

**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 LAVIE
DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE**

N° d'ordre :
Serie :

Thèse

Présentée pour l'obtention du diplôme de

Doctorat en sciences

Spécialité : Physique du solide

Option : Matériaux semi-conducteurs

Thème :

Modélisation des nanotransistors à effet de champ CNTFET

Par :

MARKI REBIHA

Devant le jury composé de :

Président :	M. Zaabat	Professeur	Université Larbi Ben M'hidi- Oum El Bouagui
Rapporteur :	C. Azizi	Professeur	Université Larbi Ben M'hidi- Oum El Bouagui
Examineur :	Y. Saidi	Professeur	Université 1 Constantine
Examineur :	M.S. Benbouza	M.C.A	Université El Hadj- Lakhdar Batna
Examineur :	S. Khemissi	M.C.A	Université Abbes Laghrour Khenchela

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier Pr. AZIZI CHERIFA de m'avoir permis de réaliser ce mémoire dans son équipe au département de Physique d'Oum El Bouaghi, pour sa disponibilité et la qualité de son encadrement ainsi que pour le soutien et la patience dont elle a fait preuve tout au long de ces quatre années.

Je remercie également Pr. Tabet Nouar, Pr. Zaabat Mourad, Pr. Boudine Azedine et Dr. Bahim Aissa pour leur aide précieuse et leur participation à mes travaux, notamment en ce qui concerne la documentation, la correction et la soumission des articles.

Je suis très honorée que Pr. M. ZAABAT ait accepté d'être président du jury, qu'il en soit ici remercié. Je tiens à remercier, Mme.Y. SAIDI, Mr. M. S. Benbouza et Mr. S. Khemissi d'avoir acceptés d'être membres du jury. L'enthousiasme de chacun dans cette tâche m'honore au plus haut point.

Enfin je ne pourrais terminer sans remercier très chaleureusement tous ceux qui ont largement contribué à l'aboutissement de ce travail et qui me supportent depuis de nombreuses années.

Tables de matières

Chapitre 1 : Etat de l'art des composants nanométriques

1-Introduction.....	
2-Synthèse et traitement des CNT	
3-Les matériaux composites à base de CNT.....	
4- Les revêtements et les films de CNT	
5- La microelectronique des CNT	
6-Les propriétés des composants électroniques à base du nanocarbone (graphène - CNT).....	
6.1. Les composants à CNT.....	
6.2. Les composants à base de graphène.....	
6.3. Les composants à base de CNT-graphène	
7- Conclusion	

Chapitre 2 : Les nanotubes de carbone

1. Introduction	
2. Structure cristalline des nanotubes de carbone.....	
3. Les différentes formes du carbone.....	
3.1. Le graphène	
3.2. Le graphite.....	
3.3. Le diamant	
3.4. Fullerènes et dérivés.....	
3.5. Les nanotubes multifeuillets et les nanotubes monofeuillets	
3.6. Classification des différents isomères du carbone	
4. Structure électronique des nanotubes de carbone.....	
5. Applications des nanotubes de carbone	
6. Voies de synthèse des nanotubes de carbone	
6.1. Evaporation par arcs électriques	
6.2. Ablation laser	
6.3. Dépôt chimique en phase vapeur	
6.4. Décomposition catalytique HiPCO.....	
7. Propriétés physiques des nanotubes de carbone.....	
7.1. Propriétés électriques	
7.2. Propriétés thermiques	
7.3. Autres propriétés remarquables des nanotubes de carbone.....	
7.4. Travail de sortie des nanotubes de carbone.....	
7.5. Transport balistique	
8. Présentation des différents types de transistors	
8.1. Transistor à barrières Schottky (SB-CNFET)	
8.2. Transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNFET).....	
8.3. Transistor à grille commandée optiquement (OG-CNFET).....	
8.4. Transistor double grille (DG-CNFET).....	

Chapitre 3 : Transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNFET)

1. Introduction.....	
2. Fonctionnement.....	
3. Calcul de la charge totale du nanotube.....	

4. Calcul du courant.....
5. Simulations et interprétations
6. Conclusion.....

Chapitre 4 : Modélisation compacte du transistor à contacts Schottky

1. Introduction.....
2. Fonctionnement du transistor a nanotube de carbone a contacts schottky
2.1. Formation des barrières Schottky
2.2. Régimes de polarisation des SB-CNTFET et profils de bande d'énergie.....
2.3. Détermination des fonctions de transmission
2.4. Calcul du coefficient de transmission par l'approximation "WKB".....
2.5. Forme de la barrière de potentiel.....
4. Modélisation compacte du transistor à contacts Schottky
4.1. Détermination de la barrière Schottky effective.....
4.2. Calcul du courant
4.3. Calibration de la longueur caractéristique de la barrière Schottky.....
4.4. Calibration de Calibration de la distance tunnel d_{Tunnel}
5. Influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques I-V.....
5.1. Influence de la hauteur de barrière Schottky
5.2. Influence du diamètre du nanotube
5.3. Influence de la distance tunnel.....
5.4. Influence de la permittivité de l'oxyde
5.5. L'influence de l'épaisseur de l'oxyde
5.6. Longueur de la grille
6. Conclusion.....
Conclusion générale.....

Liste des symboles

a : le paramètre de maille.

\vec{a}_1, \vec{a}_2 : Les vecteurs unitaires de la maille hexagonale.

\vec{T} : Le vecteur de translation.

\vec{C} : Le vecteur chiralité.

d : Le diamètre du nanotube.

θ : Angle de chiralité.

G : La conductance du nanotube.

G_0 : La conductance maximale du nanotube.

L' : La longueur de la maille élémentaire.

L : La longueur du nanotube.

e : La charge de l'électron.

V_{gs} : Le potentielle grille source.

V_{ds} : Le potentielle grille drain.

C_{ox} : la capacité d'oxyde de grille.

Q_{cnt} : La charge dans le canal.

$g(E)$: La densité d'états effectifs.

μ_S : Le niveau de Fermi de la source.

μ_D : Le niveau de Fermi de drain.

$f(E - \mu_S)$: La distribution de Fermi de la source.

$f(E - \mu_D)$: la distribution de Fermi du drain.

E_0 : L'énergie du milieu de la bande interdite.

n_{CNT} : La charge totale.

Δ_p : Le bas de la $p^{ième}$ sous-bande.

r : Le rayon du nanotube.

d_{ox} : L'épaisseur de l'oxyde de grille.

L : La longueur de grille.

M : Le nombre de modes transverses.

$v(k)$: La vitesse des porteurs.

f_S et f_D : les fonctions de distribution de la source et du drain respectivement.

$T_S(E)$ et $T_D(E)$: les probabilités de transmission d'un porteur de la source ou du drain vers le nanotube.

$T(E)$: Le coefficient de transmission.

E : L'énergie du porteur.

m^* : La masse effective.

$W(x)$: Le profil de la barrière.

Ψ_1 : L'onde incidente.

Ψ_2 : L'onde transmise.

Ψ'_1 : L'onde réfléchie.

E_{elec} : le champ électrique.

Φ_{SB} : La hauteur de la barrière Schottky.

ρ : la densité de charge mobile.

N : la densité de charge fixes.

d_{nt} : Le diamètre du nanotube.

ϵ_{nt} : La permittivité diélectrique du nanotube.

ϵ_{ox} : La permittivité diélectrique de l'oxyde.

$\lambda_{Schottky}$: La distance d'influence du contact métal sur le profil de la bande d'énergie.

d_{Tunnel} : La distance suivant l'axe du nanotube pour laquelle on fixe le niveau d'injection pour une polarisation V_{cnt} donnée.

$\Phi_{SB-S,D}^{eff}$: La hauteur de barrière Schottky effective.

$pgcd$: Le plus grand diviseur commun.

m_e : La masse de l'électron.

N : Le nombre d'atomes par maille.

Modélisation des nanotransistors à effet de champ

Introduction générale

L'évolution de la microélectronique vers la nanoélectronique, doit conduire, d'ici 2020, à une nouvelle révolution des industries électroniques. Cette avancée scientifique et technologique avait été prévue dès 1965 par Gordon Moore qui affirma lors d'une conférence de presse que le nombre de transistors par unité de surface allait doubler tous les 18 mois. Depuis, cette affirmation appelée « loi de Moore » n'a jamais été prise en défaut.

La miniaturisation des composants a permis de réduire continuellement les coûts de production et d'améliorer les performances de calcul donc c'est un nouveau monde qui est en train de naître et qui nous promet des produits plus petits, plus légers, un monde qui nous propose des ordinateurs plus performants, des moyens de communication plus rapides, des traitements médicaux plus efficaces, un environnement plus propre, un cadre de vie plus agréable.

C'est le nanomonde, qui vise à élaborer de nouveaux matériaux et des composants toujours plus petits, et à exploiter des phénomènes nouveaux qui n'apparaissent qu'à l'échelle du nanomètre. Cette émergence des nanotechnologies nécessite le développement de nouvelles techniques d'observation afin d'étudier les propriétés physiques à l'échelle nanométrique. La mesure et la compréhension des propriétés mécaniques d'objets nanométriques peuvent en effet apporter des informations très utiles concernant leur structures, leurs applications pratiques et aussi, d'approfondir nos connaissances.

Depuis une décennie, la recherche de nouveaux matériaux semi-conducteurs et de nouveaux dispositifs logiques pour remplacer le silicium et le MOSFET conduira à une nouvelle révolution au sein des industries électroniques, parmi ces nouveaux matériaux, les nanotubes de carbone, découverts en 1991 par Iijima Sumio, sont des feuilles de graphite roulées pour former un tube. Ils ont un diamètre de l'ordre du nanomètre et une longueur jusqu'à plusieurs microns.

Plusieurs dispositifs nouveaux sont actuellement étudiés, tels que les RTD (Resonant Tunneling Diode), SET (Single Electron Transistor), SPINFET (spin transistor), CNTFET (Carbon NanoTube Field Effect Transistor). Parmi ces dispositifs, les transistors basés sur les nanotubes de carbone (CNT) font partie des candidats les plus prometteurs car les nanotubes de carbone peuvent avoir des propriétés métalliques ou semi-conductrices avec une largeur de la bande d'énergie interdite variable, selon la manière dont la feuille de graphite est pliée (armchair, zig-zag, chiral). Les circuits basés sur des CNTFET auraient donc une extrême

intégration des transistors sur un centimètre carré du substrat. Pour les applications électroniques, un plus petit bandgap permet un courant plus élevé. Donc il est essentiel d'avoir des dimensions de nanotube autour de 1 nm pour avoir des caractéristiques intéressantes. Cependant, le CNT métallique peut être exploité comme interconnexion avec une résistance faible.

Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse est d'étudier les structures des CNTFET en proposant de développer une modélisation compacte de ces structures. Pour cela notre travail comprend quatre chapitres développant les aspects suivants :

Au premier chapitre, nous allons présenter l'état de l'art des composants nanométriques à base de CNT, graphène et à base de CNT-graphène ainsi leur applications dans les différents domaines.

Le second chapitre rappelle l'histoire du nanotube et poursuit avec la structure et les propriétés électroniques des nanotubes de carbone et leurs conséquences sur le transport des charges suivi d'une analyse des différents procédés de fabrication des nanotubes. Enfin, les quatre types de transistors à base de nanotubes de carbone (SB-CNTFET, C-CNTFET, OG-CNTFET et DG-CNTFET) sont décrits.

Le troisième chapitre traite la modélisation compacte du transistor à nanotube de carbone à modulation de la hauteur de barrière ou C-CNFET, c'est-à-dire avec les accès source et drain dopés chimiquement. La modélisation du fonctionnement de ce composant nécessite le calcul de la charge et du potentiel du canal. Ce dernier est également fonction de la tension de grille. Ensuite, l'équation du courant, fonction du potentiel du canal, est décrite. Enfin, Les résultats de simulation de ce modèle permettent d'estimer l'impact de la dispersion technologique du diamètre sur les résultats de simulation d'un circuit.

Dans un quatrième chapitre, nous commencerons par détailler le fonctionnement du transistor à nanotube de carbone à barrières Schottky. Dans un second temps, nous présenterons quelques réalités technologiques de la formation des barrières Schottky. Ensuite, nous exposons l'approximation WKB en la mettant en œuvre avec la modélisation compacte de la barrière Schottky dans le cas d'une diode à nanotube de carbone. De même, le modèle compact pour le transistor SB-CNTFET est développé en utilisant une deuxième approche basée sur la notion de la barrière effective. A la fin de ce chapitre, une étude d'influence des paramètres du modèle sur les performances statiques est présentée.

Chapitre 1 : Etat de l'art des composants nanométriques

1-Introduction

L'intérêt commercial dans le monde entier des nanotubes de carbone (CNT) se traduit par une capacité de production qui dépasse actuellement plusieurs milliers de tonnes par an. Les CNT sont incorporés dans divers produits commerciaux allant de batteries rechargeables, pièces automobiles, articles de sport aux coques de bateaux et les filtres à eau.

Les progrès de synthèse des CNT, purification et modification chimique permettent l'intégration des nanotubes de carbone dans l'électronique de couches minces et les revêtements de grande surface. Bien qu'ils n'offrent pas encore une résistance mécanique ou conductivité électrique ou thermique pour de nombreuses applications, les fils et les feuilles de CNT ont déjà des performances prometteuses pour des applications incluant les supercondensateurs, les moteurs et les écrans électromagnétiques de faible poids.

Les nanotubes de carbone (CNT) sont des cylindres homogènes d'une ou plusieurs couches de graphène (notés simple paroi, SWNT, ou multiparois, MWNT), avec des extrémités ouvertes ou fermées [1]. Les CNT parfaits sont tous des carbones liés à un réseau hexagonal, sauf à leurs extrémités, tandis que les défauts de nanotubes de carbone produits en masse introduisent d'autres imperfections dans les parois latérales qui dégradent généralement les propriétés souhaitées.

Les diamètres des SWNT et MWNT sont typiquement de 0,8 à 2 nm et de 5 à 20 nm, respectivement, bien que les diamètres des MWNT peuvent dépasser 100 nm. Les longueurs des CNT varient de moins de 100 nm à plusieurs centimètres en passant de l'échelle moléculaire à l'échelle macroscopique. En considérant la surface transversale des parois uniquement, un module d'élasticité proche de 1 TPa et une résistance à la traction de 100 GPa a été mesurée pour un MWNT individuel. Cette résistance est plus de 10 fois plus élevée que n'importe quelle fibre industrielle. Les MWNT sont généralement métalliques et peuvent transporter des courants jusqu'à $10^9 A.cm^{-2}$. Le SWCNT individuel peut être métallique ou semi-conducteur en fonction de l'orientation du réseau de graphène par rapport à l'axe du tube, qui est appelé la chiralité. Le SWNT peut avoir une conductivité thermique de $3500 Wm^{-1}K^{-1}s^{-1}$ à la température ambiante, basée sur la paroi du nanotube [2], ce qui dépasse la conductivité thermique du diamant. Le début de la recherche sur les CNT dans les

années 1990 a été précédé dans les années 1980 par la première synthèse industrielle de ce qui est maintenant connu sous le nom des MWNT et les observations documentées des nanofibres de carbone creux dès les années 1950. Cependant, l'activité commerciale liée au CNT a augmenté plus sensiblement au cours de la dernière décennie. Depuis 2006, la capacité de production des CNT a augmenté d'au moins 10 fois à travers le monde entier et le nombre annuel de publications dans des revues CNT liées et les brevets délivrés ne cessent de croître (figure 1).

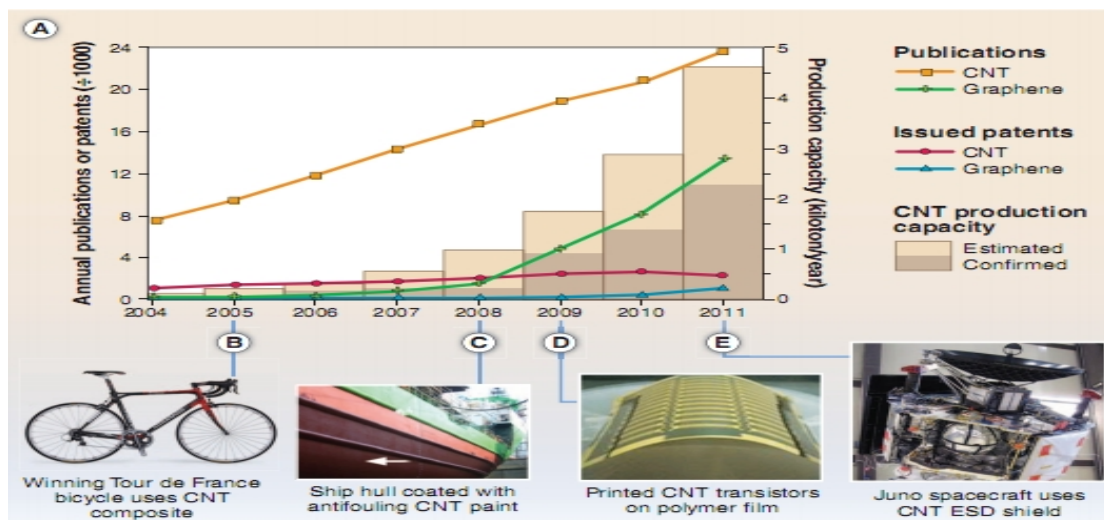


Figure 1 : (A) Les publications des journaux délivrées dans le monde par an. (B à E) Les produits sélectionnés à base de CNT : Le composite du cadre de la bicyclette, les revêtements anti-encrassements, l'électronique imprimée et un blindage de décharge électrostatique [3].

La plupart de la production des CNT est aujourd'hui utilisée dans les matériaux composites et les couches minces, qui reposent sur des architectures inorganisées des CNT ayant des propriétés limitées. Les architectures de CNT organisés (figure 2) tels que les forêts alignées verticalement, les fils et les feuilles possèdent des propriétés meilleurs que celles des nanotubes de carbone individuels et réalisent de nouvelles fonctionnalités, y compris la récupération de forme, l'adhérence à sec, l'amortissement élevé, une polarisation du terahertz, près de l'absorption d'un corps noir idéal et l'émission thermoacoustique du son [4].

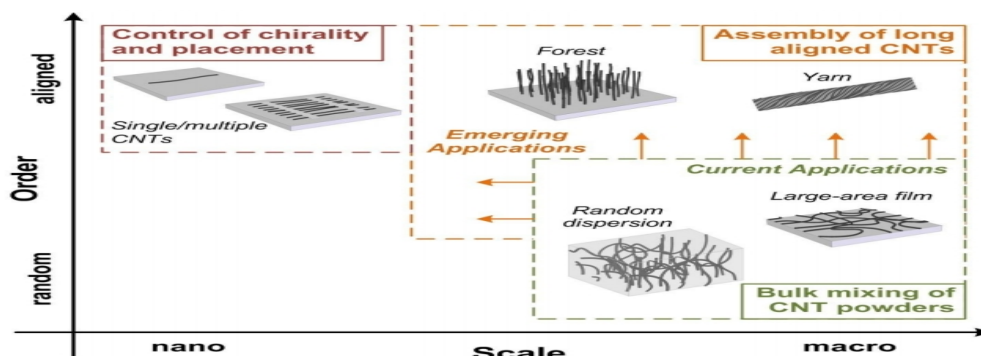


Figure 2 : Les nouvelles applications de CNT dépendent de l'ordre des nanotubes [3].

Cependant, actuellement les propriétés électriques, mécaniques et thermiques des macrostructures à base de CNT tels que les fils et les feuilles restent nettement inférieurs à celles des nanotubes de carbone individuels. Pendant ce temps, soutenues par une production en masse, les poudres de CNT ont déjà été incorporées dans de nombreuses applications commerciales. Compte tenu de ces tendances, cette étude se concentre sur les applications commerciales actuelles et futures des nanotubes de carbone les plus prometteurs et du graphène ainsi que les défis connexes qui seront les moteurs de recherche continue du développement.

2-Synthèse et traitement des CNT

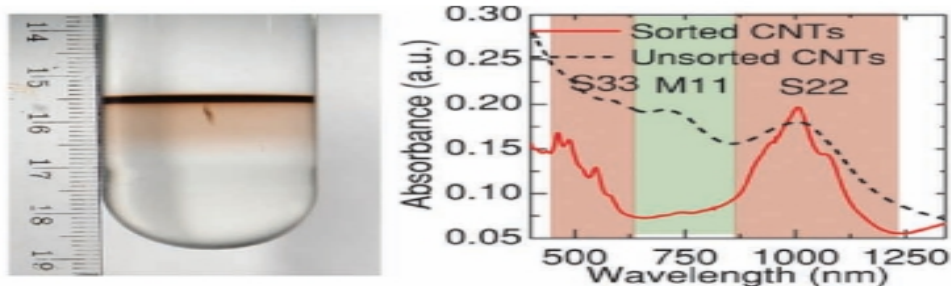
Le dépôt chimique en phase vapeur (CVD) est le mode dominant de production des CNT à grand volume et utilise généralement de mauvais réacteurs fluides qui permettent la diffusion uniforme du gaz et le transfert de la chaleur aux nanoparticules du catalyseur métallique. Elargir l'utilisation de matières premières à faible coût, augmente le rendement et réduit la consommation d'énergie et permet la production à grande échelle et par la suite diminuer sensiblement les prix des MWNT. Cependant, les méthodes CVD à grande échelle produisent des contaminants qui peuvent influencer sur les propriétés des CNT et nécessitent souvent un recuit thermique et / ou un traitement chimique coûteux pour leur suppression. Ces étapes peuvent introduire des défauts dans les parois latérales et par la suite réduire la longueur des CNT. Actuellement, les MWNT purifiés sont vendus pour moins de 100 \$ par kg, soit 1 à 10 fois supérieur à la fibre de carbone disponible dans le commerce.

La compréhension et la maîtrise des conditions du procédé CVD a permis la synthèse préférentielle de matériaux métalliques ou semi-conducteurs SWNT avec une sélectivité de 90 à 95% en dopant les nanotubes de carbone avec du bore ou de l'azote et le flux dirigé permet la croissance des SWNT isolés jusqu'à 18,5 cm de long. Cependant, l'amélioration des connaissances est obligatoire pour connaître la façon dont la chiralité, le diamètre, la longueur et la pureté se rapportent à la composition du catalyseur et les conditions opératoires. L'observation en plein réaction de la nucléation des CNT et la modélisation moléculaire de l'interface CNT-catalyseur [5] sera essentielle aux progrès de synthèse surtout la chiralité sélective.

Les nanotubes de carbone produits par la décharge d'arc et l'ablation laser ont généralement moins de défauts structurels que ceux produits par les techniques CVD, car les

défauts sur les feuilles tubulaires de graphène peuvent être réparés à des températures de croissance élevées avec un processus de recuit au cours de la réaction. Cependant les nanotubes de carbone ainsi préparés sont généralement contaminés par des impuretés, y compris le carbone amorphe, les catalyseurs métalliques, etc. Les post-traitements impliquant des processus de dispersion, de purification et de séparation sont généralement nécessaires, ainsi les qualités des CNT sont dégradées en raison de dommages de surface, la réduction de la longueur et la détérioration des contacts inter-tubes, ce qui améliore la diffusion des porteurs dans les réseaux CNT résultant la dégradation des propriétés de transport dans les transistors. Ces processus post-synthèse contribuent également de manière significative au rendement et au coût de la production. Les réseaux CNT obtenus contiennent à la fois des nanotubes de carbone métalliques et semi-conducteurs. Un défi important reste dans le contrôle du rapport CNT semi-conducteurs aux métalliques ce qui conduit à un compromis entre la mobilité des porteurs de charge et le rapport ON/OFF d'un transistor. Il existe des procédés de purification après la croissance qui produisent des CNT mono-dispersés en solution de même chiralité, diamètre, longueur et type : semi-conducteur ou métallique, dont les techniques sont l'ultracentrifugation en gradient de densité (density gradient ultracentrifugation DGU) et chromatographie de gel (gel chromatography) [6]. Ces techniques s'améliorent continuellement et produisent 99% de CNT semi-conducteurs.

La figure 3 montre une bande d'un SWCNT semi-conducteur dans un tube centrifuge après deux itérations du DGU des nanotubes de carbone produits par décharge électrique. La teneur relative en nanotubes de carbone semi-conducteurs est calculée à 99% en comparant l'aire relative sous les pics semi-conducteurs et métalliques dans le spectre d'absorbance optique,



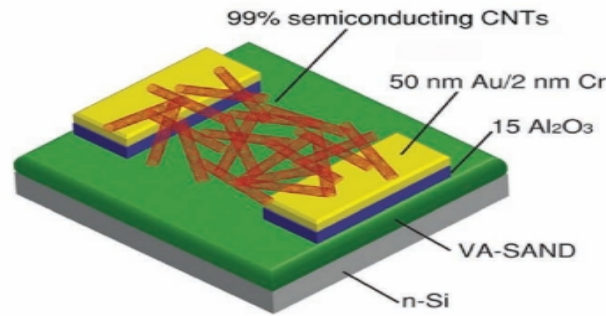


Figure 3 : CNT semi-conducteurs triés par la technique DGU confirmée par absorbance optique et qui peuvent être utilisés en tant que couche active dans les transistors à film mince [7, 8].

Bien que cette technique DGU robuste apparaît comme la méthode la plus prometteuse pour donner des nanotubes de carbone semi-conducteurs, la productivité et le rendement sont assez faibles et le coût du procédé est toujours élevé.

La figure 4 montre une méthode efficace appelée chromatographie de gel pour réaliser à grande échelle la séparation des nanotubes de carbone ayant une seule chiralité [6] qui est beaucoup plus simple que la méthode DGU. La séparation est basée sur la force d'interaction de la structure dépendante de nanotubes de carbone avec un gel à base de dextrane d'allyle, par conséquent, les CNT de grand diamètre ($> 1.4 \text{ nm}$) sont encore difficiles à séparer parce qu'ils contiennent plusieurs types de chiralité et la différence dans la courbure de la liaison carbone-carbone est réduite.

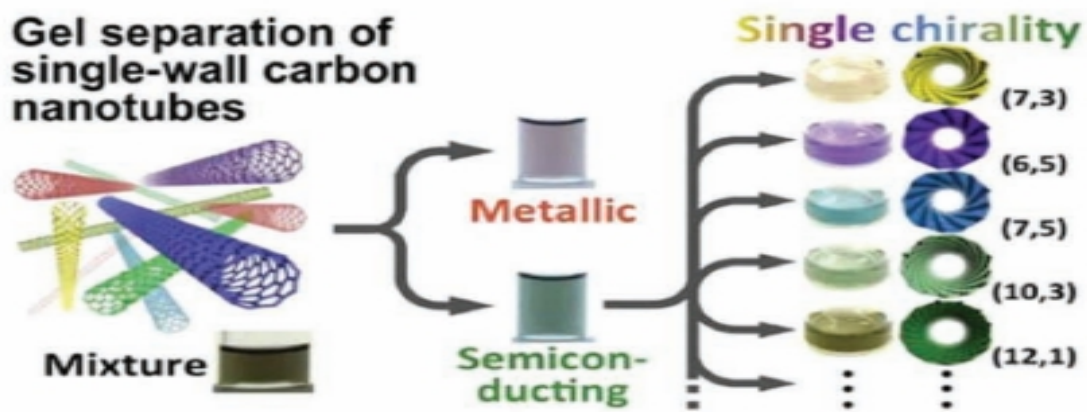


Figure 4: Un procédé de séparation à rendement élevé et simple en utilisant une électrophorèse sur gel, qui permet la séparation non seulement de CNT métalliques et semi-conducteurs mais aussi de chiralité unique [8].

La caractéristique la plus intéressante de cette méthode est que le processus de séparation utilise un seul surfactant, donc la séparation des nanotubes de carbone peut être

facilement répétée pour améliorer le niveau de pureté de chiralité suite à une dilution simple en utilisant une solution de dodécyl sulfate de sodium (SDS).

Alternativement, les poudres de SWNT de haute pureté peuvent être séparées selon la chiralité par centrifugation en gradient de densité en combinaison avec enveloppement de surfactant sélectif ou par chromatographie de gel. Bien que beaucoup de poudres et de CNT en suspension sont disponibles dans le commerce, leur production en état stable exige une modification chimique de la surface de CNT ou l'ajout de tensio-actifs (surfactants).

Le nettoyage ou le traitement thermique est généralement nécessaire pour enlever les surfactants après le dépôt de la solution, par exemple par revêtement en rotation (en anglais spin coating) ou par impression (printing). En outre, puisque la synthèse des SWNT par CVD nécessite beaucoup plus de contrôle des processus que la synthèse des MWNT et en raison des coûts élevés du processus de recherche et du développement, les prix des SWNT sont encore plus élevés que pour les MWNT. L'utilisation des MWNT est donc favorisée pour les applications où le diamètre du CNT ou la bande interdite n'est pas critique, mais la plupart des applications émergentes qui exigent des SWNT de chiralité spécifique nécessitent une réduction supplémentaire de prix pour la viabilité commerciale.

