température ambiante, la forme la plus stable du carbone pur est le graphite. C'est donc la forme la plus courante, bien qu'elle soit en général trouvée sous une forme moins pure que le charbon. Le graphite possède une structure lamellaire, dont chacun des plans, espacés de 0.334nm, est constitué d'un réseau hexagonal (en nid d'abeille) d'atomes de carbone (Figure I.1) [11].

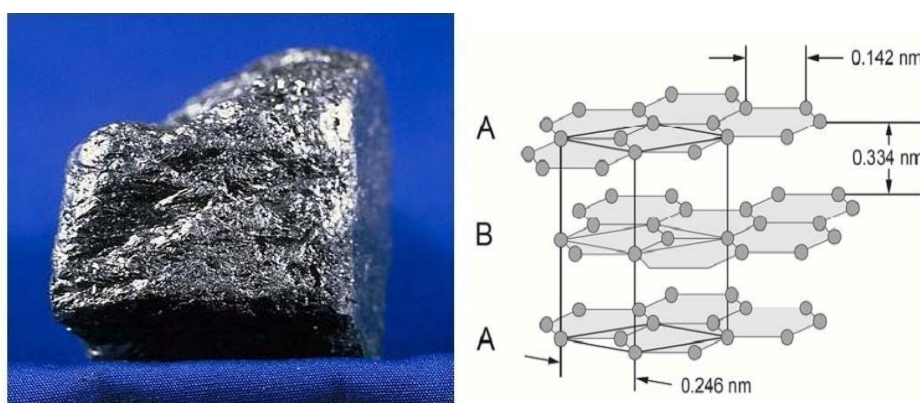


Figure I.1. Structure du graphite hexagonal [10,11]

Les liaisons au sein des plans sont covalentes, tandis que les liaisons interplanaires sont de type Van der Waals, donc faibles. C'est pourquoi le graphite est facile à feuiller, et c'est le carbone tétravalent, les quatre électrons de valence se répartissant

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

dans les orbitales $s^2 p^2$, dont les énergies sont assez proches [10-12]. Dans sa structure hexagonale, il n'est pas lié de manière covalente qu'à trois voisins. Les orbitales moléculaires de ces liaisons sont de type sp^2 c'est-à-dire que chaque électron lié se trouve dans un état combiné une orbitale atomique s^2 et deux orbitales p^2 . Le quatrième électron de valence, initialement dans l'orbitale atomique p_z^2 qui est orthogonale aux plans graphitiques, forme alors des liaisons faiblement localisées avec ses voisins du même plan. Ce dernier électron peut donc participer à la conduction électrique du graphite [9,12].

I.3.2. Le Diamant

Le diamant est la forme stable du carbone à haute pression et haute température. Il se forme à l'intérieur de la Terre, généralement entre 150 et 200 m de profondeur, là où ses conditions de stabilité sont réunies (un millier de degrés Celsius et plusieurs giga pascals). Il est métastable aux conditions ambiantes avec une durée de vie compatible avec les temps géologiques. Le diamant est la forme la plus compacte du carbone. Il possède une structure cubique à faces centrées avec un paramètre de maille de $a_0 = 0,357$ nm, et une distance interatomique de $a_{c-c} = 0,154$ nm. (Figure I.2) [11,13].

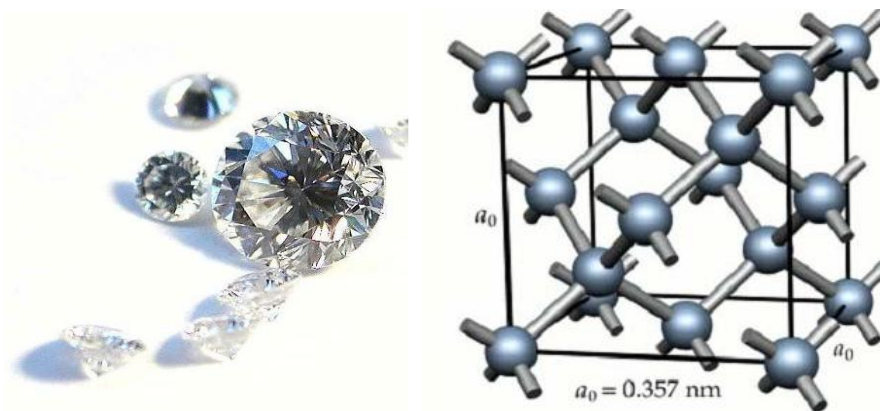


Figure I.2. Structure du diamant [10,13]

Chaque atome est lié à quatre voisins par des liaisons hybridées sp^3 . Contrairement au cas du graphite, tous les électrons de valence sont impliqués dans des liaisons covalentes, donc le diamant est isolant électriquement. En revanche, c'est le meilleur conducteur thermique connu, avec une conductivité thermique cinq fois supérieure à celle du cuivre [9,10]. Grâce à sa structure et à ce type de liaison chimique, le diamant est aussi le matériau le plus dur que l'on connaisse. C'est pourquoi il est utilisé dans de nombreuses applications comme le polissage ou le découpage.

I.4. Les nouvelles formes du carbone

I.4.1. Le Graphène

Le graphène est le nom que l'on donne à un plan de graphite lorsqu'il est isolé. Il possède donc également une structure hexagonale avec des liaisons de type sp^2 . Le graphène est à mi-chemin entre le graphite et le nanotube. Jusqu'à récemment, il était seulement un objet théorique, permettant notamment de modéliser les propriétés des nanotubes. Depuis quelques années, des techniques expérimentales permettant de l'isoler ont été mises au point et l'étude expérimentale est devenue possible [4, 11,13]. Il est ainsi, depuis quelques années, l'objet d'un intérêt croissant. Le graphène peut être considéré comme un matériau bidimensionnel (2D) parfait, puisqu'il n'est constitué que d'une seule couche d'atomes [9,10].

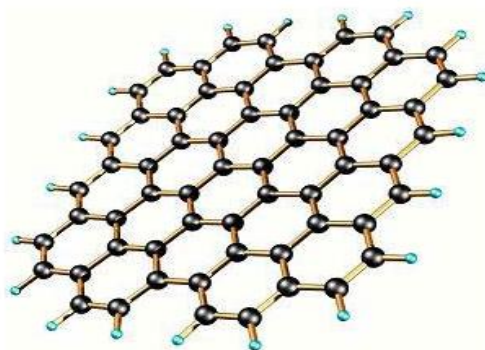


Figure I.3. Structure du graphène [4,9].

I.4.2. Fullerènes

Il s'agit de petites molécules symétriques composées d'une à plusieurs dizaines d'atomes de carbones. Ces derniers sont agencés suivant un mélange d'hexagones (similaires à la structure des plans de graphite) et de pentagones, ces derniers générant la courbure de l'ensemble [11].

Le plus couramment étudié est le fullerène C_{60} , composé de plus de 60 atomes de carbone, 20 hexagones et 12 pentagones, tel un ballon de football (Figure I.4). Dans ces structures, chaque atome a trois voisins comme dans le cas du graphite, mais du fait de la courbure, les liaisons ne sont pas purement de type sp^2 . Elles sont en fait un mélange sp^2 et sp^3 . Grâce à leur symétrie, les fullerènes C_{60} ont un module d'incompressibilité supérieur à celui du diamant [9,11]. Avec les fullerènes, on entre dans le domaine des nanomatériaux, puisque leur taille est de l'ordre de quelques nanomètres à plusieurs dizaines de nanomètres. C'est aussi la porte d'entrée du carbone dans la physique mésoscopique, puisqu'il s'agit d'un matériau de faible dimension.

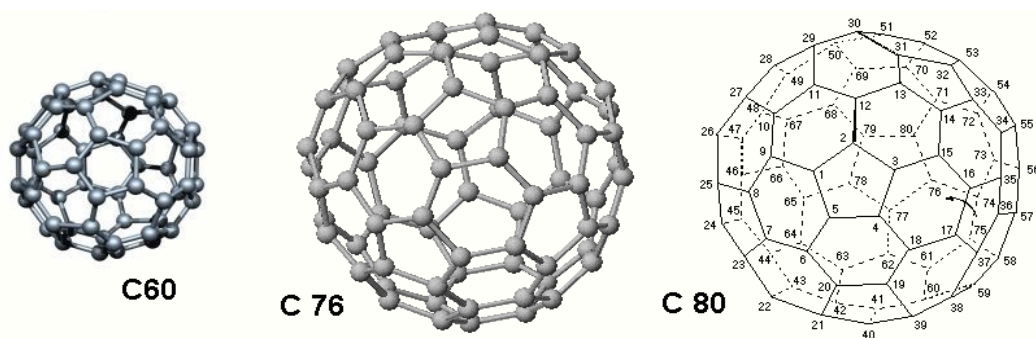


Figure I.4. Le fullerène C_{60} possède 60 atomes de carbone et le C_{76} possède 16 atomes de carbone supplémentaires [10,11].

Les fullerènes doivent tous obéir à la règle de stabilité d'Euler, mais des conditions de stabilité chimique supplémentaires font que toutes les structures géométriquement possibles n'existent pas. Les fullerènes les plus connus sont les C_{60} et C_{70} , mais il existe également les C_{76} , C_{78} , C_{82} , C_{84} [8,14]

I.5. Les nanotubes de carbone

I.5.1. Structure géométrique

Les nanotubes de carbone (CNT) sont une des nouvelles formes du carbone ce qui les rapproche des autres matériaux du carbone tels que le graphène. Cependant, ils ont une structure très particulière, qu'on ne peut obtenir que dans des conditions de synthèses bien précises. Structurellement, un nanotube de carbone CNT (Carbon NanoTube), est composé d'un ou plusieurs feuillets de graphène enroulé sur lui même, décrivant une géométrie tubulaire (figure I.5.). Ainsi, de la structure 2D (bidimensionnelle) du feuillet de graphène, on obtient un CNT avec une structure cylindrique unidimensionnelle (1D) dont le diamètre est de l'ordre du nanomètre [8,11].

La courbure des plans de graphène constitutifs des CNT induit une modification partielle de l'hybridation des liaisons C- C. Plus la courbure du tube sera importante, et donc le diamètre petit, plus l'hybridation sp^2 sera altérée. On sera en présence donc du caractère sp^3 partiel des liaisons constitutives des parois de CNT [15].

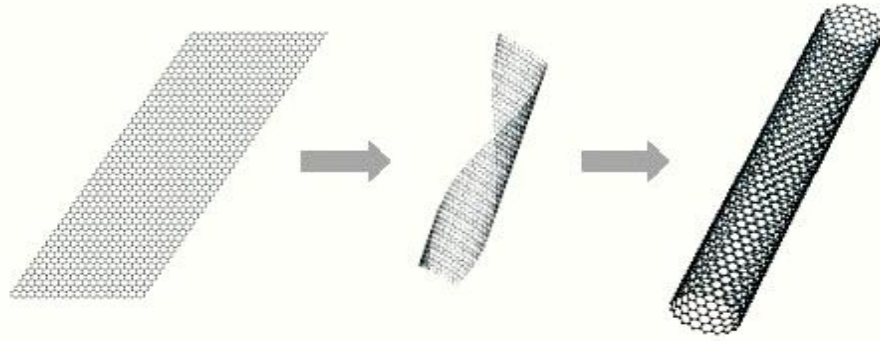


Figure I.5. Structure d'un nanotube de carbone [11].

Une autre manière de concevoir un nanotube est de considérer un fullerène que l'on allonge en y insérant toujours la même ceinture d'atomes de carbone, de manière à créer une paroi composée uniquement d'hexagones (Figure I.6.) [10].

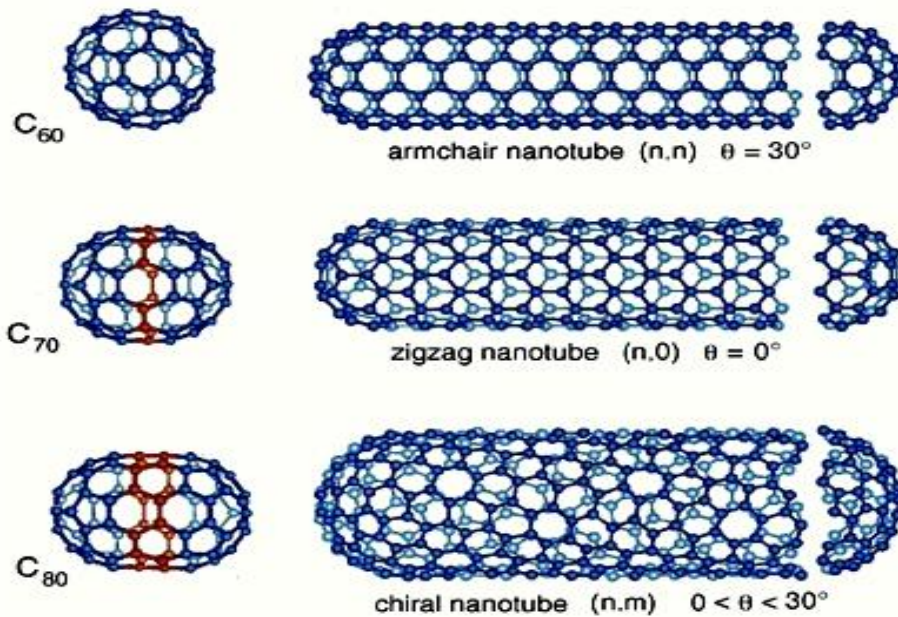


Figure I.6. Structure d'un nanotube de carbone avec différents fullerènes [10,16].

Si le CNT est constitué d'un seul feuillet de graphène, on parle de nanotube mono-feuillet (SWNT, pour Single Walled NanoTube ou nanotube mono paroi), et s'il est constitué de plusieurs couches, on parle de nanotubes multi-parois (MWNT, pour Multi Walled nanotubes ou nanotubes multi-feuillets) [17,18].

I.5.2. Les nanotubes multi parois (MWNT)

Lorsque deux parois ou plus forment le tube, on parle de nanotube multi-feuillets (MWNT pour "Multi-Walled NanoTube"). Ces nanotubes multi-feuillets(ou multi-parois) sont constitués d'un arrangement concentrique de feuilles de graphène, repliées

sur elles-mêmes de manière à former des cylindres (Figure I.7). L'espace entre les parois d'une telle structure est d'environ 0.34 nm. Le diamètre du plus petit tube interne détermine la taille du canal central du nanotube. Le diamètre interne d'un nanotube multi-feuillets est de l'ordre de 1-3 nanomètres, tandis que le diamètre externe est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres [18-19].

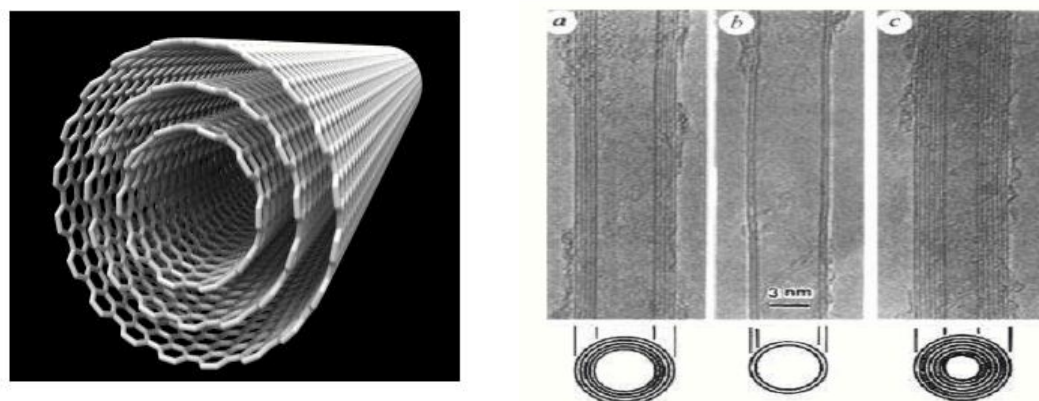


Figure I.7. Structure de MWCNT sous forme concentrique [4, 5,20].

Les nanotubes de carbones multi-feuillets peuvent présenter deux configurations différentes. La première configuration, décrivant un nanotube multi-feuillet parfait, est basée sur un emboîtement de tubes concentriques dit en « poupées russes » (figure I.7). La seconde configuration est basée sur l'enroulement en spirale d'un unique feuillet de graphène (figure I.8) [17,21].



Figure I.8. Nanotubes multi-feuillets sous forme spirale [17, 21].

I.5.3. Les nanotubes mono-paroi (SWNT)

Le nanotube de carbone mono-paroi SWNT peut être vu comme l'enroulement d'une forme stable de feuille de graphène sur elle-même produisant ainsi un cylindre. Les nanotubes de carbone mono-feuillet (ont été découverts par Bethune et Iijima en 1993 [6] (figure I.9).

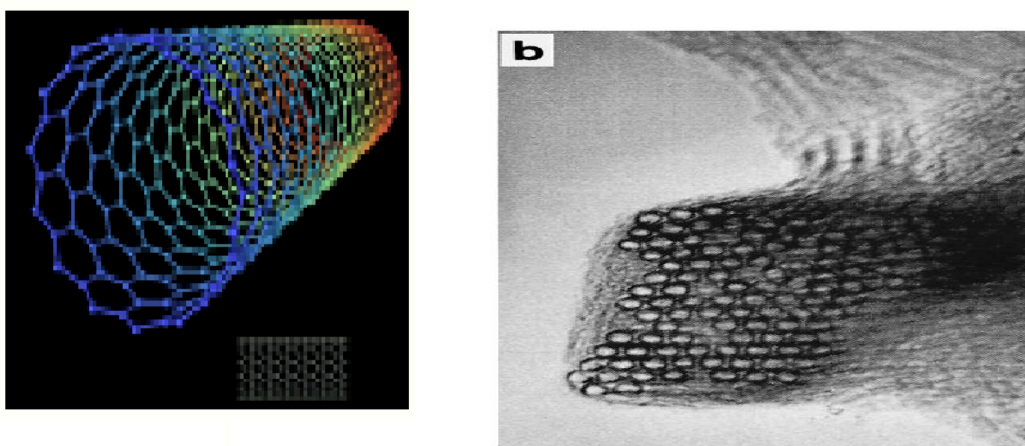


Figure I.9. Structure d'un nanotube de carbone : a) SWCNT , b) images TEM du fagot de nanotube de carbone [4, 6, 17].

La structure de ce nanotube SWCNT est déterminée par le couple de nombres entiers (n, m) définissant un vecteur caractéristique de l'enroulement appelé vecteur de chiralité \vec{C}_h [17,18].

Le vecteur chiral correspond à une section de nanotube perpendiculaire à l'axe du tube. Dans la Figure I.10, le treillis déroulé hexagonal du nanotube est représenté, dans laquelle OB est la direction de l'axe du nanotube, et OA correspond au vecteur chiral, \vec{C}_h [19, 20, 22] :

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (\text{I.1})$$

En tenant compte de l'un des sites cristallographiquement équivalent O, A, B et B', et en faisant rouler la feuille en nid d'abeilles de sorte que les points O et A coïncident (et les points B et B' coïncident), un modèle de document de nanotube de carbone peut être construit. Le vecteur OB définit un autre vecteur nommé vecteur de translation, \vec{T} [19,20].

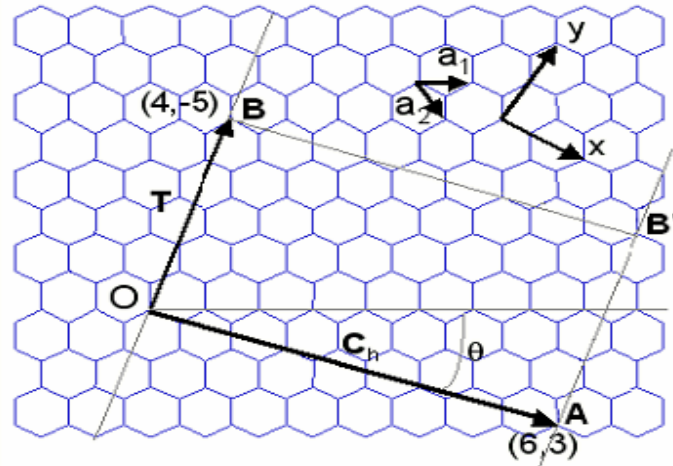


Figure I.10. Définition des vecteurs de chiralité et de translation [19, 20].

Le rectangle généré par le vecteur chiral \vec{C}_h et le vecteur de translation \vec{T} , c'est à dire le rectangle OAB'B dans la figure I.10 est appelé la cellule unité pour le nanotube. (n, m) sont des nombres entiers ($0 \leq |m| \leq n$) et a_1, a_2 sont les vecteurs unitaires du réseau hexagonal [22]. a_1 et a_2 peuvent être exprimés à l'aide des coordonnées cartésiennes (x, y) :

$$a_1 = (3/2a_{cc}, \sqrt{3}/2a_{cc}) \quad (I.2)$$

$$a_2 = (3/2a_{cc}, -\sqrt{3}/2a_{cc}) \quad (I.3)$$

Ici, la longueur de la liaison d'atomes de carbone, pour le graphite $a_{cc} = 1,42 \text{ \AA}$. C'est la même valeur qui est souvent utilisée pour les nanotubes. Mais, $a_{cc} = 1,44 \text{ \AA}$ est une meilleure approximation des nanotubes. Il doit vraiment dépendre de la courbure du tube. Nous voyons à partir des équations (I.2) et (I.3) que les longueurs des $a_1, a_2, |a_1|, |a_2|$ sont toutes deux égales à $\sqrt{3} a_{cc} = a$.

La longueur du vecteur chiral est la longueur périphérique du nanotube [20, 22] :

$$L = |\vec{C}_h| = a\sqrt{n^2 + nm + m^2} \quad (I.4)$$

On peut aussi connaître l'angle d'hélicité θ caractérisant l'enroulement de la feuille de graphène. Cet angle est formé par le vecteur \vec{C}_h et le vecteur de base a_1 et il est exprimé par [23]:

$$\theta = \arctan \left\{ \frac{\sqrt{3}m}{m + 2n} \right\} \quad (I.5)$$

Le diamètre du tube d_t est alors donné par :

$$d_t = \frac{L}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2} \quad (I.6)$$

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

Le vecteur de translation T , qui est perpendiculaire au vecteur chiral, est exprimé en [10,23] :

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (I.7)$$

$$T = [(2m + n)a_1 - (2n + m)a_2]/d_R$$

$$d_R = \begin{cases} d & \text{si } n-m \text{ n'est pas multiple de } 3d. \\ 3d & \text{si } n-m \text{ est multiple de } 3d. \end{cases}$$

Et d_R est le plus grand diviseur commun de (n, m) .

Nous obtenons ainsi trois grandes catégories de nanotubes suivant le pliage du plan graphitique [23,24] :

- ✓ ceux avec la structure "armchair" (n,m) , dans laquelle certaines liaisons C-C sont perpendiculaires à l'axe du nanotube (figure I.11.a). $(n=m)$
- ✓ ceux avec la structure "zig-zag" $(n,0)$ dans laquelle certaines liaisons C-C sont parallèles à l'axe (figure I.11.b).
- ✓ ceux avec une structure appelée chirale (n, m) présentant une symétrie miroir (figure I.11.c)

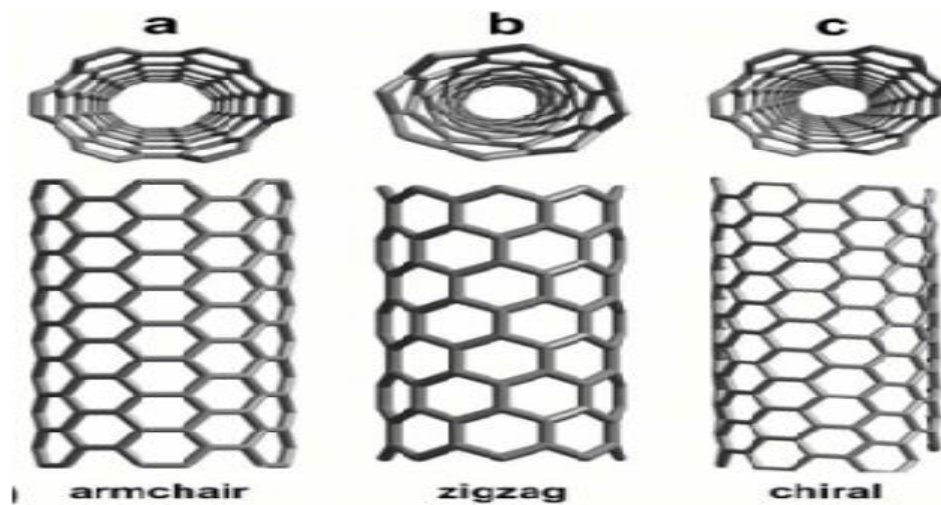


Figure I.11. Chiralité des nanotubes de carbone [23].

Le tableau I.2 présente la classification des nanotubes et les caractéristiques correspondantes.

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

Type	Vecteur de Chiralité, C_h	Longueur du Vecteur de Chiralité, L	Angle de chiralité, θ	Nombre des hexagones dans une cellule unité, N
Armchair	(n,n)	$\sqrt{3} na$	30°	$2n$
Zigzag	$(n,0)$	Na	0°	0
Chiral	(n,m)	$a\sqrt{n^2 + nm + m^2}$	$0^\circ < \theta < 30^\circ$	$2(n^2+nm+m^2)/d_R$

Tableau I.2. La classification des nanotubes [23,24].

I.5.3.1. Zone de Brillouin du nanotube

Nous avons vu que la cellule unité d'un CNT est définie par les vecteurs \vec{C}_h et T. Par analogie à ce qui précède, on définit deux vecteurs unités k_1 et k_2 du réseau réciproque du nanotube dans le réseau réciproque 2D du graphène définis par les conditions d'orthogonalité [17]:

$$C_h \cdot k_1 = 2\pi, C_h \cdot k_2 = 0, T \cdot k_1 = 0 \text{ et } T \cdot k_2 = 2\pi \quad (\text{I.8})$$

En effet, le vecteur d'enroulement \vec{C}_h retourne sur lui-même selon la circonférence, et impose donc des conditions de périodicité identiques sur la fonction d'onde dans cette direction azimutale. A partir du vecteur d'onde k , on déduit [21]:

$$C_h k = 2\pi q \quad (\text{I.9})$$

Où q désigne un entier. Le vecteur d'onde k est quantifié selon la direction transverse (azimutale pour le tube). Seul le vecteur continu k_2 parallèle à T est un vecteur du réseau réciproque, k_1 ne donnant que les valeurs discrètes permises du vecteur d'onde k selon la direction du vecteur chiral \vec{C}_h . Notons que nous considérons k_2 continu, ce qui est valable dans le cas d'un tube suffisamment long pour ne pas avoir à considérer la quantification du vecteur d'onde selon cette direction [11,25].