Alternativement, la synthèse de nanotubes de carbone alignés et longs, peut être traitée sans la nécessité d'une dispersion dans un liquide. Elle est très prometteuse pour la réalisation rentable. Ces procédés comprennent l'auto-alignement et la croissance horizontale et verticale des CNT sur des substrats revêtus de particules de catalyseur et la production des feuilles et des fils de CNT directement à partir du procédé CVD à catalyseur flottant. Les forêts de CNT peuvent être manipulées en solides denses, en films minces alignés et en microarchitecture tridimensionnelle (3D) complexe et peuvent être directement filées ou entraînées dans des fils ou des feuilles longues [9].

3-Les matériaux composites

Les MWNT ont d'abord été utilisés comme des charges électriques conductrices dans les plastiques, profitant de leur rapport élevé pour former un réseau de percolation à des concentrations aussi faibles que 0,01 pour cent en poids (% en poids). De nombreux fabricants vendent des résines de CNT prémélangées et des mélanges maîtres contenant des charges de CNT de 0.1 à 20% en poids. En outre, l'ingénierie nanométrique et les contacts CNT-polymère peuvent augmenter l'amortissement du matériau, qui est utilisé pour améliorer les articles de sport, y compris les raquettes de tennis et les cadres de bicyclettes (figure 1).

Les composites MWNT-polymères sont désordonnés et atteignent des conductivités plus élevées que $10^4 S.m^{-1}$ à 10% en poids de chargement. Dans l'industrie automobile, les

plastiques à CNT conducteurs ont permis à la peinture électrostatique assistée des boîtiers de rétroviseurs, ainsi que les canalisations de carburant et les filtres qui dissipent les charges électrostatiques. Les autres produits comprennent les interférences électromagnétiques (EMI)-blindage colis et wafer carriers (supports de tranches) pour l'industrie microélectronique.

Pour les applications portantes, les poudres de CNT mélangées avec des polymères ou des résines précurseurs peuvent augmenter la rigidité, la résistance et la ténacité. L'ajout ~ 1% en poids de MWNT à la résine époxy améliore la rigidité et la ténacité de 6 et 23%, respectivement, sans compromettre d'autres propriétés mécaniques. Ces améliorations dépendent du diamètre de CNT, du rapport (ratio), de l'alignement, de la dispersion et de l'interaction interfaciale avec la matrice.

Les résines de CNT sont également utilisées pour renforcer les composites de fibres. Parmi les exemples récents, les lames des turbines éoliennes légères, solides et les coques pour bateaux de la sécurité maritime qui sont faits à partir de composites en fibres de carbone avec la résine améliorée par des CNT (figure 5A).

Les CNT peuvent aussi être employés comme additifs dans les précurseurs organiques utilisés pour former des fibres de carbone. Les nanotubes de carbone influencent la disposition de carbone dans la fibre pyrolysée, permettant la fabrication de fibres de carbone de diamètre de 1 μm à plus de 35% d'augmentation de la résistance (4,5 GPa) et la rigidité (463 GPa) par rapport à des échantillons témoins sans CNT [10].

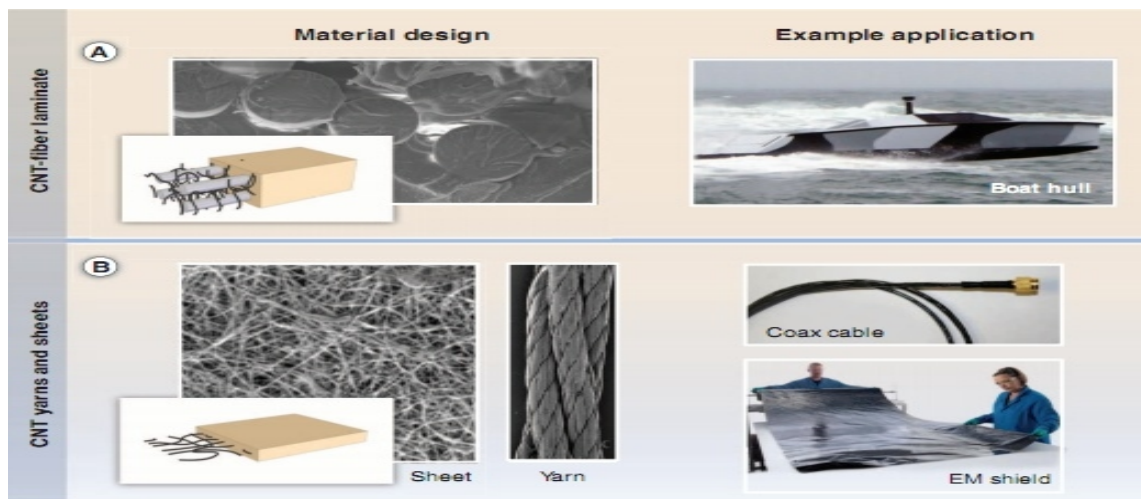


Figure 5 : (A) La coupe transversale d'une fibre laminée avec des CNT dispersés dans la résine et une légère composite fibre-CNT coque de bateau pour la sécurité maritime. (B) Les feuilles et les fils de CNT utilisés comme des câbles légers et électromagnétiques pour le blindage [3].

4- Les revêtements et les films de CNT

En s'appuyant sur la dispersion des CNT, la fonctionnalisation et les techniques de dépôt à grande surface, les CNT sont en train de devenir un matériau de revêtement multifonctionnel. Par exemple, les peintures contenant des MWNT réduisent l'encrassement biologique des coques de navires (figure 1C) en décourageant l'attachement des algues et les bernacles. L'incorporation de nanotubes de carbone dans les revêtements anticorrosions des métaux peut améliorer la rigidité du revêtement et la résistance tout en assurant une voie électrique pour la protection cathodique.

Le développement important se poursuit sur les CNT, basé sur les films conducteurs et transparents [11] comme étant une alternative à l'oxyde d'indium-étain (ITO). Une des préoccupations est que l'ITO est de plus en plus cher à cause de la rareté de l'indium, une demande croissante pour les écrans, les appareils à écran tactile, et les panneaux photovoltaïques. En plus le coût, la flexibilité des conducteurs transparents à base de CNT est un avantage majeur par rapport aux revêtements fragiles de ITO pour écrans flexibles. En outre, les conducteurs transparents des CNT peuvent être déposés à partir d'une solution (par exemple : La pulvérisation à ultrasons) et modelés par des méthodes non lithographiques rentables (exemple: la sérigraphie (screen-printing), micro-traçage (micro-plotting)). Les efforts récents du développement commercial a donné lieu à des films à SWNT avec 90% de transparence. Cette résistivité de surface est adéquate pour quelques applications. Les applications associées qui ont des exigences moins strictes comprennent les chauffages CNT à couche mince de CNT, comme pour les fenêtres de dégivrage ou les trottoirs.

5- La microélectronique

Les SWNT de haute qualité sont prometteurs pour les transistors , ce qui est dû à leur basse diffusion d'électron et leur gap, qui dépend du diamètre et de la chiralité. En plus, les SWNT sont compatibles avec l'architecture des transistors à effet de champ (field effect transistor FET) et possèdent une haute permittivité diélectrique. Après le premier transistor à base de CNT en 1998, Milestones inclut le premier SWNT-tunneling FET en 2004. En 2012, les SWNFET avec un canal inférieur à 10 nm de longueur montre une densité de courant de ($2.41 \text{ mA } \mu\text{m}^{-1}$ à 0.5 V), ce qui dépasse les résultats obtenus pour les composants à base de silicium[12]. Malgré les résultats prometteurs de dispositifs à un seul SWNT, le contrôle du diamètre CNT, la chiralité, la densité et le placement reste insuffisant pour la production microélectronique, surtout sur de grandes surfaces. Par conséquent, les dispositifs tels que les transistors comprenant des films modelés de dizaines à des milliers de SWNT sont plus

pratiques. L'utilisation d'un ensemble de CNT augmente le courant de sortie et compense les défauts et les différences de chiralité, ainsi l'amélioration de l'homogénéité et la reproductibilité du dispositif. Par exemple, les transistors utilisant des ensembles de CNT alignés horizontalement atteignent des mobilités de $80\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, des pentes sous le seuil de 140 mV decade⁻¹, et un rapport ON/OFF aussi élevé que 10. Ces développements sont soutenus par des méthodes récentes concernant la précision des densités de dépôt élevées de films de CNT permettant la fabrication de semi-conducteurs conventionnels avec plus de 10^4 composants de CNT sur une seule puce.

Les transistors à couches minces de CNT ou (TFT) sont particulièrement attractifs pour entraîner les afficheurs à diodes électroluminescentes organiques (organic light-emitting diode OLED), parce qu'ils ont montré une plus grande mobilité que le silicium amorphe ($\sim 1\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) et peuvent être déposées à basse température par des méthodes non à vide (nonvacuum methods). Récemment, les transistors à couches minces de CNT avec une mobilité de $35\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ et un rapport ON/OFF de $6 \cdot 10^6$ ont été démontrés (figure. 3A).

Un CNTFET vertical a montré un courant de sortie suffisant pour entraîner les OLED à basse tension, permettant l'émission rouge-verte-bleue par OLED à travers un réseau transparent de CNT. Le développement commercial de l'électronique à base de CNT comprend l'impression à faible coût de TFT, ainsi que les étiquettes d'identification par radiofréquence [13]. L'amélioration de la compréhension de la chimie de surface du CNT est essentielle pour la commercialisation des composants électroniques à base de CNT. L'évolution récente permet, par exemple, la rétention sélective des SWNT semi-conducteurs au cours du revêtement en rotation (spin-coating) et la réduction de la sensibilité aux produits adsorbés.

L'International Technology Roadmap pour les Semiconducteurs suggère que les nanotubes de carbone pourraient remplacer le cuivre dans les interconnexions microélectroniques, en raison de leur faible diffusion, leur grande capacité de transport du courant, la résistance à l'électromigration. Pour cela, des CNT métalliques soigneusement serrés ($> 10^{13}$ par cm^2) avec une faible densité de défauts et une faible résistance de contact sont nécessaires. Récemment, les transistors MOS complémentaires (CMOS) sont compatibles avec 150 nm de diamètre interconnecté (figure 6 C) avec un seul contact de trou CNT de résistance de 2,8 kohm a été démontré sur les wafers de 200 mm de diamètre [14]. Aussi, en remplacement des bosses de soudure, les CNT peuvent fonctionner à la fois comme des fils électriques et des dissipateurs de chaleur pour les amplificateurs de forte puissance (figure 6D).

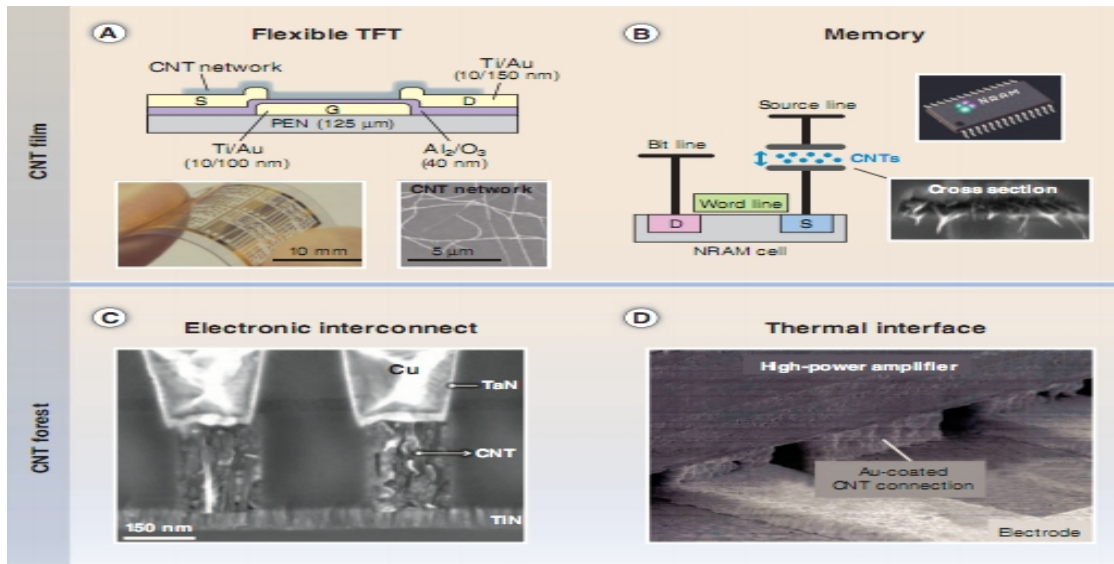


Figure 6 : Applications sélectionnées des CNT en microélectronique [3].

Enfin, un concept pour une mémoire non volatile basée sur un commutateur d'un seul CNT de barre transversale et électromécanique a été adapté pour la commercialisation (figure 6B) par des motifs enchevêtrés de films minces de CNT comme des éléments fonctionnels. Cette évolution nécessite des suspensions de CNT ultra purs pouvant être obtenus par centrifugation et traités dans les milieux industriels en salle blanche et sont donc compatibles avec les normes de traitements CMOS.

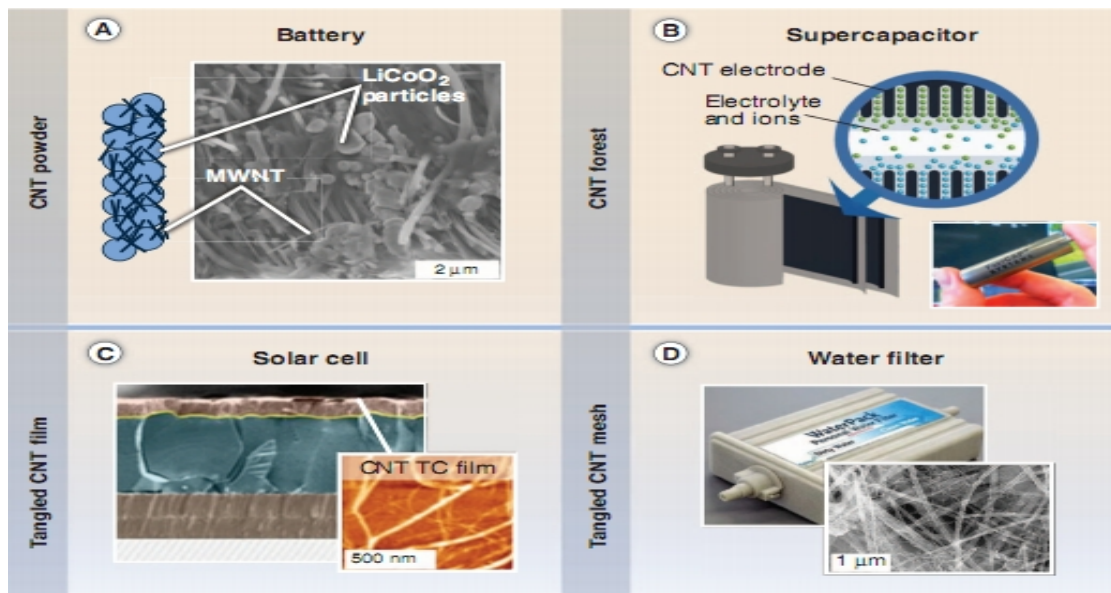


Figure 7: (A) Mélange de MWNT et poudre active pour électrode de batterie. (B) Le concept de supercondensateurs basés sur les forêts de CNT. (C) Cellule solaire en utilisant un conducteur transparent à base de SWNT. (D) Prototype de filtre à eau portable.

6- Propriétés des composants nanométriques

A ce jour, une mobilité extrêmement élevée des porteurs ($23.10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) a été obtenue avec un canal de graphène suspendu à une faible température de $\sim 5^\circ \text{ K}$ et même à la température ambiante, le transport balistique à l'échelle du micromètre a été réalisé avec une mobilité de porteurs supérieure à $10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Entre-temps, les transistors CNT ont démontré une mobilité des trous allant jusqu'à $79.10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ à température ambiante. La vitesse de saturation des transporteurs dans le graphène est proche de la vitesse de Fermi $\sim 10^8 \text{ cm s}^{-1}$. Les deux matériaux ont une capacité de courant électrique de 10^9 A cm^{-2} . La conductivité thermique du graphène est $\sim 53.10^2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ à température ambiante, surpasse les CNT d'une valeur de $35.10^2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Le graphène montre également une faible absorption de la lumière visible (2.3%) par couche de graphène [15].

Ces propriétés fascinantes font des CNT et le graphène des candidats prometteurs non seulement pour l'optoélectronique, les capteurs, les composites et les applications de l'énergie, mais aussi pour de nouveaux dispositifs nanoélectroniques. Ainsi, la technologie basée sur les CNT et le graphène a la possibilité de remplacer la technologie de silicium s'étendant de la loi de Moore après 2025 selon International Technology Roadmap for Semiconductors (2012). Cependant, ces caractéristiques remarquables ont été réalisées seulement sur des échantillons de haute qualité. A l'heure actuelle, le défi majeur est la possibilité de produire en masse des CNT et le graphène avec un contrôle souhaitable. Néanmoins, les CNT et le graphène sont les plus prometteurs pour les transistors à couches minces dans les futurs composants électroniques flexibles.

L'électronique flexible est une technologie qui permet de fabriquer des appareils électroniques sur des substrats flexibles en plastique par un processus à haut rendement et à faible coût par rapport aux puces rigides traditionnelles.

En ce qui concerne le choix des matériaux, les CNT et le graphène, avec le silicium amorphe hydrogéné (hydrogen-terminated amorphous-silicon a-Si:H), silicium polycristallin à basse température (low-temperature polycrystalline silicon LTPS), les semi-conducteurs d'oxydes métalliques et les semi-conducteurs organiques, sont des candidats prometteurs pour l'électronique flexible. Dans l'ensemble, les points suivants jouent un rôle essentiel dans le choix des matériaux, y compris la mobilité des porteurs, la température de préparation des matériaux, la flexibilité, la grande disponibilité, le coût et la stabilité.

Pour le moment, le silicium polycristallin à basse température LTPS ne possède qu'une forte mobilité qui représente son unique avantage ; Les oxydes métalliques sont coûteux en

raison de la rareté des éléments; a-Si:H est disponible et flexible, a une mobilité modeste, les semi-conducteurs organiques ont une faible mobilité et ils sont relativement instables chimiquement.

Les films minces à base de nanotubes de carbone et de graphène présentent d'excellentes propriétés à tous les problèmes mentionnés ci-dessus. Par conséquent, les transistors flexibles à base de CNT et de graphène sont de plus en plus attrayants pour réaliser de nouveaux composants flexibles, étirables et ainsi l'électronique transparente.

Les CNT et les films minces à base de graphène sont des conducteurs électriques excellents, ils sont prometteurs pour la production pratique de films conducteurs transparents (FCT) en raison de leurs propriétés électriques et optiques uniques. Comparés à un film conducteur transparent de ITO (oxyde d'indium d'étain), un CNT et FCT à base de graphène possèdent des avantages concurrentiels forts comprenant un moindre coût et une meilleure flexibilité.

Le tableau ci-dessous permet une bonne comparaison des propriétés des matériaux CNT et le graphène par rapport aux autres matériaux utilisés en nanoélectronique.

Matériau	propriétés du transistor	Conductivité	Flexibilité	Transparence	Prix	Fabrication	Stabilité
CNT	Bonnes	Bonne	Excellente	Bonne	Bon	Moyenne	Excellente
Organiques	Moyennes	Bonne	Bonne	Bonne	Bon	Excellente	Moyenne
Inorganiques	Excellentes	Passable	Bonne	Faible	Moyen	Moyenne	Excellente
Oxides du metal	Bonnes	Excellente	Bonne	Excellente	Bon	Bonne	Bonne
NW	Passables	Excellente	Bonne	Faible	Bon	Bonne	Passable
Graphène	Faibles	Excellente	Excellente	Excellente	Bon	Moyenne	Excellente

Tableau 1: Comparaison des CNT et les autres matériaux utilisés dans les applications de l'électroniques flexible [16].

6.1. Les composants à CNT

La figure 8a montre trois exemples de transistors à couches minces CNT. Q. Cao et al. [17] ont signalé que tous les transistors à couches minces CNTs sur un substrat PET (polyéthylène téréphthalate) sont transparents et flexibles (figure 8 ai). Les films minces CNT d'épaisseur élevée et faible et synthétisés par CVD ont été transférés sur le substrat. Les films les plus épais servent de source / drain / grille et les plus minces comme des canaux actifs pour les

transistors. Un diélectrique bicouche améliore la flexibilité des dispositifs, mais ces isolateurs d'épaisseur micrométrique augmentent la tension de fonctionnement des transistors. Les rapports ON/OFF sont moins de 100, ce qui démontre la difficulté de contrôler la densité des CNT dans la fabrication en phase solide. V. K. Sangwan et al. [18] ont rapporté des CNT transistors à grille enterrée et répartie, dont les électrodes de CNT ont été préparées par un procédé en solution et la couche diélectrique est Al_2O_3 et poly-méthylméthacrylate (PMMA) bicouche (Figure 8 a-ii). Les inconvénients sont la faible uniformité de performances des transistors, par exemple, les mobilités sont distribuées dans la gamme de $1 - 33 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Dans les deux exemples ci-dessus, la flexibilité des appareils est assez limitée à cause de l'utilisation des isolants contenant Al_2O_3 . S. Aikawa et al. [19] ont récemment rapporté un transistor tout-CNT extrêmement flexible et déformable (figure 8 a-iii), dans lequel le substrat et la couche diélectrique ont été faits d'alcool polyvinylique (PVA). Les nanotubes de carbone connectent aléatoirement les électrodes source / drain sans un contrôle précis du procédé CVD, ce qui conduirait à des performances électriques aléatoires pour les différents transistors. L'épaisseur totale des dispositifs fabriqués comprenant le substrat était d'environ $15 \mu\text{m}$, beaucoup plus mince que d'autres supports en plastique couramment utilisés comme le PET et le polyéthylène naphthalate (PEN). Le substrat de polymère et l'isolateur contribuent à une meilleure flexibilité et transparence par rapport aux transistors précédents faits de métaux, oxydes métalliques et le silicium.

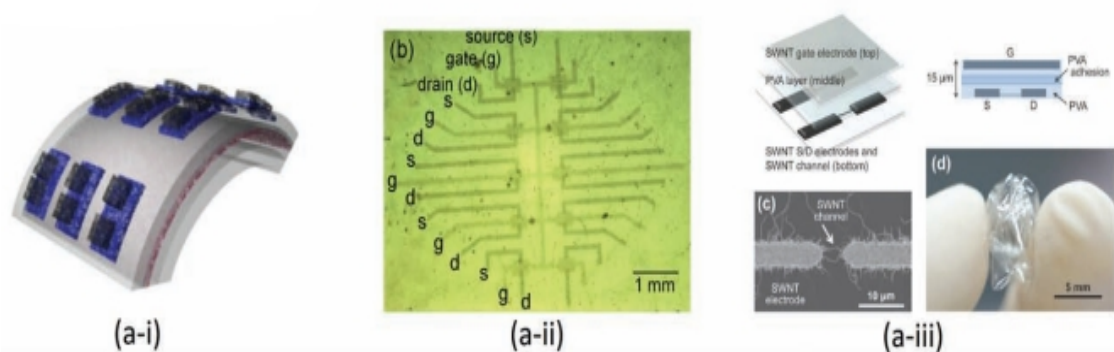


Figure 8 : (ai) Transistors à couches minces pliages [17]. (a-ii) les transistors à couches minces utilisent un substrat PET avec des électrodes de solution CNT [18]. (a-iii) Tous les transistors déformables à base de CNT [19].

6.2. Les composants à base de graphène

La figure 9 montre les progrès récents dans les transistors à couches minces de graphène. S. K. Lee et al. [20] ont présenté une méthode prometteuse pour la fabrication de réseaux de transistors à base de graphène sur un substrat de caoutchouc extensible en utilisant un procédé d'impression à basse température (figure 9 bi). Les deux canaux et les électrodes

source / drain sont monolithiquement modelés à partir d'un film de graphène synthétisé par la technique CVD sur des feuilles de Cu. La mobilité des porteurs augmente avec l'augmentation du nombre de couches de graphène. Les transistors de graphène à trois couches a donné une mobilité des trous de $> 10^3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, un ordre de grandeur supérieur à celui du transistor monocouche de graphène. Les dispositifs transparents présentent un fonctionnement stable à une déformation pouvant atteindre 5% en raison de l'excellente extensibilité du graphène et du gel d'ions, démontrant les applications potentielles dans l'avenir de l'électronique flexible [18].

Récemment, le même groupe a montré des transistors à base de graphène à grille enterrée avec GO (oxyde de graphène) comme diélectrique (figure 9 b-ii) [21]. En utilisant les mêmes techniques de formation pour le diélectrique et la grille, T. Y. Kim et al. [22] ont présenté un transistor attractif à base de graphène sur un substrat flexible produit par une technique d'impression à rouleaux avec un processus d'auto-assemblage par évaporation induite (EISA), qui permet la réalisation des dispositifs de graphène flexibles et transparents (figure 9 b-iii). Ce procédé EISA est prometteur pour la formation de motifs réguliers dans la production à grande échelle, cependant, il n'est pas adapté pour les transistors complexes et les modèles d'interconnexion des éléments de circuits.

B. J. Kim et al. [23] ont signalé une méthode pour fabriquer des transistors coplanaires à base de graphène où les motifs de source / drain / grille / canal ont été produit en une seule étape du processus de transfert et un diélectrique de grille à gel d'ions qui a été imprimée comme les deux exemples mentionnés ci-dessus (figure 9 b-iv) . Bien qu'un tel processus de formation du transistor de graphène peut considérablement diminuer les étapes de fabrication, l'absence de la bande interdite du graphène conduit à un très mauvais rapport ON/OFF des transistors. S. Lee et al [24] ont récemment fabriqué un circuit analogique à base de graphène avec la fonction de modulation quaternaire (figure 9 b-v). J. U. Park et al [25] ont présenté une idée de conception nouvelle pour réaliser monolithiquement des composants électroniques intégrés à base de graphène-graphite (figure 9 b-vi).

La structuration spatiale des catalyseurs métalliques hétérogènes permet la croissance sélective de graphène et du graphite dans un seul procédé CVD, avec un contrôle du nombre de couches de graphène. La synthèse chimique des dispositifs de graphène-graphite montre l'encodage de fonctionnalités électroniques distinctes en contrôlant la synthèse des couches de graphène et simplifie également les étapes de fabrication par rapport à l'électronique à base de silicium classique.

D'autre part, les dispositifs de graphène-graphite présentent une superbe flexibilité mécanique et une transparence modeste, mais peut éventuellement être améliorée. En se basant

sur les processus de transfert, les réseaux de transistors en graphène-graphite de grille arrière et les capteurs chimiques peuvent être fabriqués sur une série de substrats. Les performances électriques des transistors en graphène-graphite peuvent être améliorées par un meilleur contrôle de la technique CVD.

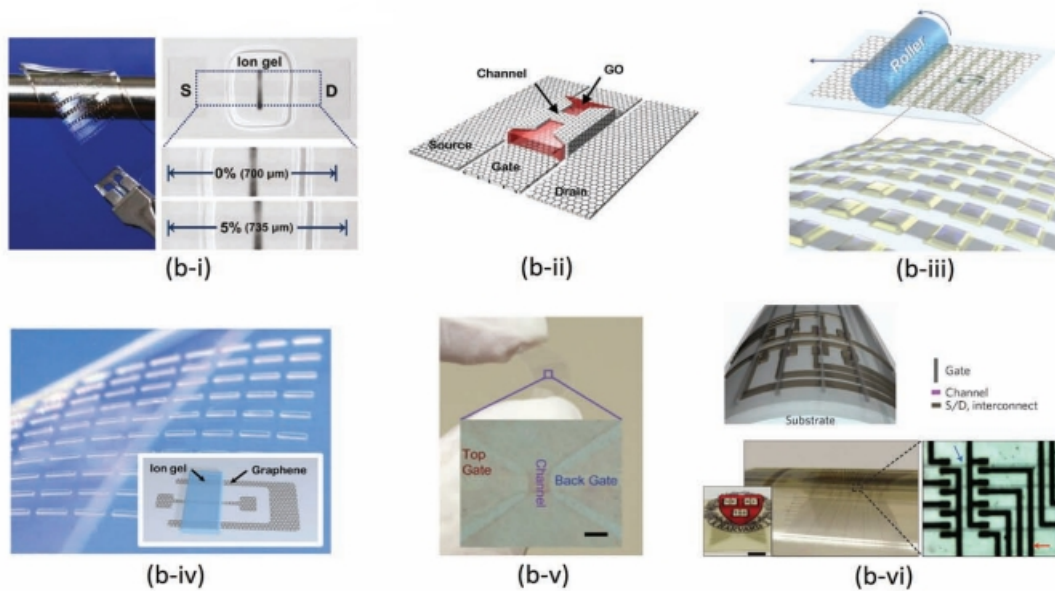


Figure 9: (b.i) les Transistors à graphène où les électrodes source / drain sont en graphène[20], (b-ii) Tous les transistors à graphène où le canal de graphène / source / drain ont été modelé monolithiquement [21]. (b-iii) La fabrication de réseaux de transistors par une technique d'impression par rouleau [22]. (b-iv) Transistors à graphène avec une grille coplanaire [23]. (b-v) Circuit modulateur tout graphène [24]. (b-vi) Réseaux monolithiques de transistors en graphène-graphite [25].