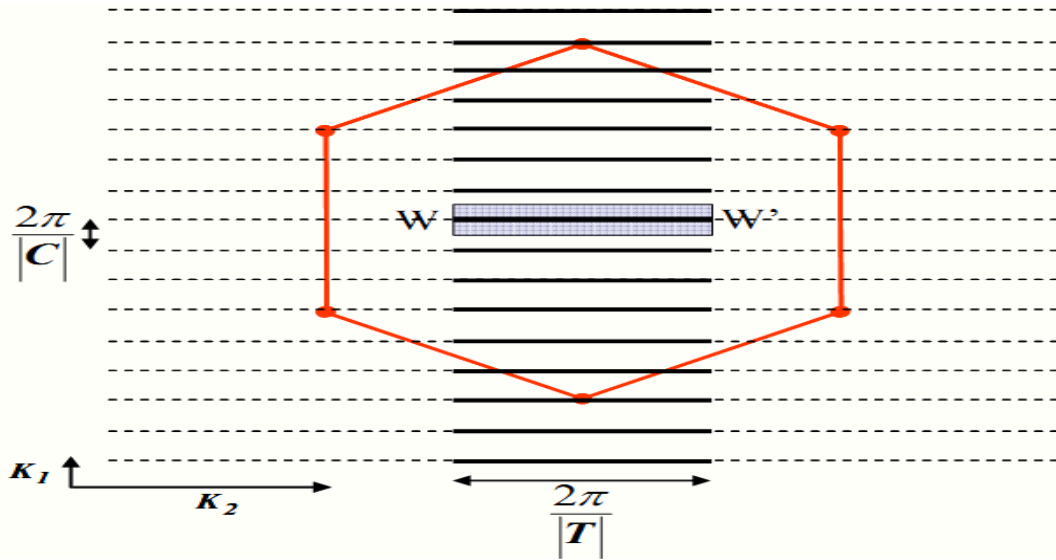


Figure I.12. La zone de Brillouin 1D d'un nanotube de carbone [21,25].

La zone de Brillouin du nanotube correspond au seul segment WW' compris dans le rectangle (figure I.12). Les lignes pointillées correspondent aux valeurs permises de k_j espacées de :

$$|K_1| = 2\pi/|C| = 2/d_t \quad (\text{I.10})$$

Au final, la zone de Brillouin du nanotube considéré, étendue à l'espace réciproque 2D du graphène, correspond aux $N-1$ segments représentés en noir (figure I.12) de longueur [21,25].

$$|\vec{K}_2| = \frac{2\pi}{|\vec{T}|} \quad (\text{I.11})$$

A partir de cette zone de Brillouin étendue, on obtient la zone de Brillouin 1D en translatant tous les segments de sorte à correspondre avec WW' : cela s'appelle la méthode de « zone- folding ».

I.5.4. Nanotube de carbones semi-conducteurs et métalliques

Il ya certaines conditions exprimées en fonction de (n, m) pour un nanotube métallique ou semi-conducteur. La condition pour le nanotube métallique est que $(2n + m)$ ou de façon équivalente $(n-m)$ est un multiple de 3.

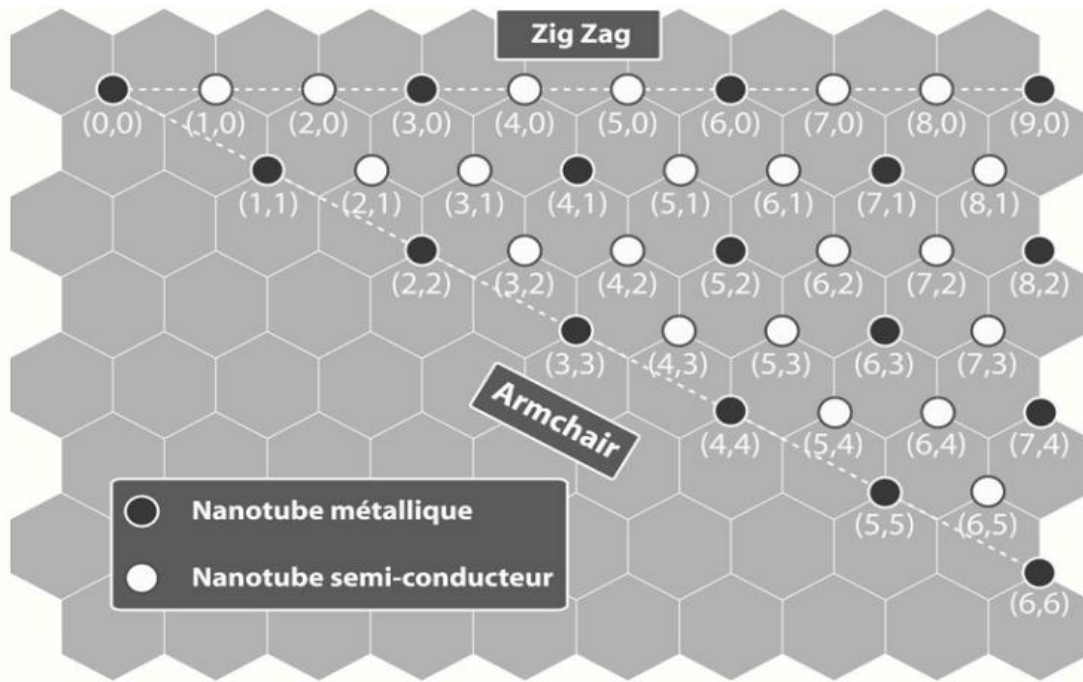


Figure I.13. Schémas des nanotubes métalliques et semi-conducteurs [26, 27]

Par conséquent, les nanotubes armchair (n, n) sont toujours métalliques, et les nanotubes zigzag $(n, 0)$ sont métalliques lorsque n est égal à un multiple de 3. Pour un nanotube semi-conducteur, $(n-m)$ n'est pas un multiple de 3 [26, 27]. La figure I.13, montre quels sont les nanotubes métalliques et ceux qui sont semi-conducteurs.

I.6. Propriétés des Nanotubes de Carbone

Les propriétés uniques des nanotubes de carbone résultent directement de leur filiation structurale avec le graphène, de leur forme tubulaire et de leur diamètre nanométrique. Le procédé de synthèse et la méthode de purification utilisés influent également très fortement sur les propriétés physico-chimiques des nanotubes de carbone.

I.6.1. Propriétés physiques

Le diamètre des nanotubes de carbone dépend naturellement du nombre de feuillets de graphène comme indiqué dans le tableau I.3.

Nanotube de carbone	Mono parois	Multi parois
Diamètre externe	0.4 à 3 nm	2 à 25 nm
Longueur	100 nm à plusieurs μm	1 μm à 1 cm

Tableau I.3. Les caractéristiques géométriques des nanotubes de carbone [28,29].

Les nanotubes de carbone mono-feuillet se regroupent sous forme de fagots (figure I.9.b) dont le diamètre peut varier de 10 à 30 nm. Un diamètre de 1 nm est de l'ordre de la taille de la double hélice de la molécule d'ADN indiquant le caractère moléculaire d'un nanotube de carbone. Par ailleurs, du fait de leur dimensions (nanométrique pour la section et micrométrique pour la longueur), les nanotubes de carbone sont considérés comme des molécules unidimensionnelles de fibres (longueur supérieure à 5 μ m, diamètre inférieur à 3 μ m et rapport longueur/diamètre supérieur à 3) [17, 30,31].

I.6.2. Propriétés électriques

Les propriétés électriques des CNT dépendent principalement de leur chiralité, de nombreuses études théoriques ont démontré que ces derniers possèdent une conductivité électrique élevée [10].

En effet les modélisations des bandes d'énergies confirment une des caractéristiques surprenantes des CNT : leur comportement métallique ou semi-conducteur, en fonction de leur diamètre et de leur hélicité. La structure particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être importante le long de l'axe du nanotube [30].

La conductivité électrique d'un CNT métallique peut atteindre 10⁵ S cm⁻¹ et celle d'un CNT semi-conducteur est comprise entre 0,1 et 100 S.cm⁻¹. Le cuivre est généralement utilisé dans les applications où une conductivité élevée est nécessaire, cependant il ne conserve pas sa conductivité apparente à l'échelle de dimensions nanométriques. La mobilité électronique mesurée sur un nanotube est jusqu'à 3 ordres de grandeur plus importantes que celle du cuivre (100 000 cm².V⁻¹ s⁻¹) à 300 K [32, 33].

A basse température, les nanotubes mono-feuillet métalliques, individuels ou regroupés en petits fagots, se comportent comme des fils quantiques, c'est-à-dire que la conduction a lieu au travers de niveaux électroniques discrets bien séparés quantiquement et cohérents sur plusieurs centaines de nanomètres. Les nanotubes de carbone peuvent également transporter des densités de courant remarquables, voisines de 10¹⁰ A/cm² soit au moins deux ordres de grandeur de plus que les métaux. Enfin, les nanotubes multi-feuillets peuvent être supraconducteurs à très basse température [34,35].

La résistivité électrique des nanotubes de carbone est de :

- 10⁻³ à 10⁻⁴ Ω . Cm pour les nanotubes de carbone mono-feuillet métallique.
- 10 Ω . Cm pour les nanotubes de carbone mono-feuillet semi-conducteurs.

- $10^4 \Omega \cdot \text{cm}$ pour les nanotubes de carbones multi-feuillets.

Les nanotubes de carbone mono-feuillet possèdent de meilleures caractéristiques électriques que les multi-feuillets en raison notamment des interactions électriques, de type Van der Waals, qui surviennent entre les différents feuillets de graphène [36,37].

I.6.3. Propriétés mécaniques

La présence de fortes liaisons chimiques C-C dans le graphite rend les propriétés des nanotubes de carbone exceptionnelles. En effet une importante énergie, équivalente à $348 \text{ KJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, est nécessaire pour dissocier une telle liaison. Grâce à ces liaisons fortes entre les atomes, les nanotubes de carbone présentent un module d'Young équivalent à celui du diamant (tableau I.4) [10,11,35].

De plus, le nanotube de carbone est 100 à 200 fois plus résistant que l'acier pour un poids 6 fois moindre (à section équivalente). Il allie à cette exceptionnelle résistance à la déformation une très grande flexibilité. Ainsi, malgré sa rigidité élevée, le nanotube de carbone a une facilité à se courber jusqu'à des angles très importants, à se déformer et à se tordre selon son axe. La courbure semble entièrement réversible jusqu'à un angle critique [35-38].

Nanotube de carbone Propriétés	Mono-feuillet	Multi-feuillets
Limite d'élasticité	45 GPa	150 Gpa
Module d'Young	1 à 1,4 TPa	1,4 à 1,6 Tpa
Module de cisaillement	0,27 TPa	0,44 à 0,47 Tpa
Module de flexion	0,2 à 1,2 TPa	3 à 30 Gpa

Tableau I.4. Quelques propriétés mécaniques des nanotubes de carbone [35-38].

Les nanotubes exhibent donc des propriétés mécaniques uniques. Leur grande flexibilité associé à un module d'Young élevé leur confèrent un comportement que certains n'hésitent pas à décrire comme étant un comportement super élastique. Ce sont donc vraiment des candidats idéaux pour ce type de fonctions électromécaniques [39, 40].

I.6.4. Propriétés thermiques

Selon leur nombre de parois et le degré de perfection de leur structure, les nanotubes de carbone peuvent présenter une conductivité thermique très élevée pouvant atteindre 6000 W/mK (par comparaison, la conductivité thermique du diamant varie

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

entre 1000 et 2600 W/mK) ce qui les place parmi les meilleurs conducteurs thermiques connus [32,36]. Tableau I.5

Nanotube de carbone Propriétés	Mono-feuillet	Multi-feuillets
Stabilité thermique (K)	< 2100	> 3200
Conductivité thermique (W/mK)	6000	< 2000

Tableau I.5. Quelques caractéristiques thermiques des nanotubes de carbone [32, 35, 36].

La mesure des propriétés thermiques d'un nano-objet comme le nanotube est délicate. Cependant, quelques études expérimentales ont permis de mesurer la conductivité thermique de nanotubes multi feuillets, mais significativement plus faible que celle du graphite. Ces résultats sont à priori décevants, mais ils peuvent s'expliquer en considérant le fait que tous les feuillets ont participé à la conduction thermique alors que seul le feuillet externe a été utilisé pour les mesures. Ces considérations permettent d'estimer la magnitude de la conduction d'un tube mono- feuillet du même ordre de grandeur que celle du graphite [15, 35, 41].

I.6.5. Propriétés optiques

Grâce à leur structure électronique les nanotubes possèdent des propriétés optiques remarquables. Les propriétés électro-optiques uniques des films de SWCNT rendent ce matériau particulièrement intéressant pour la conception de dispositifs optoélectroniques [36]. L'étude de ces propriétés optiques a permis de développer de nombreuses stratégies pour caractériser la fonctionnalisation des nanotubes de carbone [42,43]. Néanmoins il s'agissait d'études fondamentales des propriétés des SWCNT, et ces publications comportaient soit uniquement des spectres de l'intensité réfléchie « R », soit de l'intensité transmise « T ». Des mesures de réflexion ont été réalisées sur les CNT (Figure I.14), ils sont capables d'absorber 99,9% de la lumière, ce qui est 3 fois mieux que les alliages réputés comme étant le matériau le plus sombre [10,44]. On peut déduire qu'il est très proche d'un corps noir.

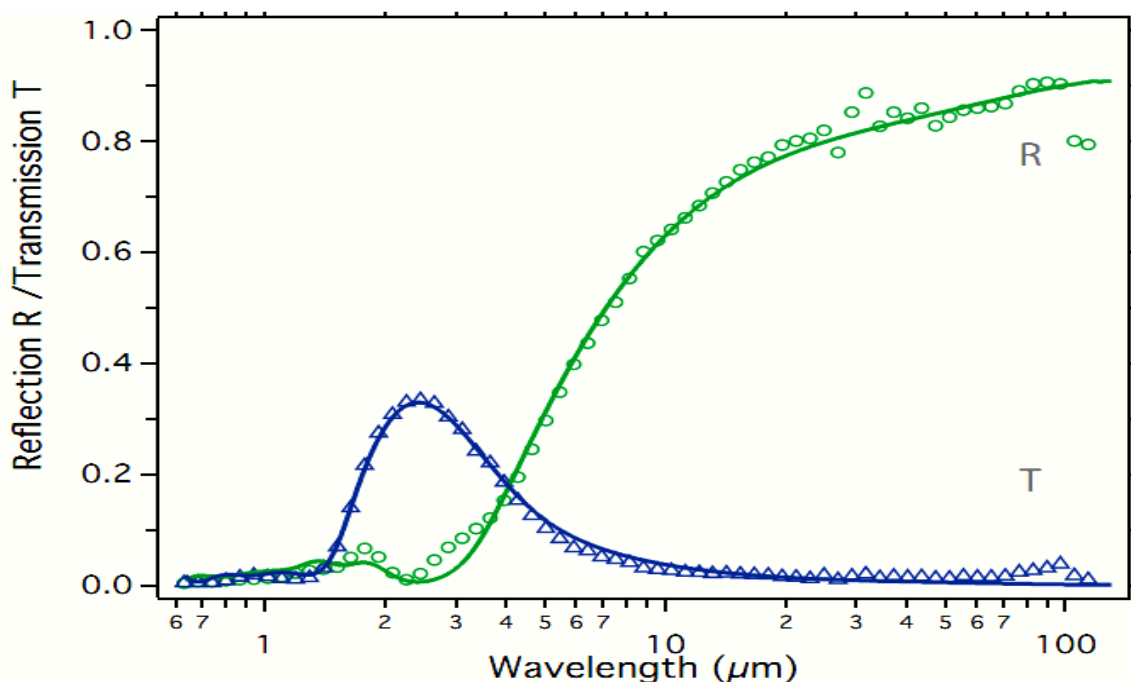


Figure I.14. Réflexion R et transmission T d'un film de nanotubes de carbone mono-paroi [44].

I.6.6. Propriétés chimiques

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés chimiques très attrayantes. Il est en effet possible [10, 11, 17, 36]:

- ✓ 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 mono-feuillet d'un faisceau (intercalation inter-tubulaire) ainsi qu'entre les différentes parois d'un nanotube multi-feuillets (intercalation inter-planaire) afin par exemple de contrôler les propriétés électroniques des nanotubes semi-conducteurs. De remplir par capillarité le canal central des nanotubes de carbone mono- et multi-feuillets 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. Elle est voisine de $2700 \text{ m}^2/\text{g}$ pour les nanotubes mono-feuillet et est généralement inférieure à $1300 \text{ m}^2/\text{g}$ pour les nanotubes multi-feuillets.
- ✓ Par ailleurs, les nanotubes de carbone présentent une excellente inertie chimique et une très bonne stabilité à haute température sous atmosphère inerte. Ils sont

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

ainsi insolubles dans les solvants organiques et dans l'eau.

I.7. Applications des nanotubes de carbone

Du fait de leurs propriétés exceptionnelles, les CNT sont adaptés pour des applications multifonctionnelles couvrant une gamme variée de matériaux pour des usages biologiques ou électroniques. Par exemple, s'agissant de la conductivité (tableau I.6), les SWNT (surtout les métalliques) sont en passe d'être efficacement utilisés comme interconnexions entre les niveaux métalliques dans la fabrication des circuits intégrés [20,45]. En comparaison avec du cuivre, les nanotubes permettent une meilleure conductivité électrique et thermique [32, 34, 35]. Par ailleurs, les nanotubes réagissent facilement avec beaucoup de produits chimiques [11].

Propriétés	Type du CNT	Réalisation
Conductivité	M_SWNT	Interconnexions entre les niveaux métalliques dans les circuits intégrés
Conductivité	SWNT	Détecteurs chimique et biochimique
Conductivité	SWNT, MWNT	Détecteurs du gaz NH ₃

Tableau I.6. Des applications électroniques réalisées avec des CNT dans divers domaines [45, 46].

En se basant sur les propriétés optoélectroniques ou photoniques non linéaires des filtres, des interrupteurs et des guides optiques peuvent être réalisés avec des nanotubes mono- parois pour les communications optiques [47].

La plupart des applications actuelles utilisent les propriétés structurelles des nanotubes [45, 47]:

- ✓ Nouveaux vêtements plus résistants ou imperméables, gilet pare-balles.
- ✓ Du polyéthylène (plastique) avec des nanotubes intégrés peut devenir 30% plus élastique.
- ✓ Les nanotubes peuvent améliorer la plupart des utilisations actuelles de fibres de carbone (raquettes de tennis, cadres de vélos, des accessoires de voiture..... etc.)

Les propriétés chimiques peuvent aussi servir [20, 45]:

- ✓ Stockage d'hydrogène à base de nanotubes, spécialement dans des piles à

combustible.

I.7.1. Transistor à effet de champ

Les nanotubes semi-conducteurs peuvent servir de transistors. Le nanotube est le candidat le plus prometteur en raison de ses propriétés uniques et sa taille nanométrique. Les transistors sont les éléments de base de tous les circuits intégrés. Un transistor possède trois bornes, l'une d'entre elles (grille ou porte) commandant la circulation du courant entre les deux autres (source et drain) séparées par un canal en matériau semi-conducteur [44, 46, 48].

Dans les dispositifs classiques le canal est réalisé en silicium. Dans le CNTFET le canal est formé par un seul semi-conducteur CNT. Sur les caractéristiques électriques des nanotubes de FET on remarque que l'on peut modifier la quantité de courant (I_{SD}) s'écoulant dans le canal du nanotubes par un facteur important en changeant la tension appliquée à une grille (V_G) figure I.15 [44,49].

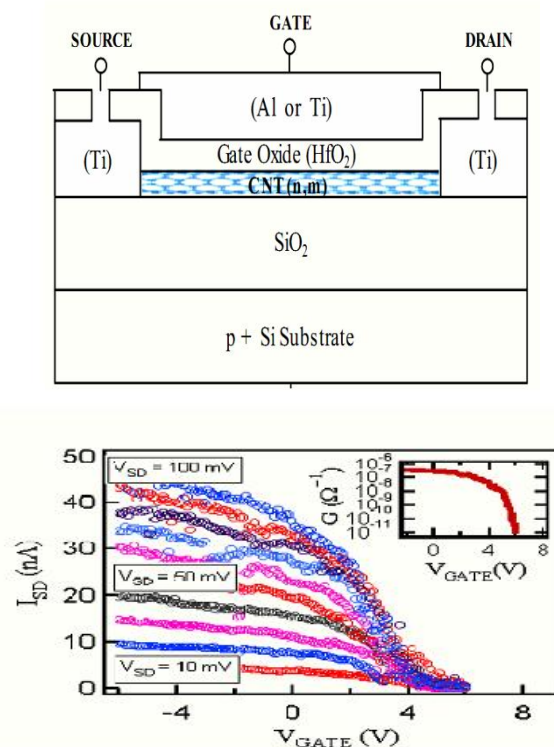


Figure I.15. a) Vue en coupe transversale d'un CNTFET, b) caractéristique électrique d'un CNTFET [49].

I.7.2. Source d'émission par effet de champ

Les dispositifs hyperfréquences à vide pour les systèmes de télécommunication installés dans les satellites et les engins spatiaux qui fonctionneront à des bandes de fréquences supérieures à celles actuellement disponibles requièrent des densités élevées

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

de courant transportées par des électrons comprises entre 5 et 20 A/cm². Les cathodes à émission de champ fabriquées à partir de nanomatériaux dont la structure est riche en carbone présentent une alternative intéressante au remplacement à faible coût des cathodes thermoélectroniques [44,50] (figure I.16).

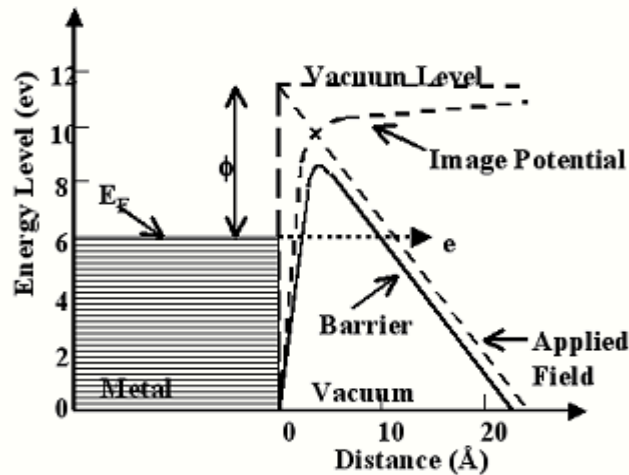


Figure I.16. Émission par effet de champ de films CNT [44,50]

Les nanotubes de carbone sont particulièrement bien adaptés à l'extraction d'électrons à température ambiante. Cette propriété, directement liée à leur forme, peut être mise en œuvre pour deux types d'applications [44]: la réalisation d'écrans plats et l'utilisation de micro-canons à électrons pour élaborer les circuits électroniques du futur.

Une des applications directe des nanotubes est la production d'écrans où la taille pourrait atteindre un mètre de diagonale. Grâce à l'introduction des nanotubes, de nouvelles structures d'écrans ne comportant pas de motifs inférieurs à 10µm, seront facilement réalisables sur une grande surface [51].

I.7.3. Autres applications électroniques

Les NEMS

Les NEMS sont des nano- systèmes électromécaniques de taille nanométrique dont les éléments sont libres de se mouvoir. On peut y inclure les oscillateurs et les diodes. Deux applications que nous pensons intéressantes, sont actuellement étudiées et même utilisées dans des circuits, les NRAM et les nano-Switch, tous les deux formés par des nanotubes de carbone qui sont actionnés de manière électrostatique [35].

Les NRAM :

Les NRAM (Nonvolatile Random Access Memory) sont une nouvelle famille

Chapitre I : Etat de l'art des Nanotubes de Carbone

de mémoire informatique qui a pu apparaître grâce aux nanotubes de carbone, le principe étant d'utiliser des réseaux croisés de nanotubes activés électro-statiquement afin de former ou non un contact entre eux [35,8]. Lorsque deux nanotubes sont en contact on forme, l'état binaire 1 et dans l'autre cas le 0, chacune des lignes du réseau étant connectée à un plot. Une description d'un tel circuit est représentée sur la figure I.17.

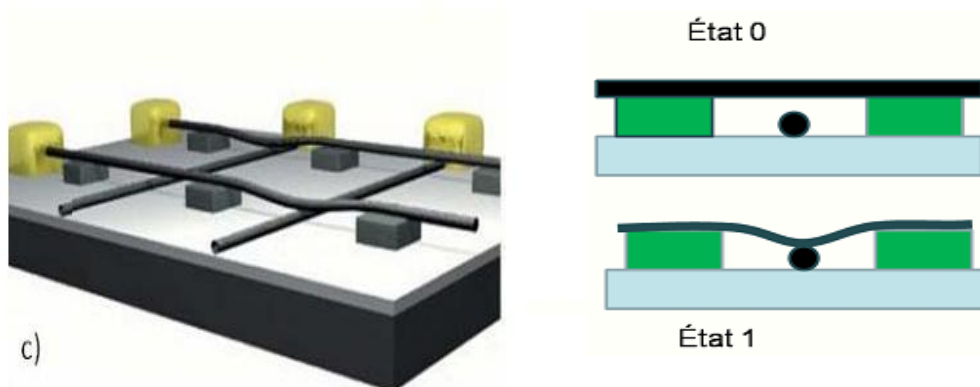


Figure I.17. Concept de NRAM en CNT [35,8]

Le photovoltaïque :

Les grandes densités de courant qu'ils peuvent supporter, leur stabilité chimique, leur faible résistivité et leur grande surface spécifique accessible, mettent les CNT au premier rang des candidats pour de nombreuses applications entrant dans le stockage et la production d'énergie [25].

Le domaine porteur du photovoltaïque pourrait dans le futur, utiliser des CNT et permettre aux cellules à base de polymères d'atteindre des rendements qui les rendraient compétitives (car moins chères à la production et moins polluantes) face aux technologies du silicium [25,26].

Chapitre II

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

II.1. Introduction

Les limites tant fondamentales qu'économiques de la technologie CMOS ont poussé la communauté scientifique à s'investir dans l'étude de technologies alternatives [51]. Ce besoin a été traduit par la naissance de l'électronique moléculaire comme le transistor à nanotube de carbone. Ce transistor à effet de champ est formé par un ou plusieurs nanotubes de carbone qui jouent le rôle du canal.

Pour des nanotubes de carbone dont la longueur est inférieure au-libre parcours moyen, les électrons qui y circulent ne subissent que peu de collision et garde une haute mobilité ce qui se traduit par un transport quasi-balistique tout au-long du canal.

Toutefois, cette particularité des transistors à nanotube de carbone est fortement dépendante des paramètres technologiques et des procédés de fabrication et d'intégration des transistors à effet de champ.

II.2 Les transistors FET à base de nanotube de carbone : CNTFET

II.2.1 Procédés de fabrication des CNTFET

Les nanotubes de carbone peuvent être synthétisés par diverses méthodes avant d'être intégrés dans des configurations de transistors MOS pour former les CNTFET. Parmi les méthodes de synthèse de nanotube de carbone les plus utilisées, on peut citer : l'évaporation par arcs électriques [52], l'ablation laser [53] et le dépôt chimique en phase vapeur [54]. Le tableau II.1 suivant donne quelques caractéristiques spécifiques à chacune de ces trois méthodes de synthèse.

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

Technique de Synthèse	Utilisation de Catalyseur	Nature des nanotubes obtenus	Température de synthèse	Avantage/Inconvénient
<i>Évaporation par arcs électriques</i>	catalyseur (Fe, Ni, Co, Y, Gd)	Nanotubes mono-parois	3000°C à 6000°C.	Economique + Méthode relativement simple/Délicatesse pour l'obtention d'un type unique de nanotube
<i>Ablation laser</i>	Catalyseurs Métalliques	Nanotubes mono-parois	800° (laser pulsé) 3000 K (laser continu)	Nombre restreint de paramètres de contrôle de la synthèse/Méthode plus coûteuse
<i>Dépôt chimique en phase vapeur</i>	Avec (PECVD) ou sans catalyseur	Nanotubes mono ou multi parois	450°C à 1100°C suivant le gaz utilisé	Méthode moins coûteuse + Production en grande quantité des CNT/Présence de défauts dans les CNT

Tableau II.1 -Caractéristiques des différents procédés de synthèse des nanotubes de carbone [54].