6.3- Les composants à base de CNT-graphène

La figure 10 montre deux exemples de transistors à couches minces CNT-graphène. S. Jang et al. [26] ont utilisé des électrodes en multicouche de graphène et un film mince CNT comme canal semi-conducteur pour construire des transistors CNT-graphène par la fabrication en phase solide (figure 10 ci). Les dispositifs présentent une faible dégradation de la mobilité des porteurs dans la gamme de tensions allant jusqu'à environ 2%, et une transparence moyenne de ~ 70% due à l'utilisation des films multicouches de graphène.

J. Yu et al. [27] ont rapporté une étude approfondie des transistors CNT-graphène et les circuits intégrés (figure 10 c-ii). Il a été constaté que l'hystérésis du composant a été réduite en remplaçant toutes les électrodes métalliques par une électrode de graphène monocouche. Les transistors CNT-graphène ont montré une bonne performance globale, comme une tension de fonctionnement $< 5 V$, un rapport ON/OFF $\sim 10^4$, une mobilité $80 \text{ cm}^2 V^{-1} s^{-1}$ et une transparence de 80%. Une série de circuits intégrés dont les inverseurs a démontré que ces

transistors à couche mince CNT-graphène souples et transparents sont plus proche à la réalisation de circuits numériques réalistes.

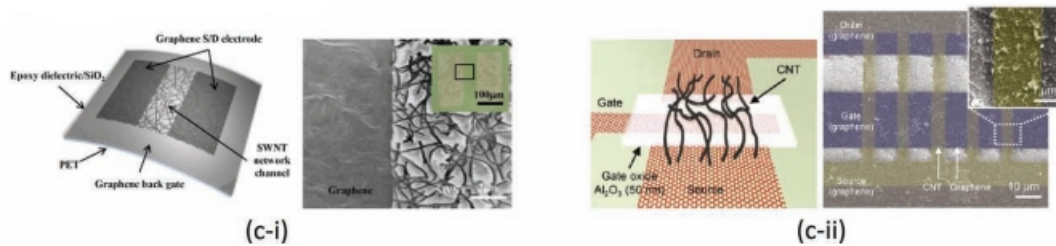


Figure 10: (c-i) Le canal du transistor est un film mince de CNT et les électrodes sont des films de graphène avec diverses couches [26]. (c-ii) les circuits intégrés CNT-graphène constitués d'électrodes de graphène en monocouche et des canaux en couche mince de CNT [27].

6- Conclusion

Pour résumer, le carbone est le matériau le plus prometteur pour l'électronique à l'horizon 2020 parce qu'il est semi-conducteur et semi-métal et en plus, c'est un matériau réalisable d'une manière rentable. Aujourd'hui, on le trouve dans de nombreux domaines, dans les appareils mobiles alimentés par batterie tels que les téléphones mobiles et les ordinateurs portables.

Les nanotubes de carbone (CNT) et le graphène ont fait l'objet d'une grande attention pour de nombreuses applications dans l'électronique flexible, en raison de leurs propriétés supêmes notamment la conductivité électronique exceptionnelle et la résistance mécanique. Ici, l'avancement des CNT et les transistors à couches minces flexibles à base de graphène à partir de la préparation des matières, les techniques de fabrication du composant à un contrôle des performances des transistors ont été examinés. L'état de l'art des techniques de fabrication des transistors à couches minces et les approches possibles d'intensification pour atteindre une production réaliste des transistors flexibles à base de nanocarbone ont été discutées.

Notamment les progrès récents dans tous les nanotransistors flexibles sont mis en évidence. Les transistors à couches minces flexibles sont destinés à une nouvelle électronique de style qui pourrait changer bien des aspects de notre vie. De tels appareils électroniques doivent être réalisés par des procédés de fabrication à faible coût, rapide et à haut rendement différents de l'électronique de silicium rigide et classique. Les CNT et le graphène ont reçu une attention considérable pour des applications dans l'électronique flexible, car ils sont techniquement supérieurs en termes de mobilité des porteurs et stabilité chimique dans les transistors à couche mince à d'autres matériaux semi-conducteurs, tels que les semi-conducteurs organiques. Nous avons tenté de clarifier les approches possibles qui vont très probablement

conduire à la production réaliste de l'électronique flexible à l'avenir, parce que toutes les approches citées dans de grand nombre de travaux confirment qu'ils ont beaucoup de possibilité dans le développement industriel.

Les films minces de CNT peuvent se comporter non seulement comme canaux semi-conducteurs, mais aussi comme électrodes pour les transistors à couche mince, tandis que le graphène satisfait uniquement aux exigences électriques et optiques des électrodes transparentes. Il est maintenant possible d'obtenir des films CNT minces uniformes et semi-conducteurs par des techniques de séparation du métal / semi-conducteur en solution ainsi que le contrôle précis de la densité des CNT dans le catalyseur flottant de la CVD. Une série de circuits intégrés sophistiqués à base de nanocarbone a été mise en évidence.

Les investissements et les développements de tous les nanotransistors à film mince sera l'un des domaines de recherche les plus actifs de réaliser des dispositifs électroniques extrêmement flexibles, transparents et extensibles. Il sera possible de réaliser de nouveaux appareils électroniques.

La tâche la plus urgente à l'heure actuelle est de fabriquer l'électronique flexible, extensible et transparente en utilisant une technique d'industrie à faible coût et à haut débit, au lieu de la production des semi-conducteurs conventionnels au laboratoire.

Dans la suite de notre travail, nous allons nous intéresser à une étude détaillée des nanotubes de carbone en expliquant la structure et les propriétés électroniques des nanotubes de carbone et leurs conséquences sur le transport des charges. Enfin, les quatre types de transistors à base de nanotubes de carbone (SB-CNTFET, C-CNTFET, OG-CNTFET et DG-CNTFET) sont décrits.

Chapitre 2 : Les nanotubes de carbone

1-Introduction

Depuis leur découverte, les nanotubes de carbone font l'objet d'un grand intérêt de la part de la communauté scientifique, notamment du fait de leurs propriétés physiques remarquables. Dans ce chapitre, nous nous intéressons plus particulièrement à leurs propriétés électroniques, thermiques dont nous rappelons quelques aspects parmi les plus intéressants, faisant du nanotube de carbone un excellent candidat pour étudier le transport électronique à l'échelle moléculaire.

Nous commençons tout d'abord par introduire ce chapitre en rappelant leur structure géométrique. Nous verrons que la structure d'un nanotube a une forte incidence sur ses propriétés électroniques. Suivant son hélicité, un nanotube a notamment la propriété de posséder ou non une bande d'énergie interdite au niveau de Fermi et d'être ainsi métallique ou semi-conducteur.

D'autre part, du fait de sa structure unidimensionnelle, un nanotube peut se comporter comme un guide d'onde électronique dans lequel le transport s'effectue à travers un nombre limité de modes de conduction. La conductance à travers ce système peut alors s'exprimer dans le formalisme de Landauer en termes de transmission d'ondes électroniques et de canaux de conduction. Nous abordons brièvement ces aspects de transport dans ce qui suit, en s'intéressant plus particulièrement à la limite de transport balistique [28].

2- Structure cristalline des nanotubes de carbone

Les nanotubes de carbone sont des cylindres creux dont la surface est entièrement composée d'atomes de carbone. On peut séparer les nanotubes de carbone en deux grandes classes : les nanotubes monoparois avec en général des diamètres $d \approx 1-2$ nm et les nanotubes multiparois ($d \approx$ quelques 10 nm) (figure 11).

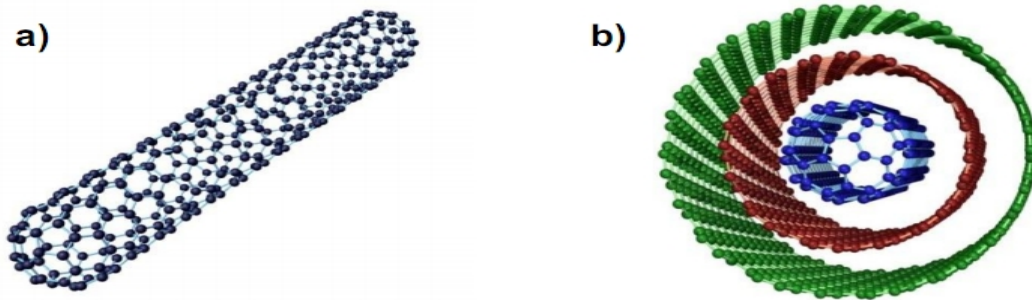


Figure 11 : Structure atomique d'un nanotube de carbone monoparoi a) et multiparois b) (Saito Lab., Université de Nagoya).

Les nanotubes monoparois sont formés d'une seule couche d'atomes de carbone et peuvent être vus comme un seul graphène replié sur lui-même pour former un nanotube. La structure des nanotubes multiparois concentriques est le résultat de l'arrangement de graphène disposé en couches concentriques et séparées d'une distance d'environ 3.4 Å [1].

Pour mieux comprendre la structure du graphène on doit commencer par la composition de l'atome de carbone qui est capable de se lier d'une manière variée à un grand nombre d'atomes différents, ce qui lui permet d'offrir des possibilités de synthèse multiples [28]. Cette diversité est due à sa structure électronique particulière ($1S^22S^22P^2$). Ses orbitales atomiques sont capables de s'hybrider avec d'autres atomes de carbone ou des hétéroatomes, pour former des orbitales moléculaires de type SP^1 , SP^2 ou SP^3 , ce qui confère au carbone un caractère bi-, tri- ou tétravalent. Il est donc possible de rencontrer des structures carbonées monodimensionnelles, bidimensionnelles ou tridimensionnelles. La seule forme thermodynamiquement stable du carbone est le graphite hexagonal. Les autres formes allotropiques du carbone sont métastables dans les conditions normales de température et de pression.

Les formes traditionnelles du carbone sont le graphite, le diamant. De nouvelles formes du carbone ont été récemment découvertes, tels que les fullerènes, les nanotubes multifeuillets et les nanotubes monofeuillets. La figure 2 montre ces différentes structures.

3. Les différentes formes du carbone

3.1. Le graphène

Le graphène (figure 12 c) est un plan monoatomique de carbone 2D de maille hexagonale, d'atomes de carbone hybridés SP^2 . Chaque atome de carbone possède quatre électrons de valence, et est lié de façon covalente à trois autres premiers voisins par les

orbitales atomiques $2S$, $2P_x$ et $2P_y$. Ces liaisons carbone-carbone comptent parmi les liaisons covalentes les plus fortes (plus fortes que dans le diamant) et sont situées dans le plan du graphène (liaisons σ). Contrairement à ces orbitales, l'orbitale $2P_z$ restante n'a aucun recouvrement avec les autres et reste perpendiculaire au plan de graphène, permettant ainsi de réaliser des liaisons dites π , dont les électrons sont plus mobiles dans le réseau. Les électrons entrant en jeu dans la conduction électrique sont donc principalement les électrons π .

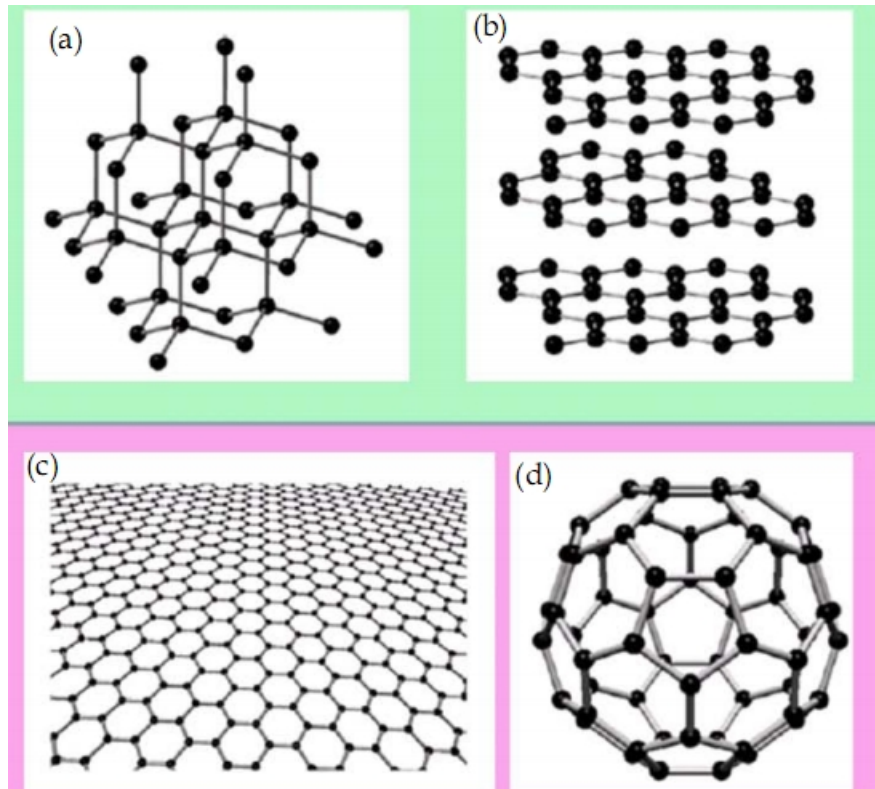


Figure12: Structures cristallographiques de (a) 3D diamant, (b) 3D graphite, (c) 2D graphène, (d) 0D fullerène [29].

3.2. Le graphite

En général le graphite se trouve sous la forme d'un empilement de couches de graphène liées par des liaisons de type Van der Waals (figure 12 b). La distance carbone-carbone a_{c-c} dans une couche est de 1.42\AA tandis que la distance inter-plan est de 3.35\AA .

3.3. Le diamant

Le diamant est une forme allotropique tridimensionnelle du carbone. Dans le diamant, les atomes de carbone sont en état d'hybridation SP^3 , et donc tétravalents. Il existe plusieurs structures cristallines du diamant, comme le diamant hexagonal, mais la structure la plus

courante est de loin le diamant cubique (figure 12 a). La maille de cette structure est de type cubique à faces centrées, avec un paramètre de maille de 0,356 nm, et une distance interatomique de 0,154 nm.

3.4. Fullerènes et dérivés

En 1985, Curl, Kroto et Smalley [30] ont réussi à isoler une forme majoritaire constituée de 60 atomes de carbone. Cette molécule (figure 12 d), refermée sur elle-même comme une cage, a la forme d'un icosaèdre tronqué dont tous les sommets sont occupés par des atomes de carbone. Sa structure est alors constituée de 12 pentagones et de 20 hexagones. Cette nouvelle molécule de 60 atomes de carbone, ou C_{60} , a été appelée buckminsterfullerène. Depuis, le nom a évolué, et nous nous référons maintenant à cette molécule en tant que fullerène, ou plus simplement C_{60} . Le fullerène C_{60} est le représentant le plus connu de la famille des fullerènes, molécules (cages) de plus de 60 atomes de carbone [31].

Les fullerènes doivent obéir à de fortes conditions de stabilité chimique ; Toutes les structures géométriquement possibles n'existent donc 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} ...

Depuis leur synthèse initiale par ablation laser, les moyens de production de fullerènes ont progressé. En 1990, Krätschmer [32] réussit la première synthèse à grande échelle de fullerènes par la sublimation d'une électrode en graphite par arc électrique. Aujourd'hui, des méthodes de synthèse du C_{60} par voie organique existent, ouvrant la voie à une production de masse des fullerènes.

3.5. Les nanotubes multifeuillets et les nanotubes monofeuillets

Les MWNT sont constitués de plusieurs parois espacées de 0,34 à 0,40 nm [1]. Deux configurations différentes, basées soit sur un emboîtement de tubes concentriques, soit sur l'enroulement d'un unique feuillet graphitique en spirale, permettent d'envisager ce type de structure.

Il y a deux types de nanotubes : métallique et semi-conducteur. Les deux types sont séduisants pour des applications nanoélectroniques d'avenir, soit comme élément actif, soit comme interconnexion. Le SWCNT, ayant un diamètre moyen de 0,4 nm à 3,0 nm et une longueur de quelques microns, montre des propriétés électroniques intéressantes pour construire des transistors à effet de champ (CNTFET – Carbon NanoTube Field Effect Transistor). La structure cylindrique du nanotube, dérivée de la structure bidimensionnelle du graphène, lui donne la possibilité de passer d'un état semi-conducteur à gap modulable à un état

métallique en ajustant seulement le diamètre. Ceci reste jusqu'à aujourd'hui une propriété unique des nanotubes de carbone.

3.6. Classification des différents isomères du carbone

Dimensions	0-D	1-D	2-D	3-D
Isomère	C fullerène	Nanotube	Graphite	Diamant
Hybridation	SP	SP	SP	SP
Distance interatomique Å	1.40 (C=C) 1.46 (C-C)	1.44 (C=C)	1.42 (C=C) 1.44 (C=C)	1.54 (C-C)
Propriétés électroniques	Semi-conducteur $E = 1.9 eV$	Métal ou semi-conducteur	Semi-métal	Isolant $E = 5.47 eV$

Tableau 1 : Le carbone est le seul matériau qui possède des isomères de 0-D à 3-D [33].

4. Structure électronique des nanotubes de carbone:

Une feuille de graphène est un pavage hexagonal à deux dimensions d'atomes de carbone de côté $a_{c-c} = 0.142nm$ (figure 13). Ce réseau hexagonal est défini par la base (\vec{a}_1, \vec{a}_2) . On note $a = \|\vec{a}_1\| = \|\vec{a}_2\| = \sqrt{3} a_{c-c} = 0.246 nm$.

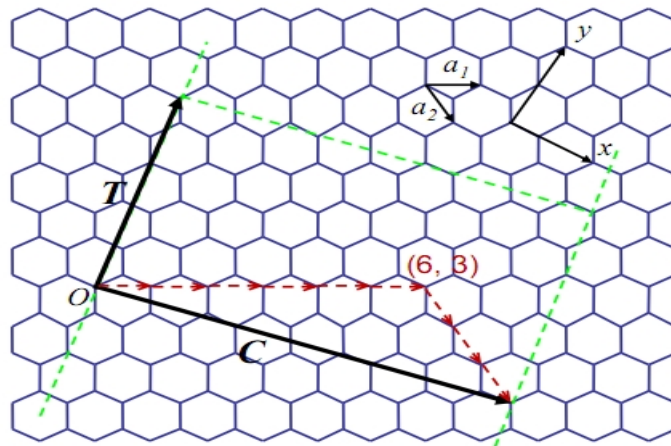


Figure 13 : Enroulement d'un SWNT sur le maillage cristallin de graphène et définition de la chiralité (n, m) associée au vecteur \vec{C} (dans le cas de la figure, $n = 6$ et $m = 3$) et des vecteurs directeurs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 . Le vecteur de translation \vec{T} suit l'axe de nanotube [34].

Le nanotube est obtenu en repliant la feuille de graphène de façon à faire coïncider deux sites cristallographiques équivalents reliés par le vecteur chiral \vec{C} qui est une combinaison linéaire des vecteurs de base du graphène \vec{a}_1 et \vec{a}_2 :

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

où (n, m) est un couple de nombres entiers positifs et $0 \leq m \leq n$. Ce couple (n, m) définit entièrement la structure du nanotube.

L'angle θ entre \vec{C} et le vecteur de base \vec{a}_1 est appelé angle chiral. Les nanotubes se divisent en deux familles : les nanotubes chiraux et les nanotubes non chiraux. Les nanotubes non chiraux possèdent une symétrie miroir, ce qui n'est pas le cas des nanotubes chiraux. Les hexagones dessinent une hélice sur la surface du nanotube. Les nanotubes peuvent être classés selon leur hélicité. Il existe trois hélicités différentes :

Si $\theta = 0^\circ$ ($n = 0$ ou $m = 0$) : Le nanotube est non chiral, de type zigzag ;

Si $\theta = 30^\circ$ ($n = m$) : Le nanotube est non chiral, de type chaise ;

Si $\theta \neq 0^\circ$ et 30° : Le nanotube est chiral.

Le nom des deux types de nanotubes non chiraux (zigzag et chaise) provient de la forme dessinée par une couronne d'atomes du nanotube (figures 14).

D'après ces relations tous les nanotubes zigzag sont métalliques. De plus, considérant l'ensemble des chiralités possibles, un tiers de nanotubes est métallique.

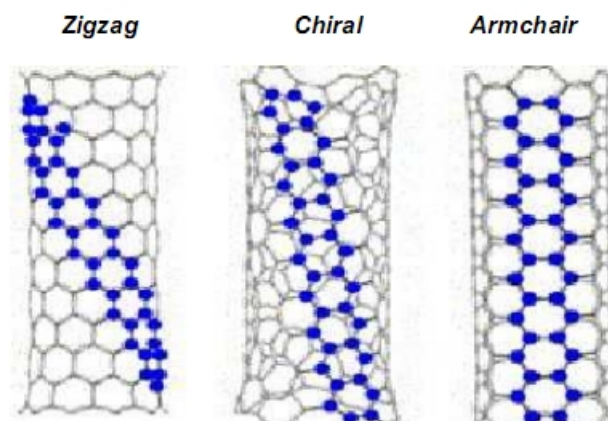


Figure 14 : Représentation des trois types de tubes [35].

Lorsque les motifs hexagonaux de carbone décrivent un cercle perpendiculaire à l'axe du tube, le CNT a une structure de type « zigzag ». Pour des motifs hexagonaux de carbone alignés parallèlement à l'axe du tube ; on dira que le nanotube a une structure de type « armchair » ou « chaise ». Lorsque les cycles forment une hélicité intermédiaire entre zigzag et armchair. Le nanotube est alors qualifié de « chiral » [35].

Les propriétés électroniques remarquables des nanotubes de carbone monoparoi permettent de fabriquer des interconnexions par les nanotubes métalliques ou des diodes et des transistors selon leur nature métallique ou semi-conductrice. Un nanotube monoparoi peut

être semi-conducteur ou métallique selon sa chiralité, comme le montre le diagramme des bandes d'énergie du graphène représenté figure (15a et b). Dans la zone de Brillouin, la bande de conduction π^* et la bande de valence π convergent aux points K et forment des vallées. Au point K, la différence entre les deux bandes décrit la bande interdite du nanotube. Selon la vue en coupe d'une vallée présentée figure (15 c et d), si les courbes des deux bandes se croisent ou si la différence est inférieure à quelques dizaines de meV, alors le nanotube présente des propriétés métalliques, sinon, le nanotube présente des propriétés semi conductrices. Le niveau de Fermi se situe dans le milieu de la bande interdite d'un nanotube semi-conducteur.

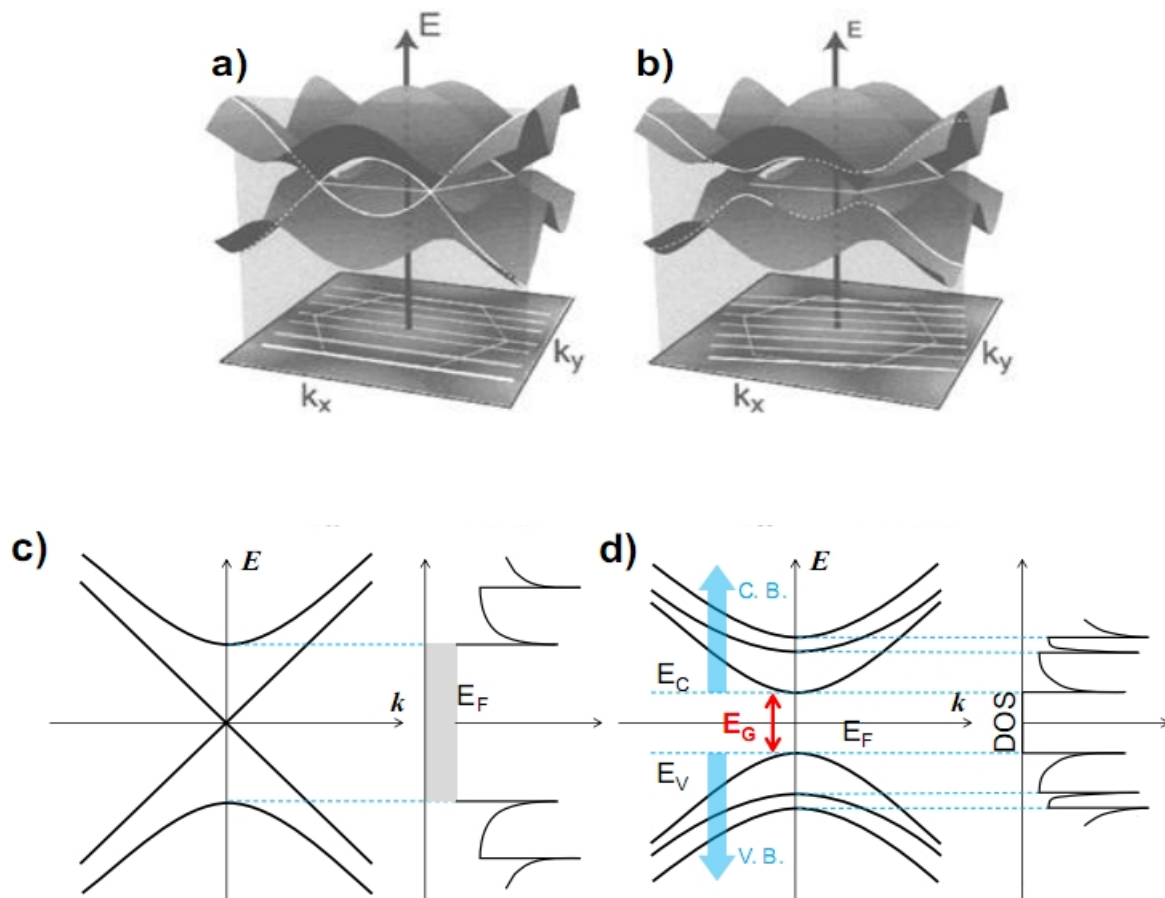


Figure 15 : Schéma de bandes d'énergie d'une feuille de graphène dans la zone de Brillouin: a) cas métallique, b) cas semi-conducteur. Schémas de bandes d'énergie du nanotube et de la densité d'état c) cas métallique et d) cas semi-conducteur [34].

Il existe un certain nombre de relations permettant de calculer le diamètre, l'hélicité, etc. A partir de la seule connaissance du couple (n, m) [36]:

$$d = 0.246 * \sqrt{n^2 + n * m + m^2} \quad (2)$$

Le vecteur de chiralité:

$$\|\vec{C}\| = a * (n^2 + n * m + m^2)^{1/2} \quad (3)$$

\vec{T} est le vecteur de translation qui est perpendiculaire au vecteur chiralité \vec{C} .

$$\vec{T} = t_1 \cdot \vec{a}_1 + t_2 \cdot \vec{a}_2 \quad (4)$$

Avec

$$t_1 = \frac{2m + n}{gcd((2n + m), (2m + n))}; \quad t_2 = \frac{2n + m}{gcd((2n + m), (2m + n))} \quad (5)$$

La fonction “gcd” est le plus grand diviseur commun.

Le diamètre du nanotube :

$$d = a * \frac{\sqrt{n^2 + n * m + m^2}}{\pi} = \sqrt{3} * a_{c-c} \frac{\sqrt{n^2 + n * m + m^2}}{\pi} \quad (6)$$

Angle de chiralité :

$$\theta = \arctan \frac{m * \sqrt{3}}{m + 2 * n} = \arccos \frac{2 * n + m}{2\sqrt{n^2 + n * m + m^2}} \quad (7)$$

La longueur de la maille élémentaire :

$$L = \sqrt{3} * a_{c-c} \frac{\sqrt{n^2 + n * m + m^2}}{p}; \quad p = pgcd(2m + n, 2n + m) \quad (8)$$

Le nombre d'atome par maille :

$$N = \frac{4 * (n^2 + n * m + m^2)}{p} \quad (9)$$

où a est le paramètre de maille de la feuille de graphène $a = 0.246 \text{ nm}$ et $a_{c-c} = 0.142 \text{ nm}$ la longueur de la liaison carbone-carbone.

5. Applications des nanotubes de carbone

Les applications des nanotubes de carbone sont de plus en plus nombreuses et diverses. Ils peuvent être utilisés :

- 1- Comme vecteurs médicamenteux et thérapeutiques,
- 2- Pour le stockage et le transport de l'énergie,
- 3- Dans la conception de matériaux composites,

- 4- En nanoélectronique dans la conception de FET (Field Effect Transistor) par exemple, dans le cas de CNT semi-conducteurs, ou encore comme interconnexions pour les CNT métalliques,
- 5- Comme pointe pour de la microscopie en champ proche.

Différentes applications en médecine (vectorisation de médicaments, reconstruction tissulaire, ...) sont envisagées puisque plusieurs auteurs ont démontré la biocompatibilité de certains CNT. D'autre part, ils sont utilisés dans la fabrication d'objets usuels. Ils sont utilisés dans certains équipements sportifs tels que les raquettes de tennis, les battes de baseball, les clubs de golf, les carrosseries de formule 1, les cadres de vélo (un vélo dont le cadre contenait des CNT, lui permettant d'avoir une masse inférieure au kilogramme, a été utilisé lors du Tour de France 2005 par l'équipe Phonak). Ils se retrouvent également dans des pneumatiques pour faciliter l'écoulement des charges électriques et les renforcer mécaniquement. Des prototypes d'écrans plats sont déjà opérationnels (Samsung, Motorola), les CNT y jouent un rôle de nanocanons à électrons.

6. Voies de synthèse des nanotubes de carbone

Les différentes méthodes de synthèse pour produire des nanotubes de carbone se classent en deux grandes catégories : les techniques à haute température et les techniques à moyenne température. A haute température, la formation des nanotubes s'obtient par la condensation d'un gaz carboné, obtenu par la sublimation d'une cible de graphite, sous atmosphère inerte. A moyenne température, les nanotubes sont obtenus par la décomposition catalytique d'espèces carbonées. Nous présentons dans cette partie les procédés de synthèse les plus répandus en nous attachant à exposer les avantages et les inconvénients de chacun d'entre eux. Il existe principalement trois voies de synthèse de CNT: l'arc électrique, l'ablation laser et le dépôt chimique catalytique en phase vapeur (CCVD, pour "Catalytic Chemical Vapour Deposition").

6.1. Evaporation par arcs électriques

L'arc électrique est la méthode historique pour la synthèse des nanotubes de carbone. Cette méthode (figure 16) était initialement une voie de synthèse des fullerènes, elle a été modifiée par la suite pour produire des CNT. La production de nanotube de carbone par évaporation par arc électrique (arc discharge evaporation) consiste à créer un plasma via un arc électrique entre deux électrodes en graphite.

L'anode est généralement enrichie en catalyseur (Fe, Ni, Co, Y, Gd) afin d'obtenir des nanotubes monoparois (l'absence de catalyseur induit la synthèse de multiparois sous forme de fagots). Cette électrode se consomme alors que la cathode se recouvre de composés carbonés parmi lesquels on retrouve du carbone amorphe, des particules de carbone et des nanotubes (30

à 70 %). Une étape de purification, de sélection de ces résultats de combustion est donc nécessaire pour extraire les nanotubes. Cette méthode est économique, relativement simple à mettre en œuvre et permet d'obtenir différents types de tubes mais la complexité des processus de synthèse rend délicat l'obtention d'un type unique de nanotube [37,38].

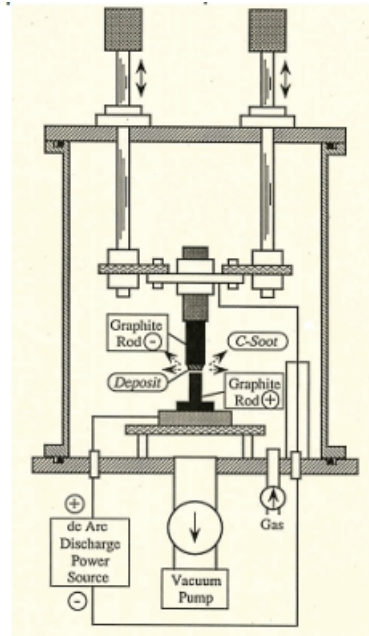


Figure 16 : Système utilisé par Iijima pour la synthèse de nanotubes de carbone par arc électrique [38].

Afin de connaître les paramètres utilisés, nous pouvons citer l'article de référence d'Aido et Iijima [1], dans lequel la synthèse était effectuée en appliquant une tension de 25 volts pour un courant d'environ 220 ampères. La croissance était effectuée dans une atmosphère d'hélium à 100 Torr et la température de la zone de synthèse était d'environ 2500°C.

6.2. Ablation laser

Cette technique a été développée en 1995 par Smalley et al. à l'Université de Rice (EU) [39]. La vaporisation laser permet d'obtenir des cordes de nanotubes monoparois avec une efficacité de l'ordre de 70-80%. Pour obtenir ces résultats, l'équipe de Rice a utilisé un laser pulsé pour vaporiser une cible composée d'environ 98.8% d'atomes de carbone (graphite) et de 0.6% de cobalt et de nickel (sans catalyseur, on n'obtiendrait que des nanotubes multiparois), en la chauffant jusqu'à 1200°C degré à l'intérieur d'un four en quartz (voir Figure 17). La pression d'Hélium ou d'Argon à l'intérieur de la chambre est de 500 mTorr. Les nanotubes se forment à proximité de la cible et sont donc entraînés par un flux d'azote en dehors du four ; ils se déposent alors sur un collecteur en cuivre refroidi à l'eau. Ils se présentent sous forme de cordes dont le diamètre est typiquement de 20nm. Leur longueur peut atteindre jusqu'à 100µm.

La répartition des diamètres des nanotubes, déterminée par diffraction X et TEM, est très peu dispersée ($1.38\text{nm} \pm 0.02\text{nm}$). Les principaux paramètres à maîtriser dans ce cas sont : la quantité de catalyseur, la puissance et la longueur d'onde d'émission laser, la température, la pression, le type de gaz inerte, la dynamique des fluides qui balayent la cible en carbone.

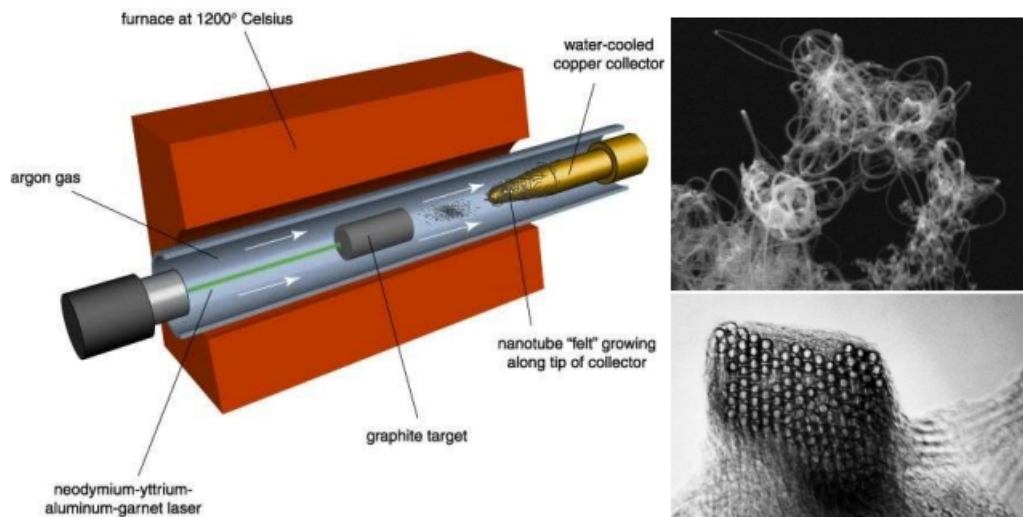


Figure 17 : A gauche : Schéma du système de production de nanotubes de carbone par ablation laser utilisé par l'équipe de R. Smalley à Rice [39]. A droite : Cordes de nanotubes monoparois.

6.3. Dépôt chimique en phase vapeur

La méthode CVD, est une technique à température moyenne adaptée des méthodes catalytiques ou pyrolytiques traditionnellement utilisées pour la synthèse des fibres de carbone. Le principe de cette méthode est basé sur la décomposition d'un gaz carboné à la surface de nanoparticules d'un catalyseur métallique dans un four porté à une température comprise entre $\pm 500\text{ °C}$ et $\pm 1200\text{ °C}$, suivant la nature du gaz. Le carbone libéré par la décomposition du gaz précipite ensuite à la surface de la particule et cette condensation aboutit à la croissance de structures tubulaires graphitiques. Le gaz carboné peut être le monoxyde de carbone, un hydrocarbure (acétylène, méthane,...), ou un alcool. Le catalyseur métallique est un métal de transition (Fe, Ni, Co, ...). Les nanoparticules sont obtenues par réduction d'un composé organométallique (tel que le ferrocène) et sont soit déposées sur un support en matériau céramique (silice, alumine) soit pulvérisées dans la chambre réactionnelle où a lieu la réaction avec le gaz carboné [40].

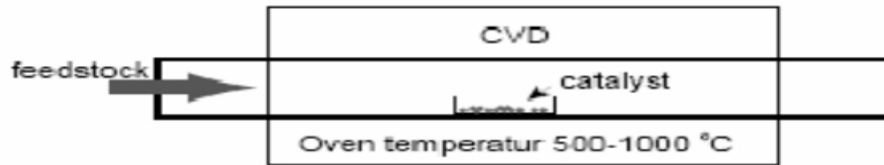


Figure 18 : Schéma de principe de décomposition catalytique d'hydrocarbure, méthode CVD [40].

6.4. Décomposition catalytique HiPCO

Le procédé HiPCO (High Pressure dismutation of CO : Décomposition sous haute pression de CO) a été développé par le groupe de R. Smalley [41]. Ce procédé fait partie de la famille des procédés de décomposition catalytique à moyenne température.

Un flux continu de pentacarbonyle de fer ($\text{Fe}(\text{CO})_5$) et de monoxyde de carbone (CO) est introduit sous une pression de 10 atm dans une enceinte chauffée à 1200°C . L'originalité du procédé tient au fait que le catalyseur, nécessaire à la croissance des tubes monofeuillets, est formé par la décomposition du gaz précurseur. D'où, le monoxyde de carbone utilisé comme source de carbone pour la croissance des tubes ne se pyrolyse pas à 1200°C , ce qui permet d'obtenir des nanotubes de carbone monofeuillets sans aucune impureté graphitique.

Les nanotubes formés par cette technique sont assez originaux. Ils présentent une large distribution de longueurs (dont des nanotubes très petits), mais contiennent beaucoup de catalyseur résiduel. Cette technique permet la synthèse à grande échelle de nanotubes monofeuillets. Le procédé de fabrication est à flux continu, ce qui est très positif pour une industrialisation.

En outre, le fait de pouvoir obtenir des nanotubes avec un diamètre moyen très petit (de l'ordre de 0,7 nm) est un avantage en ce qui concerne les propriétés optiques puisque cela ramène la bande interdite des nanotubes semi-conducteurs vers des régions spectrales où les détecteurs sont les plus sensibles.

7. Propriétés physiques des nanotubes de carbone

7.1. Propriétés électriques

Le comportement métallique ou semi-conducteur des SWNT est déterminé d'après l'orientation des motifs hexagonaux de carbone par rapport à l'axe du nanotube. Les nanotubes de configuration dite « Armchair » ont des propriétés électroniques comparables à celles des conducteurs métalliques, alors qu'une configuration « Zigzag » ou « Chiral » engendre un comportement semi-conducteur. De ces règles de construction, lors de la synthèse des CNTs

monofeuillets et en tenant compte de toutes les chiralités possibles, 1/3 des CNT auront un comportement métallique et 2/3 un comportement semi-métallique ou semi-conducteur.

Du fait de leur structure électronique unidimensionnelle, le transport électronique est dit balistique sur de longues distances dans les CNT. D'après ces auteurs, l'électron traverse le CNT (selon l'axe) sans subir de collisions et sans dissiper d'énergie. Théoriquement, en tenant compte du transport balistique, un nanotube aurait une résistance minimale de $\frac{h}{4e^2}$ soit $6,5 \text{ k}\Omega$ (h : constante de Planck, e : charge d'un électron), indépendamment de sa longueur [42].

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 nanométrique. La Figure 19 montre effectivement que la conductivité électrique des nanotubes de carbone augmente avec la longueur du nanotube, alors que la conductivité d'un fil de cuivre n'augmente pas avec la longueur, mais avec son diamètre. Ce diagramme montre aussi que la conductivité électrique des CNT devient supérieure à celle du cuivre (à diamètre équivalent), pour des longueurs supérieures à $10 \mu\text{m}$ [43].

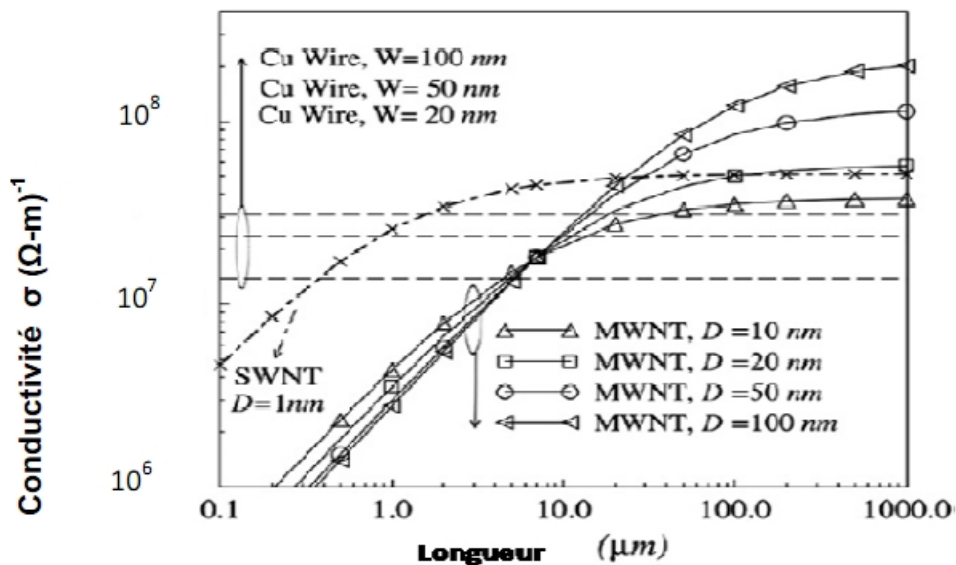


Figure 19 : Conductivité électrique des MWNT de différents diamètres et des SWNT en fonction de leur longueur [43].

Les mesures de résistivité électrique réalisées sur des tubes multi-feuillets isolés montrent que chaque tube possède ses propres caractéristiques électriques conduisant à un comportement métallique ou non avec des valeurs comprises entre $8 \cdot 10^{-6} \Omega\text{m}$ et $1,2 \cdot 10^{-4} \Omega\text{m}$. Thomas Ebbesen et al. [44] trouvent des résistances de $10^8 \Omega$ pour un nanotube de

diamètre 10 nm et $2 \cdot 10^2 \Omega$ pour un diamètre $18,2\text{ nm}$; en termes de résistivité électrique, ils trouvent respectivement $8 \cdot 10^{-3} \Omega m$ et $5,1 \cdot 10^{-8} \Omega m$.

Du fait du manque de reproductibilité des mesures sur les tubes isolés, des tests électriques 2-pointes et 4-pointes ont été réalisés sur des faisceaux de CNT [45] de 12 nm de diamètre moyen et de $180\ \mu m$ de long. Les résistances électriques mesurées dans l'axe des CNT sont respectivement pour le test 2-pointes et 4-pointes de $3,75\ \Omega$ et $0,0056\ \Omega$ (figure 20). Ces auteurs ont par la suite déterminé la résistivité d'un seul tube évalué à $2,44 \cdot 10^{-6} \Omega m$.

Sur ces graphes, on remarque que les CNT présentent bien un comportement ohmique, cependant la gamme de variation en tension pour les tests 4-pointes reste faible ($\pm 2\text{ mV}$).

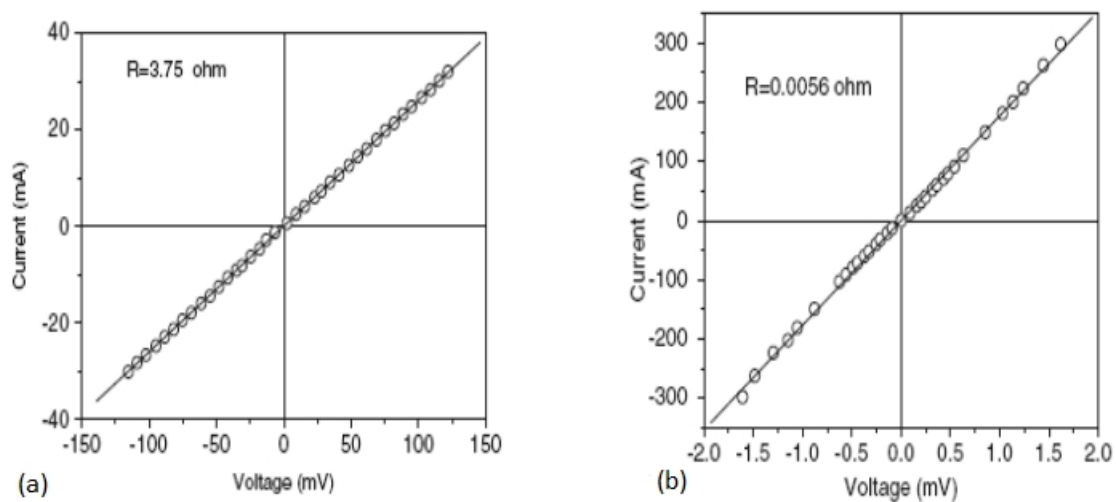


Figure 20 : Courbe $I=f(U)$: (a) pour le test 2-pointes et (b) pour le test à 4-pointes [45].

On remarque ainsi une dispersion de résultats de conductivité et de résistivité électrique des CNT. Cependant, beaucoup d'interrogations interviennent à la lecture de ces résultats puisque toutes les données nécessaires à l'appréciation ne sont pas systématiquement données (densité de CNT, longueur, diamètre...).

7.2. Propriétés thermiques

Le diamant et le graphite sont généralement connus comme étant d'excellents conducteurs thermiques à température ambiante. La liaison covalente dans le diamant étant isotrope, il dissipe la chaleur à hauteur de $2000\text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ à température ambiante. La conductivité thermique transverse du graphite est de $3000\text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Le nanotube de carbone possède une dissipation thermique fortement anisotrope.

En effet dans la direction de l'axe du tube, les atomes de carbone sont covalents sur une grande distance (du micromètre à plusieurs millimètres) à l'instar de son diamètre qui est

nanométrique. Ainsi, d'un point de vue théorique, pour un SWNT isolé et dépourvu de tout défaut (lacunes, impuretés etc..), une dissipation thermique est évaluée à $6600 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ dans le sens longitudinal à température ambiante. Cette conductivité thermique théorique est fortement altérée, et peut chuter jusqu'à $2980 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, lorsque le modèle de calcul tient compte de défauts au sein du CNT [46]. Ce calcul permet la détermination de conductivités thermiques dans l'axe des CNT et transverses (λ longitudinale $\approx 950 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ et λ transverse $\approx 5, 6 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$) pour un faisceau de SWNT montrant ainsi le caractère anisotrope quant à la dissipation de chaleur dans les CNT. Ces valeurs théoriques sont voisines des valeurs expérimentales enregistrées par Small et al. [47], et Fujii et al. [48] qui mentionnent respectivement 3000 et $2069 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ pour des MWNT isolés, de 14 et $9,8$ nm de diamètre. Pour des SWNT de $2,6 \mu\text{m}$ de long et $1,7$ nm de diamètre, Dai et al. avancent des valeurs proches de $3500 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$.

Cependant, les valeurs de conductivités thermiques mesurées lorsque les CNT sont associés en faisceaux sont plus faibles que celles prévues par les modèles. Hone et al. [49] ont mesuré la conductivité thermique d'un tapis de CNT monoparois alignés. Cette conductivité thermique qui n'excède pas $250 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ dans l'axe des CNT, reste toutefois supérieure à la conductivité d'un tapis de nanotubes multiparois mesurée par Yang et al. [50] entre 15 et $200 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$. D'autres valeurs de conductivité, plus faibles encore et voisines de $25 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, ont été enregistrées par Yi et al. [51] pour des faisceaux de MWNT. En théorie, le libre parcours moyen du phonon le long des CNT influe sur la conductivité thermique dans l'axe des CNT. La conductivité est maximale quand la longueur du CNT est supérieure au libre parcours moyen du phonon, à savoir environ 20 nm d'après Yang et al. [52], 100 nm d'après Che et al. [46] et 500 nm d'après Kim et al. [53]. En pratique, la longueur des CNT est généralement supérieure au micromètre ce qui ne devrait pas altérer la conductivité thermique axiale. Il semblerait donc que la chute de conductivité thermique soit associée à l'augmentation du nombre de contacts entre les CNT regroupés en faisceaux. Les caractéristiques électriques et thermiques des nanotubes semblent prometteuses mais que les valeurs de conductivité associées sont très différentes d'une référence à l'autre, qu'elles soient issues de calculs ou de mesures.

7.3. Autres propriétés remarquables des nanotubes de carbone

Les liaisons covalentes entre les atomes de carbone (liaisons C-C) assurent au nanotube de carbone des propriétés mécaniques remarquables. L'énergie de dissociation de cette liaison est de 348 KJmol^{-1} . C'est la raison pour laquelle les fibres (et notamment les nanotubes) ont des propriétés mécaniques uniques. Les CNT possèdent une grande flexibilité, réversibles jusqu'à un angle de 110° . Jian Ping Lu [54], puis Hernández et al. [55] ont calculé des modules d'Young proches de 1 TPa pour des SWNT et des MWNT, ces calculs sont proches des valeurs expérimentales (1,25 TPa pour des SWNT) obtenues par Krishnan et al. [56], (1,8 TPa pour des MWNT) obtenues par Treacey et al. [57]. D'après Yu et al. [58], les contraintes à la rupture des faisceaux de SWNT sont voisines de 30 GPa.

Les CNT sont insolubles dans les solvants organiques et dans l'eau. Cependant lorsque le CNT est mélangé à un détergent par exemple, des molécules chimiques peuvent être, greffées à la surface du CNT et s'auto-organisent en forme d'anneaux ou d'hélices. Ce qui permet plusieurs possibilités de fonctionnalisation du CNT [59]. Un tel assemblage organique constitue une méthode simple et efficace pour rendre fonctionnel des nanotubes par des réactifs chimiques. La structure ainsi obtenue permet d'envisager de nombreuses applications dans le domaine des nano biotechnologies (détecteurs moléculaires pour le dosage des molécules dans l'organisme, vecteurs notamment de médicaments complexes). Des mesures de réflectance ont été réalisées sur les CNT, ils sont capables d'absorber 99,9% de la lumière (Figure 21), ce qui est 3 fois mieux que l'alliage nickel-phosphore réputé comme étant le matériau le plus sombre [60].

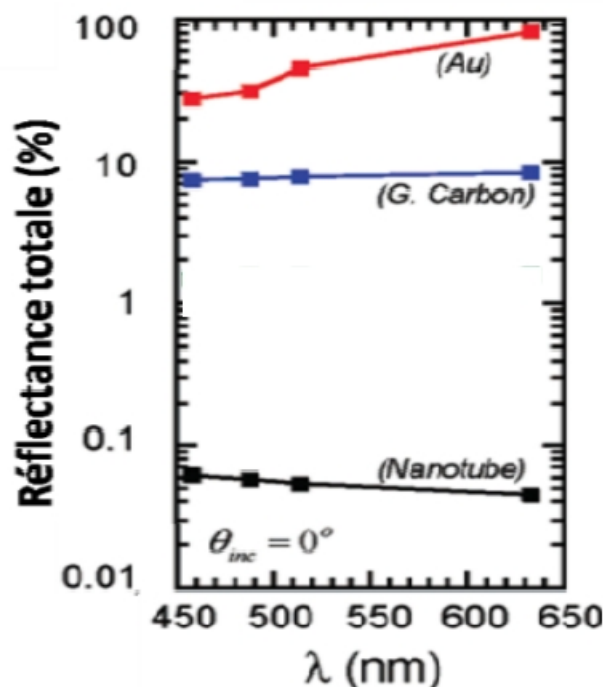


Figure 21 : Réflectance de CNT à différentes longueurs d'onde [60].

7.4. Travail de sortie des nanotubes de carbone

Si la valeur du travail de sortie du graphène est bien connue, le travail de sortie des nanotubes ne se déduit pas trivialement. Il a fallu attendre, en effet, la publication de Su et al. en 2007 [61]. Dans un premier temps, ces auteurs ont séparé les nanotubes en deux catégories : ceux de diamètre supérieur à 1nm (10\AA) qui ont un travail de sortie proche de celui du graphène qu'il évalue à 4.48eV. Tandis que pour ceux de diamètre inférieur, un déséquilibre de la distribution de charge se crée pour les atomes de carbone. De fait, les atomes de carbone se rapprochant de la paroi opposée, les effets répulsifs induits déplacent les nuages électroniques vers l'extérieur et ainsi modifient le dipôle de surface, augmentant ainsi le travail de sortie. Pour observer cette augmentation, des calculs ab-initio peuvent être réalisés (figure 22).

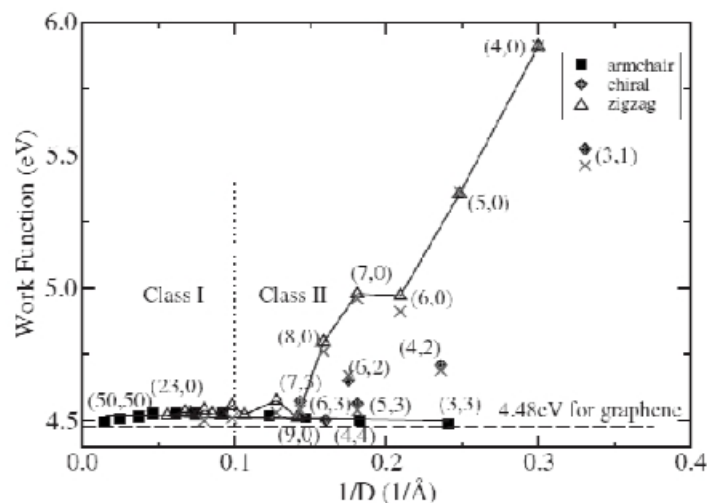


Figure 22: Variation du travail de sortie des nanotubes de carbone en fonction de l'inverse du diamètre du nanotube de carbone obtenu par calcul ab-initio [61].

L'augmentation est particulièrement importante pour les nanotubes de type Zig Zag de très petit diamètre et peut atteindre 5.9 eV pour les nanotubes(4,0). Mais dans la plupart des cas, le travail de sortie des nanotubes correspond au travail de sortie du graphène augmenté d'environ 0.1 eV. Or, ce travail de sortie est évalué empiriquement entre 4.75 et 5.05 eV soit 4.9 ± 0.15 eV.

7.5. Transport balistique

Considérons maintenant un nanotube de carbone connecté à des électrodes métalliques (réservoirs d'électrons). Le nanotube est considéré comme un lien conducteur pour le passage des électrons d'un réservoir à l'autre. Cette situation est schématisée sur la figure 23. Du fait des dimensions réduites du nanotube, les propriétés de transport électroniques de ce conducteur

sont bien différentes de celles d'un matériau massif. A basses températures, les fonctions d'onde des électrons peuvent préserver leur cohérence sur des distances importantes (microniques), caractérisées par la longueur de cohérence de phase $L\phi$. Dans le régime mésoscopique, les dimensions du nanotube sont telles que $L < L\phi$ et les électrons peuvent préserver leur phase sur toute la longueur du nanotube connecté. D'autre part, pour des nanotubes sans défauts, la distance moyenne entre deux collisions élastiques, caractérisée par le libre parcours moyen L_e est telle que $L < L_e$. Dans ce régime « balistique », le nanotube se comporte alors comme un guide d'onde pour les électrons qui sont transportés à travers le nanotube sans subir de collisions (mis à part les éventuelles réflexions aux bords). La loi d'Ohm qui régit le transport à travers un conducteur macroscopique ne peut plus s'appliquer. La quantité naturelle pour décrire le transport est la conductance $G = \frac{I}{V}$ qui s'exprime en terme de transmission d'ondes électroniques à travers des modes de conduction discrets. Par ailleurs, G peut s'exprimer par la célèbre formule de Landauer [62] :

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{j,\sigma} T_{j\sigma} \quad (10)$$

où la conductance G s'exprime sous la forme d'une somme de probabilités de transmission $T_{j\sigma}$ d'un ensemble de canaux de conduction discrets j de spins σ . Dans le cas d'un nanotube de carbone métallique, les bandes de conduction et de valence se coupent au niveau de Fermi en deux points. Le nanotube possède alors deux modes de conduction orbitaux, chaque mode étant doublement dégénéré en spin. On en déduit que la conductance maximale d'un nanotube relié aux électrodes métalliques par des contacts électriques transparents ($T = 1$) est :

$$G = 4 G_0 = 4 \frac{e^2}{h} \quad (11)$$

où $G_0 = \frac{e^2}{h} = 38.7 \text{ S}$ est la conductance maximale d'un seul canal de conduction non dégénéré en spin. Cette valeur maximale de la conductance dans le régime balistique ne peut être atteinte que pour des nanotubes de carbone de bonnes qualités structurales dans lesquels l'effet des défauts intrinsèques est suffisamment faible pour que la longueur du nanotube connecté soit telle que $L < L_e, L\phi$.