II.2.1.1 Configuration en grille arrière

Le transistor à nanotube de carbone (en anglais Carbon NanoTube Field Effect Transistor : CNTFET) a été cité pour la première fois en 1998 par deux groupes de chercheurs. Le premier est issu de l'université Delft au Pays-Bas [55] et le deuxième appartient à la multinationale américaine IBM (International Business Machine) [56]. Les nanotubes qui sont utilisés dans le CNTFET [56] (figure II.1) sont synthétisés par ablation laser avec un dopage de Nickel (Ni) et de Cobalt (Co) pour favoriser la

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

croissance des nanotubes de types arm chairs de diamètre d'environ 1,6nm [57 ,58]. Pour dissocier les nanotubes et éliminer les impuretés (fagots et résidus de carbone) résultant du procédé de synthèse, un nettoyage de l'échantillon est assuré par traitement ultrasonique dans une solution de type H_2SO_4/H_2O_2 .

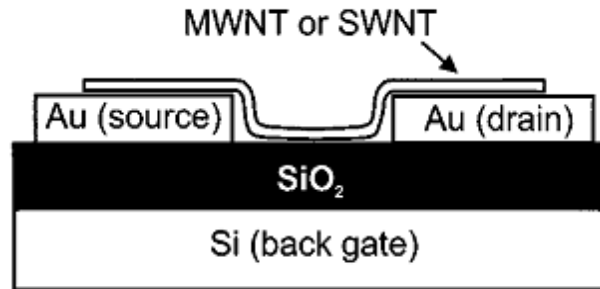


Figure II.1. Coupe transversale d'un transistor à nanotube de carbone en configuration de grille arrière. Le nanotube de carbone relie les deux électrodes en "Au" de la source et du drain [56].

Par la suite, ces nanotubes sont dispersés et positionnés par pointe au microscope à force atomique (ou en anglais : AFM pour Atomic Force Microscope) sur un substrat en silicium couvert lui-même par une couche d'oxyde SiO₂ d'épaisseur égale à 140 nm avec des contacts pré-localisés en Au formant ainsi une configuration de transistor en grille arrière ou enterrée (en anglais : Back-gate configuration). Les contacts en Au des accès source et drain ont une épaisseur égale à 30 nm et ils sont définis par lithographie à faisceau d'électrons.

Depuis ce premier transistor, les procédés de fabrication ont nettement été améliorés pour mieux aligner les nanotubes de carbone et bien contrôler leur contact avec le métal des accès. Ainsi, la méthode de synthèse de nanotube par dépôt chimique en phase vapeur (CVD) a été adoptée pour faire croître directement les nanotubes sur les électrodes source et drain du transistor [59, 60]. Ce procédé de fabrication fait appel à trois étapes de lithographie par faisceau d'électrons focalisé (ou en anglais : EBL pour Electron Beam Lithography) et de photolithographie comme le schématise la figure II.2.

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

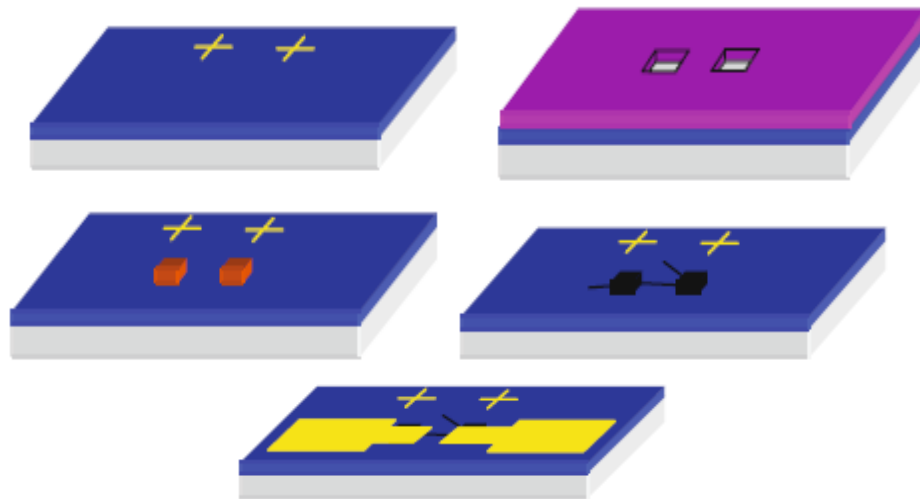


Figure II.2. Procédé de fabrication de CNTFET. (a) Marquage du substrat ; (b) Ouverture pour dépôt du catalyseur dans la photo-résine ;(c) Ajout du catalyseur et élimination de la photo-résine ;(d) Croissance des nanotubes par dépôt chimique en phase vapeur ; (e) Dépôt des électrodes.

Un troisième procédé de fabrication consiste à faire croître directement les nanotubes sur le métal des électrodes comme le montre la figure II.3 [61]. Ainsi, les nanotubes sont suspendus sur des tranchés du substrat et leurs propriétés intrinsèques sont moins perturbées par les interactions avec ce substrat [62].



Figure II.3. (a) Image de microscopie à force atomique d'un nanotube de carbone mono-paroi synthétisé sur un substrat tranché de platine (Pt). (b) Image de microscopie à effet tunnel de la partie suspendu du nanotube [61].

Cette méthode s'avère plus difficile à mettre en œuvre que celle qui consiste à faire croître les nanotubes de carbone directement sur le substrat du fait que le métal

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

des électrodes absorbe l'hydrocarbure pendant l'étape de dépôt chimique en phase vapeur et influence ainsi la formation des nanotubes de carbone. En plus, la haute température de synthèse dégrade la conductivité des accès et limite ainsi les performances du transistor.

II.2.1.2 Autres types de configurations

Afin d'améliorer le couplage électrostatique entre la grille et le nanotube de carbone, d'autres configurations de CNTFET ont été créés. La figure II.4 montre deux différentes configurations : le CNTFET à grille avant (en anglais : top-gate configuration) ou le CNTFET à grille cylindrique (en anglais : wrap-around gate).

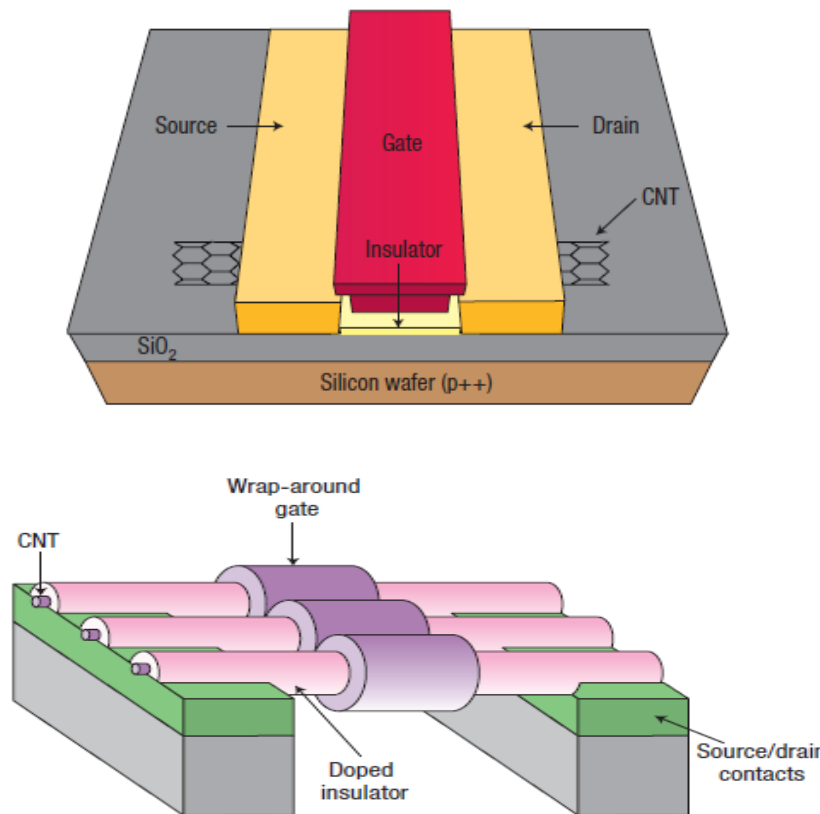


Figure II.4. Deux configurations de transistors CNTFET ; (a) en grille avant et (b) en grille cylindrique dans le cas d'un canal formé par plusieurs nanotubes mis en parallèle [63].

II.2.2 Caractéristiques électriques des CNTFET

Naturellement, les CNTFET ont un comportement de type "p" et il existe deux hypothèses expliquant cet effet. La première hypothèse met en évidence la nature intrinsèque du nanotube et prédit que lors de la formation ou bien de la purification, les

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

atomes des nanotubes de carbone entrent en réaction avec d'autres atomes dopant ce qui leur donne cette propriété [64]. La seconde hypothèse, la plus communément admise, souligne plutôt le type de contact à l'interface métal/nanotube et prévoit l'existence d'une barrière tunnel appelée barrière Schottky créée par la différence des travaux de sortie entre le métal et le nanotube semiconducteur [65]. Cette barrière est bien plus importante pour les électrons que pour les trous ce qui résulte en un comportement unipolaire de trous. J. S. Wind et al. de l'IBM T.J. Watson Research Center aux Etats Unis, ont rapporté dans la littérature [66] des caractéristiques électriques mesurées d'un CNTFET de type "p". Ce transistor est composé d'une couche d'oxyde SiO_2 d'épaisseur 120 nm sur un substrat en silicium de résistivité 0,005–0,01 $\Omega \text{ cm}$. Le canal du transistor est formé par un film de nanotubes de carbone issus d'une solution de 1,2-dichloroethane de densité égale à un nanotube par une surface de $\sim 5 \times 5 \mu\text{m}^2$. Suivant la même référence, il a été noté que les nanotubes sont synthétisés par ablation laser et ils sont de types armchair avec $n = 8$ à 11. Les accès source et drain sont formés par des contacts en titane (Ti) et espacés entre eux par une longueur de 200–300nm. Le contact de la grille, quant à lui, est formé par une couche de 50 nm d'aluminium (Al). La figure II.5 montre les caractéristiques I_D en fonction de V_{DS} pour différentes polarisations en V_{GS} (de -0,1V jusqu'à -1,1V par pas de -0,2V) au dessus de la tension de seuil $V_{th} = -0,5V$. Sur cette figure, on remarque que le transistor atteint son régime de saturation pour des polarisations en $V_{GS} - V_{th}$ supérieure à 1V avec un maximum de courant $I_{ON} = 3,5\mu\text{A}$ pour $V_{GS} - V_{th} = -1,1V$.

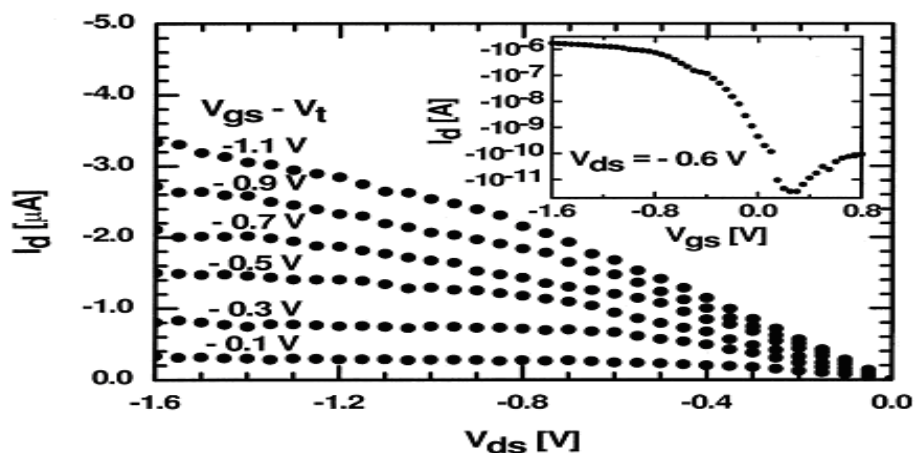


Figure II.5. Caractéristiques I_D en fonction de V_{DS} d'un CNTFET de type p en grille avant ($L=260\text{nm}$) pour différents V_{GS} et une caractéristique I_D en fonction de V_{GS} de ce transistor pour $V_{DS} = -0,6\text{V}$ [66].

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

D'autre part, l'insert de la figure II.5 montre une caractéristiques I_D en fonction de V_{GS} pour $V_{DS} = -0,6V$. Ici, le rapport I_{ON}/I_{OFF} est nettement supérieur à 10^4 avec une pente sous le seuil $\sim 130mV/déc$

Le tableau II.2 suivant résume quelques performances électriques de ce transistor et les compare avec un 15nm Si p-MOSFET [67] et un 50nm SOI p-MOSFET [68].

Métriques	260nm p-CNTFET	15nm Si p-MOSFET	50nm SOI p-MOSFET
Epaisseur d'oxyde [nm]	15	1,4	1,5
Tension de seuil V_t [V]	-0,5	$\sim -0,1$	$\sim -0,2$
Ion [$\mu A/\mu m$]	2100	265	650
Ioff [$nA/\mu m$]	150	<500	9
Pente sous le seuil [mV/déc]	130	~ 100	70
Transconductance [$\mu S/\mu m$]	2321	975	650

Tableau II.2. Performances électriques d'un CNTFET [51] comparées avec ceux d'un 15nm Si p-MOSFET [67] et un 50nm SOI p-MOSFET [68].

Sur ce tableau, le CNTFET présente un rapport de courant I_{ON}/I_{OFF} ($\sim 1,4 \times 10^4$) vingt trois fois plus grand que celui du 15nm Si p-MOSFET ($0,6 \times 10^3$). Ce rapport reste faible devant celui du 50nm SOI p-MOSFET ($\sim 7 \times 10^4$). Par contre, le CNTFET a une transconductance normalisée par unité de longueur ($2321 \mu S/\mu m$) nettement supérieure à ceux du 15nm Si p-MOSFET ($975 \mu S/\mu m$) et du 50nm SOI p-MOSFET ($650 \mu S/\mu m$).

Mais malgré ces bonnes performances pour le rapport de courant I_{ON}/I_{OFF} et la transconductance, on remarque bien que ce CNTFET souffre d'une dégradation dans la

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

penne sous le seuil qui est égale 130mV/décade contre 100mV/décade voir 70mV/décade pour les deux autres transistors MOSFET. Ces dégradations sont à l'origine de nombreuses limitations intrinsèques et technologiques. Ces limitations seront expliquées et mis en évidence dans les sections qui suivent [69].

II.3 Les différents types des transistors à nanotube de carbone

Du premier CNTFET paru en 1998 jusqu'à nos jours, différents types de transistors ont vu le jour. Les efforts ont porté sur l'amélioration du transport dans le canal formé par le nanotube dans le but d'atteindre des performances ultimes. Parmi ces types de transistors, on peut citer le CNTFET à modulation de hauteur de barrière et le CNTFET à double grille. En outre, on peut avoir des phototransistors avec les CNTFET ; c'est le cas du CNTFET à grille optique. La différence entre le principe d'opérations de ces différents CNTFET réside dans la forme adoptée pour la grille et de la nature du courant (tunnel ou thermoïonique). Ce paragraphe présente ces différents types et explique leurs régimes de fonctionnement [69].

II.3.1 Transistor à effet de champ conventionnel (CNTFET)

Le principe de fonctionnement du transistor à effet de champ conventionnel à base de nanotube de carbone (Carbon Nanotube Field Effect Transistor pour CNTFET) est très similaire à un MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor) en considérant le remplacement du matériau de canal pour profiter du transport balistique dans le CNT. La représentation schématique du transport d'électron montrant le vecteur d'onde dans un CNTFET de type N est présenté figure II.6 selon l'évolution du schéma des bandes d'énergie en fonction de la polarisation. Dans cette représentation schématique, le drain et la source sont supposés être des contacts ohmiques avec le canal du nanotube. La polarisation de la grille module le potentiel électrique du canal pour autoriser ou bloquer le transport d'électrons. Du fait de la similitude de comportement avec le MOSFET, ce transistor est souvent appelé CNTFET à modulation de hauteur de barrière ou MOS-like CNTFET. Cependant, le transport dans le CNTFET diffère par rapport à celui dans le MOSFET puisque dans des conditions de longueur du canal inférieure ou proche du libre parcours moyen des électrons, le transport électronique dans le CNTFET se caractérise par un fort taux de balisticité supérieur à 80% [70, 71]. En effet, dans les CNTFET de type N, les électrons injectés côté drain et côté source contribuent au courant balistique selon la

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

direction du vecteur d'onde longitudinal, $-k$ ou $+k$, respectivement. C'est-à-dire que les deux contributions sont de même nature mais de sens opposé. Dans les CNTFET de type P, le même principe de fonctionnement est valable avec un transport de trous dans la bande de valence.

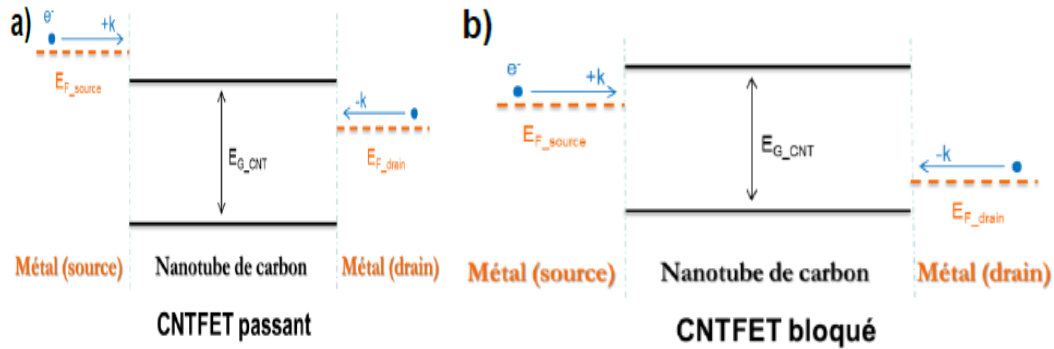


Figure II.6. Diagrammes d'énergie d'un CNTFET type N, sous deux conditions de polarisation montrant l'état passant (a) et l'état bloqué (b). La polarisation V_{DS} est positive dans les deux cas. Dans a), V_{GS} est fortement positif. Dans b), il est faiblement positif [71].

Un exemple de procédé de fabrication qui se veut proche du procédé planar utilisé pour les MOSFETs est présenté figure II.7a [72]. Le canal en CNT est réalisé par dépôt à la place de l'épitaxie dans le procédé CMOS (Complementary MOS) (II.7a.1). Ensuite, les électrodes drain et source sont déposées (II.7a.2). Selon la nature du métal et le diamètre du nanotube, le contact est de type N ou P. Par exemple, les électrodes sont en Al dans une réalisation de n-FET [73]. Un autre exemple, les électrodes sont en Au dans un p-FET [74]. Le canal est alors défini par auto-alignement après le lift-off (II.7a.3). Le diélectrique de la grille est déposé localement par CVD (II.7a.5). Puis le métal de grille est déposé (II.7a.6). L'électrode de grille est réalisée par auto-alignement après le lift-off (II.7a.7). Ce procédé de fabrication conduit à la configuration "grille avant" (top gate). Dans la configuration "grille arrière" (back gate), la grille est souvent réalisée (en Si fortement dopé ou en Al) avant l'oxyde qui est réalisé par croissance in situ. Grâce à la facilité apparente de ce procédé de fabrication, le CNTFET pourrait être compatible avec la technologie CMOS actuelle.

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

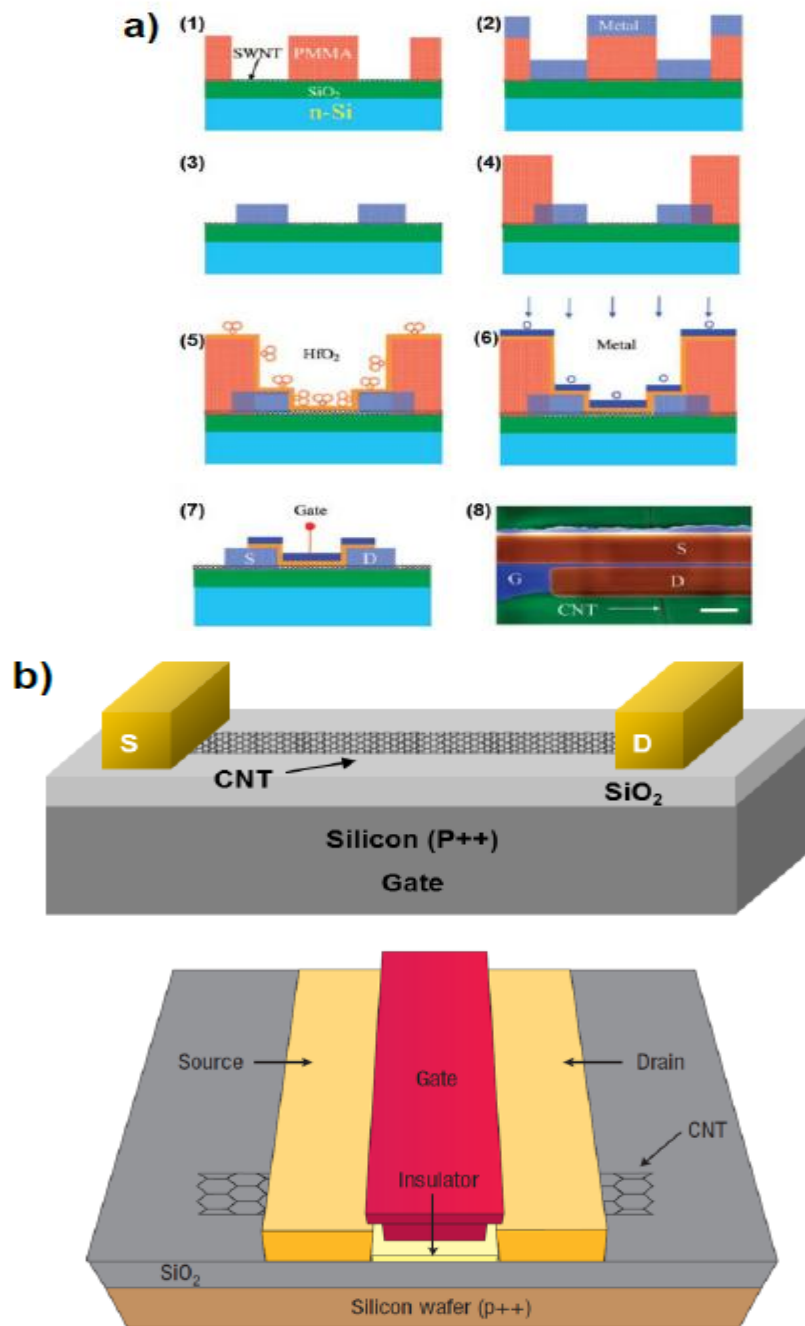


Figure II.7. a) Procédé de fabrication auto-aligné d'un CNTFET "top gate" avec oxyde de grille en HfO₂ [72]. b) Schéma de configurations de CNTFET avec grille arrière en haut (back gate) [75] et avec grille avant en bas (top gate).

En pratique, pour simplifier le procédé de fabrication donc minimiser le coût de fabrication du CNTFET, le canal est souvent sans aucun dopant. De plus, on recherche à avoir aucun dopant pour ne pas augmenter le scattering. L'oxygène n'est pas vraiment un dopant de nanotube, mais peut modifier la nature du contact métal/semi-

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

conducteur et favoriser le transport de trou [76]. En associant des métaux avec un travail de sortie supérieur à celui du nanotube, on peut obtenir des CNTFET (sans passivation) de type P [77] [74] [78]. Si on élimine l'oxygène dans le canal de nanotube par recuit sous vide, avec passivation et en choisissant des métaux avec un travail de sortie inférieur à celui du nanotube, les transistors de type N peuvent être fabriqués [76] [79].

L'inverse de la pente sous seuil des caractéristiques I_D - V_G d'un transistor FET décrit la qualité de control entre le régime passant et bloqué. Plus cette valeur est faible, plus la courbe d' I_D - V_G est abrupte, plus les niveaux ON/OFF d'un FET sont bien définis et meilleure est la performance du transistor. Le meilleur CNTFET de type P a été mesuré avec une valeur de l'inverse de la pente sous le seuil de 85 mV/décade en dopant le nanotube sur les régions d'accès avec du triéthylxonium hexachloroantimonate $(C_2H_5)_3O^+SbCl_6^-$ avec des électrodes en Pd [80]. L'inverse de la pente est de 100 mV/décade pour le meilleur CNTFET de type N sans dopage et avec des électrodes en Sc [72]. Le temps de transit ou la fréquence de transition d'un transistor est une autre figure de mérite. Un oscillateur en anneau a été publié avec une fréquence de résonance de 52 MHz soit un temps de transit de 1,9 ns par étage [81]. Un autre exemple, un CNTFET a atteint à une fréquence de coupure (cut-off frequency) de 80 GHz avec le canal en réseau des s-SWNT non-alignés [82].

La figure II.7 montre des réalisations de CNTFET avec un nanotube semi-conducteur individuel. A l'heure actuelle, ce type de réalisation en reste à l'état de démonstrateur de laboratoire. Puisque quel que soit la méthode de réalisation des s-SWNT déposés sur le substrat par spin-coating ou par croissance localisée, il n'a pas encore été mis au point de méthode permettant la réalisation d'un grand nombre de transistors avec CNT individuel selon une grande densité d'intégration. Bien souvent, le canal contient plusieurs nanotubes ou bien un réseau de nanotube plus ou moins aligné.

Néanmoins, ce composant a été beaucoup étudié et plusieurs modèles compacts ont été développés pour répondre à la demande de conception de circuits intégrés. De plus, des circuits simples avec les CNTFET conventionnels, ont été réalisés. Une porte logique, "inverseur" a été réalisée [73] [74] (figure. II.8a). Un oscillateur en anneau à 5 étages a été développé basé sur des inverseurs en CNTFET (figure II.8b) [81].

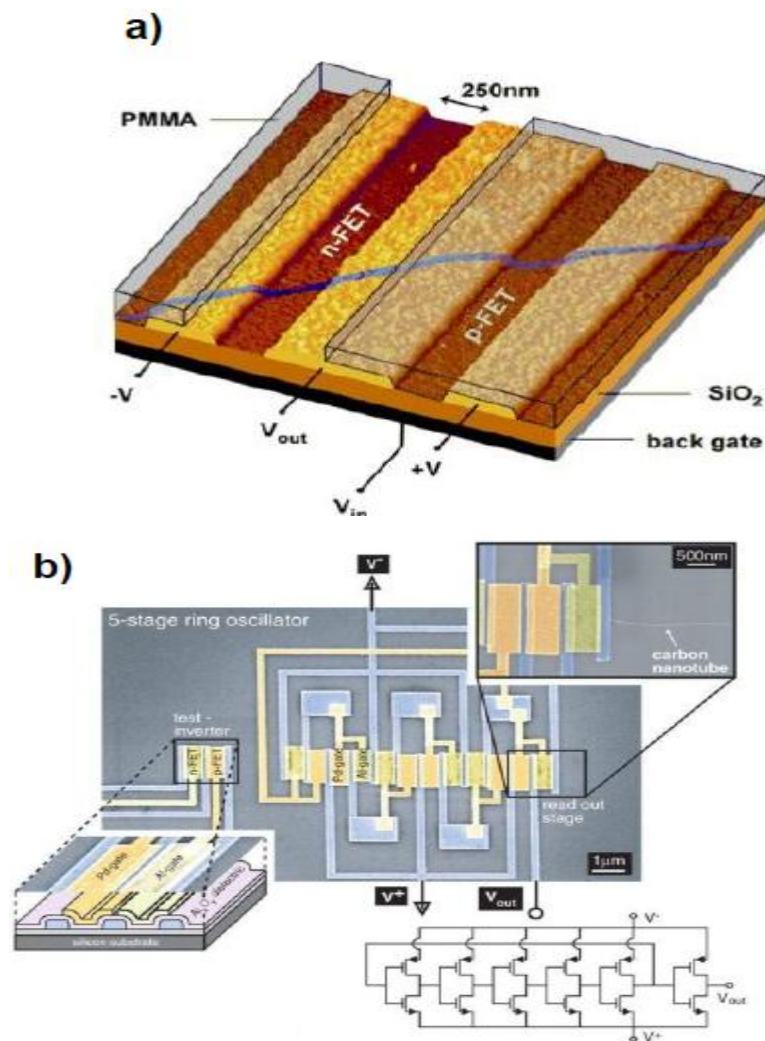


Figure II.8. a) Schéma de l'inverseur avec un p-CNTFET et un n-CNTFET [74]. b) Photo du circuit oscillateur en anneau à 5 étages [81].