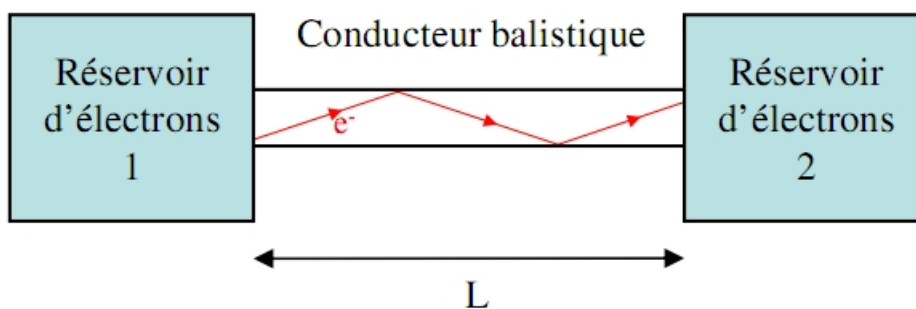


Figure 23: Représentation schématique d'un conducteur balistique de longueur L relié à deux réservoirs d'électrons 1 et 2. Les seules collisions que peuvent subir les électrons sont des réflexions spéculaires aux bords du conducteur balistique [63].

Dans le cas où les contacts ne sont pas totalement transparents ($T_{j\sigma} < 1$), la valeur de la conductance du nanotube est toujours inférieure à $\frac{4e^2}{h}$ et peut s'exprimer par [63]. :

$$G = 2 \frac{e^2}{h} \sum_j T_j \quad (12)$$

8. Présentation des différents types de transistors

Ce paragraphe présente les différents types de transistors à base de nanotubes de carbone (ou CNTFET pour Carbon Nanotube Field Effect transistor). Grossièrement, ces transistors fonctionnent sur le même principe : Faire circuler un courant entre les électrodes de source et de drain à travers le nanotube semi-conducteur (qui joue le rôle de canal) selon la polarisation de l'électrode de grille, isolée du canal par un diélectrique.

La principale différence entre les transistors décrits ci-après réside dans la nature du contact entre le nanotube semi-conducteur et les électrodes métalliques de source et de drain. Nous verrons qu'il est également possible d'avoir des transistors à barrières Schottky, à modulation de hauteur de barrière, à grille commandée optiquement et à double grille.

8.1. Transistor à barrières Schottky (SB-CNFET)

Les électrodes de source et drain du transistor à barrières Schottky (SB-CNFET) sont déposées directement sur le nanotube. Historiquement, les premiers transistors fabriqués étaient de ce type bien que le travail d'extraction des métaux alors utilisés (Pt pour le premier, Au pour le deuxième) soit supérieur à 5 eV. Des barrières Schottky au niveau des contacts métal-nanotube apparaissent. Le nanotube n'est pas dopé (du moins pas volontairement), de

l'oxygène peut être présent à l'interface et modifier le travail d'extraction des électrodes et donc la hauteur de la barrière.

Ces barrières sont rendues plus ou moins passantes aux porteurs selon la polarisation de grille. Ainsi, la polarisation de grille agit plus sur la variation de la résistance de contact que sur la conductance du canal [64]. Lorsque la grille n'est pas polarisée $V_{gs} = 0 V$, les électrons ou les trous doivent franchir une barrière de potentiel pour passer bien que les bandes d'énergie soient courbées par la présence d'une tension de drain V_{ds} non nulle (Figure 24.a)) : les deux barrières Schottky côté drain et source sont bloquées (parties i et iii de la Figure 24.a)).

Lorsque $V_{gs} < 0 V$, les bandes de conduction et de valence du « corps » du nanotube (partie ii de la Figure 23.a)) sont alors suffisamment remontées, les trous peuvent alors passer à travers la barrière Schottky affinée : un courant par effet tunnel apparaît (Figure 24.b). De la même manière avec $V_{gs} > 0 V$, le schéma de bandes d'énergie de la partie interne du canal est abaissé et affine les barrières Schottky qui laissent alors passer les électrons par effet tunnel (Figure 24.c)) [65].

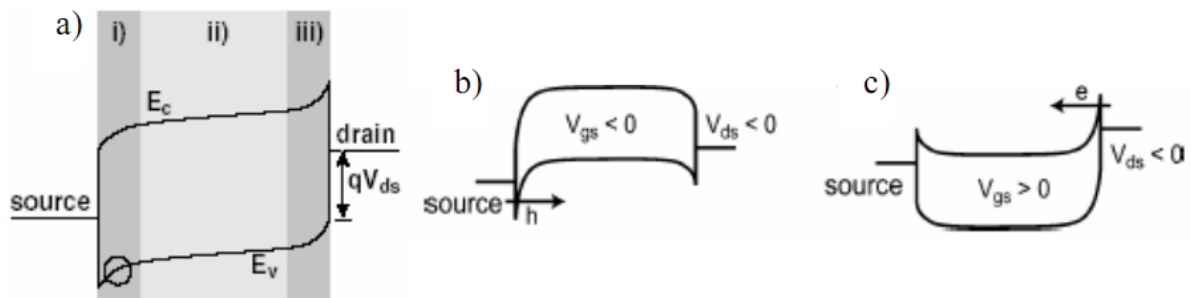


Figure 24 : Schéma de bandes d'énergie avec $V_{ds} < 0 V$ et a) sans polarisation de grille, b) avec polarisation de grille négative et c) positive [65].

Il est possible de faire circuler les 2 types de porteurs en même temps : il faut que la barrière côté source soit suffisamment affinée pour les trous, i.e. $V_{gs} < 0 V$, et de même pour la barrière côté drain pour le passage des électrons, i.e. $V_{gd} > 0 V$. Dans le cas où le niveau de Fermi des métaux est aligné avec le milieu de la bande interdite du nanotube, pour $V_{gs} = V_{ds}/2$, les courants d'électrons et de trous sont égaux. Cette ambipolarité peut être intéressante pour des applications optoélectroniques.

Ce type de transistor a une pente inverse sous le seuil $S = dV_{gs}/d(\log I_{ds})$ élevée (le passage de l'état OFF à l'état ON nécessite une large excursion de V_{gs}) de l'ordre de 200 mV/décade. Selon la position du niveau de Fermi du métal par rapport au schéma de bandes d'énergie du nanotube, le transistor est plus ou moins ambipolaire : les branches N et P sont plus ou moins marquées. Le courant à l'état OFF est dépendant de V_{ds} . Les barrières Schottky,

lorsqu'elles sont passantes par effet tunnel, ne laissent pas passer autant de porteurs qu'un contact sans barrière Schottky : le courant à l'état ON est limité. Ainsi, une des possibilités d'amélioration des figures de mérite du transistor à nanotube consiste à optimiser le contact métal/semiconducteur: C'est le but notamment du transistor à modulation de hauteur de barrière décrit dans le prochain paragraphe.

8.2. Transistor à modulation de la hauteur de barrière (C-CNFET)

De part son mode de fonctionnement et son mode de fabrication, ce transistor est aussi appelé CNFET de type MOS (MOS-like CNTFET) ou C-CNTFET pour CNTFET Conventionnel. En effet, le contact entre le métal de source ou de drain et le nanotube est supposé ohmique ou avec une hauteur de barrière faible, améliorée par rapport au transistor à nanotube à barrière Schottky. Les extrémités du nanotube, à proximité des contacts de source et de drain, servent d'accès aux porteurs tandis que la partie interne, dont la position des bandes d'énergies est modulée par la polarisation de grille, bloquera ou non le passage des porteurs (les électrons dans le cas de la figure 25).

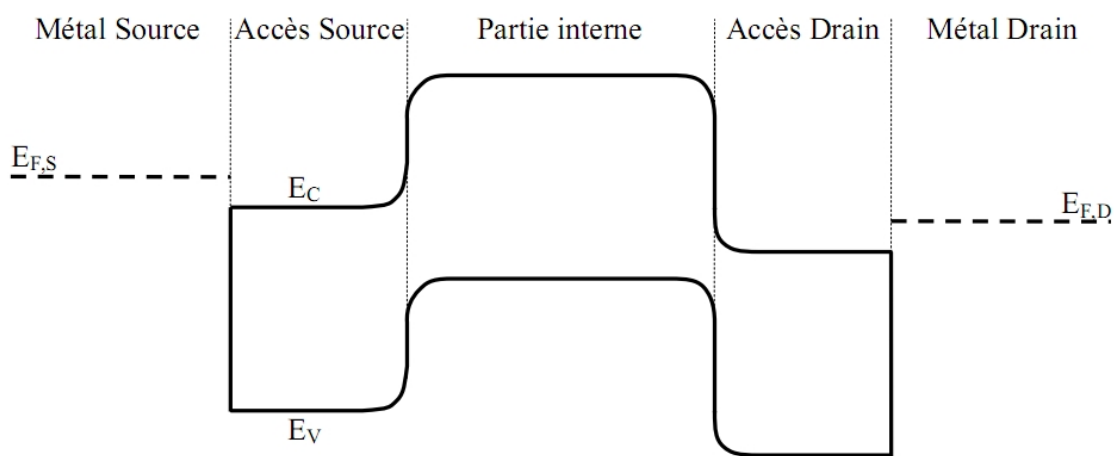


Figure 25 : Représentation schématique des bandes d'énergie (pas de barrières Schottky) du transistor C-CNFET selon l'axe source-drain pour $V_{gs} = 0$ et $V_{ds} > 0$ V. $E_{F,S}$ et $E_{F,D}$ sont les niveaux de Fermi des métaux de source et drain respectivement [66].

De tels transistors peuvent être obtenus par dopage des accès source et drain ou en utilisant un métal approprié. L'utilisation de palladium ou de rhodium pour des nanotubes de grand diamètre ($> 1,6$ nm) ou d'or permet d'obtenir un contact Schottky avec une hauteur de barrière proche de zéro pour les trous (alignement du niveau de Fermi du métal avec la bande de valence du nanotube). Pour les électrons, le métal qui rapproche le plus le niveau de Fermi

du métal et la bande de conduction est, pour le moment, l'aluminium : la hauteur de barrière obtenue est quasi-nulle.

Les performances de ce type de transistor sont améliorées par rapport au SB-CNTFET : une pente inverse sous le seuil plus faible égale à 85 mV/décade , un courant à l'état passant plus élevé, une ambipolarité souvent supprimée (la branche N ou P est au moins largement atténuée). Le courant OFF est parfois augmenté : la cause supposée est l'apparition d'un courant tunnel bande-à-bande [66].

8.3. Transistor à grille commandée optiquement (OG-CNTFET) :

Le principe de fonctionnement de ce transistor est proche de celui des précédents : 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. 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 26). 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 CNTFET : OG-CNTFET) [67,68]. Il est possible de choisir la longueur d'onde à laquelle le dispositif sera sensible en choisissant le polymère.

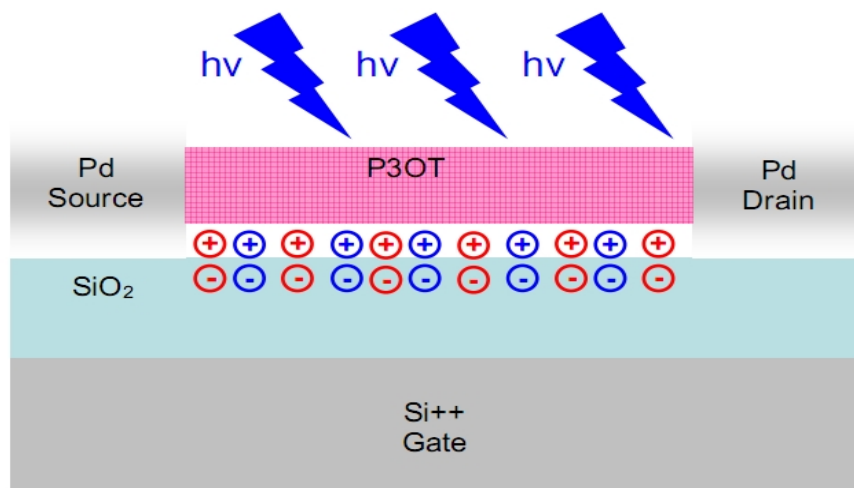


Figure 26 : OG-CNTFET sous insolation. Les charges en rouge représentent le dopage de type P induit par le dépôt du polymère P3OT (poly3-octylthiophène-2,5-diyl) celles en bleu les charges photogénérées [68].

8.4. Transistor à double grille (DG-CNTFET):

Il existe plusieurs configurations de transistor double grille (DG-CNTFET). 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 spécifique 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).

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-CNTFET. Comme indiqué sur la figure 27, 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 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 [69].

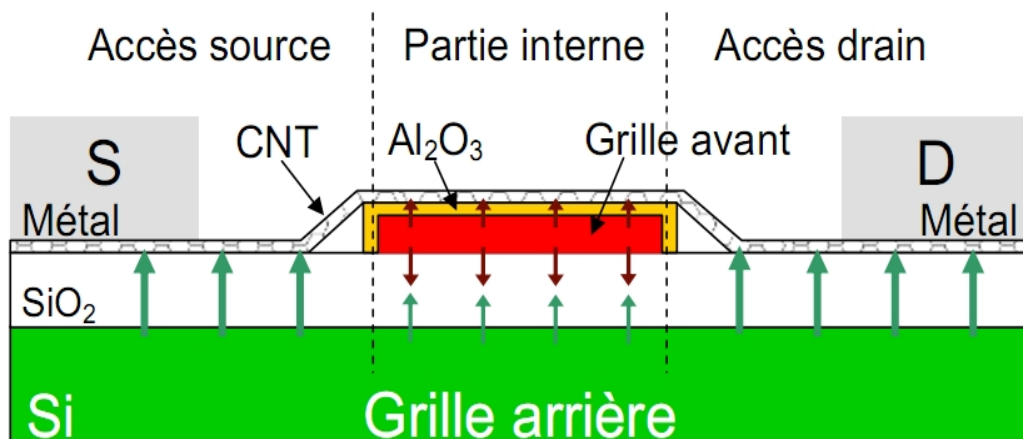


Figure 27 : Vue en coupe du DG-CNTFET. Les flèches rouges et vertes représentent l'effet de la grille avant et de la grille arrière respectivement [29].

Ainsi, ce transistor est reconfigurable : il sera de type N ou P pour une polarisation de la grille arrière V_{bg} positive ou négative qui abaisse ou remonte les bandes d'énergie des zones d'accès, respectivement. Pour une tension de grille arrière V_{bg} nulle, le transistor est bloqué : on suppose par simplicité dans un premier temps que le niveau de Fermi du métal s'aligne avec le milieu de la bande interdite du nanotube, des tensions de bandes plates sont ajoutées ensuite dans le modèle [68,69]. Il est à noter que la zone d'accès drain est également affectée par la tension drain-source V_{ds} à travers la charge.

9. Conclusion

Les nanotechnologies sont un secteur innovant et prometteur qui présente de nombreuses perspectives d'applications. Afin que les attentes à leur égard deviennent des réalités, un important effort de recherche fondamentale et appliquée est au préalable nécessaire.

Le nanotube de carbone (CNT) est à ce jour l'un des candidats les plus prometteurs pour faire passer le transistor à effet de champ (FET) à l'échelle du nanomètre, Les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone (Carbon NanoTube Field Effet Transistors, CNTFET) figurent aujourd'hui parmi les dispositifs susceptibles de remplacer la technologie CMOS. Des recherches intensives sont en cours afin de déterminer les caractéristiques des transistors à nanotube de carbone (CNTFET).

Chapitre 3 : Transistor à modulation de la hauteur de barrière (C-CNTFET)

1. Introduction

Dans ce chapitre, la modélisation compacte physique et électrique du transistor à nanotube de carbone à modulation de hauteur de barrière aussi appelé CNTFET de type MOS (MOS-like CNTFET) ou C-CNTFET pour CNTFET Conventionnel est décrite. Afin de pouvoir s'adapter aux dispersions technologiques de ce transistor, la modélisation est basée sur la physique. Avant de décrire les équations de la charge et du courant, le fonctionnement global de ce transistor est présenté.

2. Fonctionnement

Nous décrivons ici le cas du transistor C-CNTFET de type N, i.e. les accès source et drain du nanotube sont dopés N (figure 27). Les calculs pour le transistor de type P sont similaires.

Dans un conducteur balistique, les électrons provenant de la source remplissent les états $+k$ et ceux provenant du drain remplissent les états $-k$ à condition que les contacts soient « sans réflexion ». C'est-à-dire qu'il faut que la probabilité de réflexion d'un électron qui sort du conducteur pour entrer dans le contact soit négligeable. Ceci est vrai quand le niveau de Fermi du contact (dans notre cas la zone dopée n+) n'est pas trop près du bas de la bande de conduction du nanotube intrinsèque [70]. Les états sont alors remplis selon la distribution de Fermi (figure 28).

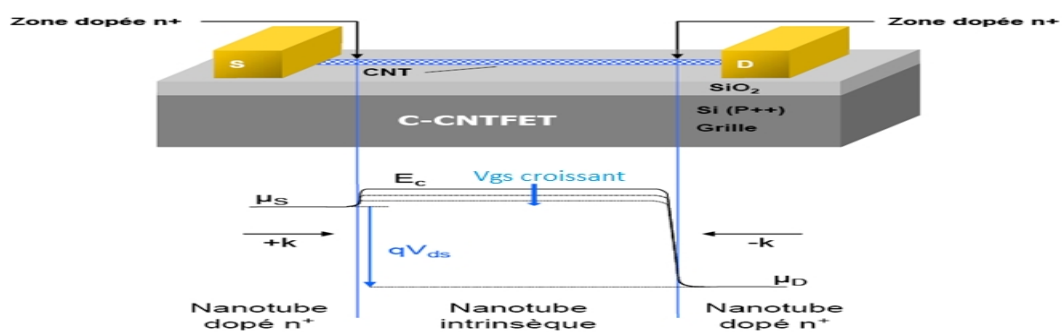


Figure 27: Schéma du bas de la bande de conduction E_C en fonction de la position dans le canal pour une forte tension V_{ds} .

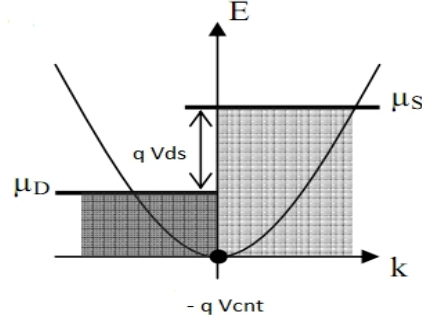


Figure 28 : $E(k)$ dans la bande de conduction. E_c est modulé par V_{cnt} . Les états $+k$ sont remplis par le niveau de Fermi de la source et les états $-k$ par le niveau de Fermi du drain.

Lorsque la tension V_{gs} augmente, elle augmente le potentiel de contrôle du canal V_{cnt} et permet d'accumuler la charge Q_{cnt} dans le canal. Cette charge provoque une différence de potentiel entre V_{gs} et V_{cnt} à travers la capacité d'oxyde de grille C_{ox} (lorsque V_{gs} augmente, V_{cnt} n'est pas augmentée de la même quantité). Les bandes d'énergie seront courbées, diminuées par V_{cnt} (figure 28). Les calculs que nous avons développés prennent comme point de départ un potentiel V_{cnt} fixe et permettent d'établir la relation entre V_{gs} et V_{cnt} .

3. Calcul de la charge totale du nanotube

La première étape consiste donc à considérer une valeur particulière de V_{ds} et une valeur particulière de V_{cnt} . Il est nécessaire de connaître la charge Q_{CNT} pour évaluer le potentiel du canal. Elle est calculée à partir de la densité de charge linéique n_{CNT} . La source et le drain apportent tous deux des charges. Rappelons que les états $+k$ sont remplis par la source et les états $-k$ par le drain selon la distribution de Fermi dans les deux cas. La densité linéique de porteurs s'écrit donc, en ne considérant que les porteurs ayant une énergie supérieure à E_c : Sachant que la charge dans une région est l'intégrale sur l'énergie du produit de la densité d'états effectifs par la distribution de Fermi.

$$n_{CNT} = \int_{E_c}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} \cdot (f(E - \mu_S) + f(E - \mu_D)) \cdot dE \quad (13)$$

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

$$f(E - \mu_\alpha) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E - \mu_\alpha}{K_B T}\right]} \quad (14)$$

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

$$g(E) = \frac{8}{3\pi a_{c-c} V_{pp\pi}} \frac{|E - E_0|}{\sqrt{(E - E_0)^2 - E_C^2}} h\{|E - E_0| - E_C\} \quad (15)$$

Avec a_{c-c} la distance entre 2 atomes de carbone soit environ 0,142 nm, $V_{pp\pi}$ l'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone soit 2,5 eV, E_0 est l'énergie du milieu de la bande interdite soit $E_C - E_g/2$ et $h(x)$ l'échelon de Heaviside qui vaut 1 si x est positif et 0 si x est négatif [71].

La hauteur de la barrière de potentiel côté source a été fixée à $E_g/2$: on a donc $E_0 = \mu_S$. Par la suite, $\mu_S = 0$.

La densité d'états deviendra alors :

$$g(E) = g_0 \frac{E}{\sqrt{E^2 - E_C^2}} \quad \text{si } E > E_C \quad (16)$$

$$= 0 \quad \text{si } E < E_C$$

Avec

$$g_0 = \frac{8}{3\pi a_{c-c} V_{pp\pi}}$$

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

$$n_{CNT} = n_S + n_D \quad (17)$$

Il suffit maintenant de résoudre :

$$n_\alpha = \int_{E_C}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} f(E - \mu_\alpha) \cdot dE \quad (18)$$

Avec $\alpha = S$ ou D

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

$$n_\alpha = \int_0^{+\infty} \frac{g(E' + E_C)}{2} f(E' + E_C - \mu_\alpha) \cdot dE' \quad (19)$$

En intégrant les équations 14 et 16 dans l'équation 19 :

$$n_{\alpha} = \int_0^{+\infty} \frac{g_0}{2} \frac{E + E_C}{\sqrt{(E + E_C)^2 - E_C^2}} \frac{dE}{1 + \exp \frac{E + E_C - \mu_{\alpha}}{K_B T}} \quad (20)$$

Pour supprimer la racine carrée provenant de la densité d'états, le changement de variable suivant est nécessaire : E devient $\sqrt{Z^2 + E_C^2} - E_C$ donc l'équation 20 devient :

$$n_{\alpha} = \int_0^{+\infty} \frac{g_0}{2} \frac{dZ}{1 + \exp \frac{\sqrt{Z^2 + E_C^2} - \mu_{\alpha}}{K_B T}} \quad (21)$$

Avant de poursuivre les calculs, une discussion sur la contribution des sous-bandes doit être menée. La principale différence entre le schéma de bande d'énergie du graphite et du nanotube est la discrétisation des bandes de valence et de conduction due au confinement des électrons autour du nanotube. Il en résulte que la bande de conduction est constituée de multiples sous-bandes (figure 29).

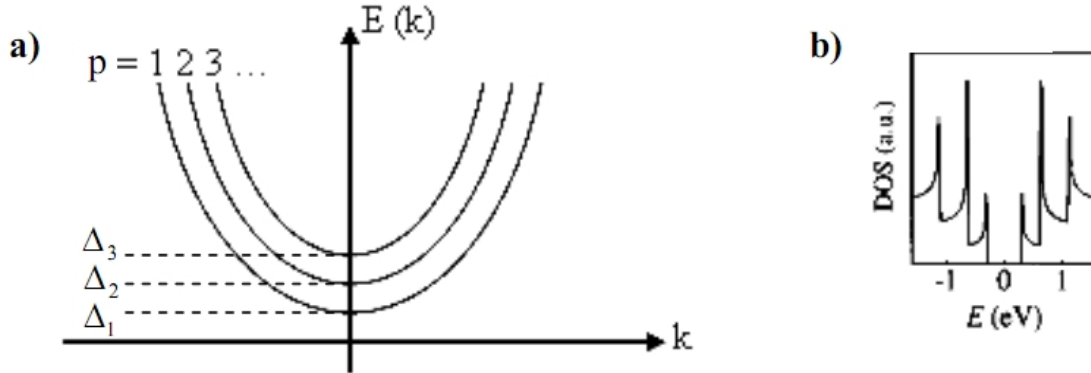


Figure 29 : (a) Schéma de principe montrant les 3 premières sous bandes [71] et (b) la densité d'états associés en unités arbitraires en fonction de l'énergie [72].

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

$$n_{\alpha} = \sum_{p=1}^{\infty} n_{\alpha p} \quad (22)$$

Avec

$$n_{\alpha p} = \int_0^{+\infty} \frac{g_0}{2} \frac{dZ}{1 + \exp \frac{\sqrt{Z^2 + (\Delta_p - Vcnt)^2} - \mu_\alpha}{K_B T}} \quad (23)$$

En regroupant les densités de porteurs de source et de drain (équation 17) et en simplifiant l'expression obtenue en posant μ_S comme référence de potentiel, on peut écrire $\mu_S - \mu_D = e.Vds$, soit $\mu_D = -e.Vds$. Avec cette simplification et en utilisant les équations 22 et 23, on obtient :

$$n_{CNT} = \sum_{p=1}^{p=nsb} \int_0^{+\infty} \frac{g_0}{2} \left\{ \frac{1}{1 + \exp \frac{\sqrt{Z^2 + (\Delta_p - Vcnt)^2}}{K_B T}} + \frac{1}{1 + \exp \frac{\sqrt{Z^2 + (\Delta_p - Vcnt)^2} + Vds}{K_B T}} \right\} .dZ \quad (24)$$

Cette équation n'a pas de solution analytique. La démarche consiste donc à la résoudre numériquement pour en déduire des équations approchées explicitées dans la suite. Pour de faibles énergies, c'est-à-dire inférieures à 1 eV du niveau de Fermi, le minimum de la $p^{ième}$ sous-bande Δ_p est donné par:

$$\Delta_p = \Delta_1 \frac{6p - 3 - (-1)^p}{4} \quad (25)$$

Explicitons maintenant $Vcnt$ en fonction de Vgs en utilisant la relation liant la différence de potentiel et la charge de la capacité d'oxyde de grille :

$$Vcnt = Vgs - \frac{Q_{CNT}}{C_{OX}} \quad (26)$$

Avec Q_{CNT} la charge dans le nanotube. Dans le cas où le nanotube, de rayon r , est placé sur un oxyde de grille plan, d'épaisseur d_{ox} , de constante diélectrique ϵ_{ox} et de longueur de grille L , la capacité de grille s'exprime par [73] :

$$C_{OX} = \frac{2 \pi \epsilon_0 \epsilon_{ox} L}{\ln \left[2 \frac{(d_{ox} + r)}{r} \right]} \quad (27)$$

Enfin, il faut prendre en compte la tension de bandes plates V_{FB} pour évaluer la tension Vgs' à appliquer sur la grille $Vgs' = Vgs + V_{FB}$.

Pour calculer le courant de drain, les valeurs des variables Vds et $Vcnt$ sont nécessaires (équation 25). Vds est une entrée du modèle, $Vcnt$ dépend de Vgs et de la charge Q_{CNT}

(équation 26). V_{gs} est également une variable d'entrée tandis que la charge dépend de la densité de porteurs:

$$Q_{CNT} = e \cdot n_{CNT} \cdot L \quad (28)$$

Avec L la longueur de grille. Q_{CNT} et C_{OX} sont tous deux directement proportionnels à L . V_{cnt} est donc indépendant de la longueur de grille (équation 26). Le courant de drain est, par conséquent, également indépendant de L ce qui est cohérent avec le transport balistique. Q_{CNT} et C_{OX} sont dorénavant des grandeurs linéiques.

On peut également obtenir la relation $V_{cnt} = f(V_{gs})$ en simplifiant les équations physiques par une série d'équations empiriques. Ainsi, Raychowdhury [74] propose l'équation qui permet d'approximer l'équation 23 :

$$\begin{aligned} n_{\alpha p} &= g_0 K_B T \left\{ A \exp \frac{V_{cnt} - \Delta_p - \mu_{\alpha}}{K_B T} \right\} & \text{si } V_{cnt} - \Delta_p - \mu_{\alpha} < 0 \\ &= g_0 K_B T \left\{ B \frac{V_{cnt} - \Delta_p - \mu_{\alpha}}{K_B T} + A \right\} & \text{si } V_{cnt} - \Delta_p - \mu_{\alpha} \geq 0 \end{aligned} \quad (29)$$

Avec $A = -5.3 \Delta_p^2 + 10 \Delta_p + 1$ et $B = 0.34 \Delta_p + 1$. Ces expressions, empiriques, sont valables pour $\Delta_p < 0.5 eV$.

On peut maintenant obtenir la relation $V_{cnt} = f(V_{gs})$:

$$\begin{aligned} V_{cnt} &= V_{gs} & \text{si } V_{gs} < \Delta_1 \\ &= V_{gs} - \alpha (V_{gs} - \Delta_1) & \text{si } V_{gs} \geq \Delta_1 \end{aligned} \quad (30)$$

V_{CNT} est donné par:

$$V_{CNT} = V_{gs} - 0.5 \left\{ \alpha \cdot (V_{gs} - \Delta_1) + \sqrt{\alpha \cdot (V_{gs} - \Delta_1)^2 + 4 \cdot \varepsilon^2} \right\} \quad (31)$$

Avec $\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot V_{ds} + \alpha_2 \cdot V_{ds}^2$ et pour une capacité de grille de 17pF/m et un nanotube de diamètre 3 nm, $\alpha_0 = 0.31$; $\alpha_1 = -0.36 V^{-1}$, $\alpha_2 = 0.1 V^{-2}$, $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$.

4. Calcul du courant

Le calcul du courant de drain s'appuie sur l'une des équations de la formule de Landauer [75] appliquée ici aux électrons (charge électronique négative), en prenant comme convention un courant entrant par le drain :

$$I_{ds} = \frac{2e}{2\pi} M \left(\int_0^{\infty} v(k) f_s(k) T_S(E) dk - \int_0^{\infty} v(k') f_D(k') T_D(E) dk' \right) \quad (32)$$

Avec :

$\frac{2}{2\pi}$ est la densité d'états en 1D dans l'espace réciproque (2 pour le spin et 2π pour le « volume » de la case quantique en 1D),

M est le nombre de modes transverses (générés par la présence d'un potentiel transverse au déplacement des électrons),

$v(k)$ la vitesse des porteurs,

f_s et f_D les fonctions de distribution de la source et du drain respectivement,

$T_S(E)$ et $T_D(E)$ les probabilités de transmission d'un porteur de la source ou du drain vers le nanotube.

La première intégrale exprime le courant créé par les électrons provenant de la source et remplissant les états $+k$ tandis que la seconde correspond aux électrons provenant du drain et remplissant les états $-k$. Les barrières de potentiel côté source et côté drain impliquent respectivement $T_S(E)$ et $T_D(E)$ différents de 1. Les intégrations se font uniquement sur les k et k' positifs relativement à la direction des porteurs injectés. En effectuant le changement de variable permettant de passer du vecteur d'onde k à l'énergie E par la relation :

$$E = \hbar^2 \cdot k^2 / 2m^*, \text{ on aura donc } dk = m^* / \hbar^2 k \cdot dE.$$

En rappelant que $V(k) = \hbar \cdot k / m^*$, on obtient $V(k) \cdot dk = 1/\hbar dE$. Les fonctions de distribution $f_s(k)$ et $f_D(k')$ deviennent les fonctions de Fermi $f_s(E)$ et $f_D(E)$ correspondantes. Le courant de drain s'écrit alors :

$$I_{ds} = \frac{2e}{h} M \left\{ \int_0^\infty f_s(E) T_S(E) dE - \int_0^\infty f_D(E) T_D(E) dE \right\} \quad (33)$$

En supposant que tous les électrons ayant une énergie supérieure à E_C franchissent le canal, le coefficient de transmission $T(E)$ vaut 1 pour $E > E_C$ et est nul pour $E < E_C$.

$$I_{ds} = \frac{2e}{h} M \left\{ \int_{E_C}^\infty f_s(E) dE - \int_{E_C}^\infty f_D(E) dE \right\} \quad (34)$$

En développant la fonction de Fermi :

$$I_{ds} = \frac{2e}{h} M \left\{ \int_{E_C}^\infty \frac{dE}{1 + \exp \frac{E - \mu_S}{K_B T}} - \int_{E_C}^\infty \frac{dE}{1 + \exp \frac{E - \mu_D}{K_B T}} \right\} \quad (35)$$

Pour intégrer de zéro à l'infini, on effectue le changement de variable $x = \frac{E-E_C}{K_B T}$ et $dE = K_B T \cdot dx$

$$I_{ds} = \frac{2e}{h} M K_B T \left\{ \int_0^\infty \frac{dx}{1 + \exp \frac{-\mu_S + E_C}{K_B T} \exp x} - \int_0^\infty \frac{dx}{1 + \exp \frac{-\mu_D + E_C}{K_B T} \exp x} \right\} \quad (36)$$

Or on sait que :

$$\int_0^\infty \frac{dx}{1 + b \exp x} = \ln(1 + b^{-1})$$

D'où

$$I_{ds} = \frac{2e}{h} M K_B T \left\{ \ln \left[1 + \exp \frac{\mu_S - E_C}{K_B T} \right] - \ln \left[1 + \exp \frac{\mu_D - E_C}{K_B T} \right] \right\} \quad (37)$$

De manière à simplifier les calculs, nous n'avons considéré jusqu'ici que le bas de la bande de conduction E_C . Or, nous avons vu que cette bande de conduction est en fait composée de multiple sous-bandes. Le courant total est la somme des contributions des courants issus de chaque sous-bande. Rappelons également que ces sous-bandes sont courbées, diminuées par le potentiel de contrôle du canal V_{cnt} . Comme précédemment, il faut remplacer E_C par $E_{Cp} = \Delta_p - e \cdot V_{cnt}$.

Le courant total est :

$$I_{ds} = M \frac{2e K_B T}{h} \sum_{p=1}^{p=nsb} \left\{ \ln \left(1 + \exp \frac{\mu_S - \Delta_p + e \cdot V_{cnt}}{K_B T} \right) - \ln \left(1 + \exp \frac{\mu_D - \Delta_p + e \cdot V_{cnt}}{K_B T} \right) \right\} \quad (38)$$

Le nombre de modes transverses qui peuvent se propager est de 2 par sous-bande. Comme pour la densité de porteurs, en posant $\mu_S = 0$ (μ_S devient encore une fois la référence de potentiel), on a $\mu_D = -e \cdot V_{ds}$. L'équation du courant est donc :

$$I_{ds} = \frac{4e K_B T}{h} \sum_{p=1}^{p=nsb} \left\{ \ln \left(1 + \exp \frac{-\Delta_p + e \cdot V_{cnt}}{K_B T} \right) - \ln \left(1 + \exp \frac{-\Delta_p + e(V_{cnt} - V_{ds})}{K_B T} \right) \right\} \quad (39)$$

Le premier terme de cette équation représente la contribution de la source, i.e. le courant des électrons provenant de la source, le deuxième terme, qui s'oppose au premier, représente la contribution du drain.

5. Simulations et interprétations

Les courbes présentées sont les caractéristiques électriques calculées d'un transistor à nanotube de 3 nm de diamètre.

Plus V_{GS} est grand, plus le niveau d'énergie de l'ensemble des sous-bandes est diminué. Il y a alors plus de porteurs dans la bande de conduction. Donc il y'aura plus de sous bandes qui conduisent, donc il faut augmenter le nombre de sous bandes dans les calculs pour obtenir un courant convenable (figure 30).

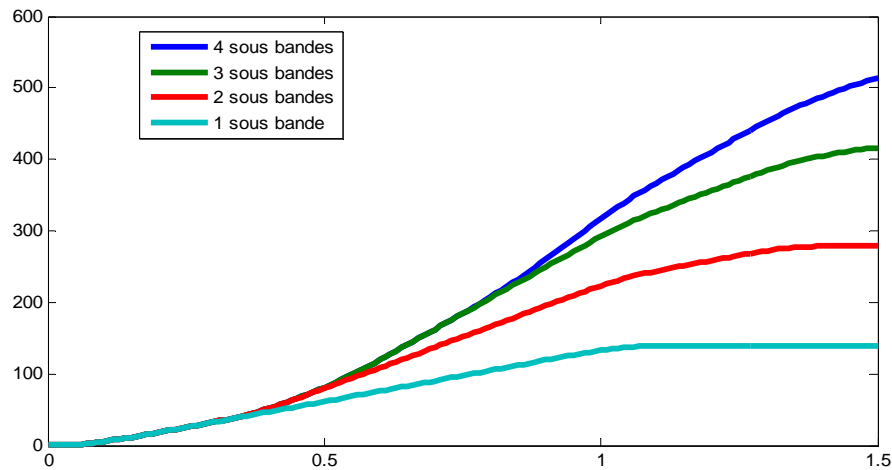


Figure 30: Caractéristique $I_{ds} = f(V_{gs})$ en fonction du nombre de sous bandes, $V_{ds} = 0,9V$ [76].

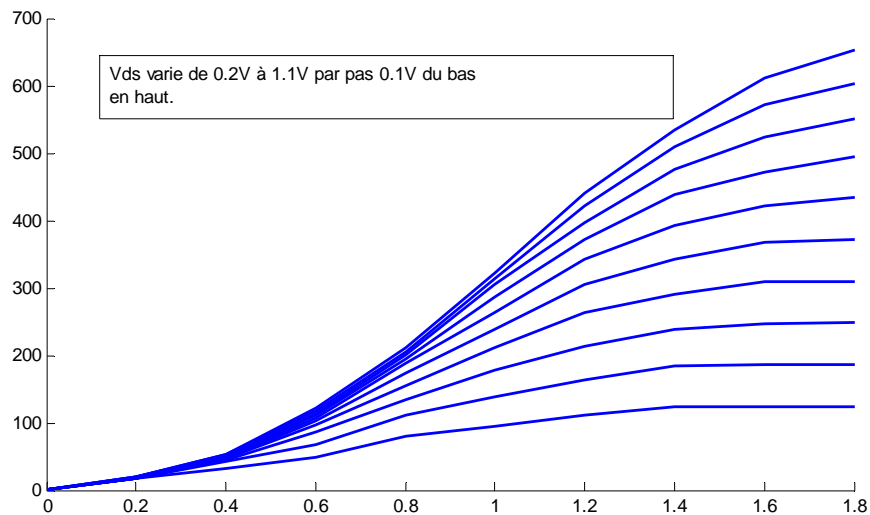


Figure31 : Caractéristique $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour 4 sous bandes [76].

- V_{ds} est nul : la contribution au courant total des électrons provenant de la source d'une part, et celle des électrons provenant du drain d'autre part sont identiques.

- V_{ds} est positif : ces deux contributions sont déséquilibrées, celle des électrons issus du drain est diminuée, la différence de ces contributions, le courant total est alors positif (figure 31).

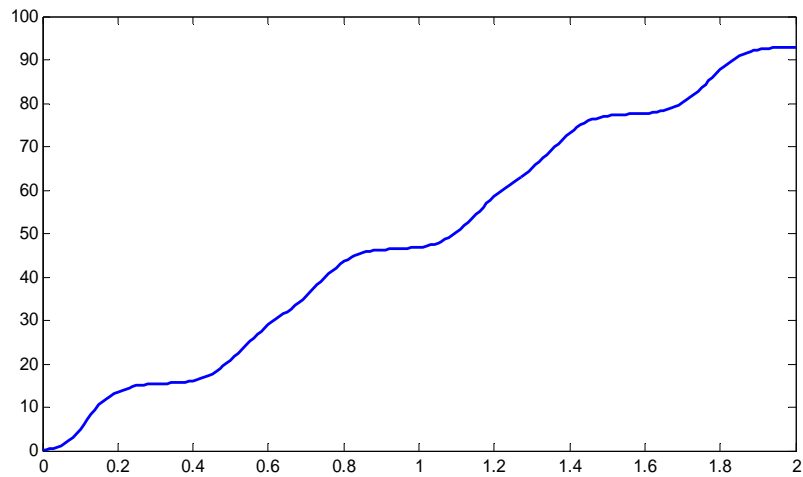


Figure 32 : Caractéristique $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour $V_{ds} = 0.1V$ [77].

Sur la figure 32, On voit clairement des paliers. Le 1^{er} pour V_{gs} compris entre 0,2V et 0,45V, correspond à la conduction des 2 premières sous-bandes. Le second, pour V_{gs} compris entre 0.85V et 1,07 V, correspond à la conduction des 4 premières sous-bandes. Le dernier palier pour V_{gs} compris entre 1.45V et 1.7V, correspond à la conduction des 6 premières sous-bandes.

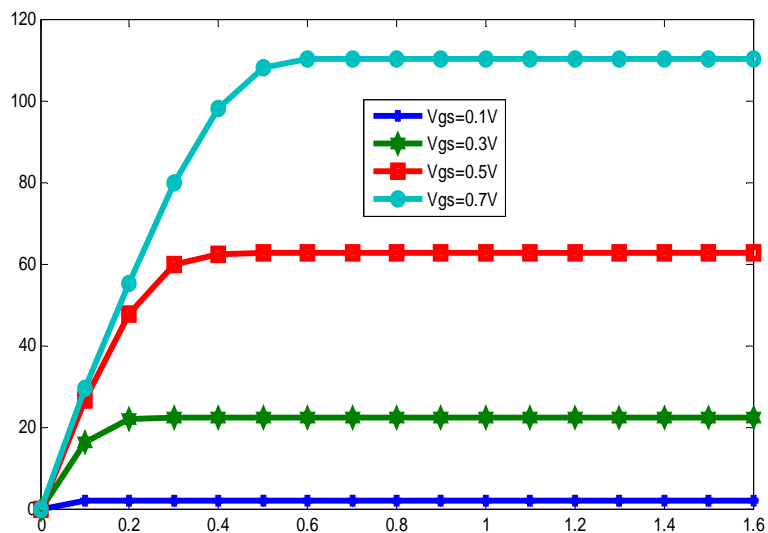


Figure 33 : Caractéristique $I_{ds} = f(V_{ds})$ pour 3 sous bandes [77].

Le régime linéaire, s'explique par le fait que l'accroissement de V_{ds} augmente la barrière de potentiel vue côté drain par les électrons des états $-k$. La contribution du courant créé par les électrons $-k$ diminue donc créant ainsi une augmentation de I_{ds} alors que V_{gs} est constant. Lorsque la tension V_{ds} est grande, les électrons du drain doivent franchir une barrière trop importante pour passer. Une augmentation de V_{ds} ne change rien à ce phénomène. Le courant reste constant (figure 33).

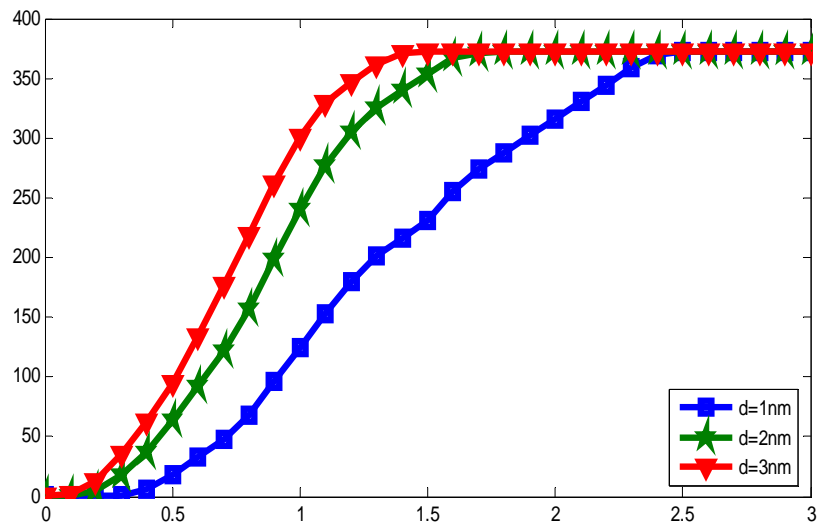


Figure 34 : Caractéristique $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour des diamètres variables (3 sous bandes) à $V_{ds} = 0.8\text{V}$ [78].

La caractéristique $I_{ds} = f(V_{gs})$ pour des diamètres variables (figure 34) montre que : Pour les faibles valeurs de V_{gs} le courant du drain I_{ds} dépend de la valeur du diamètre par contre lorsque V_{gs} augmente on remarque que le courant de saturation reste constant quelque soit la valeur du diamètre.

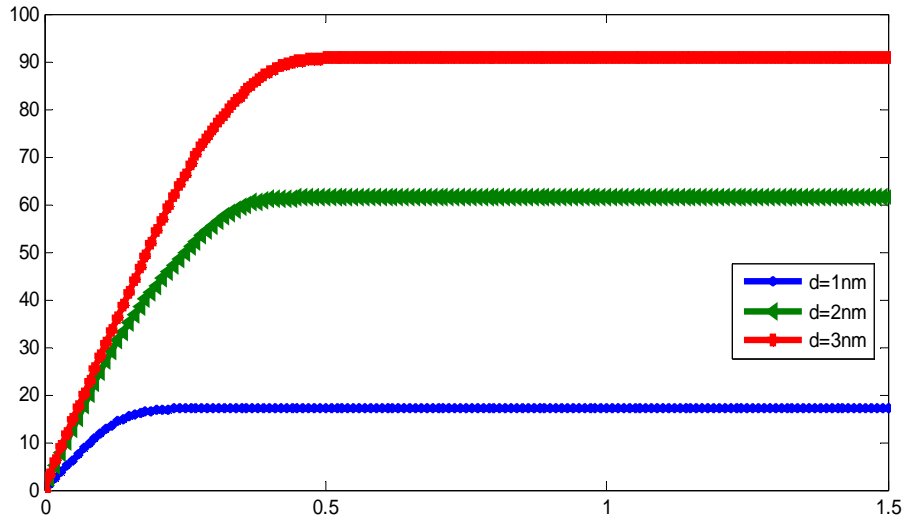


Figure 35: Caractéristique $I_{ds} = f(V_{ds})$ pour des diamètres variables (3 sous bandes) lorsque $V_{gs} = 0.6V$ [78].

La caractéristique $I_{ds} = f(V_{ds})$ pour des diamètres variables (figure 35) montre clairement l'influence du diamètre sur la valeur du courant I_{ON} dans la zone de saturation qui peut être expliquer du fait que le gap est inversement proportionnel au diamètre selon la relation $E_g \cong \frac{0.9}{d}$.

6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé la résolution analytique des équations fondamentales qui régissent le comportement du transistor C-CNTFET. Nous avons déterminé le nombre de sous bandes à une augmentation du courant de ce composant. Nous avons constaté que pour les grands diamètres du nanotube le courant devient important. Cependant, ce paramètre doit être pris en considération lors de la conception des circuits logiques à base de CNTFET.

Dans la suite de notre travail, nous nous sommes intéressés au fonctionnement du transistor à nanotube de carbone à barrières Schottky. Dans un second temps, nous présenterons quelques réalités technologiques sur leur formation et à la fin, une étude d'influence des paramètres du modèle sur les performances statiques est présentée.

Chapitre 4 : Modélisation compacte du transistor CNTFET à contacts Schottky noté SB-CNTFET

1. Introduction

Ce chapitre décrit la modélisation compacte physique et électrique du transistor à nanotube de carbone à barrières Schottky. L'objectif de ce travail de modélisation est de montrer l'influence des paramètres physiques et géométriques sur les caractéristiques I-V.

2. Fonctionnement du transistor à nanotube de carbone à contacts schottky

Nous allons détailler le principe de fonctionnement du nanotransistor SB-CNTFET.

2.1. Formation des barrières Schottky

Un transistor à nanotube de carbone est formé de deux contacts de type métal/nanotube côté source et drain. Au niveau des interfaces formées par le contact métal et le nanotube semi-conducteur, des barrières de potentiel Schottky sont formées et s'opposent à la transition des porteurs entre la source et le drain à travers le nanotube.

L'existence des barrières Schottky à l'interface nanotube/métal a été mise en évidence par plusieurs équipes grâce à différentes méthodes de mesures électriques ou optiques. Celle qui conduit aux résultats les plus significatifs est la caractérisation de la jonction métal-nanotube par microscopie à photo-courant à balayage laser (ou Scanning PhotoCurrent Microscopy (SPCM)) utilisée par Freitag et al. [79] en 2009. Dans ce travail, un nanotube de diamètre important (entre 1 et 2 nm) est connecté à deux électrodes en palladium sur un substrat de silicium avec un oxyde de surface de 100 nm d'épaisseur.

Un faisceau laser argon de longueur d'onde 457.9 nm et de largeur de faisceau de 400 nm vient balayer la surface de l'échantillon. Lorsque le faisceau éclaire la jonction nanotube/métal un photo-courant est généré : sous l'effet d'un photon, soit un électron du métal est excité et possède assez d'énergie pour franchir la barrière de potentiel, soit une paire électron-trou est dissociée dans le nanotube créant ainsi un flux de porteurs de charges.

Sur la figure 36.a est représentée la cartographie de la différence de potentiel en chaque point de l'échantillon générée par le laser pour des tensions de grille allant de 1V à 4V. De ces mesures sont extraites l'évolution potentielle de la bande de valence suivant l'axe du nanotube sur la figure 36.b et c. Ces deux graphes montrent à la fois une baisse du potentiel au niveau du nanotube mais aussi une diminution de la largeur de la barrière de potentiel à franchir pour les électrons lorsque V_{gs} augmente. Pour représenter les conséquences sur la conduction à travers le contact, la figure 36.d illustre la structure de bande au niveau du contact pour $V_{gs} = 1.6$ V et

$V_{gs} = 3.4 \text{ V}$. A 1.4 V , la barrière entre le niveau de Fermi du métal et la bande de conduction est forte tandis que celle pour la bande de valence est faible permettant la conduction par les trous. A 3.4 V la barrière pour les trous s'est agrandie, et celle pour les électrons s'est affinée, permettant une conduction de ces porteurs à travers une barrière de potentiel appelé barrière Schottky. Ceci explique le comportement ambipolaire du transistor.

Nous observons donc ici, lors de l'augmentation de V_{gs} , une diminution du niveau de la bande de conduction dans le nanotube et l'apparition d'une barrière quasi triangulaire pour les électrons. Décrivons de manière théorique ce qui se passe à l'interface.

Dans un cas idéal, lorsqu'un nanotube de carbone est mis en contact avec un métal, le système retrouve son équilibre lorsque le niveau de Fermi du nanotube vient s'aligner sur celui de métal, imposant un transfert de porteurs pour compenser cet écart

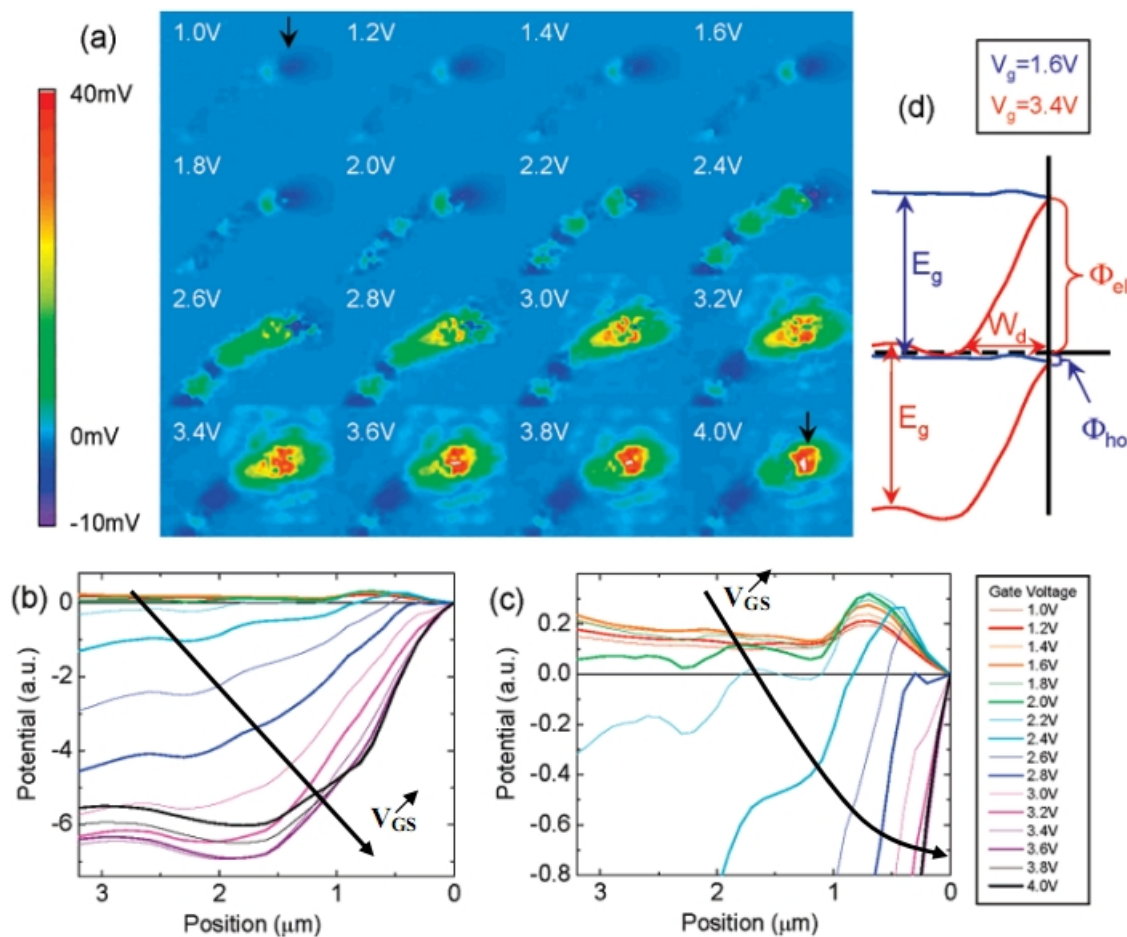


Figure 36 : Mise en évidence des barrières Schottky : (a) images de microscopie de photo-courant à balayage laser (puissance du laser $900 \mu\text{W}$), (b) variation de la hauteur de la barrière Schottky suivant l'axe du nanotube de carbone pour différentes polarisations de la grille V_{gs} allant de 1 V jusqu'à 4 V par pas de 0.2 V , (c) agrandissement du graphe précédent dans la zone de contact, (d) profil de bande d'énergie de la 1ère sous-bande de conduction et de valence pour deux polarisations V_{gs} , 1.6 V et 3.4 V . La bande interdite E_g a été fixée de telle manière que le niveau de Fermi métal s'aligne avec le haut de la 1ère sous bande de valence pour $V_{gs} = 1.6 \text{ V}$ et le bas de la 1ère sous bande de conduction pour $V_{gs} = 3.4 \text{ V}$ [79].

2.2. Régimes de polarisation des SB-CNTFET et profils des bandes d'énergies

Dans le cas des SB-CNTFET, La variation dans le potentiel de la grille V_{gs} change le potentiel du canal V_{cnt} et modifie également la forme des barrières Schottky de source et drain qui déterminent l'injection des porteurs. Le profil de bandes d'énergie proche du contact dépend fortement des polarisations V_{gs} et V_{ds} .

Essayons d'examiner la variation du profil de bande d'énergie et la forme des barrières Schottky de la structure SB-CNTFET en configuration "back-gate" (figure 37) selon la gamme de polarisation V_{gs} et V_{ds} .

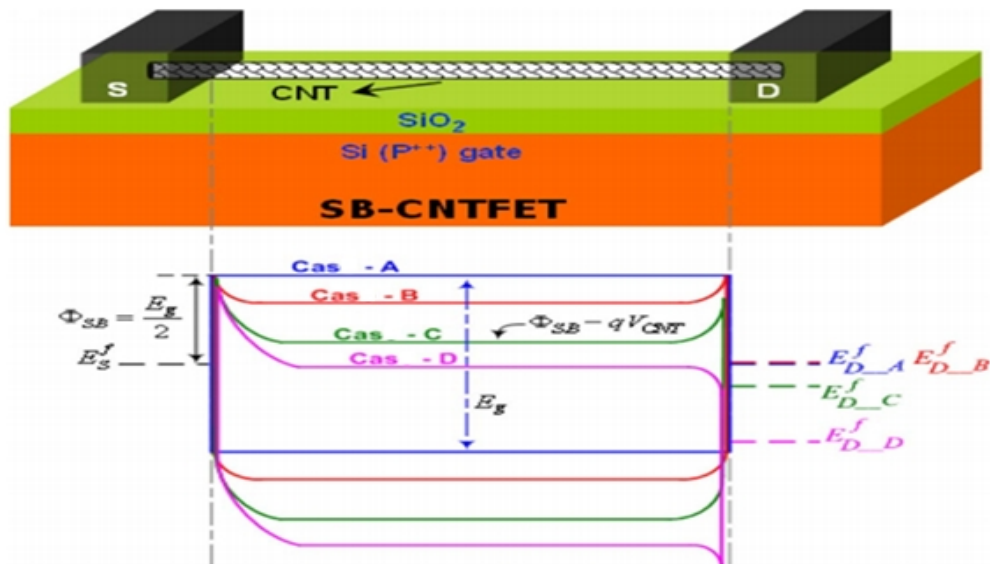


Figure 37 : Structure et profils de bandes d'énergies du SB-CNTFET.