II.3.2 Le transistor à double-grille : DG-CNTFET

Il existe plusieurs configurations de transistor double grille (DG-CNFET). Celle décrite ci-après est une amélioration du transistor à modulation de hauteur de barrière : au lieu d'avoir un dopant chimique et/ou un choix de métal spécifiques pour obtenir des zones d'accès source et drain de type N ou P, ces zones d'accès sont dopées électrostatiquement en polarisant une grille supplémentaire (aussi appelée grille arrière ou Back Gate -BG-) [83]. La grille avant, Front Gate -FG-, (ou grille centrale ou interne) permet alors de moduler la position du schéma de bandes d'énergie de la partie interne et donc la hauteur de barrière comme pour le transistor C-CNFET. Comme indiqué sur la Figure II.9, la grille avant, située entre le nanotube et la grille arrière, écrante l'effet de la grille arrière. Ainsi, la partie interne ne subit l'effet que de

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

la grille avant. Dans une autre configuration, le nanotube serait entre les 2 grilles (les nanotubes sont déposés avant la grille avant), la partie interne subirait l'effet des polarisations des 2 grilles [84].

Le principe du fonctionnement du DG-CNTFET est d'utiliser la grille arrière comme une pré-polarisation du transistor (figure I.9), Ensuite, la grille avant permet de bloquer ou laisser passer les porteurs désignés. Dans les CNTFET à double grille, le substrat en silicium joue un rôle important (celui de la grille arrière) en déterminant le type du porteur majoritaire ainsi que le courant I_{ON} du dispositif [85, 86] :

* Lorsque V_{GS-Si} est suffisamment négative, le dispositif fonctionne comme un FET de type P enrichi avec une tension de seuil négative et une pente sous le seuil.

* Lorsque V_{GS-Si} est positive, le dispositif fonctionne comme un FET de type N avec une tension de seuil positive.

*Lorsque la grille arrière est flottante (ou $V_{GS-Si} = 0$), le transistor est bloqué.

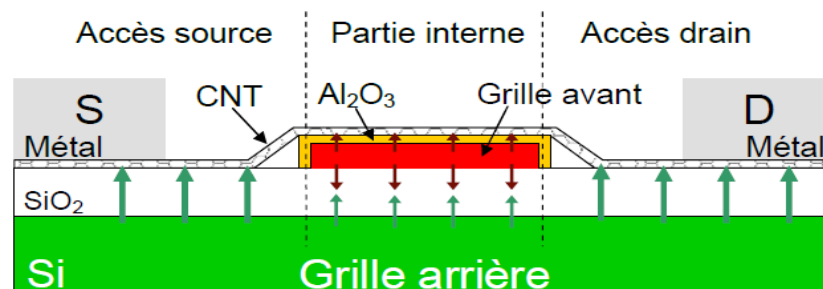


Figure II.9. Vue en coupe du DG-CNTFET. Les flèches rouges et vertes représentent l'effet de la grille avant et de la grille arrière respectivement [83].

II.3.3 Transistor à effet de champ à barrière Schottky (SB-CNTFET)

Dans les CNTFET idéaux, les contacts entre l'électrode en métal et le canal du nanotube de carbone sont de type ohmique. En pratique, les nanotubes sont de type intrinsèque et les régions d'accès ne sont pas dopées pour simplifier la fabrication de transistor. Par conséquent, le contact électrode/CNT est généralement de type Schottky plus ou moins prononcé [87, 88]. Le CNTFET à barrière Schottky (SB-CNTFET pour Schottky-Barrier CNTFET) est un transistor particulier, il montre une forte ambipolarité symétrique par rapport au CNTFET conventionnel unipolaire ou faible ambipolarité [89- 91]. Parce que le SB-CNTFET inclut à la fois un comportement de type P et de type N, la figure II.10 [90] montre pour les polarisations V_{GS} négatives, le

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

courant de trous et pour les polarisations V_{GS} positives, le courant d'électrons. Ces deux courants s'annulent pour V_{GS} tendant vers zéro lorsque V_{DS} est nul. Le principe de fonctionnement du SB-CNTFET est donc de polariser fortement la grille de manière positive ou négative pour favoriser le transport d'électrons ou de trous, respectivement (figure II.11). L'ensemble de cette caractéristique se décale sur l'axe V_{GS} selon la valeur de V_{DS} (figure II.12) [90] [92].

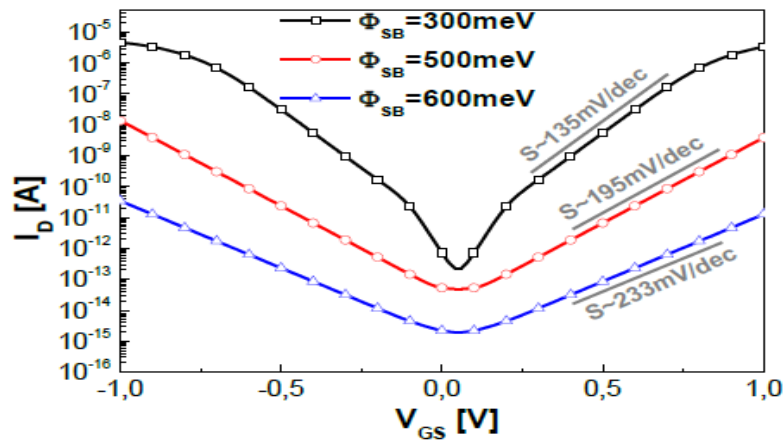


Figure II.10. Caractéristiques symétriques $I_D - V_{GS}$ simulées du modèle compact (courbe continue) et de Monte-Carlo (symboles) d'un SB-CNTFET avec un nanotube (11, 0) pour trois barrières Schottky : 300, 500 et 600 meV, $V_{DS} = 100$ mV [90].

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

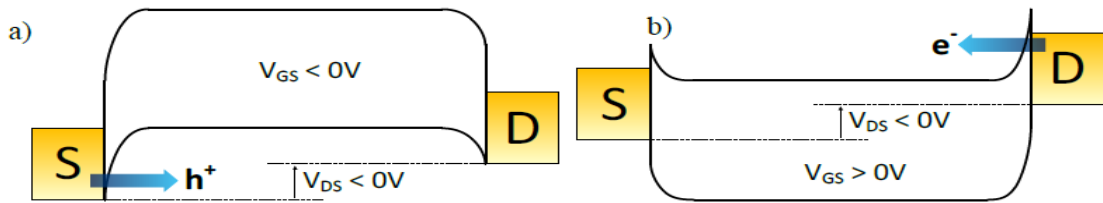


Figure II.11. Diagrammes de bande d'énergie qui expliquent pour le même V_{DS} , a) le comportement de type P donnant lieu à un courant de trous (V_{GS} négatif), b) le comportement de type N donnant lieu au courant d'électrons (V_{GS} positif).

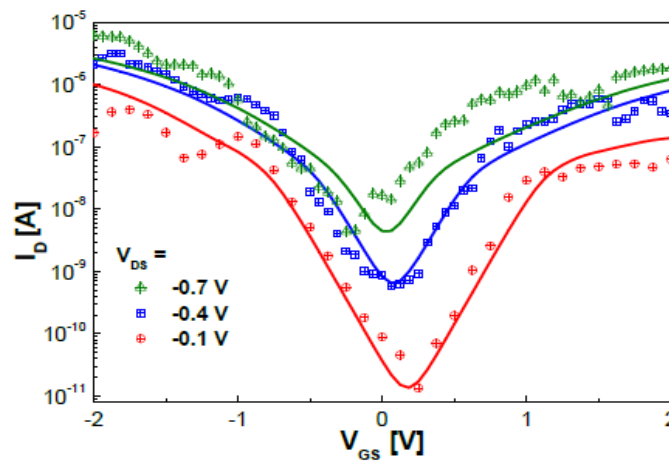


Figure II.12. Caractéristiques $I_D - V_{GS}$ mesurées pour un SB-CNTFET avec un SWNT (14, 0) avec S_iO_2 de 10 nm et les contacts métalliques en Ti pour trois V_{DS} , -0.1, -0.4 et -0.7 V [89] [90]. La symétrie des caractéristiques se décale selon la variation de V_{DS} .

Des réalisations de SB-CNTFET ont été démontrées. À partir de ce transistor, des conceptions de cellule de mémoire SRAM (*Static Random Access Memory*) en prenant quatre ou six SB-CNTFET (4T ou 6T SRAM) ont été proposées [90] [93]. Plusieurs modèles compacts ont été proposés soit par l'approximation WKB soit l'approche de la barrière Schottky effective [90] [94] [95]. D'autres études sur ces circuits [109] ont montré que le 4T et 6T SRAM permettent une puissance consommée réduite de 30% et une surface d'intégration réduite de 37% par rapport à l'équivalent SRAM en CMOS nœud technologique 65 nm. Par ailleurs, Kureshi et al. ont montré une SNM (*Static Noise Margin*) de lecture augmentée de 21% par rapport la CMOS 32 nm [93].

Chapitre II : les Composants Electroniques à base de Nanotubes de Carbone

II.3.4 Transistor à effet de champ commandé optiquement (OG-CNTFET)

Le principe de fonctionnement de ce transistor est : faire passer un courant entre les électrodes de source et de drain à travers un nanotube selon la quantité de lumière éclairant le nanotube (sans grille ni isolant par-dessus) et y générant des paires électrons-trous [96]. L'insolation du dispositif va modifier l'effet de la polarisation de grille. Le stockage des charges générées et donc la sensibilité aux photons peut être améliorée par l'ajout d'un polymère photoconducteur, situé autour du nanotube entre les électrodes de source et de drain (voir Figure I.13)[97] Dans ce cas, l'insolation du dispositif peut dominer l'effet de la polarisation de grille et le dispositif peut être dit « commandé optiquement » (Optically Gated CNFET : OG-CNFET)[97, 98]. Il est possible de choisir la longueur d'onde à laquelle le dispositif sera sensible en choisissant le polymère.

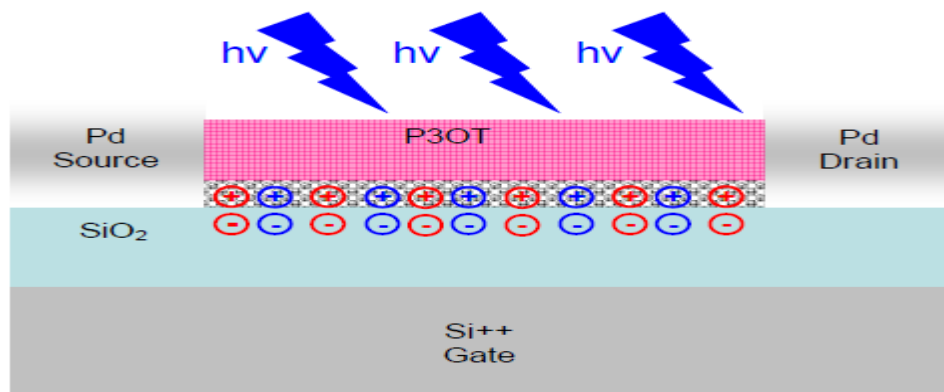


Figure II.13. OG-CNFET sous insolation. Les charges en rouge représentent le dopage de type P induit par le dépôt du polymère P3OT (poly3-octylthiophene-2,5-diyl) celles en bleu les charges photogénérées [98].

Chapitre III

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

III.1 Introduction

Les nanotubes de carbone sont prometteurs pour l'application dans les composants électroniques futurs, notamment les transistors à effet de champs [99-101].

Au fur et à mesure la technologie CMOS progresse, les dimensions des dispositifs ont été mises à l'échelle dans le régime nanométrique [102] [103]. Par conséquent, dans l'avenir, les transistors peuvent fonctionner près de leur limite balistique, ce qui rend important de comprendre la physique des dispositifs balistiques. Comme les dimensions des transistors sont mises à l'échelle, les effets quantiques, qui affectent la tension de seuil, la capacité de grille, l'effet tunnel et l'abaissement de la barrière induite par le drain (DIBL).

Les approches de modélisation quantique reposent sur une solution auto-cohérente des équations de Schrödinger et de Poisson afin d'obtenir la distribution de charge et le courant pour une géométrie de dispositif spécifique. Une solution à l'équation de Schrödinger peut être poursuivie à différents niveaux de complexité en fonction de la nature du dispositif étudié et du degré de précision souhaité.

Ce travail vise à décrire la méthode pour résoudre l'équation de Poisson et Schrödinger en mode espace basé sur le formalisme de la Fonction de Green Non Equilibré (NEGF) pour simuler le transport quantique dans ces transistors avec un accent particulier sur le schéma de solution mode-espace. Les conditions aux limites quantiques sont également données.

III.2. Transport balistique dans les dispositifs ultracourts

Avant de parler de transport balistique, il convient de discuter brièvement de la longueur caractéristique du transport, le libre parcours moyen (l_{pm}). [104]

III.2.1 La longueur moyenne libre de l'électron (libre parcours moyen)

Le libre parcours moyen, l_{pm} (electron mean free path) est la longueur moyenne que l'électron peut parcourir à l'intérieur du matériau sans collision avec le réseau cristallin du matériau. La comparaison entre cette longueur et les dimensions de l'échantillon (L = longueur et w = largeur) définissent plusieurs régimes de fonctionnement :

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

Transport diffusif : pour des échantillons dont les dimensions sont beaucoup plus grandes que l_{pm} , $l_{pm} \ll L, w$.

Transport balistique : pour des échantillons beaucoup plus petits que l_{pm} , $l_{pm} \gg L, w$. [104]

III.2.2 Transport balistique

Les modèles physiques, permettant d'obtenir les relations courant/tension dans les transistors. Elle suppose que les porteurs subissent un nombre d'interactions suffisamment important pour leur permettre d'être constamment en équilibre local avec le réseau cristallin, comme illustré schématiquement en figure III.1.a. Il existe alors une relation unique entre le champ électrique \vec{E} et la vitesse moyenne des porteurs \vec{v} : $\vec{v} = -\mu_{eff} \cdot \vec{E}$ (μ_{eff} mobilité effective). [104]

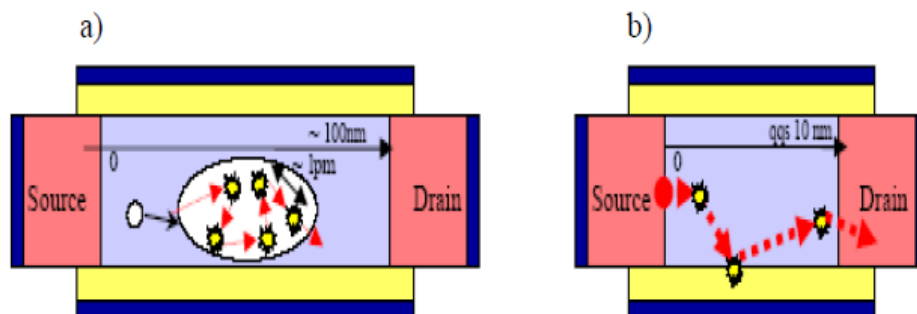


Figure III.1. Schéma d'une trajectoire typique d'un porteur avec ses interactions dans a) un transistor long et b) un transistor ultracourt. l_{pm} : libre parcours moyen des porteurs. [104]

Dans les transistors ultimes où la longueur de grille est fortement submicronique, la longueur du canal est de l'ordre de la distance moyenne entre deux interactions, appelée libre parcours moyen l_{pm} . Le nombre d'interactions subies par les porteurs lors de leur traversée d'un canal ultracourt est donc très faible, comme illustré sur le schéma de la figure III.1.b. Ce nombre peut même être nul, le porteur est alors qualifié de « balistique ». L'hypothèse d'un régime de mobilité est donc sérieusement remise en question dans les dispositifs ultracourts.

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

III.3. Description du transport électronique par la mécanique quantique

III.3.1. Effets quantiques

La réduction des dimensions des dispositifs jusqu'à des tailles nanométriques met en évidence des phénomènes de nature quantique, jusqu'alors considérés comme inexistantes ou en grande partie négligeable. Ces effets quantiques sont essentiellement de trois ordres: les effets liés au confinement quantique, au courant tunnel et aux phénomènes d'interférences quantiques.

III.3.2. Confinement quantique

Les épaisseurs de canal des dispositifs CNTFET sont aujourd'hui proches des longueurs d'onde des électrons. En conséquence, les porteurs dans la couche d'inversion sont libres de se mouvoir parallèlement au canal de conduction. Par contre, du fait des forts champs électriques, leurs mouvements perpendiculairement à la surface du canal sont confinés dans un puits de potentiel étroit, ou puits de confinement. Ces effets de confinement se manifestent essentiellement sous deux aspects: [104]

➤ La quantification de la bande d'énergie en sous-bandes (valeurs propres de l'équation de Schrödinger) dans le puits de potentiel (Figure III.2). Les porteurs dans la couche d'inversion se comportent alors comme dans un gaz à deux dimensions (au lieu d'un gaz à trois dimensions ou continuum d'énergie dans le cas classique). Leur mouvement est libre dans le plan de la structure et quantifié dans la direction perpendiculaire. Pour déterminer précisément la densité d'états d'énergie lors de l'application d'un potentiel sur la grille d'une structure MOS (sur le canal de transistor CNTFET), un traitement quantique du problème s'impose. Il nécessite la résolution couplée de l'équation de Schrödinger, qui permet de déterminer les états stationnaires d'énergie, les fonctions d'ondes et les concentrations de porteurs associées, et de l'équation de Poisson, qui permet d'évaluer le potentiel dans la structure pour une distribution de porteurs donnée.

➤ La détermination de la distribution des porteurs dans la direction transverse au transport par la superposition de fonctions d'ondes (fonctions propres de l'équation de Schrödinger) chacune associée à une sous-bande

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

d'énergie. Les écarts entre un calcul quantique et les approches classiques sont illustrés sur la figure III.3. Le calcul, issu de la mécanique quantique et plus représentatif de la réalité, impose une concentration nulle à l'interface diélectrique de grille-semi-conducteur alors que le calcul mené avec la statistique de Fermi surestime la concentration de porteurs proches de l'interface.

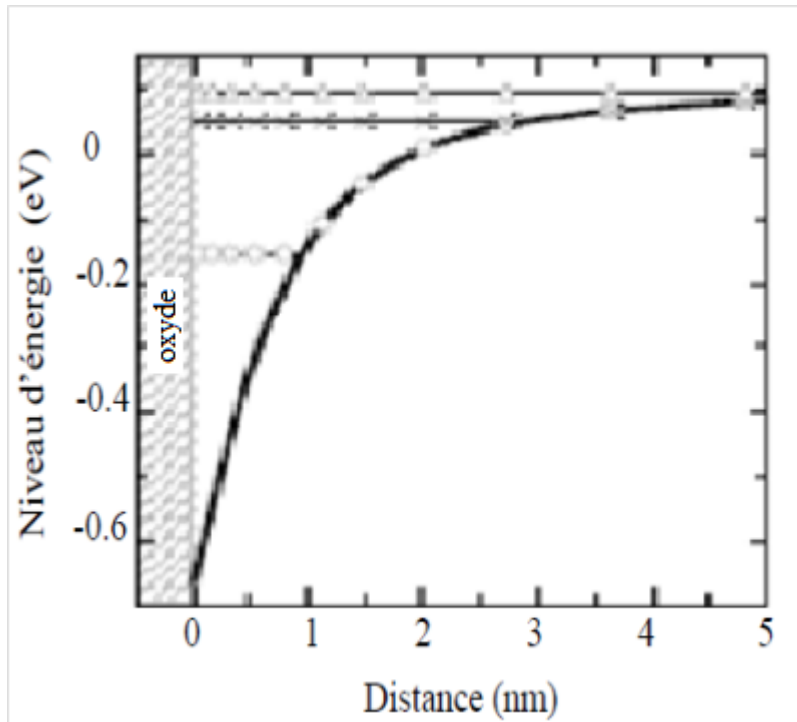


Figure III.2. Niveaux d'énergie dans une capacité MOS en forte inversion.

[104]

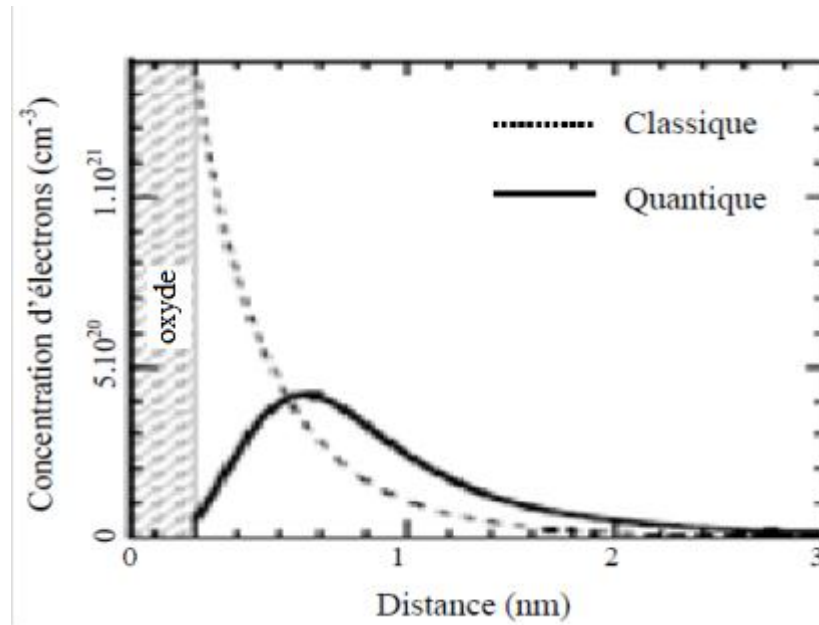


Figure II.3. Concentration d'électrons dans une capacité MOS en régime de forte inversion [104].

III.4. Modèle Auto cohérente Schrödinger-Poisson

A ce jour, de par l'importance du rôle que peuvent jouer les effets quantiques sur les performances électriques des dispositifs, l'introduction de ces effets dans les méthodes de simulation constitue un réel enjeu. Pour cela différentes approches numériques permettant de coupler les effets quantiques, sont proposées dans la littérature.

Une description physique exacte des effets quantiques nécessite forcément de résoudre l'équation de Schrödinger. En parallèle, il est nécessaire de résoudre l'équation de Poisson, il s'agit donc d'effectuer un calcul Schrödinger-Poisson couplé ou auto-cohérent. [104]

III.4.1. Résolution auto-cohérent des équations de Schrödinger et de Poisson

L'approche traitée dans ce paragraphe et qui parfois appelée couplage Schrödinger-Poisson est actuellement plus connue en littérature sous le nom de self consistent Schrödinger Poisson. Cette approche intuitive est utilisée par de nombreux auteurs, citons [105-112].

Le principe de cette approche est de découpler la direction du transport x , pour laquelle le mouvement des porteurs est supposé semi-classique, de la direction transverse au transport y , pour laquelle les porteurs sont confinés et leur énergie est supposée être quantifiée sur toute l'épaisseur du nanotube. Ainsi donc les porteurs dans le canal étant

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

libres de se mouvoir parallèlement au canal mais leurs mouvements perpendiculaires sont confinés dans un puits potentiel.

Afin d'explicitier le fonctionnement général de cette méthode, l'algorithme général des principales étapes est présenté sur la figure III.4.

Le dispositif simulé est subdivisé en tranches dans la direction du transport x appelées tranches Schrödinger (Figure III.5). Dans chacune de ces tranches, le profil de potentiel étant connu (potentiel de départ $V_0(x, y)$). L'équation de Schrödinger est résolue dans la direction du confinement y et permet d'obtenir les niveaux d'énergie E et leur fonction d'onde associée $\Psi(x, y)$.

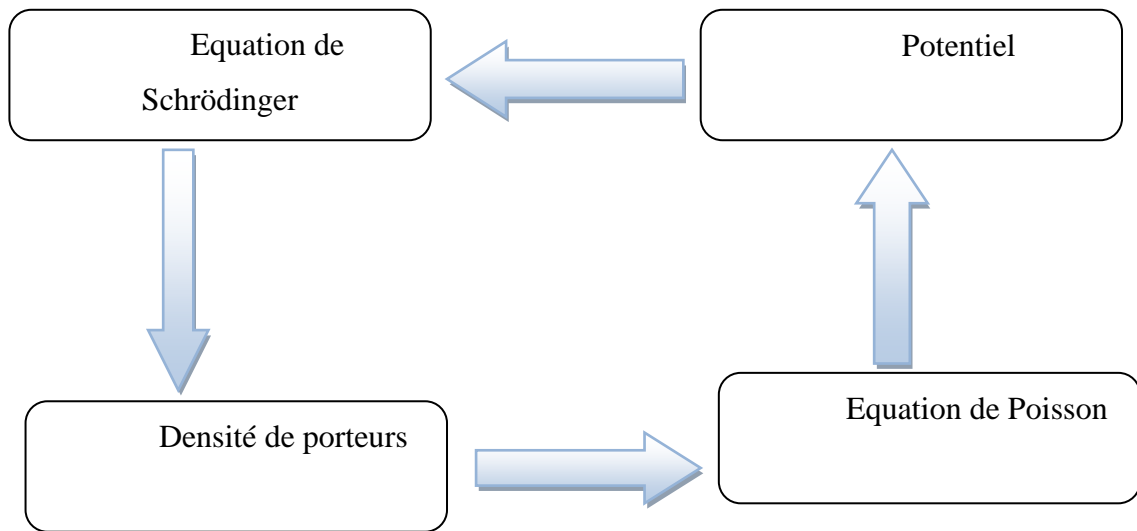


Figure III.4. Organigramme général de la Méthode de couplage Poisson – Schrödinger [104].

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

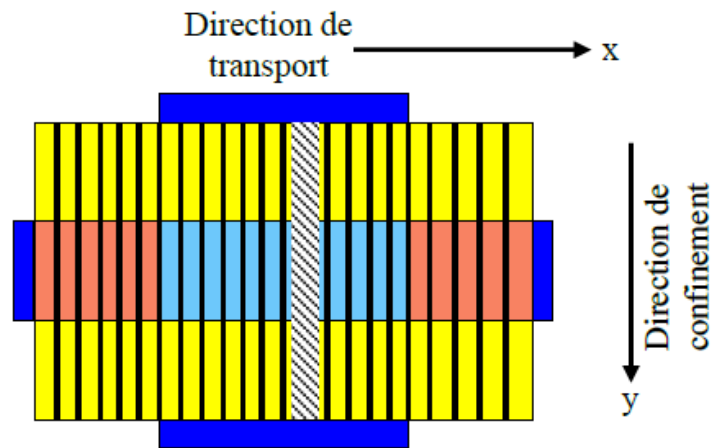


Figure III.5. Schéma d'une tranche Schrödinger est hachurée [104].