Cas A : $V_{gs} = 0$ et $V_{ds} = 0$ (courbe bleue).

Pour ce cas, le composant est non polarisé et il n'y a ni formation de barrière Schottky ni injection de porteurs qui ont des énergies inférieures à la hauteur de la barrière dans le canal.

Cas B : $V_{gs} > 0$ et $V_{ds} = 0$ (courbe rouge).

Dés l'application d'un potentiel de grille V_{gs} positif, on remarque que la formation des deux barrières Schottky au niveau des jonctions source/nanotube et nanotube/drain. Idéalement, en l'absence des phénomènes d'interaction de type porteurs/réseau et porteurs/porteurs, le profile de bande d'énergie est symétrique.

Cas C : $V_{gs} > V_{ds} > 0$ (courbe verte)

En appliquant un potentiel de drain, on crée un déséquilibre dans le profil de bande d'énergie du transistor. Les porteurs transitant de la source vers le drain ou vis-versa rencontrent deux barrières qu'ils franchissent par effet tunnel. La barrière du côté drain sera décalée par une quantité égale à l'énergie équivalente au potentiel V_{ds} appliqué. La fonction de transmission totale aura la forme la plus générale c.-à-d. en fonction des deux fonctions de transmission source $T_S(E)$ et drain $T_D(E)$.

Cas D : $V_{gs} > 0$ et $V_{gs} < V_{ds}$ (courbe violette).

Pour ce régime de polarisation, on remarque l'effacement de la barrière associée à la bande de conduction côté drain et la formation d'une barrière associée à la bande de valence du côté de la bande de valence. Ainsi, les électrons transitant de la source vers le drain, ne rencontrent qu'une seule barrière qu'ils franchissent par effet tunnel. De façon corolaire, un courant de trou commence à apparaître.

2.3. Détermination des fonctions de transmission

Dans le cas des SB-CNTFET, La variation dans le potentiel de la grille V_{gs} change le potentiel du canal V_{cnt} et modifie également la forme des barrières Schottky de source et drain qui déterminent l'injection des porteurs.

Ces barrières sont caractérisées par leur transparence qui définit la fonction de transmission globale exprimée à partir des deux fonctions de transmission T_S et T_D respectivement de la source et du drain [80]. La fonction de transmission globale T est exprimée par l'équation (40) :

$$T_T(E) = \frac{T_S(E) \cdot T_D(E)}{T_S(E) + T_D(E) - T_S(E) \cdot T_D(E)} \quad (40)$$

Le calcul des fonctions de transmission $T_S(E)$ et $T_D(E)$ exige la connaissance de la forme de la barrière Schottky.

2.4. Calcul du coefficient de transmission par l'approximation "WKB"

Une méthode pour calculer le coefficient de transmission est l'approximation de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger de façon

semi-classique. Lorsqu'une particule traverse une barrière, l'équation de Schrödinger unidimensionnelle indépendante du temps peut s'écrire [81].

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + W(x) - E\right) \Psi(x) = 0 \quad (41)$$

où m^* et E sont la masse effective et l'énergie du porteur, respectivement. $W(x)$ est le profil de la barrière.

En admettant que la fonction d'onde est de la forme :

$$\Psi(x) = \alpha(x) \exp\left[\mp i \frac{\beta(x)}{\hbar}\right] \text{ avec } \beta(x) = 2m^* \sqrt{E - W(x)} \quad (42)$$

On peut trouver les solutions de l'équation (41) pour la partie réelle :

$$\frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} - \frac{\alpha}{\hbar^2} \left[\frac{\partial \beta}{\partial x}\right]^2 + \frac{2m^*(E - W(x))}{\hbar^2} \alpha = 0 \quad (43)$$

et pour la partie imaginaire :

$$\alpha \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \alpha}{\partial x} \frac{\partial \beta}{\partial x} = 0 \quad (44)$$

L'équation (44) peut être résolue avec :

$$\frac{\partial \beta}{\partial x} = \frac{C}{\alpha^2} \quad (45)$$

avec C est une constante

En remplaçant (45) dans (43), on obtient :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{C}{\alpha^2}\right)^2 + \frac{2m^*(E - W(x))}{\hbar^2} = 0 \quad (46)$$

on obtient :

$$\beta(x) \cong \int \sqrt{2m^*(E - W(x))} dx \quad (47)$$

Donc, $\Psi(x)$ devient :

$$\Psi(x) = \alpha(x) \exp\left\{\mp i \frac{\int \sqrt{2m^*(E - W(x))} dx}{\hbar}\right\} \quad (48)$$

Si on considère que la barrière se situe entre les points x_1 et x_2 avec x_2 supérieur à x_1 , l'onde incidente Ψ_1 et l'onde transmise Ψ_2 s'écrivent :

$$\Psi_1(x) = \alpha(x) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{x_1} \sqrt{2m^*(E - W(x'))} dx' \right\} \quad (49)$$

$$\Psi_2(x) = \alpha(x) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{x_2} \sqrt{2m^*(E - W(x'))} dx' \right\} \quad (50)$$

La fonction de transmission est proportionnelle au rapport du module entre l'onde transmise et celle incidente. Elle est donnée par :

$$T(E) = \left| \frac{\Psi_2(x)}{\Psi_1(x)} \right|$$

Finalement, le coefficient de transmission s'écrit :

$$T(E) = \left\{ \frac{\exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{x_2} \sqrt{2m^*(E - W(x'))} dx' \right]}{\exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{x_1} \sqrt{2m^*(E - W(x'))} dx' \right]} \right\}^2 \quad (51)$$

$$T(E) = \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m^*(E - W(x'))} dx' \right] \right\}^2 \quad (52)$$

Et enfin :

$$T(E) = \exp \left[\frac{-2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m^*(E - W(x'))} dx' \right] \quad (53)$$

Avec la condition traduisant que la variation de la barrière de potentiel est suffisamment faible[113] :

$$m^* \hbar \frac{dW(x)}{dx} \ll \sqrt{|2m^*(W(x) - E)|^3} \quad (54)$$

3.5. Forme de la barrière de potentiel

D'après [82] et comme il est illustré par la figure 38 suivante, la forme du potentiel de la barrière Schottky à l'interface nanotube/métal du contact peut être approximée par une forme exponentielle.

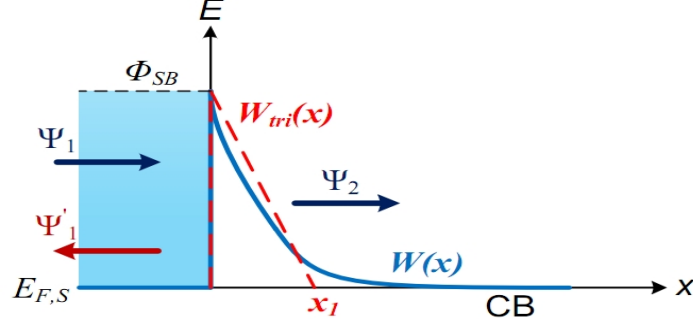


Figure 38 : Approximation triangulaire dans la bande de conduction (CB) par rapport au profil exponentiel Schottky avec l'onde incidente Ψ , l'onde réfléchie Ψ' et l'onde transmise Ψ [82].

Son profil en fonction de la distance suivant l'axe de nanotube $W(x)$ peut s'écrire :

$$W(x) = \Phi_{SB} - e \cdot V_{cnt} \left(1 - \exp \left[\frac{-2x}{L} \right] \right) \quad (55)$$

avec Φ_{SB} est la hauteur de la barrière Schottky repérée par rapport au niveau de Fermi source, V_{cnt} est le potentiel de canal du nanotube et L est la longueur du canal en la supposant identique que celle de la grille dans le cas du CNTFET. Cependant cette expression s'avère encore trop compliquée pour établir une expression analytique simple pour le courant tunnel.

Pour cette raison, [83, 84] ont rapproché le profil de la barrière de potentiel par une forme triangulaire (courbe rouge sur la figure 38). Dans ce cas, comme la variation du profil du potentiel est linéaire, on parle alors du régime tunnel de FOWLER-NORDHEIM et ce dernier peut s'écrire sous la forme :

$$W_{tri}(x) = \Phi_{SB} - e \cdot E_{elec} \cdot x \quad (56)$$

avec E_{elec} est le champ électrique dans la jonction tunnel noté:

$$E_{elec} = \frac{\Phi_{SB}}{e \cdot d_{ox}} \quad (57)$$

On remplace l'équation 56 dans l'équation 53, le coefficient de transmission devient alors :

$$T(E) = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_1} \sqrt{2m^* (\Phi_{SB} - e \cdot E_{elec} \cdot x - E)} dx \right) \quad (58)$$

Après intégration, on aura la forme analytique :

$$T(E) = \exp \left(-4 \frac{\sqrt{2m^*}}{3 \cdot e \cdot \hbar \cdot E_{elec}} (\Phi_{SB} - E)^{3/2} \right) \quad (59)$$

Pour calculer le courant dans la diode, on utilise la formule de Landauer [85] qui s'applique lorsqu'on dispose de deux réservoirs métalliques reliés entre eux par un canal mono-dimensionnel caractérisé par un transport balistique:

$$I_{DS} = \frac{2e}{h} \int_0^{\infty} \left[\begin{array}{cc} s & s \\ -0 & D \end{array} \right] \int_0^{\infty} \left[\begin{array}{cc} D & D \end{array} \right]$$

En exprimant la relation entre le vecteur d'onde et l'énergie, la formule de la vitesse devient : Avec

Les distributions de Fermi-Dirac f_s et f_D prennent la forme générale en fonction de l'énergie. Comme les différentes sous-bandes contribuent éventuellement au courant du drain et comme le nombre de mode transverse M est égal à 2 dans le cas de nanotube de carbone (c'est-à-dire les sous-bandes doublement dégénérées), l'équation de Landauer (2.22) devient :

$$I_{DS} = \frac{2e}{h} \sum_{p=1}^{p=nsb} \int_0^{\infty} \left[\begin{array}{cc} s & s \\ -0 & D \end{array} \right] \int_0^{\infty} \left[\begin{array}{cc} D & D \end{array} \right]$$

$\frac{1}{\Delta_p - Vcnt}$ $\frac{1}{\Delta_p - Vcnt}$

$\frac{1}{elec}$ $SB-S$ $3/2$

$\frac{1}{elec}$ $SB-D$ $3/2$

Avec les fonctions de distribution de Fermi-Dirac :

$$f_s = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_s}{k_B T}\right)}$$

$$f_D = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_D}{k_B T}\right)}$$

$\Delta_p - Vcnt$ B

$\Delta_p - Vcnt$ B

Et finalement [86] :

$$I_{DS} = \frac{4e}{h} \sum_{p=1}^{p=nsb} \left\{ \int_{\Delta_p - V_{cnt}}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - e(V_{cnt} - V_s)}{K_B T}\right)} \exp\left(-4 \frac{\sqrt{2m^*}}{3e\hbar E_{elec}} (\Phi_{SB} - E - eVs)^{3/2}\right) dE \right. \\ \left. - \int_{\Delta_p - V_{cnt}}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - e(V_{cnt} - V_{ds})}{K_B T}\right)} \exp\left(-4 \frac{\sqrt{2m^*}}{3e\hbar E_{elec}} (\Phi_{SB} - E - eV_{ds})^{3/2}\right) dE \right\} \quad (67)$$

4. Modélisation compacte du transistor à contacts Schottky

L'approche retenue pour la modélisation d'une barrière Schottky consiste à extraire une hauteur de barrière effective déterminant le niveau d'injection des porteurs dans le canal. Ensuite, nous montrons comment intégrer cette méthode dans le calcul de la densité de charge et du courant tunnel pour aboutir à un modèle compact complet pour le transistor SB-CNTFET.

4.1. Détermination de la barrière Schottky effective

On utilise la méthode de potentiel de surface (Surface Potential Method) pour décrire les propriétés électrostatiques d'un transistor CNTFET puisqu'elle prend en considération tous les paramètres liés aux propriétés technologiques du composant tels que l'épaisseur de l'oxyde de la grille et le diamètre du nanotube de carbone. Elle se base sur l'équation de Poisson unidimensionnel qui permet de donner une relation entre la distribution de charge et le potentiel $\Phi_f(x)$ à l'interface nanotube/diélectrique de la grille [87] :

$$\frac{\partial^2 \Phi_f(x)}{\partial x^2} - \frac{\Phi_f(x) - \Phi_g - \Phi_{bi}}{\lambda^2} = -e \frac{[\rho \pm N]}{\epsilon_0 \epsilon_{nt}} \quad (68)$$

Avec Φ_g et Φ_{bi} le potentiel de la grille et le potentiel de la hauteur de barrière respectivement. ρ représente la densité de charge mobile et N est la densité de charge fixes dues au dopage du nanotube avec des porteurs de type accepteurs (signe -) ou donneurs (signe +). Pour une densité de charge ρ fixe, l'équation 2.46 a une solution de la forme [87]:

$$\Phi_f(x) \propto \exp\left(\frac{-x}{\lambda_{Schottky}}\right) \quad (69)$$

La relation (69) montre clairement que le potentiel $\Phi_f(x)$ dépend fortement de la caractéristique $\lambda_{Schottky}$ qui reflète les propriétés géométriques du CNTFET car elle est fonction du diamètre du nanotube d_{nt} et de l'épaisseur d'oxyde d_{ox} .

Dans le cas d'une configuration plane à grille arrière, cette longueur caractéristique (figure 39) est:

$$\lambda_{Schottky} = \sqrt{(\varepsilon_{nt}/\varepsilon_{ox}) d_{nt} d_{ox}} \quad (70)$$

Avec ε_{nt} , ε_{ox} les permittivités diélectriques respectives du nanotube et de l'oxyde.

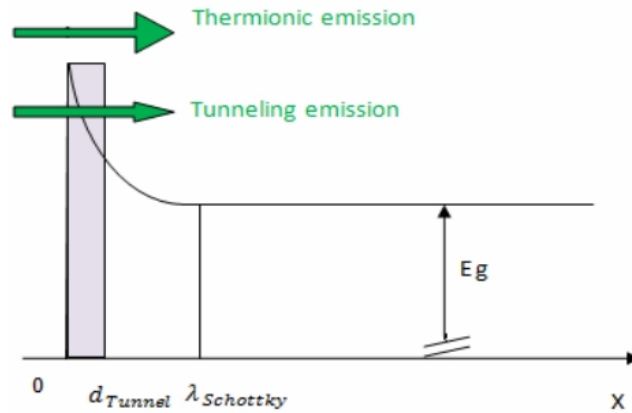


Figure 39 : Profil de la bande d'énergie de la barrière Schottky au contact source-nanotube montrant la longueur caractéristique $\lambda_{Schottky}$ et d_{Tunnel} [88].

Dans un CNTFET conventionnel, une électrode métallique est en contact directement avec le nanotube semi-conducteur intrinsèque. Ce contact n'est pas de type ohmique avec une résistance d'accès, mais de type Schottky avec la présence d'une barrière d'énergie. Une façon simple de représenter la présence de la barrière Schottky (SB) est la différence avant rapprochement des matériaux pour aligner le niveau de Fermi à l'équilibre thermodynamique côté métal et côté nanotube. Selon cette approche, la hauteur de la barrière Φ_{SB} est donnée par :
Pour les SB de la bande de conduction :

$$\Phi_{SB,p} = E_{F,C} + \Delta_p - E_{F,M} \quad (71)$$

Pour les SB de la bande de valence :

$$\Phi_{SB,p} = E_{F,C} - \Delta_p - E_{F,M} \quad (72)$$

$E_{F,C}$ et $E_{F,M}$ sont les travaux de sortie correspondants au niveau de Fermi du carbone et du métal, respectivement. L'énergie Δ est le minima d'une sous-bande d'énergie par rapport au niveau de Fermi du carbone. On l'appelle souvent le bas de sous-bande qui est égale à $E_{g,p}/2$, l'indice p représente l'ordre de la sous-bande.

Par effet tunnel, les porteurs libres traversent une barrière fine d'énergie. L'effet tunnel est modélisé par un coefficient de transmission dépendant de l'énergie $T(E)$ qui décrit la probabilité pour qu'un porteur puisse traverser la barrière de potentiel. Le formalisme de Landauer définit le courant dans le canal d'un CNTFET par transmission de porteur provenant des contacts selon le coefficient de transmission:

Dans un SB-CNTFET, la hauteur de la barrière Schottky détermine son régime de fonctionnement. Cette hauteur de barrière peut être remplacée par une hauteur de barrière effective $\Phi_{SB-S,D}^{eff}$ qui découle de la résolution analytique de l'équation de Poisson sachant qu'elle est nécessairement inférieure à Φ_{SB} et devient la clé du calcul du coefficient de transmission. Elle s'écrit [86] :

$$\Phi_{SB-S,D}^{eff} = (\Phi_{SB-S,D} - (\Delta_p - eV_{cnt} + eV_{S,D})) \exp^{-d_{Tunnel}/\lambda_{Schottky}} + (\Delta_p - eV_{cnt} + eV_{S,D}) \quad (73)$$

$\lambda_{Schottky}$ représente la distance d'influence du contact métal sur le profil de la bande d'énergie. d_{Tunnel} est la distance suivant l'axe du nanotube pour laquelle on fixe le niveau d'injection pour une polarisation V_{cnt} donnée.

Ainsi, selon l'énergie des porteurs présents à l'interface de la jonction Schottky et selon la hauteur de barrière Schottky effective $\Phi_{SB-S,D}^{eff}$, ces porteurs peuvent traverser ou non vers le canal (figure 40) et qui montre également que la fonction de transmission, contrairement à la méthode WKB, est égale à 1 pour des énergies de porteurs supérieures à $\Phi_{SB-S,D}^{eff}$ et elle est égale à 0 dans le cas contraire.

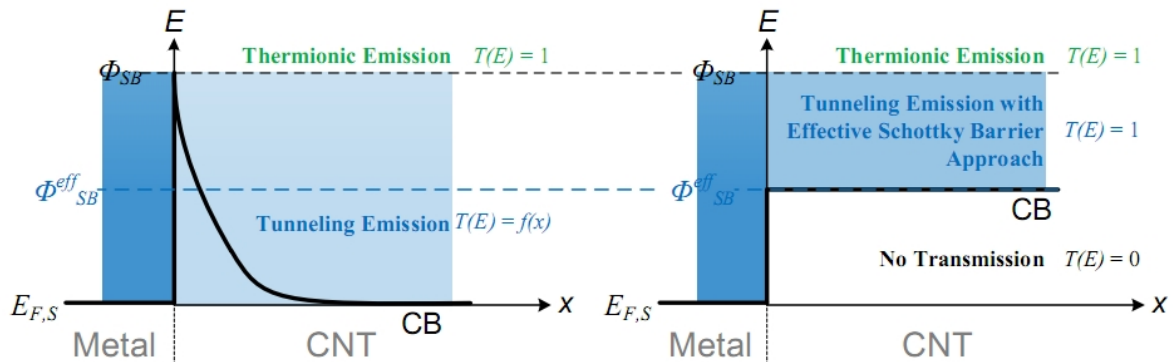


Figure 40 : Représentation schématique de la bande de conduction au environ de la jonction Schottky métal-nanotube. A gauche, représentation de type exponentiel pour le calcul de l'effet tunnel selon l'approche WKB. A droite, représentation simplifiée pour le calcul de l'effet tunnel selon l'approche barrière Schottky effective avec le coefficient, $T(E)$ associé [86].

4.2. Calcul du courant

La résolution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle par l'approximation WKB ne s'avère pas pertinente pour la modélisation compacte par contre la méthode de la SB effective simplifie le calcul du coefficient de transmission tunnel en lui donnant une valeur binaire. Par exemple, dans le cas du transport des électrons, si l'énergie de l'électron est inférieure à la hauteur de barrière Schottky effective Φ_{SB}^{eff} , alors il ne peut pas traverser la barrière. C'est-à-dire que le coefficient de transmission est nul. Sinon, le porteur est transmis et le coefficient est égal à 1 comme dans le cas de l'effet thermoïonique. Si l'énergie des porteurs

est supérieure à la hauteur de la barrière Schottky Φ_{SB}^{eff} , le transport se produit par effet thermoïonique.

Le courant de drain dans un SB-CNTFET est calculé en ayant recourt à l'équation de Landauer, en supposant un canal monodimensionnel en "1D" et qui est caractérisé par un transport balistique entre source et drain.

En utilisant la formulation de la barrière de Schottky effective, on écrit [86]:

$$I_{DS} = \frac{2q}{h} M \sum_{p=1}^{p=nsb} \left(\int_{\Phi_{SB}^{eff}}^{\infty} f_S(E) dE - \int_{\Phi_{SB}^{eff}}^{\infty} f_D(E) dE \right) \quad (74)$$

Avec :

$$f_S(E) = \int_{\Phi_{SB}^{eff}}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - e(V_{cnt} - V_S)}{K_B T}\right)} \quad (75)$$

$$f_D(E) = \int_{\Phi_{SB}^{eff}}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - e(V_{cnt} - V_{ds})}{K_B T}\right)} \quad (76)$$

Et par la suite :

$$I_{DS} = \frac{2q}{h} M \sum_{p=1}^{p=nsb} \left(\int_{\Phi_{SB}^{eff}}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - e(V_{cnt} - V_S)}{K_B T}\right)} dE - \int_{\Phi_{SB}^{eff}}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - e(V_{cnt} - V_{ds})}{K_B T}\right)} dE \right) \quad (77)$$

Cette équation du courant est intégrable à partir de la formule:

$$\int \frac{dE}{1 + b \exp\left(\frac{E}{K_B T}\right)} = K_B T \left(\frac{E}{K_B T} - \ln \left(1 + b \exp\left(\frac{E}{K_B T}\right) \right) \right) = K_B T \left[-\ln \left(\exp\left(\frac{-E}{K_B T}\right) + b \right) \right] \quad (78)$$

Ce qui permet d'avoir, après simplifications, un résultat analytique pour le courant de drain dans le SB-CNTFET :

$$I_{DS} = \frac{4eK_B T}{h} \sum_{p=1}^{p=nsb} \left\{ \ln \left(1 + \exp\left(\frac{eV_S + \Phi_{SB-S}^{eff} - \Delta_p}{K_B T}\right) \right) - \ln \left(1 + \exp\left(\frac{eV_{ds} + \Phi_{SB-D}^{eff} - \Delta_p}{K_B T}\right) \right) \right\} \quad (79)$$

Avec Φ_{SB-S}^{eff} et Φ_{SB-D}^{eff} les hauteurs de barrières effectives de la source et du drain respectivement.

4.3. Calibration de la longueur caractéristique de la barrière Schottky

La calibration de la longueur caractéristique $\lambda_{Schottky}$ est issue d'une recherche bibliographique puis d'une comparaison avec les résultats de la simulation Monte-Carlo. Le paramètre $\lambda_{Schottky}$ représente la longueur caractéristique (screening length) de la barrière Schottky. $\lambda_{Schottky}$ modélise la distance d'influence du contact métal sur le profil de bande d'énergie. La figure 41 la localise à l'interface du contact métal/semi-conducteur et de la partie constante de la bande de valence. Pour le cas d'une grille planar, elle s'écrit en utilisant la formule pour le MOSFET planar sur SOI [89]:

$$\lambda_{Schottky} = \sqrt{(\epsilon_{nt}/\epsilon_{ox}) d_{nt} d_{ox}} \quad (80)$$

La permittivité du CNT fait toujours actuellement l'objet d'investigations. Elle a été confirmée comme supérieure à 4 pour un nanotube (17, 0) avec une longueur quelconque. Elle a été calculée par l'approche de la liaison forte (tight-binding) dans une gamme comprise entre 4,2 et 5,3 pour les CNT avec un diamètre inférieur à 4 nm. On a estimé une valeur moyenne de la constante diélectrique égale à 4,6 pour des diamètres allant de 0.8 à 2 nm. Cette valeur est en accord avec la constante calculée par la méthode B3LYP [90]. A partir de cette valeur, on a mené une comparaison avec des résultats de la simulation Monte-Carlo. La configuration du contact Schottky est celle d'un nanotube de diamètre de 1,4 nm sur un oxyde de grille SiO_2 de 10 nm ($\epsilon_r = 3.9$). En utilisant l'équation 80, la longueur caractéristique $\lambda_{Schottky}$ est calculée égale à 4 nm. D'après la figure 41, issue du travail de H. N. Nguyen [91], la valeur de 4 nm pour $\lambda_{Schottky}$ semble être une bonne estimation.

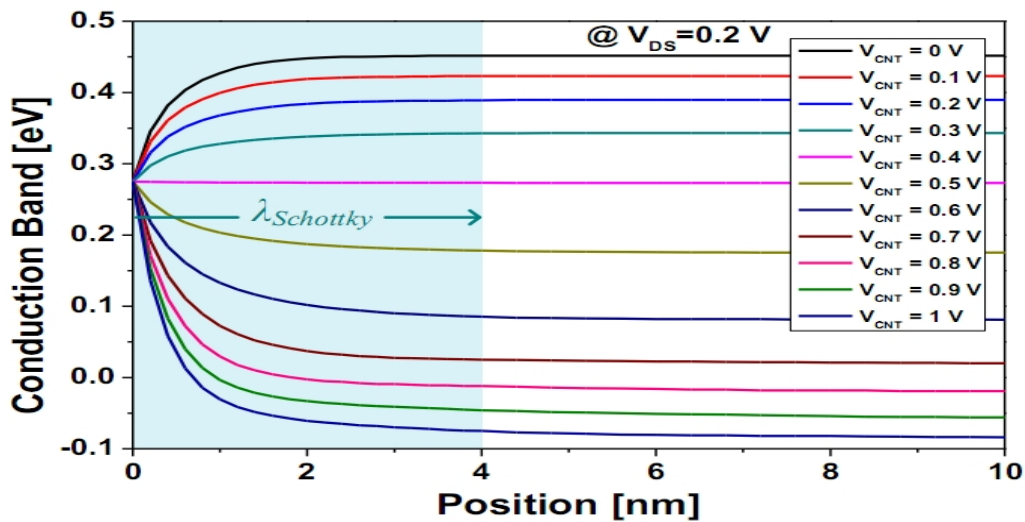


Figure 41 : Résultat de la simulation des profils de la bande de conduction sous différentes polarisations du canal pour une barrière Schottky initiale (sans polarisation) de 0,275 eV (contribution de Dr. Huu Nha Nguyen) [91].

4.4. Calibration de la distance tunnel d_{Tunnel}

Selon la référence [89], on sait que la distance tunnel d_{Tunnel} dépend de la hauteur de la barrière Schottky et de la température. De plus, elle est proportionnelle à l'inverse de la racine carrée de la masse effective du porteur. Mais la relation entre eux n'a pas été déterminée. Pour notre étude, la dépendance thermique de d_{Tunnel} n'est pas le sujet et, elle est très probablement présente par la dépendance thermique de la masse effective du porteur. Par conséquent, nous supposons que d_{Tunnel} est une fonction de Φ_{SB} et paramétrée par la masse effective du porteur qui s'écrit comme :

$$\Phi_{SB-S,D}^{eff} = (\Phi_{SB} - (\Delta_p - eV_{cnt} + eV_{S,D}))e^{-d_{Tunnel}/\lambda_{Schottky}} + (\Delta_p - eV_{cnt} + eV_{S,D}) \quad (81)$$

$$d_{Tunnel} = \frac{f(\Phi_{SB})}{\sqrt{m^*}} \quad (82)$$

Malheureusement, la masse effective de l'électron est connue sous forme analytique uniquement pour les SWNT zigzag (avec un diamètre inférieur à 2 nm. Ces valeurs s'écrivent, pour les bas de sous-bandes, en tenant compte du coefficient de non-parabolicité dans les équations suivantes [34].

- Pour la première sous-bande :

$$\begin{aligned} E_1^m(n) &= \frac{\pi V_{pp\pi}}{n \cdot \sqrt{3}}, \\ m_1^*(n) &= \frac{3m_e}{nV_{pp\pi}} \left(1 - 0.0044n + \frac{gcd(n+1.3) - gcd(n-1.3)}{n} \right), \\ \gamma_1(n) &= \frac{3}{2V_{pp\pi}} (0.3n - 1) \end{aligned} \quad (83)$$

Pour la deuxième sous-bande :

$$\begin{aligned} E_2^m(n) &= 2E_1^m(n) \left(1 + \frac{gcd(n-1.3) - gcd(n+1.3)}{3n} \right), \\ m_2^*(n) &= m_1^*(n) \left\{ \frac{E_2^m(n)}{E_1^m(n)} + \frac{5}{n} \left[\frac{E_2^m(n)}{E_1^m(n)} (gcd(n-1.3) - 1) - (gcd(n+1.3) - 1) \right] \right\} \\ \gamma_2(n) &= \frac{3}{2V_{pp\pi}} (0.2n - 1) \end{aligned} \quad (84)$$

Pour la troisième sous-bande :

$$E_3^m(n) = 4E_1^m(n) \left(1 + \frac{1 + 2gcd(n+1.3) - 3gcd(n-1.3)}{4n} \right),$$

$$m_3^*(n) = m_1^*(n) \left\{ \frac{E_3^m(n)}{E_1^m(n)} + \frac{5}{n} \left[\frac{E_3^m(n)}{E_1^m(n)} (\gcd(n+1.3) - 1) - (\gcd(n-1.3) - 1) \right] \right\}, \quad (85)$$

$$\gamma_3(n) = \frac{3n^2}{300V_{pp\pi}}$$

Où les $E^m(n)$, $m^*(n)$ et $\gamma(n)$ sont les bas de sous-bande, les masses effectives dans chaque sous-bande et les coefficients de la non-parabolicité de chaque sous-bande, respectivement.