III.5. La simulation des CNTFET basée sur le formalisme de la Fonction de Green Non Equilibre (NEGF)

Les progrès de la technologie des transistors à base de nanotube de carbone conduisent de plus en plus à des transistors de taille fortement nanométrique. A ce niveau de miniaturisation, les effets quantiques et atomistiques ne sont plus négligeables [113] et modifient sensiblement les propriétés de transport des matériaux à base du graphène. Dans ce contexte, le formalisme des fonctions de Green hors équilibre constitue une méthode pertinente pour décrire le comportement quantique des nano-transistors à base de nanotube de carbone et ses dérivés. Dans ce qui suit, nous allons détailler la simulation rigoureuse des nano-transistors à base de nanotube de carbone qui s'effectue via la résolution auto-cohérente des deux systèmes d'équations couplés Schrödinger-Poisson, en représentation "mode d'espace" en utilisant les formalises NEGF (Figure III.6). Il est à noter que dans la littérature, l'approche NEGF a été appliquée avec succès pour étudier le transport quantique dans les CNTFET aux limites balistiques et diffusives [114 ,115], où un accord étroit avec les données expérimentales a été rapporté [116] en incluant la diffusion élastique due à la présence des défauts dans les transistors à canaux fortement submicronique.

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

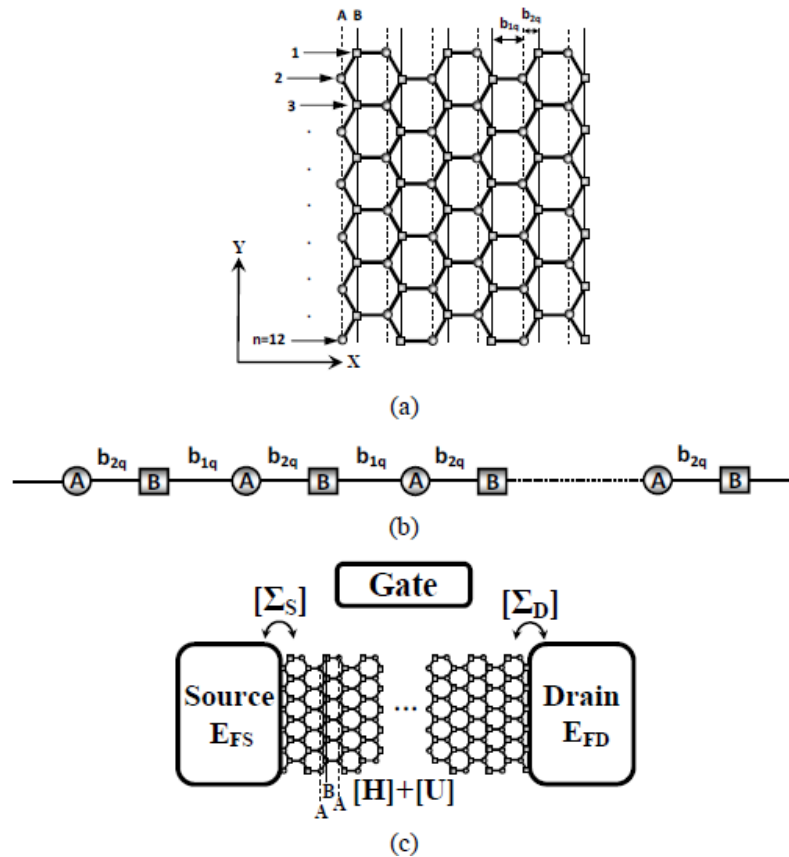


FIGURE III.6 (a) Croquis schématique d'un nano ruban de graphène de type fauteuil avec 12 dimères de carbone ($n = 12$) [117]. (b) Chaîne unidimensionnelle pour le q ième mode utilisé dans la représentation en mode d'espace [114]. (c) Vue d'ensemble du formalisme NEGF incluant les quantités utilisées: le dispositif est défini par le Hamiltonien H , qui est relié aux réservoirs gauche et droit par les self-énergies Σ_S et Σ_D , respectivement [115].

Les CNTFET sont simulés en résolvant l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode MS NEGF couplée avec l'équation de Poisson bidimensionnelle sous les limites balistiques. La représentation MS peut réduire considérablement le coût de calcul et le temps de simulation. De plus, pour le transport balistique, l'approche MS a montré sa capacité à reproduire les résultats de l'espace réel (RS) avec une précision supérieure à 95% dans le pire des cas [118]. Une structure atomique à deux dimensions détaillée est représentée dans la figure (III.6(a)). Les cercles et les carrés sont les sous-réseaux de carbone de type A et de type B, respectivement.

L'approche "mode espace" découple le réseau d'espace réel représenté sur la figure (III.6(a)) en une chaîne de ligne conduisant à la représentation unidimensionnelle MS

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

Dans l'approche MS, les auto-énergies de la source et du drain pour le $q^{ième}$ mode peuvent être calculées analytiquement en utilisant l'expression suivante [118]

$$\Sigma S_q(Dq) = \frac{\alpha_{1(M)} + \sqrt{[\alpha_{1(M)}]^2 - 4(E - U_{1(M)})^2 b_{1q}^2}}{2(E - U_{1(M)})} \quad (\text{III.5a})$$

$$\alpha_{1(M)} = (E - U_{1(M)})^2 + b_{1q}^2 - b_{2q}^2 \quad (\text{III.5b})$$

Où $t_0 = 2.7$ eV, $\Delta t = 0.12$ eV, et $U_{1(M)}$ sont le paramètre de liaison des plus proches voisins (TB), le paramètre de relaxation de liaison de bord, et le potentiel électrostatique de la première (dernière) colonne qui se couple au contact de la source (drain), respectivement. La densité d'états locale résultant des états injectés source (drain) peut s'écrire

$$D_{S(D)} = G \Gamma_{S(D)} G^+ \quad (\text{III.6})$$

Où $\Gamma_{S(D)}$ est l'élargissement du niveau d'énergie dû au contact de la source (drain) et il est défini par la relation suivant

$$\Gamma_{S(D)} = i(\Sigma_{S(D)} - \Sigma_{S(D)}^+) \quad (\text{III.7})$$

Sur la base des équations ci-dessus, la densité de charge dans le canal peut être calculée comme [118]

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

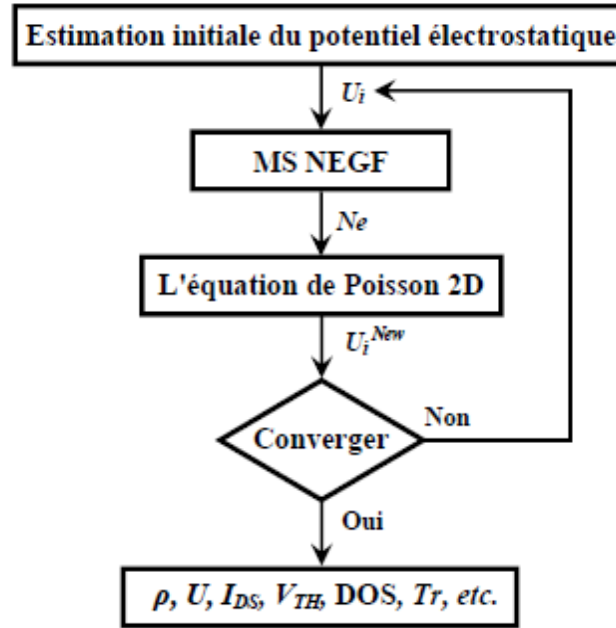


FIGURE III.7 Organigramme de l'algorithme auto-cohérent 2D Poisson-NEGF.

$$N_e = (-e) \int_{-\infty}^{+\infty} dE \cdot \text{sgn}[E - E_N] \times \{D_S(E)f(\text{sgn}[E - E_N](E - E_{FS})) + D_D(E)f(\text{sgn}[E - E_N](E - E_{FD}))\} \quad (\text{III.8})$$

Où sgn est la fonction de signe, et $f(\text{sgn}[E - E_N](E - E_{FS(FD)}))$ représente la fonction de fermi de la source (drain) qui correspond au niveau de fermi $E_{FS(FD)}$. Le potentiel auto-cohérent est calculé à partir de la densité de charge et les potentiels d'électrode en utilisant l'équation de Poisson bidimensionnelle suivante

$$\nabla^2 U = -\frac{q}{\varepsilon} \rho \quad (\text{III.9})$$

Où U est le potentiel électrostatique, ρ est la distribution de la densité de charge nette en comptant la concentration de dopage, et $\varepsilon = k\varepsilon_0$ est la permittivité du milieu avec k et ε_0 représentent respectivement la constante diélectrique et la permittivité du vide. L'équation de Poisson est résolue en coordonnées 2D en utilisant la méthode des différences finies (FDM) en supposant que le potentiel dans le sens de la largeur est invariant. Afin de traiter avec précision les géométries complexes et les frontières entre les différentes régions diélectriques, l'espacement de grille utilisé dans la discrétisation 2D-FDM (cf. annexe 1) est choisi égal à 1\AA pour les directions z et x . Dans les contacts entre CNT et la grille, le potentiel V est calculé par la condition limite de

Chapitre III : Etude du transport balistique dans les transistors à nanotubes de carbone

Dirichlet $eV = eV_G + \Phi_{CNT} - \Phi_G$, où V_G , Φ_G et Φ_{CNT} sont la tension de grille et le travail de sortie de l'électrode de grille et de CNT, respectivement. La condition aux limites de Neumann est appliquée aux limites restantes, où le champ électrique perpendiculaire à la limite est supposé d'être nul [120]. Comme représenté sur la figure (III.7), à partir d'une estimation initiale du profil d'énergie potentielle sur site U_i , les équations (III.1–III.8) sont résolues et la densité de charge résultante N_e est ensuite insérée dans (III.9) pour obtenir de nouveaux potentiels électrostatiques sur site, qui à son tour mettra à jour les éléments diagonaux de la matrice hamiltonienne dans (III.1). Ce cycle est répété jusqu'à ce que l'auto-cohérence est atteinte pour un critère de convergence défini par la variation maximale du profil de potentiel électrostatique entre des itérations consécutives, c'est-à-dire, $Max(|U_i^{Old} - U_i^{New}|) \leq U^{Tol}$, où la valeur de tolérance U^{Tol} est normalement prise égale à 10^{-3} eV.

Après la convergence, le courant du canal peut être calculé en utilisant la formule de Landauer-Büttiker donnée par

$$I = \frac{4q}{h} \int T(E) [f(E - E_{fs}) - f(E - E_{fd})] dE \quad (III.10)$$

Où q est la charge élémentaire, h est la constante du Planck, et $T(E)$ est le coefficient de transmission calculé par

$$T(E) = Tr(\Gamma_S G \Gamma_D G^+) \quad (III.11)$$

Où Tr est l'opérateur "trace".

Chapitre IV

IV.1. Introduction

Pour un dispositif à canal long, la hauteur de barrière dépend principalement de la tension de grille. Dans le cas des transistors à effet de champ, la barrière de potentiel est commandée à la fois par la tension grille-source V_{GS} et la tension drain-source V_{DS} . Ces conditions ont permis à la barrière de potentiel entre la source et le canal d'empêcher les électrons de s'écouler vers le drain. La hauteur de la barrière diminue lorsqu'une tension de drain élevée est appliquée. Il en résulte une diminution supplémentaire de la tension de seuil. Dans ce cas, la source injecte des porteurs dans la surface du canal et la grille ne joue aucun rôle. C'est ce qu'on appelle l'abaissement de la barrière induite par le drain (DIBL).

Nous avons élaboré un programme en langage MATLAB pour la simulation numérique et nous avons obtenu les résultats suivants, sur la caractéristique de transfert $I_D(V_{DS})$ ainsi que l'influence des paramètres suivants : la longueur de grille L_G , le diamètre du nanotube φ , l'épaisseur de l'oxyde de grille t_{ox} , la permittivité diélectrique de la grille et le dopage du canal et ceci pour différentes températures supérieures à la température ambiante jusqu'à la température de l'azote liquide sur le paramètre DIBL et la tension de seuil qui conditionne les performances du transistor CNTFET [121-123].

IV.2. L'effet de DIBL

Le DIBL peut également être trouvé dans des dispositifs à deux dimensions tels que CNTFET. Cependant, en raison des propriétés structurales et électrostatiques du CNTFET, l'effet DIBL dans le CNTFET présente une nouvelle caractéristique sur la performance du composant [124].

Quelques travaux intéressants sur l'effet DIBL ont été remarqués, par exemple dans la référence [125], Fiori. G développe un modèle numérique basé sur le NEGF et montre que l'effet DIBL dans les CNTFET à canal court peut être réduit par une structure à double grille, à triple grille ou à grille cylindrique. Dans la référence [126], l'effet DIBL est observé dans le CNTFET fabriqué sur une plaquette de silicium par R. Thomas Weitz, En référence [127] Bien que Fillo et al, ont souligné l'effet DIBL dans leurs travaux mais ils n'ont pas expliqué de manière approfondie.

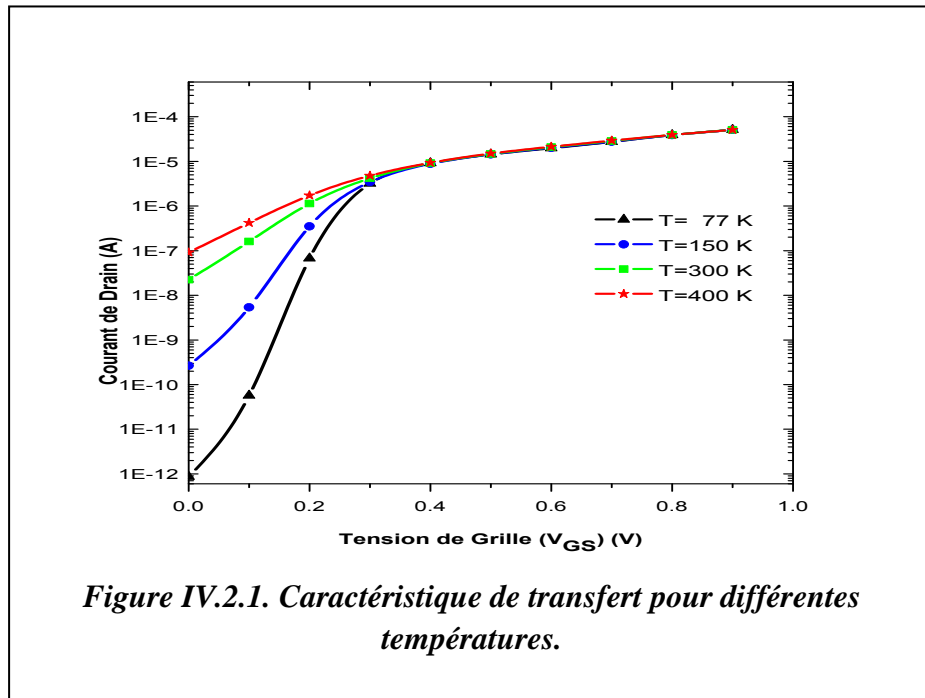
Nous présentons nos résultats numériques sur le DIBL. Ce ci est déterminé en utilisant la formule classique pour les tensions V_{DS} faibles ($V_{DS}=50$ mV) et pour les tensions V_{DS} élevées ($V_{DS}=1$ V)

Chapitre IV. Résultats et Interprétations

$$DIBL = \frac{V_{TH}(\text{Low VDS}) - V_{TH}(\text{High VDS})}{\text{High VDS} - \text{Low VDS}}$$

Aussi nous avons apporté notre contribution sur ce paramètre.

IV.2.1. Caractéristique de transfert

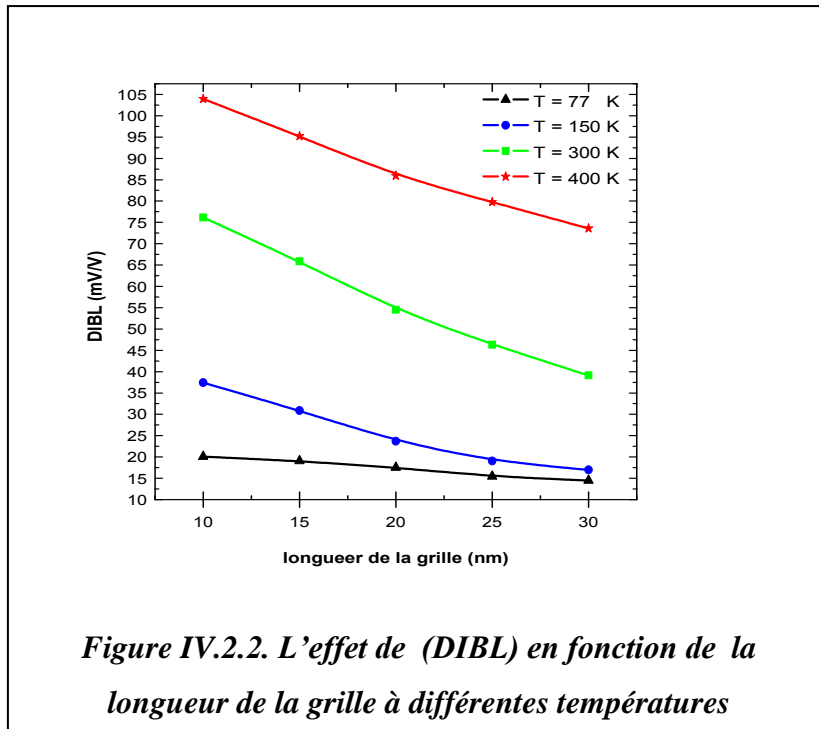


Les résultats de la simulation numérique obtenus dans le cadre de notre composant d'étude sur la caractéristique de transfert $I_D(V_{GS})$ sont représentés sur la figure (IV.2.1) et ceci pour différentes températures.

Ceci montre que l'effet de la température est significatif pour des tensions grille-source faibles. Nous observons sur cette figure que lorsque la température diminue le courant de fuite diminue également, donc nous obtenons un CNTFET avec de meilleures performances à basse température. On peut voir que l'augmentation de la température décale les caractéristiques vers la gauche et il est clair que lorsque la température devient supérieure à 150 K, le courant sous-seuil augmente de façon spectaculaire.

IV.2.2. Influence de la longueur de la grille sur le DIBL

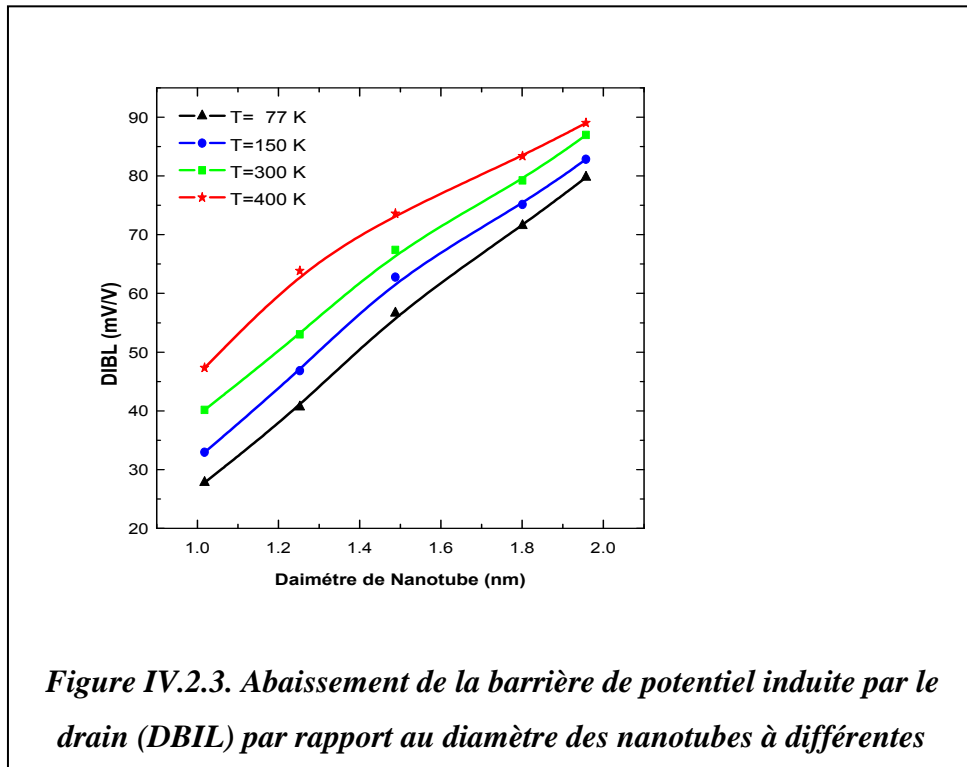
Dans la figure (IV.2.3) nous présentons les variations du DIBL en fonction de la longueur de grille pour des températures variantes de 77K à 400K.



Sur la figure (IV.2.2) nous avons présenté DIBL en fonction de la longueur de grille entre 10 et 30 nm pour différentes températures. Pour $T = 150$ K, $T = 300$ K, $T = 400$ K, le DIBL diminue de manière linéaire lorsque la longueur de grille augmente. Nous notons une réduction d'environ 54,64% en DIBL, quand la température change de 400 K à 77 K. Pour $T = 77$ K, on observe que le DIBL est pratiquement constant quelle que soit la longueur de grille est dans ce cas, nous avons obtenu une valeur faible du DIBL (environ 20 mV / V).

IV.2.3. Influence du diamètre du nanotube sur le DIBL

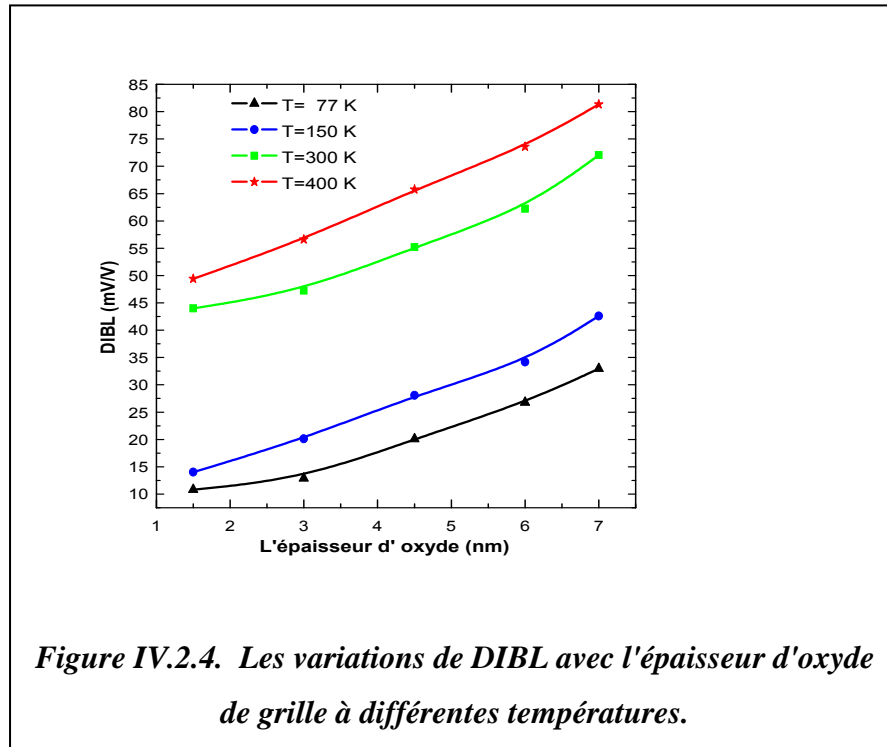
Dans la figure (IV.2.3) nous présentons les variations du DIBL en fonction du diamètre du nanotube pour des températures variantes de 77K à 400K.



Nous observons une réduction importante (environ: 65,17%) du DIBL lorsque le diamètre des nanotubes diminue. Le composant présente une bonne performance (DIBL) lorsque nous choisissons un petit diamètre de nanotubes et une basse température.

IV.2.4. Influence de l'épaisseur de l'oxyde de grille sur le DIBL

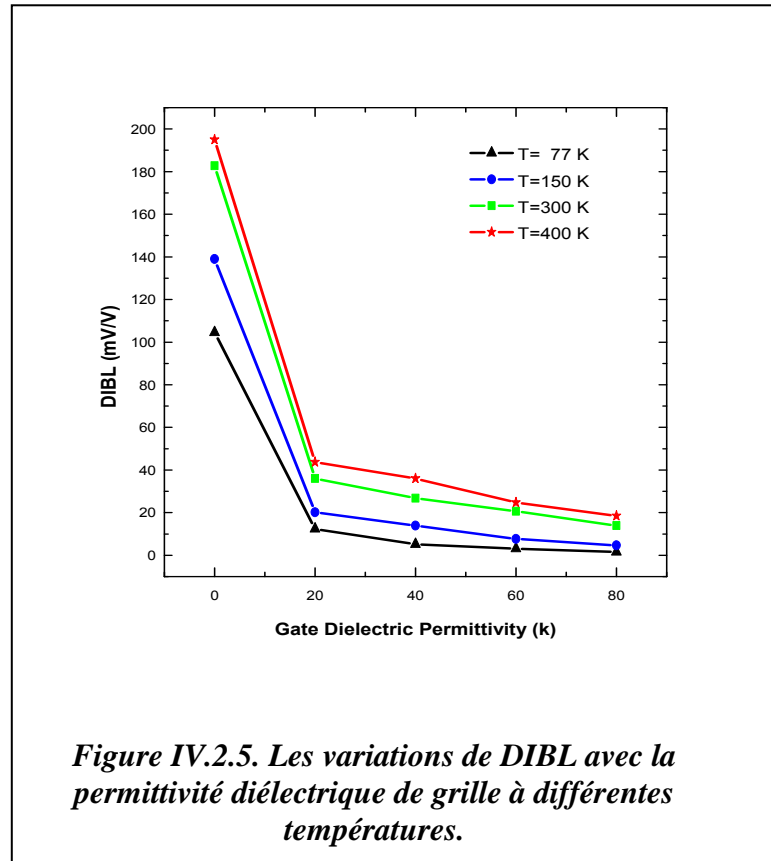
Les résultats numériques obtenus sur le DIBL en fonction de l'oxyde de grille pour différentes températures sont représentés à la figure (IV.2.4)



Comme nous pouvons le voir, lorsque le t_{ox} diminue le DIBL diminue également. Nous notons que lorsque le t_{ox} change de 7 nm à 1,5 nm, il y a une réduction importante dans DIBL autour de 67,20%. En outre, le DIBL est calculé comme une fonction de la température dans cette même figure. Le DIBL environ 59,49% lorsque la température passe de 400 K à 77 K.

IV.2.5. Influence de la permittivité du diélectrique de grille sur le DIBL

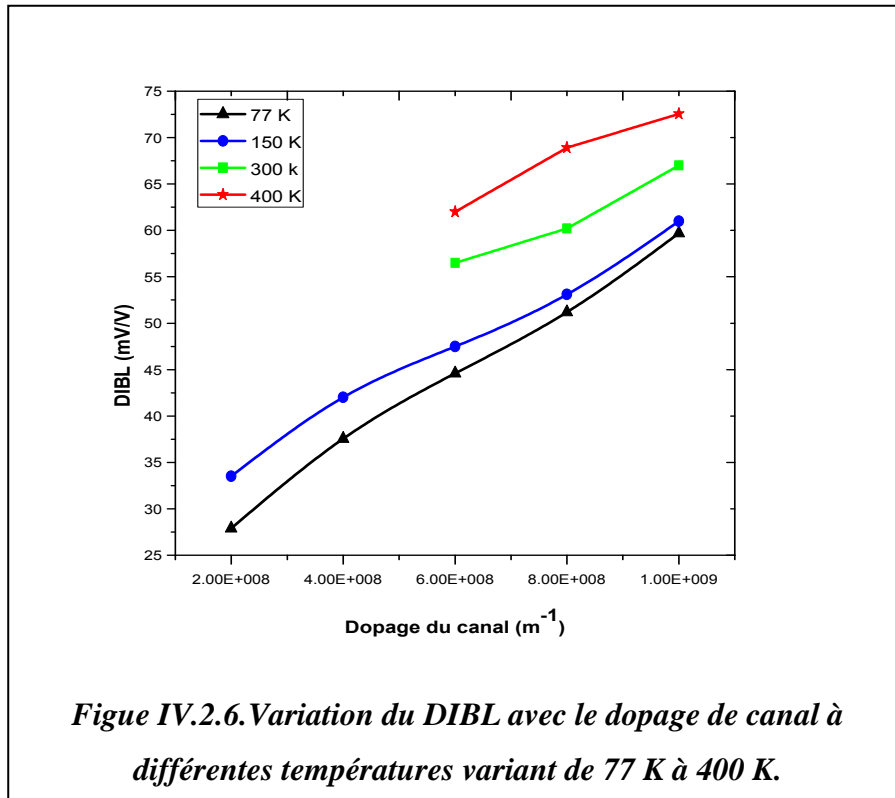
Nous présentons sur la figure (IV.2.5) les variations du DIBL en fonction de la permittivité du diélectrique de grille (de 3.9 à 80) pour différentes températures de 400 K à 77 K.



Nous constatons que le paramètre DIBL est considérablement amélioré lorsque la permittivité augmente à la température ambiante, il y a 88.89% de réduction du DIBL lorsque k varie de 3.9 à 80 .D'autre part le DIBL est meilleur pour les basses températures.

IV.2.6. Influence du dopage du canal sur le DIBL

Sur la figure (IV.2.6) nous avons apporté les variations du DIBL en fonction de dopage du canal et ceci pour différents températures.



Nous constatons que lorsque le dopage du canal augmente le DIBL augmente également avec une pente presque linéaire. D'autre part nous observons une réduction de 25.95% du DIBL lorsque le dopage du canal passe de $10^9 m^{-1}$ à $2.5 \times 10^8 m^{-1}$. De la même manière, la diminution du DIBL a lieu à la température de 77 K. Pour 300 K et 400 K ; l'évolution du DIBL pour des dopages inférieurs à $6 \times 10^8 m^{-1}$ n'a pas pu être trouvée pour des problèmes de convergence du programme.

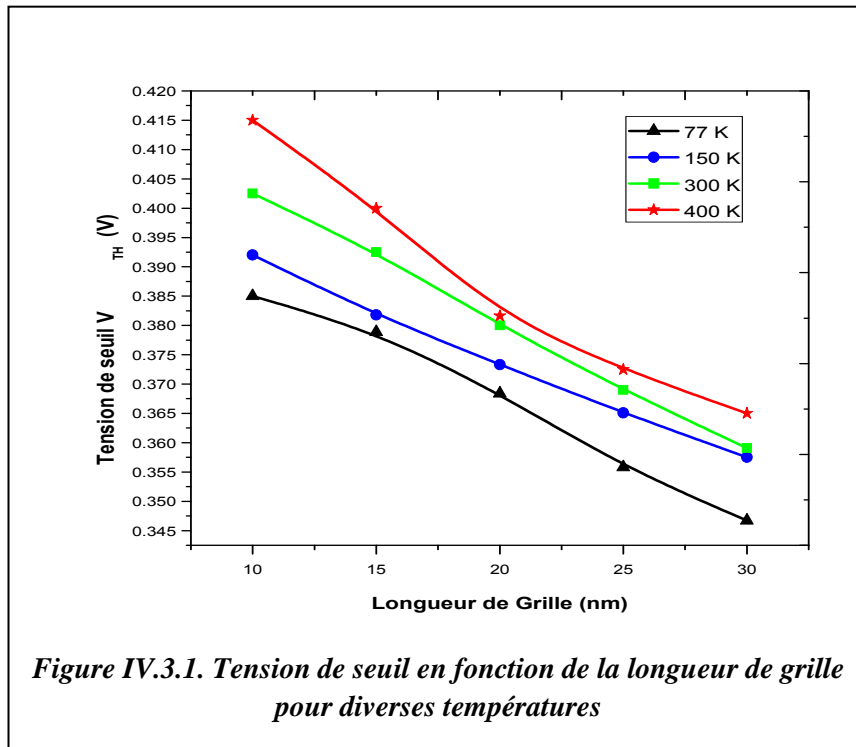
IV.3. l'effet de la tension de seuil (V_{TH})

La tension de seuil est un paramètre très important et qui conditionne les performances du CNTFET.

Aussi nous avons fait une simulation numérique sur ce paramètre. Les résultats obtenus sur la tension de seuil (V_{TH}) en fonction des paramètres suivants :

La longueur de grille (L_G), le diamètre du nanotube (φ), l'épaisseur de l'oxyde (t_{ox}), la permittivité diélectrique (k) et du dopage du canal.

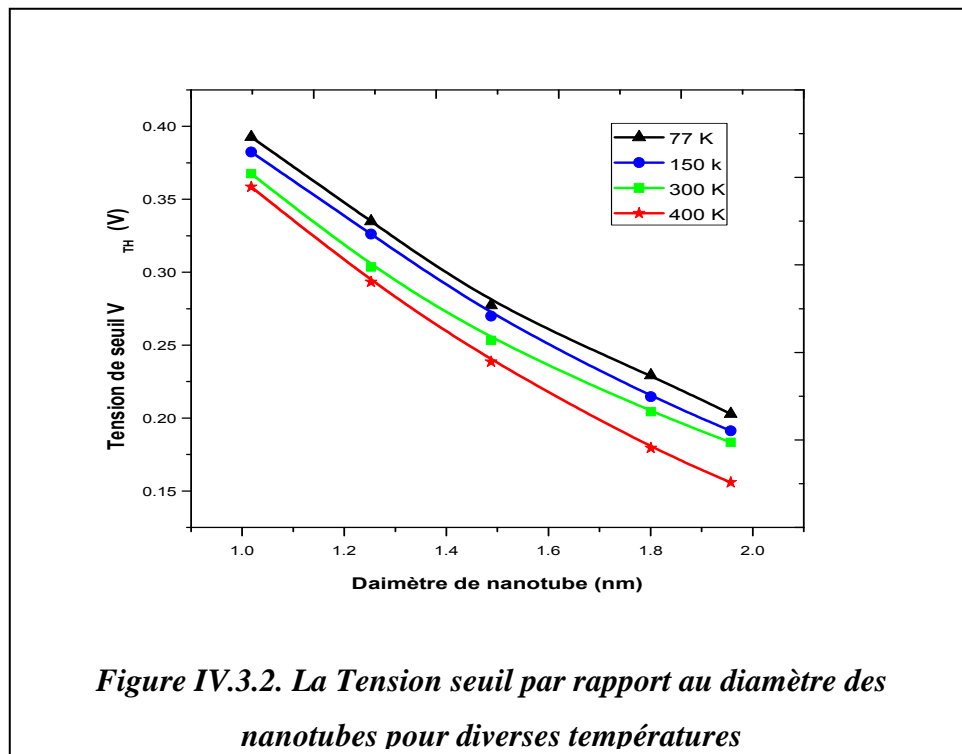
IV.3.1. Influence de la longueur du canal de grille sur la tension de seuil (V_{TH})



Nous présentons dans la figure (IV.3.1) la variation de (V_{TH}) en fonction de la longueur de grille à différentes températures. Nous remarquons que la tension de seuil (V_{TH}) est inversement proportionnelle à la longueur de grille (L_G) et diminue avec l'augmentation de (L_G). Un changement de V_{TH} à la diminution de la température de 400 K à 77 K peut être facilement observé.

IV.3.2. Influence de la longueur du diamètre des nanotubes sur la tension de seuil (V_{TH})

Dans la figure (IV.3.2) nous présentons les variations de tension de seuil (V_{TH}) en fonction du diamètre du nanotube pour des températures variantes de 77K à 400K.

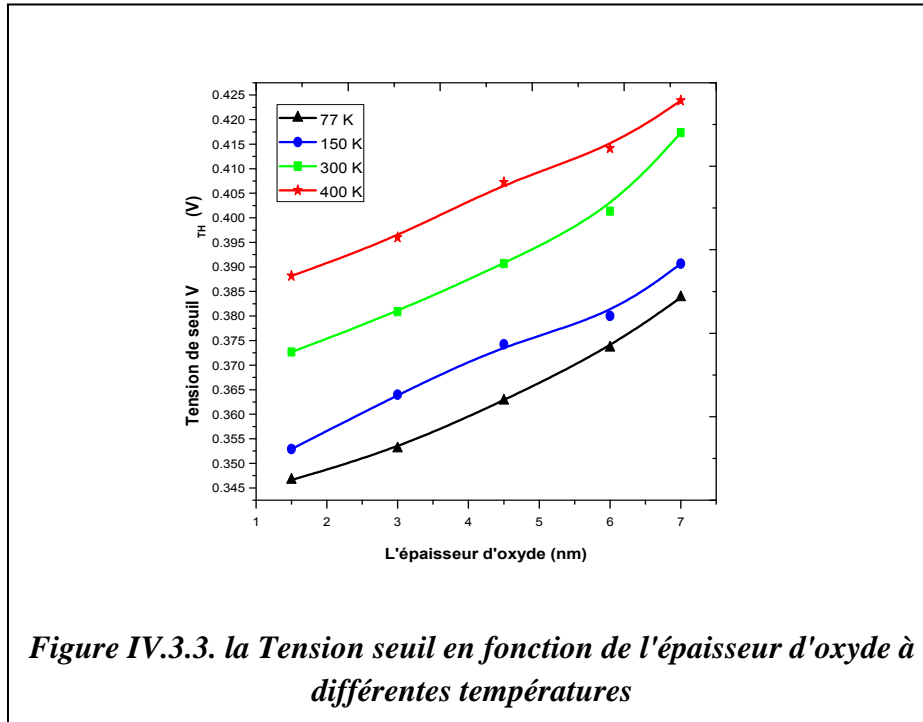


Etant donné que le courant de drain dépend du diamètre des nanotubes, la tension de seuil (V_{TH}) du CNTFET dépend également du diamètre du nanotube.

On peut voir que, lorsque le diamètre augmente V_{TH} diminue quelle que soit la température appliquée. Par conséquent, les différentes tensions de grille seront fonction du diamètre des nanotubes. Cette propriété va fortement influencer le comportement de toute porte logique basée sur le CNTFET. Pour étudier l'impact de la température sur le CNTFET, nous avons fait varier la température de $T = 400$ K jusqu'à 77 K et nous avons simulé le comportement du transistor dans cet intervalle de température. Nos résultats montrent que la diminution de la température donne des tensions de seuil plus élevées. Un changement de V_{TH} environ 42% quand T change de $T = 400$ K jusqu'à 77 K peut être facilement observée.

IV.3.3. Influence de l'épaisseur de l'oxyde de grille sur la tension de seuil (V_{TH})

Les résultats numériques obtenus sur la tension de seuil en fonction de l'épaisseur de l'oxyde de grille pour différentes températures sont représentés à la figure (IV.3.3)



La figure (IV.3.3) représente l'évolution de la tension de seuil V_{TH} en fonction de l'épaisseur d'oxyde à différentes températures variant de 77 K à 400 K. On peut observer que, lorsque l'épaisseur de l'oxyde augmente V_{TH} augmente. En outre, on constate une réduction d'environ 41,8% de V_{TH} lorsque la température varie de 400 K à 77 K, et cette réduction reste pratiquement identique pour toutes les épaisseurs d'oxyde.

IV.3.4. Influence de la permittivité du diélectrique de grille sur la tension de seuil

L'oxyde de silicium SiO_2 a été utilisé comme diélectrique de grille, depuis la création du MOSFET en 1960, en raison de sa stabilité électrique entre Si et SiO_2 et de sa stabilité thermique. Lorsque le diélectrique de grille est si mince, surtout quand il est inférieur à 1,5 nm, la fuite due à l'effet tunnel direct d'électrons à travers le SiO_2 sera très élevée, et la dissipation de puissance du circuit augmentera à une valeur inacceptable [127]. Pour remédier à ce problème la solution possible consiste à incorporer l'utilisation d'un diélectrique à haute permittivité de grille.

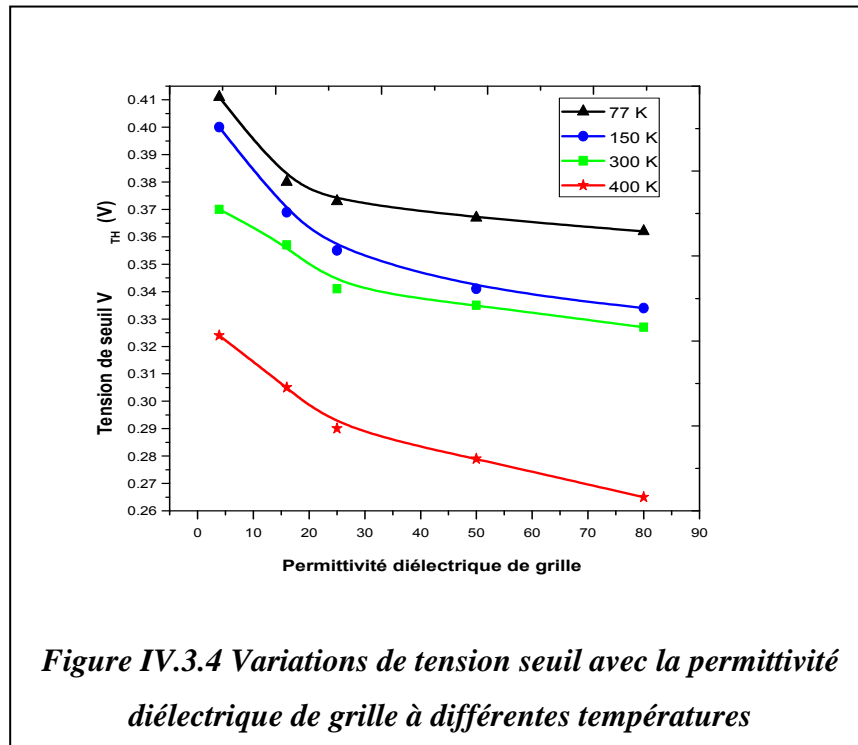
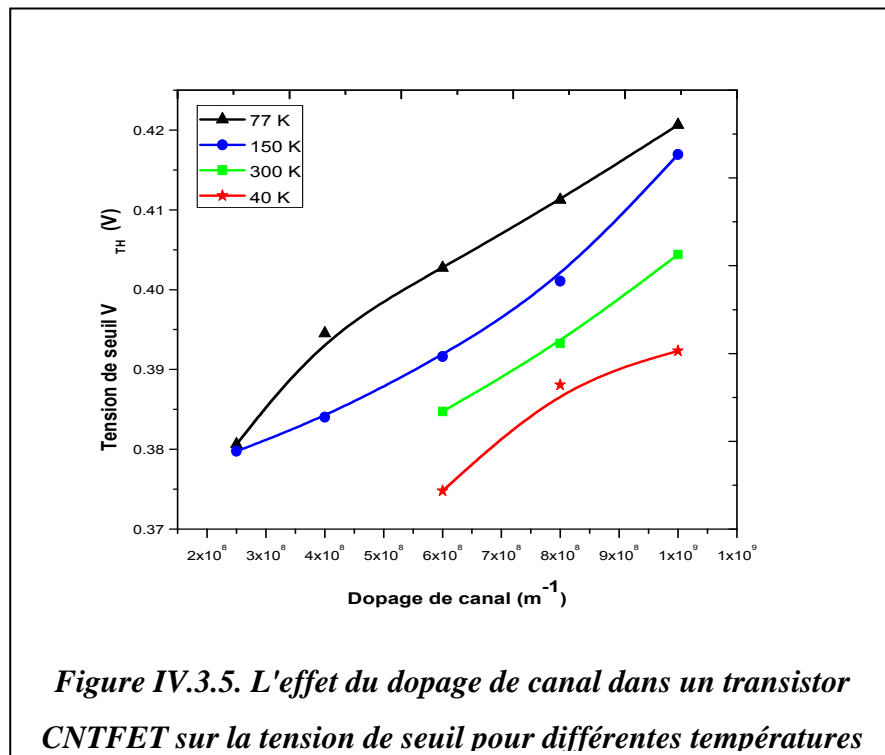


Figure (IV.3.4) présente la tension de seuil en fonction de la permittivité du diélectrique de grille à différentes températures.

Une valeur élevée de la permittivité dégrade la tension de seuil. Les résultats sont compréhensibles car il y a une relation directe entre la capacité de grille et le facteur de permittivité. Nous observons une tension de seuil élevée des constantes diélectriques faibles.

$$C_G \cong \frac{2K_{ox}\epsilon_0}{\ln\left(\frac{2T_{ox}}{r}\right)}$$

IV.3.5. Effet de dopage du canal sur la tension de seuil



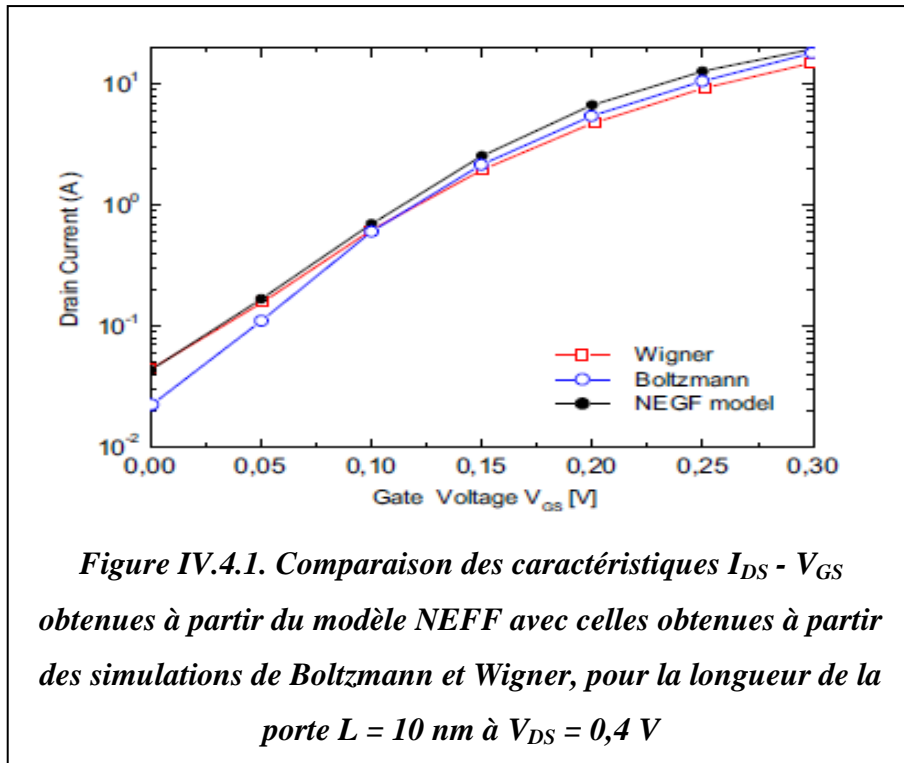
La figure (IV.3.5) montre que la tension de seuil (V_{TH}) est proportionnelle au dopage du canal. Quand le dopage de canal est élevé V_{TH} augmente. Notant que lorsque le canal dopage varie entre $2,5 m^{-1}$ et $6 m^{-1}$ pour $T = 300 K$ et $T = 400 K$ notre programme diverge et nous ne pouvons pas obtenir des résultats. Comme nous pouvons le voir à partir de la même figure que l'augmentation de la température donne des tensions de seuil faibles. Un changement de V_{TH} environ 40,5% lorsque T change de $T = 400 K$ jusqu'à $77 K$ peut être facilement observée.

IV.4. Performances statiques et dynamiques du CNTFET

Dans cette partie de notre travail, nous présentons les résultats statiques obtenus sur le courant de drain et les résultats dynamiques obtenus sur le temps de commutation du CNTFET.

IV.4.1. Caractéristiques statiques $I_D(V_{GS})$

Sur la figure IV.4.1, nous présentons les résultats obtenus par le modèle NEGF et leurs comparaisons avec ceux de Wigner et Boltzmann.

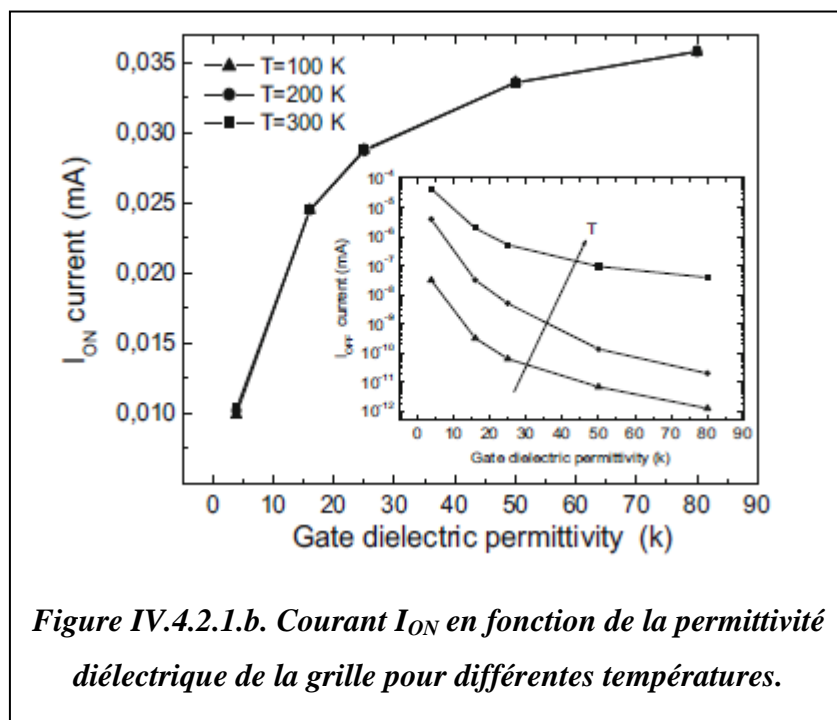
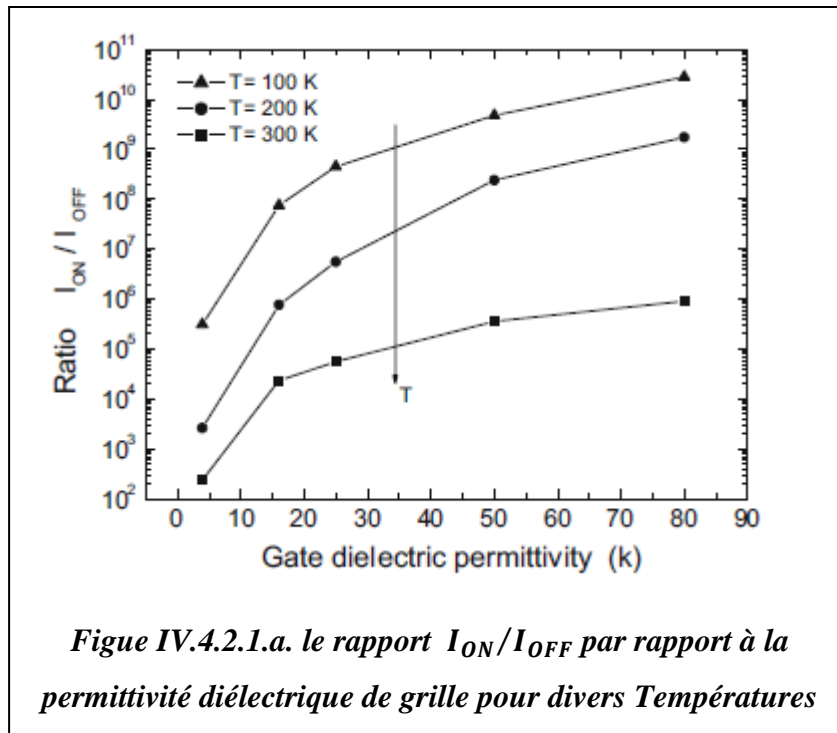


Nous constatons que le courant obtenu avec le modèle NEGF est plus élevé que les autres. Cependant pour les tensions de grille faibles, l'effet tunnel entre la source et le drain devient possible et le comportement sous le seuil est dégradé en tenant compte des effets quantiques. De manière générale, on peut conclure qu'il ya un accord satisfaisant entre notre modèle et celui de Winger.

IV.4.2. Caractéristiques dynamiques

IV.4.2.1. Rapport I_{ON}/I_{OFF} en fonction de la permittivité du diélectrique de grille

Les figure (IV.4.2.1.a) et (IV.4.2.b) représente les résultats obtenus du rapport du courant I_{ON}/I_{OFF} en fonction de la permittivité du diélectrique de grille et pour différents températures.

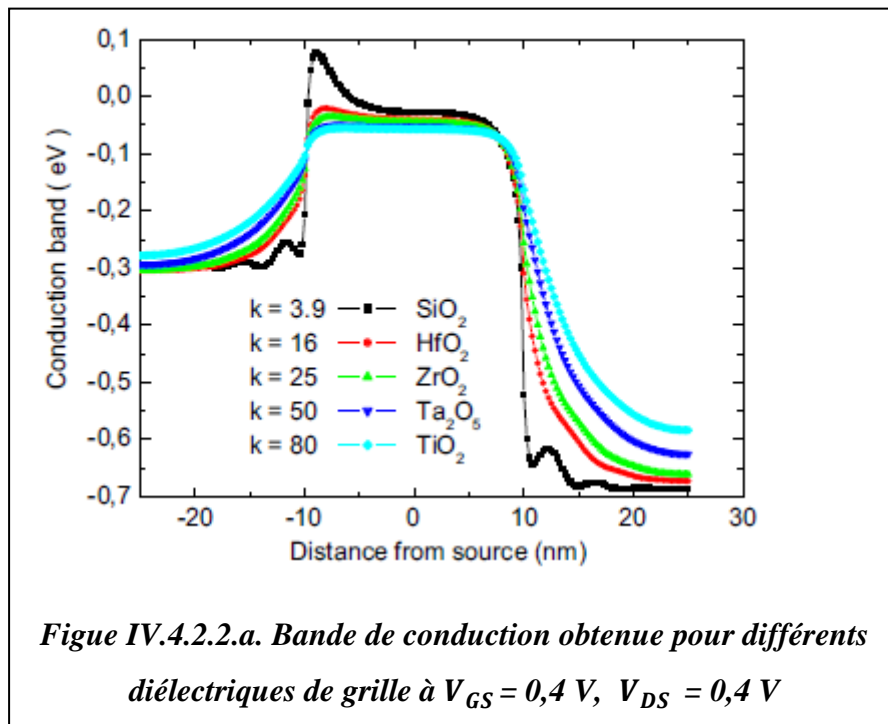


Sur figure IV.4.2.1.a, nous présentons le rapport du courant I_{ON}/I_{OFF} en fonction de la permittivité diélectrique de grille pour trois valeurs de température. I_{ON} est obtenu à $V_{GS} = 0.6$ V et $V_{DS} = 0.6$ V, alors que I_{OFF} est défini comme le courant obtenu pour $V_{GS} = 0$ V et $V_{DS} = 0.6$ V. On constate qu'avec une permittivité diélectrique de grille croissante, le rapport de courant I_{ON}/I_{OFF} augmente également.

Chapitre IV. Résultats et Interprétations

Ceci est dû au courant élevé à l'état ON au faible courant I_{OFF} lors de l'utilisation de permittivités diélectriques à grille élevées, comme le montre la Figure IV.4.2.1.b Ceci est attribué au contrôle de la tension de grille sur le canal. La figure IV.4.2.1.a montre également l'impact de la température T pour différentes permittivités diélectriques de grille. Les résultats montrent une influence notable sur le rapport de courant I_{ON}/I_{OFF} , en abaissant la température, le rapport du courant I_{ON}/I_{OFF} augmente. Ceci est principalement dû à la réduction importante de I_{OFF} lorsque T varie de 300 K à 100 K, comme est indiqué sur la Figure IV.4.2.1.b C'est parce que, à la température ambiante, le courant de l'effet tunnel quantique est ajouté au courant d'émission thermique, et tous deux conduisent à un courant de fuite plus élevé. Lorsque la température est réduite, le courant d'émission thermique est supprimé par la barrière du canal. L'effet tunnel quantique devient donc la seule contribution, entraînant une diminution du courant.

IV.4.2.2. Effet du diélectrique de grille sur la bande de conduction et de la pente sous le seuil



La figure IV.4.2.2.a montre la variation du diagramme de bande de conduction par rapport à la position de la source ; le long de la longueur du CNTFET pour différentes permittivités diélectriques de grille. On peut voir que la meilleure conduction pour SiO_2 se produit à des valeurs d'énergie plus élevées, tandis que TiO_2

Chapitre IV. Résultats et Interprétations

nécessite une énergie légèrement inférieure pour la conduction et conduit à des valeurs de courant de drain élevées. Cette dernière observation rend les oxydes de grille à valeurs k élevées susceptibles d'améliorer le courant de drain des dispositifs CNTFET. Comme la longueur de la grille diminue avec la mise à l'échelle du dispositif, le maintien de la faible consommation d'énergie et la vitesse élevée sont les plus grands défis, pour améliorer les performances du CNTFET. La pente sous le seuil est un paramètre important pour l'estimation de la performance des dispositifs à l'échelle nanométrique, reflétant le niveau de contrôle offert par la tension de grille dans la région sous le seuil. La pente sous le seuil est définie comme la variation de tension de grille nécessaire pour une variation d'une décennie dans le courant de drain [128].

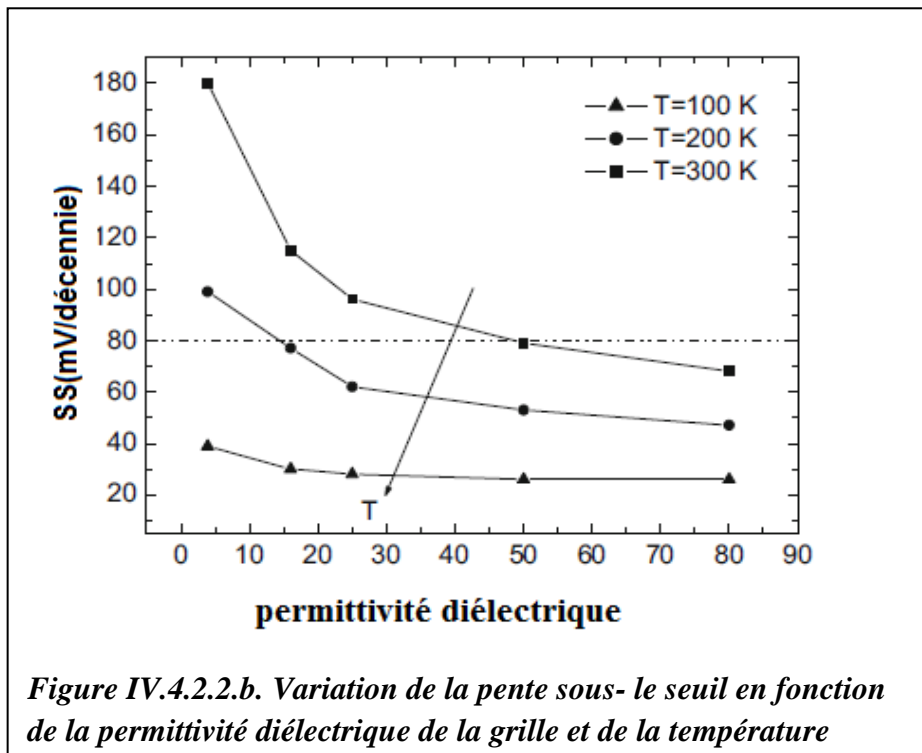


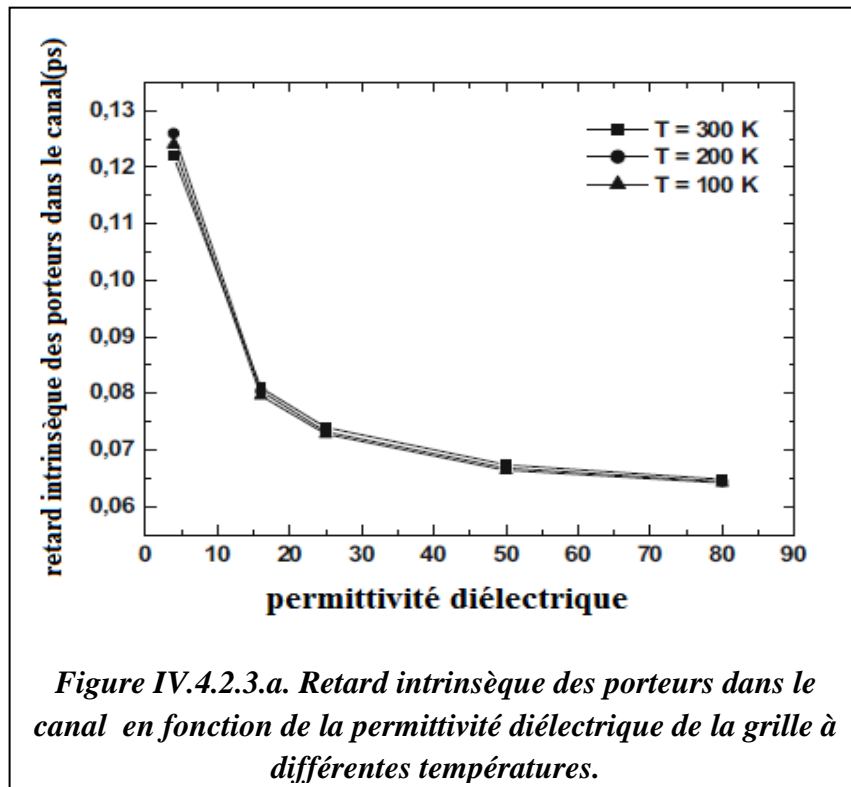
Figure IV.4.2.2.b. Variation de la pente sous- le seuil en fonction de la permittivité diélectrique de la grille et de la température

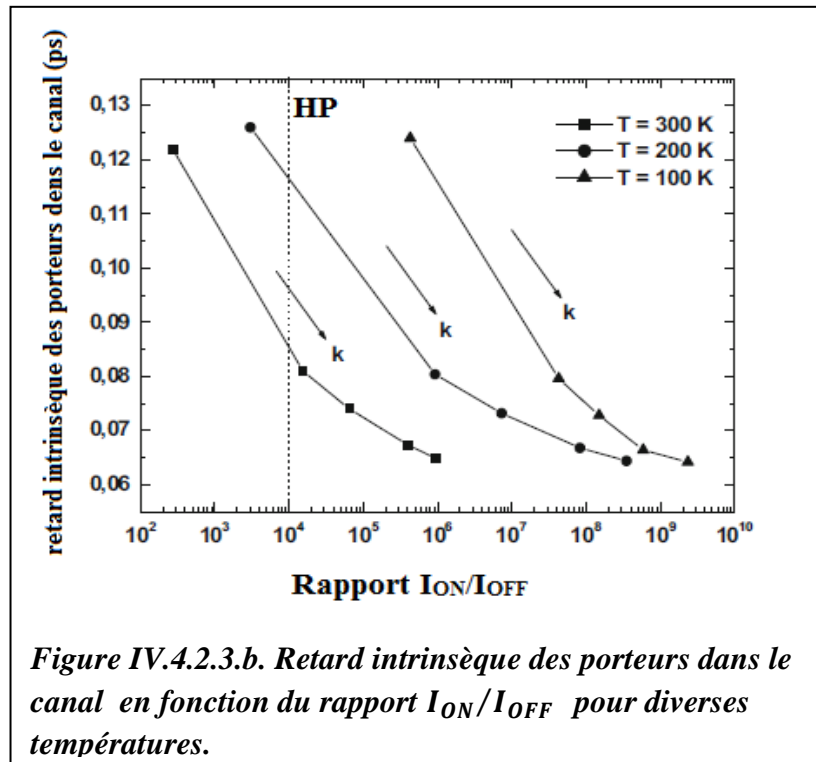
La figure IV.4.2.2.b présente l'effet de la permittivité diélectrique de la grille sur la pente sous- le seuil pour différentes températures. On constate que la pente diminue avec l'augmentation de la permittivité diélectrique de la grille. Une faible pente sous- le seuil est préférée pour les faibles puissances pour les CNTFET nanométrique. Une Pente SS faible est obtenue pour la température de 100K quelle que soit la valeur de la permittivité diélectrique de grille. A 200K et dans les cas de H_fO_2 , ZrO_2 , Ta_2O_5 et TiO_2 comme diélectrique de grille, la pente sous- le seuil du CNTFET est nettement meilleure que pour SrO_2 . A température ambiante, la pente

sous- le seuil est meilleure pour $T_{a2}O_5$, alors que celle pour T_iO_2 elle reste proche de la recommandation du Roadmap technologique international pour les semi-conducteurs (ITRS) qui donne des valeurs de 80 mV / dec [129].

IV.4.2.3. Retard intrinsèque des porteurs dans le canal de CNTFET

Sur les figures IV.4.2.a et IV.4.2.3.b nous présentons les résultats obtenus de le retard intrinsèque des porteurs dans le canal de CNTFET en fonction de la permittivité diélectrique de grille et pour différentes températures.





Le retard intrinsèque des porteurs dans le canal (CV / I) caractérise la vitesse à laquelle un transistor commute. Il s'agit d'un paramètre important pour les applications logiques, fournissant une limite de fréquence pour les transistors. La figure IV.4.2.3.a montre que la constante diélectrique de grille élevée k conduit à un retard de grille intrinsèque inférieur en raison d'une augmentation du courant de saturation I_{ON} du dispositif. Ces résultats montrent que des performances élevées du composant CNTFET à grande vitesse peuvent être obtenues en utilisant des diélectriques à grille élevée. La même figure montre également que l'influence de la température sur le retard intrinsèque des porteurs dans le canal reste faible quelle que soit la valeur de la permittivité diélectrique de la grille. La figure IV.4.2.3.b montre le retard intrinsèque des porteurs dans le canal en fonction du rapport de courant I_{ON}/I_{OFF} à différentes températures. Le rectangle en pointillés indique la région utile pour réaliser les recommandations ITRS. Ces résultats montrent que notre CNTFET avec différents diélectriques de grille donne un temps de commutation et un rapport du courant I_{ON}/I_{OFF} élevés en même temps. De plus, comme on l'observe sur cette figure, lorsque T varie de 300 K à 200 K, le retard intrinsèque des porteurs dans le canal faible avec un rapport de courant I_{ON}/I_{OFF} supérieur à 10^4 est obtenu pour k au-dessus de 3,9. Cependant, pour une température basse de $T = 100$ K, notre dispositif satisfait aux exigences ITRS ($I_{ON}/I_{OFF} \approx 10^4$) et offre une amélioration significative pour toute

Chapitre IV. Résultats et Interprétations

constante diélectrique k de la grille. Cette performance supérieure à basse température qui découle des propriétés supérieures de transport d'électrons dans le régime balistique fait de ce dispositif un candidat potentiel pour une utilisation dans des applications logiques à haute vitesse dans l'avenir.

Conclusion

Conclusion

La recherche sur les nouveaux matériaux semi-conducteurs et les nouveaux dispositifs (pour remplacer le silicium et le MOSFET) doit conduire à une nouvelle révolution au sein des industries électroniques. Les nanotechnologies sont un secteur innovant et prometteur qui présente des 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 nanométrique. Les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone (Carbon NanoTube Field Effet Transistors, CNTFET) figurent aujourd'hui parmi les dispositifs susceptibles de remplacer la technologie MOSFET Si, et des recherches intensives sont en cours afin de déterminer les caractéristiques des transistors à nanotube de carbone (CNTFET).

C'est dans ce contexte que nous nous sommes intéressés à présenter une étude sur les caractéristiques statiques des transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone. Cette étude nous a permis d'ouvrir une fenêtre sur les différentes grandeurs et paramètres qui contrôlent la performance de ces composants à l'échelle nanométrique.

Le premier chapitre constitue une recherche bibliographique sur les nanotubes de carbone et montre l'importance de ces nano-objets tant dans le domaine des nanosciences que dans leurs applications. Nous avons décrit les structures et les propriétés des nanotubes de carbone. Nous avons exposé, par la suite, les procédés de fabrication et nous avons montré quelques caractéristiques électriques et leurs domaines d'applications.

Dans le deuxième chapitre nous avons présenté l'application la plus importante du CNT qui est le CNTFET. Nous avons présenté les propriétés physiques et les caractéristiques statiques de ces structures, puis nous avons décrit quelques dérivés de ce composant.

Dans le troisième chapitre, nous nous sommes intéressés à l'étude analytique de ce composant. La méthode est basée sur le formalisme de la fonction de Green en non-équilibre noté NEGF, à deux dimensions, réalisé avec la solution des équations de Poisson et de Schrödinger, pour traiter les phénomènes physiques des jonctions métal/CNT, et la procédure de simulation globale.

Conclusion

Dans le quatrième chapitre, nous avons présenté l'ensemble des résultats obtenus par la simulation numérique grâce à un programme que nous avons élaboré par MATLAB. Ces résultats portent sur l'abaissement de la hauteur de barrière induite par le drain notée DIBL principal paramètre qui influe sur les performances du CNTFET nanométrique .L'influence des principaux paramètres physiques et géométriques du transistor tels que la longueur de la grille, le diamètre des nanotubes, l'épaisseur de l'oxyde, la permittivité diélectrique de la grille et le dopage du canal a été déterminée. Nous avons constaté que l'effet DIBL diminue avec l'épaisseur décroissante de l'oxyde, le diamètre des nanotubes et le dopage du canal. D'autre part, l'effet DIBL diminue lorsque la température varie de 400 k à 77 K, De plus, lorsque la permittivité diélectrique et la longueur de la grille augmentent, l'effet DIBL diminue. Après avoir étudié l'impact des différents paramètres sur la tension de seuil du CNTFET, nous avons constaté que la tension de seuil (V_{TH}) diminue lorsque l'épaisseur de l'oxyde et le dopage du canal diminuent, et lorsque les températures varient de 400K à 77K. Lorsque la longueur de la grille, le diamètre du nanotube et la permittivité diélectrique de la grille augmentent la tension de seuil (V_{TH}) diminue. Enfin nous avons présenté les effets des diélectriques à permittivités de grille élevée et de la température sur la performance d'un CNTFET balistique. Ces résultats sont en accord avec ceux déterminés par d'autres auteurs ce qui montre le bien fondé de notre méthode d'étude.

Comme perspectives, bien que l'application majeure de cette étude concerne les dispositifs CNTFET, l'approche de la Fonction de Green hors équilibre peut être appliquée également aux dispositifs Nanowire CNTFET, nanoribbon field-effect transistors ou surrounding gate CNTFET. Les phénomènes de relaxation des porteurs provenant de niveaux excités et les interactions électron-phonon constituerait une thématique à explorer.

Références

Référence Bibliographique

- [1] H. Fanet, Micro et nanoélectronique : Bases, Composants, Circuits, Dunod, Paris. (2006).
- [2] J.B. Edel and A.J. deMello, Nanofluidics; Nanoscience and Nanotechnology, Imperial College London. UK, (2009).
- [3] G. Wilde, "Nanostructured Materials", frontiers of nanoscience Series Editor: Richard E. Plamer, Vol. 1, The University of Birmingham, UK, (2009).
- [4] H.S. Philipwong, D. Akinwande, Carbon Nanotube and Graphene Device Physics, Cambridge University Press, New York, (2011).
- [5] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon. Nature, 354 (1991) 56-58.
- [6] S. Iijima and T. Ichihashi. Single-Well carbon nanotubes of 1-nm diameter, Nature, 363 (1993) 603-605.
- [7] M.H. Rummeli, P. Ayala and T. Picher, Carbon Nanotubes and Related Structures: Production and Formation, Edited by Drik M. Guldi and Nazario Martin, WILEY-VCH Verlag. Weinheim, (2010).
- [8] J. Robertson, Diamond-like amorphous carbon”Materials Science and Engineering: R, 37 (2002) 129-281.
- [9] M. Bozlar, Modification de surface des nanotubes de carbone par un polymère conducteur électrogénéré pour la réalisation de nanocomposites multifonctionnels, Thèse de doctorat, Ecole centrale paris, (2007).
- [10] Jean-Malo Chehab, Guillaume Saint-Pierre. T.P.E Les Nanotubes de Carbone dans le Domaine Médical, 1^{ère} S, Lycée d’Hulst-paris 7^{ème}, (2007-2008).
- [11] S. Rizk, Elaboration et caractérisation de nanostructures carbonées par procédé cvd assiste par plasma microonde, Thèse de doctorat, Université Henri Poincaré, Nancy I, (2009).
- [12] H. Rafii-Tabar, Computational modelling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes, Physics Reports, 390 (2004) 235-452.
- [13] S. Ruffinatto, Le diamant pour la bioélectronique : De la fonctionnalisation chimique à la modification physique par des nanotubes de carbone, Thèse de doctorat, Université De Grenoble, (2012).
- [14] H.A. Witek, S. Irle, G. Zheng, W.A. de Jong, K. Morokuma, Modelling carbon nanostructures with the self-consistent charge density-functional tight-binding method: Vibrational spectre and electronic structure of C28, C60, and C70, J. Chemical Physics, 125 (2006) 214706.
- [15] F. Seichepine, Réalisation d’interconnexions de faible résistivité à base de nanotubes de carbone biparois pour la microélectronique, Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III, (2011).
- [16] D. Qian, G.J. Wagner and W.K. Liu, M.F. Yu, R.S. Ruoff, Mechanics of carbon nanotubes, Appl Mech Rev, 55 (2002) 495-533.
- [17] P.J.F. Harris, carbon nanotubes and related structures new materials for the twenty-first century, Cambridge University Press, New York, (2004).
- [18] M.D. Taczak, Controlling the structure and Properties of Carbon Nanotubes, MITRE Nanosystems Group, (2007).

Référence Bibliographique

- [19] Z. Chen, Nanotubes for Nanoelectronics, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, Edited by H. S. Nalwa, 7 (2004) 919-942.
- [20] P.R. Bandaru, Electrical Properties and Applications of Carbon Nanotube Structures, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 7 (2007) 1-29.
- [21] S. Wang, functionalization of carbon nanotubes: characterization, modelling and composite applications, Thèse de doctorat, Florida state university, (2006).
- [22] J.H. Lee, B.S. Lee, Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM, Computational Materials Science, 51 (2012) 30-42.
- [23] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus and R. Saito, physics of Carbon Nanotubes, Carbon, 33 (1995) 883-891.
- [24] X.T. Than, croissance catalytique et étude de nanotubes de carbone Multi-feuillets produits en masse et de nanotubes de carbone ultra-long individuels a quelques feuillets, Thèse de Doctorat, Université Montpellier II, (2011).
- [25] D. Salem, synthese de nanotube de carbon monofeuillets individuels et composites modeles polymeres – nanotubes de carbone. Applplication a l'effet photovoltaïque, Thèse de doctorat, université de Strasbourg, (2012).
- [26] M.P. Anantram and F. Léonard, Physics of carbon nanotube electronic devices, Rep. Prog. Phys, 69 (2006) 507-561.
- [27] T. Belin, F. Epron, Characterization methods of carbon nanotubes: a review, Materials Science and Engineering B, 119 (2005) 105-118.
- [28] M. Fiawoo, Etude par Microscopie Electronique en Transmission de la germination et la croissance des Nanotubes de carbone synthétisés par dépôt chimique en phase vapeur, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud, (2009).
- [29] R. Pakiniat et all, Synthesis of Carbon Nanotube by Laser Chemical Vapor Deposition by means of Nd: Yag laser Second Harmonic, Int. J. Sci. Emerging Tech, 2 (2011) 71-74.
- [30] P.L. McEuen, M.S. Fucher and H. Park, Single-Walled Carbon Nanotube Electronics, IEEE Transactions on Nanotechnology, 1 (2002) 78-85.
- [31] K. Keren, R.S. Berman, Evgeny Buchstab, DNA-Templated Carbon Nanotube Field-Effect Transistor, Reports SCIENCE, 302 (2003) 1380-1382.
- [32] N.M. Ismail, A. Aziz and M. Jaafear, Thermal stability and electrical conductivity of multiwalled carbone nanotube (MWCNT)/polymethyl Methacrylite (PAMMA) Nanocomposite prepared via the Coagulation Method, 2nd ASEAN-APCTP Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology, AIP Conf. Proc, 1455 (2012) 212-215.
- [33] T. Mizutani, Y. Ohno, S. Kishimoto, Electrical properties of carbon nanotube FETs, Invited Paper, Proc. Of SIE, 7037 (2008) 703703 (1-9).
- [34] E. Flahaut, synthèse par voie catalytique et caractérisation de composites nanotubes de carbone-metal-oxyde. Poudres et matériaux denses, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, (1999).
- [35] R. Thibault, Etude de nano-systèmes électro-mécaniques (NEMS) à base de nanotubes de carbone pour applications hyperfréquences, Thèse Doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III, (2008).

Référence Bibliographique

- [36] H. Mbtsi, Synthèse de nanotubes de carbone pour l'obtention de vias d'interconnexions électroniques et de drains thermiques, Thèse de Doctorat, Université d'Orléans, (2010).
- [37] M. Miao, Electrical conductivity of pure carbon nanotube yarns, *CARBON*, 49 (2011) 3755-3761.
- [38] P.A. Gowri Sankar, K. Udhaya kumar, Mechanical and Electrical Properties of single Walled Carbon Nanotubes: A Computational Study, *European Journal of Scientific Research*, 60 (2011) 324-340.
- [39] Ph. Avouris, T. Hertel, R. Martel, T. Schmidt, H. R. Shea, R.E. Walkup, Carbon nanotubes: nanomechanics, manipulation, and electronic devices, *Applied Surface Science*, 141 (1999) 201-209.
- [40] P.M. Agrawal, B.S. Sudalayandi, I.M. Raff, R. Komanduri, A comparison of different methods of Young's modulus determination for single-wall carbon nanotubes (SWCNT) using molecular dynamics (MD) simulations, *Computational Materials Science*, 38 (2006) 271-281.
- [41] J. Hone, Carbon Nanotubes: Thermal properties, *Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, (2004) 603-610.
- [42] S. Berger, F. Iglesias, P. Bonnet, C. Voisin, G. Cassabois, J.S. Lauret, C. Delalande and P. Roussignol, Optical properties of carbon nanotubes in a composite material: The role of dielectric screening and thermal expansion, *Journal of Applied Physics*, 105 (2009) 094323.
- [43] H. Kataura, Y. Kumazawa, Y. Maniwa, I. Umezu, S. Suzuki, Y. Ohtsuka and Y. Achiba. Optical Properties of Single Wall Carbon Nanotubes, *Synthetic Metals*, 103 (1999) 2555-2558.
- [44] C. Roquelet, Transfert d'énergie dans des composites nanotube carbone/porphyrine, Thèse de doctorat, Ecole normale supérieure de Cachan, (2012).
- [45] P.M. Ajayan and O.Z. Zhou, Applications of Carbon Nanotubes, *Topics Appl. Phys*, 80 (2001) 391-425.
- [46] C.S. berger, Charge and spin transport in carbon nanotubes, *Semicond. Sci. Technol*, 21 (2006) 1-9.
- [47] P.N. Minh and P.H. Khoi, Carbon nanotube: a novel material for applications, APCTP-ASEAN Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology (AMSN08), *Journal of Physics: Conference Series*, 187 (2009) 012002.
- [48] A. GOHIER, cinétique de croissance de nanotubes de carbone mono-parois et multi-parois orientés par procédé plasma, Thèse de Doctorat, Université de Nantes, (2007).
- [49] Y. Awano, S. Sato, M. Nihei, T. Sakai, Y. Ohno, and T. Mizutani, Carbon Nanotubes for VLSI: Interconnect and transistor Applications, *Proceedings of the IEEE*, 98 (2010) 2015-2031.
- [50] E. Minoux, Etude et développement de sources électronique à émission de champ à base de nanotubes de carbone. Application aux tubes hyperfréquences, Thèse Doctorat, Ecole Polytechnique, (2006).
- [51] <http://www.intel.com/products/processor/corei7EE/index.htm>

Référence Bibliographique

- [52] Y.L. Kim et al, Highly Aligned Scalable Platinum-Decorated Single-Wall Carbon Nanotube Arrays for Nanoscale Electrical Interconnects ACS Nano, 3 (2009) 2818-2826.
- [53] W. Fu, L. Liu, K. Jiang, Q. Li, and S. Fan, Super-aligned carbon nanotube films as aligning layers and transparent electrodes for liquid crystal displays, Carbon, 48 (2010) 1876-1879.
- [54] R. Landauer, Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices, Philosophical Magazine, 21 (1970) 863.
- [55] T. Ando, Excitons in Carbon Nanotubes, J. Physical Society of Japan, 66 (1997) 1066-1073.
- [56] S. Reich, C. Thomsen, and P. Ordejñn, Electronic band structure of isolated and bundled carbon nanotubes, Physical Review B, 65 (2002) 55411.
- [57] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, Physical properties of carbon nanotubes. Imperial College Press, (1998).
- [58] H. Kajiura, A. Nandyala, U.C. Coskun, A. Bezryadin, M. Shiraishi, and M. Ata, Electronic mean free path in as-produced and purified single-wall carbon nanotubes, Applied Physics Letters, 86 (2005) 122106.
- [59] C. Maneux, J. Goguet, S. Fregonese, T. Zimmer, H. Honincthun, and S. Galdin-Retailleau, Analysis of CNTFET physical compact model, International Conference on Design and Test of Integrated Systems in Nanoscale Technology, DTIS 2006, (2006) 40-45.
- [60] J. Guo and M.A. Alam, Carrier transport and light-spot movement in carbon-nanotube infrared emitters, Applied Physics Letters, 86 (2005) 023105.
- [61] M. Freitag et al, Hot Carrier Electroluminescence from a Single Carbon Nanotube, Nano Letters, 4 (2004) 1063-1066
- [62] P. Avouris, M. Radosavljevi, and S. Wind, Carbon Nanotube Electronics and Optoelectronics, Applied Physics of Carbon Nanotubes, Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag, (2005) 227-251.
- [63] <http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/Home2009.htm>
- [64] P. Avouris and J. Chen, Nanotube electronics and optoelectronics, Materials Today, 9 (2006) 46-54.
- [65] X. Qiu, M. Freitag, V. Perebeinos, and P. Avouris, Photoconductivity Spectra of Single-Carbon Nanotubes: Implications on the Nature of Their Excited States, Nano Letters, 5 (2005) 749-752.
- [66] P. Avouris, J. Chen, M. Freitag, V. Perebeinos, and J. C. Tsang, Carbon nanotube optoelectronics, physica status solidi (b), 243 (2006) 3197-3203.
- [67] R.B. Weisman, Simplifying carbon nanotube identification, The Industrial Physicist, 10 (2004) 24-27.
- [68] Y. Oyama et al, Photoluminescence intensity of single-wall carbon nanotubes, Carbon, 44 (2006) 873-879.

Référence Bibliographique

- [69] M. Najari, Modélisation compacte des transistors à nanotube de carbone à contacts Schottky et application aux circuits numériques, Thèse de doctorat, université Bordeaux, (2010).
- [70] J. Appenzeller, Y. Lin, J. Knoch, et P. Avouris, Band-to-Band Tunneling in Carbon Nanotube Field-Effect Transistors, *Physical Review Letters*, 93 (2004) 196805.
- [71] G. Zhang, X. Wang, X. Li, Y. Lu, A. Javey, H. Dai, Carbon Nanotubes: From Growth, Placement and Assembly Control to 60mV/decade and Sub-60 mV/decade Tunnel Transistors, *Electron Devices Meeting, IEDM '06, International conference*, (2006)1-4.
- [72] J. Knoch, J. Appenzeller, A novel concept for field-effect transistors – the tunneling carbon nanotube FET, *Device Research Conference Digest, DRC '05. 63rd*, (2005) 153-156.
- [73] N. Peng, H. Li, et Q. Zhang, Nanoscale Contacts between Carbon Nanotubes and Metallic Pads, *ACS Nano*, 3 (2009) 4117-4121.
- [74] Z. Zhou, G. Eres, R. Jin, A. Subedi, D. Mandrus, et E.H. Kim, The performance of in situ grown Schottky-barrier single wall carbon nanotube field-effect transistors, *Nanotechnology*, 20 (2009) 085709.
- [75] A. Javey, J. Guo, Q. Wang, M. Lundstrom, et H. Dai, Ballistic carbon nanotube field-effect transistors, *Nature*, 424 (2003) 654-657.
- [76] M. Freitag, J.C. Tsang, A. Bol, D. Yuan, J. Liu, et P. Avouris, Imaging of the Schottky Barriers and Charge Depletion in Carbon Nanotube Transistors, *Nano Letters*, 7 (2007) 2037 -2042.
- [77] B. Zheng, Y. Li, et J. Liu, CVD synthesis and purification of single-walled carbon nanotubes on aerogel-supported catalyst, *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 74 (2002) 345-348.
- [78] K. Balasubramanian, Y. Fan, M. Burghard, K. Kern, M. Friedrich, U. Wannek, et A. Mews, Photoelectronic transport imaging of individual semiconducting carbon nanotubes, *Applied Physics Letters*, 84 (2004) 2400.
- [79] F. Léonard, J. Tersoff, Role of Fermi-Level Pinning in Nanotube Schottky Diodes, *Physical Review Letters*, 84 (2000) 4693.
- [80] C. Adessi, R. Avriller, X. Blase, A. Bournel, H. Cazin d'Honinchtun, P. Dollfus, S. Frégonèse, S. Galdin-Retailleau, A. López-Bezanilla, C. Maneux, H. Nha Nguyen, D. Querlioz, S. Roche, F. Triozon, et T. Zimmer, Multiscale simulation of carbon nanotube devices, *Comptes Rendus Physique*, 10 (2009) 305-3190.
- [81] Y. Tseng, P. Xuan, A. Javey, R. Malloy, Q. Wang, J. Bokor, et H. Dai, Monolithic Integration of Carbon Nanotube Devices with Silicon MOS Technology, *Nano Letters*, 4 (2004) 123-127.
- [82] R. Marani, G. Gelao, A.G. Perri, Modelling of Carbon Nanotube Field Effect Transistors oriented to SPICE software for A/D circuit design, *Microelectronics Journal*, 44 (2013) 33–38.
- [83] T. W. Ebbesen and P.M. Ajayan, Large-scale synthesis of carbon nanotubes, *Nature*, 358 (1992) 220-222.

Référence Bibliographique

- [84] T. Guo, P. Nikolaev, A. G. Rinzler, D. Tomanek, D. T. Colbert, and R. E. Smalley, Self-Assembly of Tubular Fullerenes, *The Journal of Physical Chemistry*, 99 (1995) 10694-10697.
- [85] T. Ghani, Challenges and Innovations in Nano-CMOS Transistor Scaling, in 2010 IEEE Workshop on Microelectronics and Electron Devices, (2010).
- [86] T. Guo, P. Nikolaev, A. Thess, D. Colbert, and R. Smalley, Catalytic growth of single-walled nanotubes by laser vaporization, *Chemical Physics Letters*, 243 (1995) 49-54.
- [87] Y. Chen et M.S. Fuhrer, Tuning from Thermionic Emission to Ohmic Tunnel Contacts via Doping in Schottky-Barrier Nanotube Transistors, *Nano Letters*, 6 (2006) 2158-2162.
- [88] B.M. Kim, T. Brintlinger, E. Cobas, M.S. Fuhrer, H. Zheng, Z. Yu, R. Droopad, J. Ramdani, et K. Eisenbeiser, High-performance carbon nanotube transistors on SrTiO₃/Si substrates, *Applied Physics Letters*, 84 (2004) 1946.
- [89] L. Castro, D. John, et D. Pulfrey, Towards a compact model for Schottkybarrier nanotube FETs, *Conference of Optoelectronic and Microelectronic Materials and Devices*, (2002) 303-306.
- [90] J. Guo, S. Datta, et M. Lundstrom, A Numerical Study of Scaling Issues for Schottky-Barrier Carbon Nanotube Transistors, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 51 (2004) 172-177.
- [91] Y. Yaish, J. Park, S. Rosenblatt, V. Sazonova, M. Brink, et P. McEuen, Electrical Nanoprobing of Semiconducting Carbon Nanotubes Using an Atomic Force Microscope, *Physical Review Letters*, 92 (2004) 046401.
- [92] W. Kim, A. Javey, R. Tu, J. Cao, Q. Wang, et H. Dai, Electrical contacts to carbon nanotubes down to 1 nm in diameter, *Applied Physics Letters*, 87 (2005) 173101.
- [93] Z. Chen, J. Appenzeller, J. Knoch, Y. Lin, et P. Avouris, The Role of Metal–Nanotube Contact in the Performance of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors, *Nano Letters*, 5 (2005) 1497-1502.
- [94] A. Javey, R. Tu, D.B. Farmer, J. Guo, R.G. Gordon, et H. Dai, High performance n-type carbon nanotube field-effect transistors with chemically doped contacts, *Nano Letters*, 5 (2005) 345-348.
- [95] M. Radosavljević, J. Appenzeller, P. Avouris, et J. Knoch, High performance of potassium n-doped carbon nanotube field-effect transistors, *Applied Physics Letters*, 84 (2004) 3693.
- [96] A. Javey, J. Guo, D.B. Farmer, Q. Wang, D. Wang, R.G. Gordon, M. Lundstrom, et H. Dai, Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Integrated Ohmic Contacts and High- κ Gate Dielectrics, *Nano Letters*, 4 (2004) 447- 450.
- [97] P.G. Collins and P. Avouris, Nanotubes for Electronics, *Scientific American Magazine*, (2000) 62-69.
- [98] N. Inami, M. Ambri Mohamed, E. Shikoh, and A. Fujiwara, Synthesis-condition dependence of carbon nanotube growth by alcohol catalytic chemical vapor deposition method, *Science and Technology of Advanced Materials*, 8 (2007) 292-295.
- [99] S. Datta, Nanoscale device modeling: The Green's function method," *Superlattices Microstruct*, 28 (2000) 253–278.

Référence Bibliographique

- [100] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, (1997).
- [101] F. Djeflal, M. Chahdi, A. Benhaya, and M. L. Hafiane, An approach based on neural computation to simulate the nanoscale CMOS circuits: Application to the simulation of CMOS inverter, *Solid-State Electron*, 51 (2007) 26–34.
- [102] Z. Ren, R. Venugopal, S. Goasguen, S. Datta, and M.S. Lundstrom, nanoMOS 2.5: A twodimensional simulator for quantum transport in double-gate MOSFETs, *IEEE Trans. Electron Devices*, 50 (2003) 1914–1925.
- [103] A.A. Orouji and Z. Arefinia, Detailed simulation study of a dual material gate carbon nanotube field-effect transistor, *Phys. E*, 41 (2009) 552–557.
- [104] R. Djamil, *Contribution à l'étude de transistor MOS à oxyde de grille très mince*, Thèse de doctorat, université Mentouri – Constantine, (2010).
- [105] C.T. Hsing, D.P. Kennedy, A.D. Sutherland, K.M. Van Vliet, Quantum mechanical determination of the potential and carrier distributions in the inversion layer of metal-oxide-semiconductor devices, *Physica Status Solidi (a)*, 56 (1979)129-141.
- [106] J. Suñé, P. Olivo, B. Ricco, Self-consistent solution of the Poisson and Schrödinger equations in accumulated semiconductor-insulator interfaces, *Journal of Applied Physics*, 70 (1991) 337-345.
- [107] F. Rana, S. Tiwari, D. A. Buchanan, Self-consistent modeling of accumulation layers and tunneling currents through very thin oxides, *Applied Physics Letters*, 69 (1996) 1104-1106.
- [108] S.H. Lo, D.A. Buchanan, Y. Taur, Modeling and characterization of quantization, polysilicon depletion, and direct tunneling effects in MOSFETs with ultrathin oxides, *IBM Journal of Research and Development*, 43(1999) 327-337.
- [109] A. Ghetti, J. Bude, P. Silverman, A. Hamad, H. Vaidya, Modeling and simulation of tunneling current in MOS devices including quantum mechanical effects, *IEICE Transaction on Electronics*, E83-C, (2000) 1175-1182.
- [110] E. Cassan, *Etude théorique du courant tunnel de grille dans les transistors MOSFET sub-0,1µm*, Thèse de doctorat, université de Paris Sud (Orsay), (2000).
- [111] P. Andrey, I. Mayergoyz, Analysis of fluctuations in semiconductor devices through self-consistent Poisson-Schrodinger computations, *Journal of applied physics*, 96 (2004) 2071-2079.
- [112] C. Cheng and all, 3D self-consistent Schrödinger-Poisson solver: the spectral element method, *Journal of computational electronics*, 7 (2008) 337-341.
- [113] S. Vasudevan, K. Walczak, N. Kapur, M. Neurock, and A. W. Ghosh, Modeling electrostatic and quantum detection of molecules, *IEEE Sensors J*, 8 (2008) 857–862.
- [114] Y. Ouyang, Y. Yoon, and J. Guo, Scaling behaviors of graphene nanoribbon FETs: A three-dimensional quantum simulation study, *IEEE Trans. Electron Devices*, 54 (2007) 2223–2231.
- [115] G. Fiori and G. Iannaccone, Simulation of graphene nanoribbon field-effect transistors, *IEEE Electron Device Lett*, 28 (2007) 760–762.
- [116] J. Guo, Modeling of graphene nanoribbon devices, *Nanoscale*, 4 (2012) 5538–5548.

Référence Bibliographique

- [117] S. Datta, Nanoscale device modeling: The Green's function method, *Superlattices Microstruct*, 28 (2000) 253–278.
- [118] P. Zhao and J. Guo, Modeling edge effects in graphene nanoribbon field-effect transistors with real and mode space methods, *J. Appl. Phys*, 105 (2009) 034503-1–034503-7.
- [119] F. Djeflal, M. Chahdi, A. Benhaya, and M. L. Hafiane, An approach based on neural computation to simulate the nanoscale CMOS circuits: Application to the simulation of CMOS inverter, *Solid-State Electron*, 51 (2007) 26–34.
- [120] Z. Ren, R. Venugopal, S. Goasguen, S. Datta, and M.S. Lundstrom, nanoMOS 2.5: A twodimensional, simulator for quantum transport in double-gate MOSFETs, *IEEE Trans. Electron Devices*, 50 (2003)1914–1925.
- [121] A. Khial, D. Rechem, C. Azizi, M. Zaabat, On the DIBL Reduction Effect of Short Channel Carbon Nanotube Field Effect Transistors, *International Journal of Electrical and Computer Engineering (IJECE)*, 6 (2016) 1514-1521.
- [122] A. Khial , D. Rechema, C. Azizi and F. Lagraf, Study of different parameters effects on threshold voltage of CNTFET , *J. New Technol. Mater*, 8 (2018)10-14.
- [123] D. Rechem, A. Khial, C. Azizi, F. Djeflal, Impacts of high-k gate dielectrics and low temperature on the performance of nanoscale CNTFETs, *J Comput Electron* 15 (2016) 1-8.
- [124] H. Zhou et al, Numerical Study of DIBL effect in Carbon Nanotube-FETs, *IEEE NANO Organizers*, 752 (2009) 978-981.
- [125] R.T. Weitz, Highly Reliable Carbon Nanotube Transistors with Patterned Gates and Molecular Gate Dielectric, *Nano Letter*, 462 (2000) 1-3.
- [126] G. Fiori, et al, A Threen-Dimensional Simulation Study of the Performand of Carbon Nanotunbe Field-Effect Transistors with Doped Reservoirs and Realistic Geometry, *IEEE Trans. Electron Devices*, 53 (2006) 1782 – 1788.
- [127] [http:// www.itrs.net/links/2010itrs](http://www.itrs.net/links/2010itrs).
- [128] B. Svilicic, , V. Jovanovic, , T. Suligoj, vertical silicon-on-nothing fet: subthreshold slope calculation using compact capacitance model. *J. Microelectronics, Electronic Components and Materials* 38 (2008) 1-4.
- [129] S. Slimani, B. Djellouli, the impact of high dielectric permittivity of 2-D numerical modeling nanoscale SOI Double-Gate Mosfet using Nextnano simulator. *CENICS 2011, 4-International Conference on Advances in Circuits, Electronics and Micro-electronics, Nice/Saint Laurent du Var, France, (2011)*

Annexes

Annexe 1

La solution de l'équation de poisson bidimensionnelle peut s'obtenir en maillant le domaine étudié en $N_X \times N_Z$ noeuds, où N_X et N_Z représentent le nombre de noeuds suivant les directions x et z respectivement. La solution 2D de l'équation de Poisson est ainsi composée de $N_X \times N_Z$ valeurs de potentiels, initialement inconnus, correspondant à chaque noeud du réseau. Le canal (CNT ou graphène) est considéré intrinsèque, et il est connecté à deux réservoirs dopés N^+ . Notant que la résolution de l'équation de Poisson peut se limiter à la région du canal et de ses oxydes ou en considérant les réservoirs. Le potentiel étant considéré constant au delà de ces régions. Afin d'obtenir les équations susceptibles pour résoudre le système d'inconnues, nous devons appliquer l'équation (III.9) aux noeuds internes et utiliser des conditions particulières aux limites pour les noeuds frontaliers. Etudions tout d'abord le cas d'un noeud interne quelconque $[\alpha, \beta]$ de la figure (A.1.1) L'approximation des différences finies aux dérivées spatiales exprime l'équation (III.9) sous la forme:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\varepsilon_1 d_{y1} + \varepsilon_4 d_{y2}}{d_{y1} + d_{y2}} \right) \left(\frac{U_{\alpha, \beta} - U_{\alpha-1, \beta}}{d_{x1}} \right) \left(\frac{2}{d_{x1} + d_{x2}} \right) + \left(\frac{\varepsilon_1 d_{x1} + \varepsilon_2 d_{x2}}{d_{x1} + d_{x2}} \right) \left(\frac{U_{\alpha, \beta} - U_{\alpha, \beta+1}}{d_{y2}} \right) \left(\frac{2}{d_{y1} + d_{y2}} \right) + \\ & \left(\frac{\varepsilon_2 d_{y1} + \varepsilon_3 d_{y2}}{d_{y1} + d_{y2}} \right) \left(\frac{U_{\alpha, \beta} - U_{\alpha+1, \beta}}{d_{x2}} \right) \left(\frac{2}{d_{x1} + d_{x2}} \right) + \left(\frac{\varepsilon_3 d_{x1} + \varepsilon_4 d_{x2}}{d_{x1} + d_{x2}} \right) \left(\frac{U_{\alpha, \beta} - U_{\alpha, \beta-1}}{d_{y1}} \right) \left(\frac{2}{d_{y1} + d_{y2}} \right) \\ & = -\frac{q}{\varepsilon_0} (n - n_0)_{\alpha, \beta} \end{aligned} \quad (A.1.1)$$

Où $d_{x1}, d_{x2}, d_{y1}, d_{y2}$ sont les espacements entre les noeuds dans les directions X et Z en cas d'une discrétisation irrégulière, comme il est illustré dans la figure (A.1.1). $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$ sont les constantes diélectrique éventuellement entouré du noeud $[\alpha, \beta]$. En se basant sur l'équation (A1.1) qui est l'expression générale de l'équation de poisson discrétisé, on peut extraire les expressions simplifiées des cas particuliers tels que constante diélectrique uniforme, maillage uniforme, interface horizontale ou verticale de deux milieux diélectrique, etc.

Dans le cas d'une désertisation régulière pour un milieu uniforme, c'est-à-dire $d_{x1} = d_{x2} = d_{y1} = d_{y2} = a$ et $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon$, L'équation (A.1.1) peut être simplifié et exprimée sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{a^2} U_{\alpha,\beta+1} + \frac{1}{a^2} U_{\alpha-1,\beta} - 2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{a^2} \right) U_{\alpha,\beta} + \frac{1}{a^2} U_{\alpha+1,\beta} + \frac{1}{a^2} U_{\alpha,\beta-1} \\ = -\frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} q(-n + n_0)_{\alpha,\beta} \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

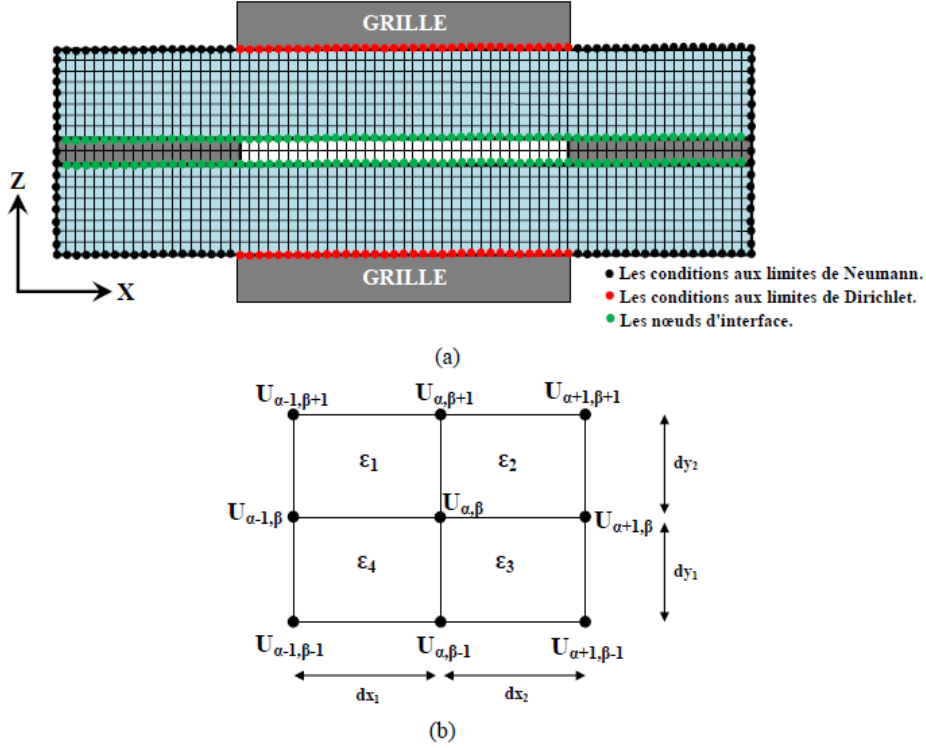


Figure A.1.1. (a) Discretisation du domaine de simulation pour la résolution de l'équation de Poisson en utilisant "2D FDM". (b) L'affectation des potentiels et des diélectriques dans les éléments du domaine en utilisant un stencil à 5 points standard.

Supposant que $d_{x1} = d_{x2} = a, d_{y1} = d_{y2} = b$ et $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon$ (cas d'une discrétisation uniforme monodimensionnellement pour un milieu diélectrique uniforme), l'équation (A.1.1) s'exprime comme :

$$\frac{a}{b} U_{\alpha,\beta+1} + \frac{b}{a} U_{\alpha-1,\beta} - 2 \left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b} \right) U_{\alpha,\beta} + \frac{b}{a} U_{\alpha+1,\beta} + \frac{a}{b} U_{\alpha,\beta-1} = \frac{-ab}{\varepsilon_0 \varepsilon} q(-n + n_0)_{\alpha,\beta} \quad (\text{A.1.3})$$

Dans le cas où le noeud est positionné à une interface horizontale $\varepsilon_{SUP}/\varepsilon_{INF}$, la discontinuité de ε devrait être prise en compte. Avec une discrétisation uniforme monodimensionnellement l'équation (A.1.1) devient :

$$\frac{a}{b}U_{\alpha,\beta+1} + \frac{b}{2a}\left(1 + \frac{\varepsilon_{INF}}{\varepsilon_{SUP}}\right)U_{\alpha-1,\beta} - \left(\frac{b}{a} + \frac{a}{b}\right)\left(1 + \frac{\varepsilon_{INF}}{\varepsilon_{SUP}}\right)U_{\alpha,\beta} + \frac{b}{2a}\left(1 + \frac{\varepsilon_{INF}}{\varepsilon_{SUP}}\right)U_{\alpha+1,\beta} + \frac{a}{b}\frac{\varepsilon_{INF}}{\varepsilon_{SUP}}U_{\alpha,\beta-1} = \frac{-ab}{\varepsilon_0\varepsilon_{SUP}}q(-n + n_0)_{\alpha,\beta} \quad (\text{A.1.4})$$

Où ε_{SUP} et ε_{INF} sont des constantes diélectriques pour les matériaux au-dessus de l'interface et au-dessous de l'interface, respectivement.

Ensuite, nous regardons les équations pour tous les noeuds de frontière. Aux contacts de la porte, les conditions aux limites de Dirichlet sont spécifiées, signifiant :

$$U_{\alpha,\beta} = V_G - V_{FB} \quad (\text{A.1.5})$$

Où V_{FB} est la tension de bande plate qui traduit la différence des travaux de sortie du métal de grille et le graphène ou CNT.

Aux contacts source / drain, les conditions aux limites de Neumann sont imposées, c'est à- dire $\vec{n} \cdot \vec{\nabla}V = 0$. Ces conditions aux limites permettent aux potentiels de contact de flotter à toutes les valeurs nécessaires pour assurer la neutralité de la charge dans les régions de contact. Les conditions aux limites fixes plus communes deviennent inappropriées dans les simulations de transport balistique où les statistiques de non-équilibre prévalent aux contacts source/drain. Pour les autres limites sans contact d'électrode, les mêmes conditions de champ électrique nul sont supposées. Ces conditions aux limites sont accomplies numériquement en réglant

$$U_{\alpha,\beta} - U_{\alpha,\beta\pm 1} = 0 \text{ pour les bords supérieur et inférieur.}$$

$$U_{\alpha,\beta} - U_{\alpha\pm 1,\beta} = 0 \text{ pour les bords gauche et droit.}$$

$2U_{\alpha,\beta} - U_{\alpha,\beta-1} + U_{\alpha\pm 1,\beta} = 0$ pour les deux noeuds de coin le long du bord supérieur.

$2U_{\alpha,\beta} - U_{\alpha,\beta+1} + U_{\alpha\pm 1,\beta} = 0$ pour les deux noeuds de coin le long du bord inférieur.

Jusqu'à présent, nous avons obtenu les équations $N_x \times N_z$ nécessaires pour résoudre $U_{\alpha,\beta}$. Connaissant n_0 et n (densité électronique), les équations (A.1.1) représentent un ensemble d'équations linéaires pouvant être résolues directement pour le potentiel du vide. Un système d'équations de poisson non linéaire, qui relie la densité de charge au potentiel à travers une fonction fictive non linéaire, s'est révélé

Annexes

très utile pour améliorer la convergence. Dans ce cas, la méthode de Newton-Raphson [130] peut être utilisée afin de résoudre le nouveau système d'équations non-linéaire.

Publications

Liste des Publications

1. **Aicha Khial**, D. Rechem, C. Azizi, M. Zaabat, On the DIBL Reduction Effect of Short Channel Carbon Nanotube Field Effect Transistors, International Journal of Electrical and Computer Engineering (IJECE), 6 (2016) 1514-1521.
2. **Aicha Khial**, D. Rechem, C. Azizi and F. Lagraf, Study of different parameters effects on threshold voltage of CNTFET , J. New Technol. Mater, 8 (2018)10-14.
3. D. Rechem, **Aicha Khial**, C. Azizi, F. Djefal, Impacts of high-k gate dielectrics and low temperature on the performance of nanoscale CNTFETs, J Comput Electron 15 (2016) 1-8.

Liste des Conférences

1. **A. Khial** and All, The impact of CNTFT's physical parameters on its DIBL effect, Second International conference on new materials and active devices May 25-26/2014, L'Arbi Ben M'Hidi Oum El Bouaghi.

Résumé

Depuis la découverte des composants nanométriques, ne cessent de révéler des propriétés physiques remarquables, à cet égard, Les nanotubes de carbone (CNT) ont des candidats prometteurs pour application dans les dispositifs futurs de la nanoélectronique, En particulier le transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone.

Dans ce contexte de cette thèse, nous avons étudié l'effet de l'abaissement de la barrière de tension du drain (DIBL) sur les transistors FETT à base des nanotubes de carbone (CNTFET) et la tension de seuil (V_{TH}). Cette étude est basé sur un model numérique en utilisant l'approche de la fonction de Green non-équilibre (NEGF) pour résoudre l'équation de Schrödinger et poisson dans les CNTFET.

Les résultats obtenus dans cette étude montrent l'influence des paramètres physique et géométrique (longueur de grille, l'épaisseur de l'oxyde, diamètre du nanotube ; permittivité du diélectrique et le dopage du canal) sur les performances électriques du CNFET pour différentes températures.

Ces résultats sont en bonne concordance avec les résultats présentés dans la littérature.

Mots clés: CNTFET ,fonction de Green ,DIBL, nano-transistors.

Abstract

Since the discovery of nanoscale components; they present a significant physical properties. In this regard; carbon nanotubes (CNT) have shown to be a promising candidate as a material for the future nanoelectronic devices in particular the carbon nanotube field effect transistor (CNTFET)

In this context that this thesis, we studied the effect of Drain Induced Barrier Lowering (DIBL), on FETT transistor based carbon nanotubes (CNTFET), And threshold voltage (V_{TH}); self consistent solution of the Schrodinger and Poisson equations has been performed within the non equilibrium Green's function a mode space approach.

The obtained results show the influence of physical and geometrical parameters (gate length ;oxide thickness,nano-tube;diameter;dielectric ,permittivity)and chanal doping)on the electrical performances of CNTFET for different temperatures

This results show good agreement with literature results.

Keywords: CNTFET; Green's function; DIBL, .nano-transistor.

المخلص

منذ اكتشاف مواد النانومترية لم تنتفك هذه المواد من إظهار خصائص فيزيائية ملحوظة و في هذا الصدد ظهرت أنابيب الكربون النانوية (CWT) لتكون مرشحا واعدة كمادة لأجهزة النانو الالكترونية في المستقبل و لاسيما في ميدان الترونزستور ذات تأثير الحقل (CNTFET)، و في هذا السياق هذه الأطروحة تقدم نمذجة الترونزستور بأنبوب الكربون النانوي المهمة لفهم الخصائص الكهربائية في مقياس النانومتر.

بعد دراسة نظرية التي تعطي نظرة عامة لأنابيب الكربون النانوية و كذلك الترونزستور CNTFET قمنا بدراسة تأثير حاجز فرق الكمون في بوابة المخرج (DIBL) و فرق كمون العتبة (V_{TH}) باستخدام الحسابات التحليلية على الخصائص الكهربائية للترونزستور من أجل درجات حرارة مختلفة.

النتائج المحصل عليها بواسطة برمجة نموذج في البعدين الثنائي باستعمال دالة غرين لحل معادلة شرودنغر و بواسو لتحديد تناقص (DIBL) و دراسة (V_{TH}) على أساس النموذج المقدم في هذه الدراسة، كما ان نتائج المحاكاة تبين تأثير المعايير الفيزيائية و الهندسية (طول القناة – سمك الأكسيد- قطر القناة- سماحية الفراغ و تطعيم القناة) على حاجز فرق الكمون لبوابة المخرج و فرق كمون العتبة.

الكلمات المفتاحية: CNTFET، دالة غرين، DIBL، الترونزستورات النانومترية.