L'entier n est pour un nanotube zigzag $(n, 0)$, m_e est la masse de l'électron. La fonction \gcd est le plus grand diviseur commun entre deux entiers.

4.5. Comparaison entre le courant donné par la méthode WKB et le courant issu de la méthode SB effective

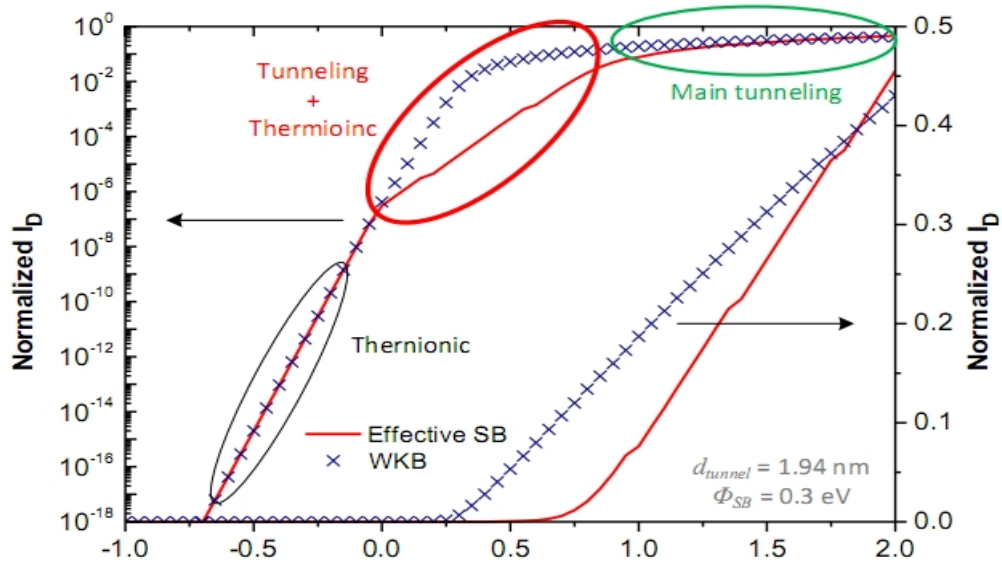


Figure 42 : Comparaison entre le courant donné par WKB (symboles) et le courant issu de SB effective (traits continus). Une bonne cohérence des deux résultats aux fortes polarisations. Φ_{SB} 0,3 eV et d_{Tunnel} = 1,94 nm.

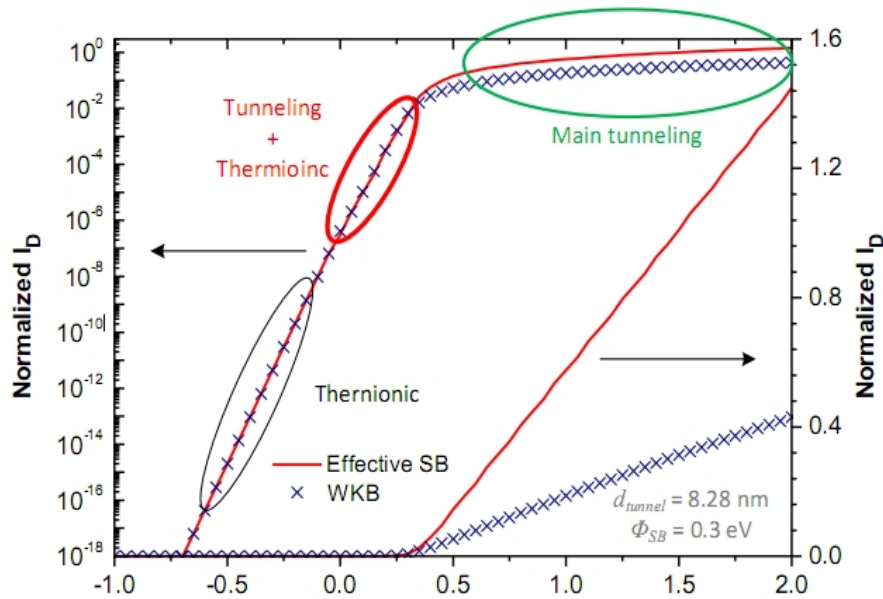


Figure 43 : Comparaison entre le courant donné par WKB (symboles) et le courant issu de SB effective (traits continus). Une parfaite cohérence aux faibles polarisations (entre 0 et 0,5 V) pour le résultat de l'émission tunnel. $\Phi_{SB} = 0,3$ eV et $d_{Tunnel} = 8,28$ nm.

Les figures 42 et 43 issues de [34] montrent un bon accord partiel selon les valeurs de d_{Tunnel} , 1,94 nm et 8,28 nm respectivement. Dans les deux cas, les courants sont identiques pour les polarisations négatives pour lesquelles seul l'effet thermoïonique a lieu avec une valeur de la fonction de Fermi très faible.

La figure 42 présente un bon accord pour les fortes polarisations (supérieures à 1 V) pour lesquelles le courant comporte la contribution du courant de tunnel, mais aussi une partie non-négligeable du courant thermoïonique. Par contre, le courant de la méthode SB effective est beaucoup plus faible que celui issu de WKB pour les faibles polarisations (entre 0 et 0,5 V) pour lesquelles la contribution de l'effet tunnel et celle de l'effet thermoïonique interviennent de façon quasi similaire. Par conséquent, le but de l'approche SB effective n'est que partiellement atteint.

La figure 43 présente un parfait accord pour les faibles polarisations. Dans ce cas, le courant tunnel de la méthode SB effective est cohérent avec celui issu de WKB. Cette étude est réalisée avec une hauteur de barrière Φ_{SB} de 300 meV. Le même bon accord est trouvé pour les autres valeurs de la hauteur de la barrière Schottky. Cela montre l'efficacité de la méthode de la calibration d_{Tunnel} pour les faibles polarisations de canal. On a reporté les valeurs de d_{Tunnel} en fonction Φ_{SB} dans la figure 44.

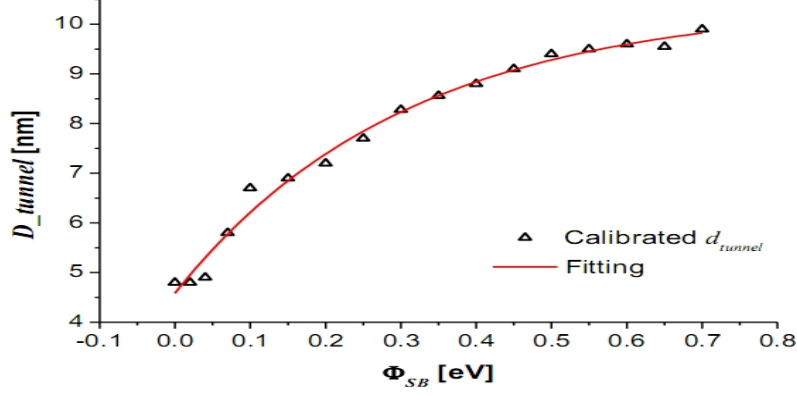


Figure 44 : La calibration de la longueur de tunnel en fonction de la hauteur de la barrière Schottky et solution analytique comportementale [34].

Ensuite, une solution analytique comportementale a été déterminée par le logiciel “Origin 8”. Cette fonction numérique est validée sur l’intervalle Φ_{SB} de 0 à 0,7 eV pour le nanotube (19, 0) et s’écrit :

$$d_{Tunnel}(\Phi_{SB})|_{(19,0)} = 10^{-9} \left\{ 10.41183 - 5.83131 \cdot \exp\left(-\frac{\Phi_{SB}}{0.30479}\right) \right\} \quad (86)$$

En remplaçant l’équation 86 dans la relation 82, une fonction générale pour les SWNT zigzag de d_{Tunnel} est déduite :

$$d_{Tunnel}(\Phi_{SB}) = 10^{-9} \left\{ 10.41183 - 5.83131 \cdot \exp\left(-\frac{\Phi_{SB}}{0.30478}\right) \right\} \sqrt{\frac{m_1^*(19)}{m_1^*(n)}} \quad (87)$$

On observe que la surestimation du courant apparait pour des polarisations supérieures à un seuil de potentiel (voir figure 43). Ce seuil correspond à la valeur du bas de la sous-bande. Ainsi, le calcul de Φ_{SB}^{eff} pour les fortes polarisations doit être corrigé à partir de la valeur de Δ_p . Par ailleurs, dans un souci de simplicité, nous privilégions un facteur correctif ne dépendant que des seuls paramètres Φ_{SB} et m^* . De plus, pour faciliter la convergence du calcul, ce facteur correctif doit présenter une variation proche de d_{Tunnel} . Finalement, nous avons calibré le facteur correctif (sans unité), $factor_eff_SB$ en utilisant la même méthode que d_{Tunnel} présentée figure 45.

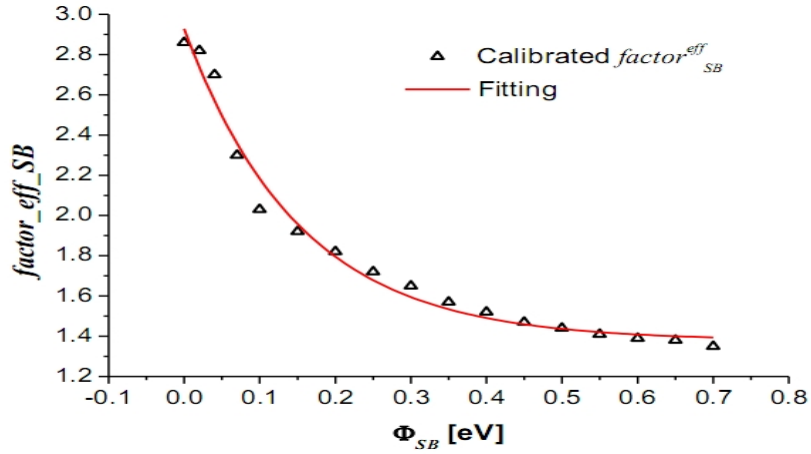


Figure 45 : La calibration du facteur correctif en fonction de la hauteur de la barrière Schottky et solution analytique comportementale.

Il s'écrit :

$$factor_{SB}^{eff}(\Phi_{SB}) = \left\{ 1.37867 + 1.55024 \cdot \exp\left(-\frac{\Phi_{SB}}{0.15228}\right) \right\} \left(\frac{m_1^*(19)}{m_1^*(n)} \right)^{1/3} \quad (88)$$

La barrière Schottky effective est déduite en intégrant le facteur correctif dans l'équation 73 à travers une fonction de lissage :

$$\Phi_{SB}^{eff} = \left[(\Phi_{SB} - (\Delta_p - eV_{cnt} + eV_{S,D})) \cdot \exp\left(-d_{tunnel}/\lambda_{Schottky}\right) + (\Delta_p - eV_{cnt} + eV_{S,D}) + \frac{V_{cnt} - \Delta_p \sqrt{factor_{SB}^{eff}(\Phi_{SB})}}{factor_{SB}^{eff}(\Phi_{SB})} \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{V_{cnt} - \Delta_p}{K_B T}}} \right) \right] \quad (89)$$

5. Influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques I-V

Nous avons étudié l'influence des paramètres physiques et géométriques sur les caractéristiques I-V.

La figure 46 montre la caractéristiques I_{ds} en fonction de V_{gs} en échelle logarithmique pour V_{ds} de 0,1 à 1,2V par pas de 0,2V. On remarque que la caractéristique est ambipolaire (courant d'électrons et de trous). Ce résultat est cohérent avec le fait qu'à cette polarisation, le transistor a une structure de bande d'énergie symétrique entre la bande de conduction et la bande de valence ce qui implique des contributions égales des électrons et des trous dans le courant total circulant entre drain et source.

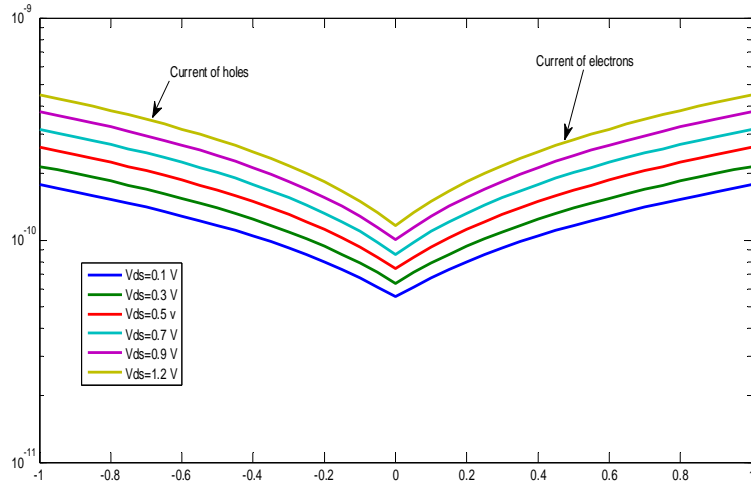


Figure 46 : La caractéristique I_{ds} en fonction de V_{gs} pour V_{ds} de 0.1 à 1.2 V par pas de 0.2V avec $\Phi_{SB}=110$ meV, $d_{Tunnel}=4.835$ nm, $\lambda_{Schottky}=3.29$ nm [92].

La figure 47 montre $I_{ds} = f(V_{ds})$ pour V_{gs} allant de 0.6 à 0.9 V. 0,9V par pas de 0,1V. Après la saturation du courant pour des polarisations en V_{ds} supérieures à V_{gs} , un courant de trous se manifeste. Donc, une barrière Schottky se forme dans la bande de valence côté drain et un courant de trou se rétablit et évitera la saturation du transistor.

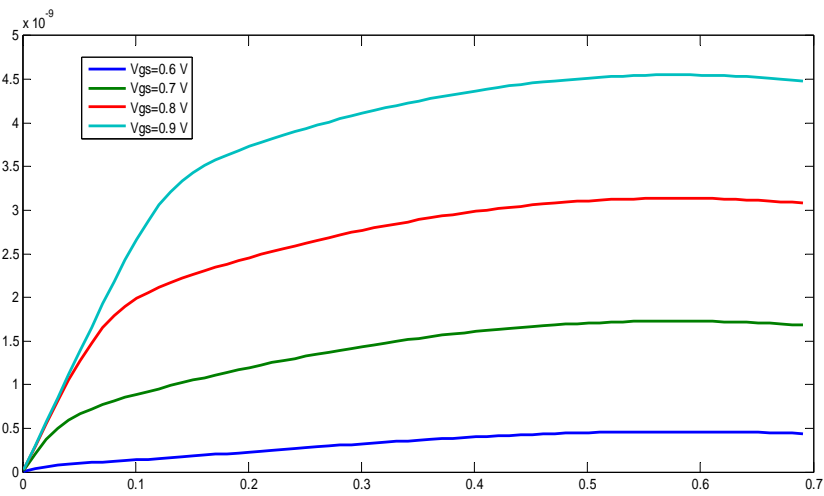


Figure 47: I_{ds} en fonction de V_{ds} pour un SB-CNTFET, $\Phi_{SB}=110$ meV, $d_{Tunnel}=4.835$ nm, $\lambda_{Schottky}=3.29$ nm [92].

5.1. Influence de la hauteur de barrière Schottky

La figure 48 montre l'influence de la hauteur de barrière Schottky sur la caractéristique I_{ds} en fonction de V_{gs} pour trois valeurs de Φ_{SB} : 200meV, 400meV et 600meV à $V_{ds} = 0,1V$. En effet, en augmentant la hauteur de la barrière, le courant se dégrade en passant d'une hauteur de barrière 0.2 eV à une hauteur de barrière égale à 0,6eV.

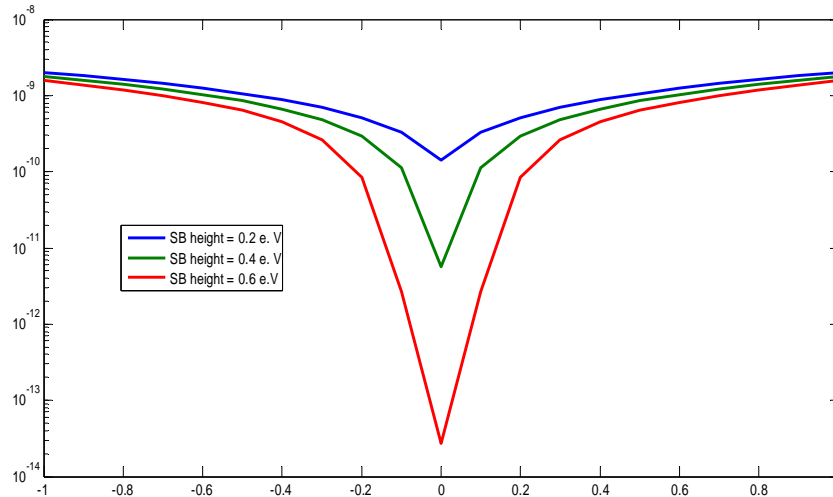


Figure 48 : Caractéristiques I_{ds} en fonction de V_{gs} pour un composant SB-CNTFET formé par un nanotube zigzag (13, 0) et pour trois valeurs de la hauteur de la barrière Schottky ($\Phi_{SB}=0,2$; 0,4 et 0,6eV) en échelle logarithmique à $V_{ds}=0,1V$ [93].

La hauteur de la barrière Schottky dépend essentiellement de la différence de travail de sortie entre le métal et le nanotube de carbone puisque le phénomène de blocage de niveau de Fermi en surface a peu d'impact. De ce fait, des contacts formés par des métaux dont le travail de sortie est élevé (comme le Pd ou le Ti) donnent lieu à des barrières Schottky du côté de la bande de valence et donnant naissance à un transport de type p. A l'inverse, des contacts formés par des métaux dont le travail de sortie est faible donnent lieu à des barrières Schottky du côté de la bande de conduction et donne naissance en un transport de type n. Ainsi un contact est formé par un métal dont le travail de sortie conduit à un régime de transport ambipolaire.

5.2. Influence du diamètre du nanotube

Nous notons que le courant I_{ds} correspondant à la chiralité (25,0) est plus important que ceux obtenus à partir des chiralités (17,0) et (11,0). De plus les meilleures performances de I_{ds} sont obtenues pour les grands diamètres des CNT d'où pour les faibles gaps. Or on sait que le gap est inversement proportionnel au diamètre (figure 49).

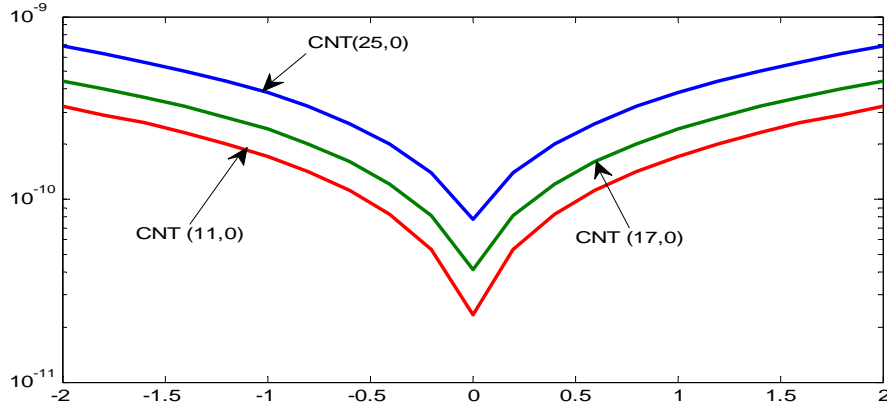


Figure 49 : Influence du diamètre sur les caractéristiques I_{ds} en fonction de V_{gs} à $V_{ds} = 0,1V$ et pour trois chiralités du nanotube de carbone (25, 0) en bleu, (17, 0) en vert et (11,0) en rouge avec $\Phi_{SB} = 0,275$ eV à $V_{ds} = 0,1V$ [88].

5.3. Influence de la distance tunnel

D'après la figure 50, lorsque d_{Tunnel} diminue I_{ds} diminue aussi.

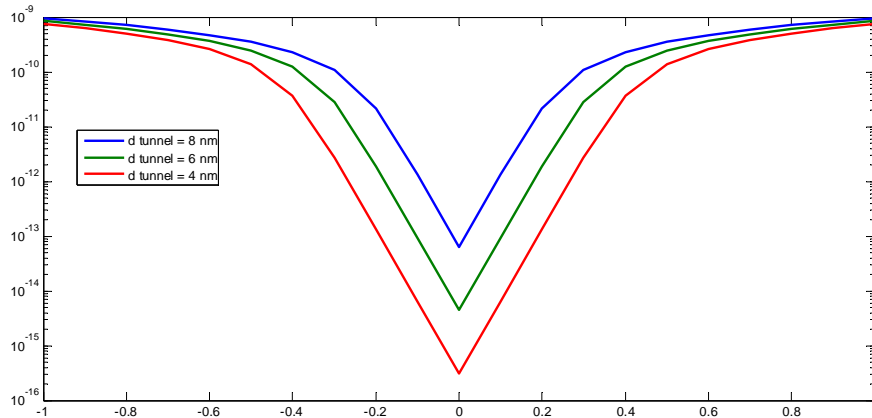


Figure 50 : L'effet de d_{Tunnel} sur la caractéristique I_{ds} en fonction de V_{gs} pour trois valeurs de $d_{Tunnel} = 4nm, 6nm$ et 8 nm à $V_{ds} = 0,1 V$ [94].

5.4. Influence de la permittivité de l'oxyde

La figure 51 est la caractéristique de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs} , elle est fonction de deux permittivités diélectriques, pour l'oxyde zirconium ZrO_2 avec $\epsilon_{ZrO_2} = 40$ et l'oxyde de silicium SiO_2 avec $\epsilon_{SiO_2} = 3,9$, les simulations ont montrés que le courant de drain est plus important pour la haute permittivité diélectrique d'où la barrière Schottky est d'autant plus fine que la permittivité diélectrique est forte et l'épaisseur de l'oxyde est fine. Ces résultats sont compatible avec la littérature.

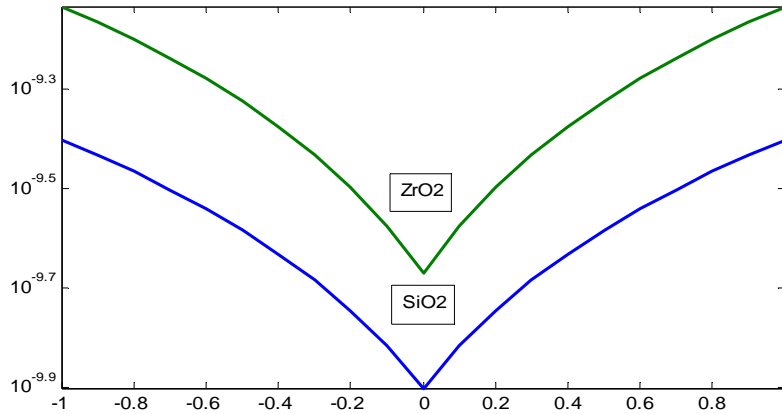


Figure 51 : L'effet de la permittivité diélectrique sur la caractéristique de transfert d'un SB.CNTFET de chiralité (13,0) et pour deux différentes valeurs de ϵ_{ox} : $\epsilon_{SiO_2} = 3,9$; $\epsilon_{ZrO_2} = 40$ at $V_{ds} = 0,1 V$ [88].

5.5. L'influence de l'épaisseur de l'oxyde

La caractéristique de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs} à $V_{ds} = 0,1 V$ montre que lorsque l'épaisseur de la grille diminue le courant de drain I_{ds} augmente. Ce résultat est dû au confinement des porteurs (électrons et trous) qui est plus important (figure 52).

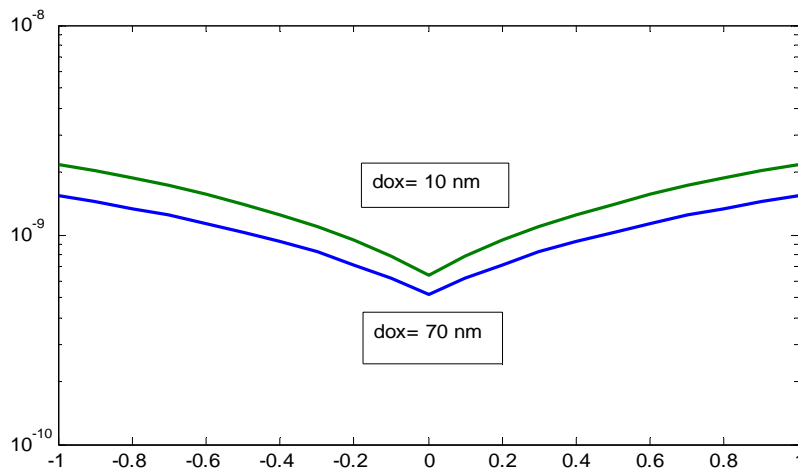


Figure 52 : L'effet de l'épaisseur de l'oxyde de grille d_{ox} sur la caractéristique de transfert pour un SB-CNTFET avec un CNT de chiralité (13,0) [94].

La largeur de la barrière Schottky dépend de la permittivité de l'oxyde de la grille ϵ_{ox} et de l'épaisseur d'oxyde de grille. En effet ces deux paramètres technologiques qui déterminent le contrôle électrostatique du transistor et positionnent ainsi les bandes d'énergies dans le canal, à travers l'efficacité de la commande électrostatique par la grille : la barrière Schottky est d'autant plus fine que la permittivité est forte ou que l'épaisseur de l'oxyde est fine.

5.6. Longueur de la grille

Du fait de la nature fortement balistique du transport électronique dans le canal, une longueur de grille inférieure à 150nm – 200nm n'influe pas sur les performances électriques du SBCNTFET et ne modifie pas les dimensions des barrières Schottky. De ce fait, dans le cas où la longueur de la grille est inférieure à ~15nm, l'effet tunnel résonant entre les deux barrières Schottky favorise l'augmentation du courant.

Conclusion

L'étude menée au début de ce quatrième chapitre concernant la mise évidence des barrières Schottky et le principe de fonctionnement du nanotransistor SB-CNTFET en utilisant une approche qui est basée sur la notion de barrière Schottky effective. Cette approche a abouti à un modèle original compacte qui prend en considération les barrières Schottky. Nous avons présenté un modèle pour le SB-CNTFET, nous notons que la caractéristique I_{ds} en fonction de V_{gs} est ambipolaire.

Le transistor a une structure symétrique de la bande d'énergie entre la bande de conduction et la bande de valence, ce qui signifie que les contributions des électrons et des trous dans le courant circulant entre le drain et la source sont égales. Son principe de fonctionnement est de polariser fortement la grille. En effet, le courant I_{ds} est dégradé de façon exponentielle quand la hauteur de la barrière Schottky est plus élevée. Il faut choisir le diamètre du nanotube parce que les meilleures performances sont observées pour les plus grands diamètres des nanotubes ainsi pour les plus faibles gaps.

I_{ds} est plus grand pour les plus grands d_{Tunnel} , pour les oxydes les plus mince et de haute permittivité diélectrique. Ainsi, le comportement du courant de saturation est sensiblement amélioré en réduisant la hauteur SB. Les résultats obtenus permettent d'optimiser les paramètres géométriques et physiques pour obtenir les meilleures performances du composant dans les applications de commutation.

Conclusion générale

Au terme de ce travail concernant la modélisation des nanotransistors à effet de champ CNTFET, nous rappellerons les principaux résultats obtenus lors de notre étude.

Au premier chapitre, nous avons présenté l'état de l'art des composants nanométriques, les nouvelles méthodes de synthèse et de purification des CNT et les procédés courants de séparation des nanotubes métalliques et semi-conducteurs qui ont été expliqués principalement pour fournir des SWNT homogènes pour les applications électroniques. L'utilisation des CNT dans les matériaux composites, les revêtements et les films de la microélectronique, les propriétés des CNT et du graphène et enfin les dernières nouveautés des composants électroniques à base de CNT, de graphène et de CNT- graphène ainsi que leur applications ont été établies.

Dans le second chapitre, nous avons présenté la structure cristalline du nanotube de carbone monoparoi, SWNT et le nanotube multiparoi, MWNT. La structure des bandes d'énergie de SWNT utilisée est liée à l'enroulement du nanotube, la chiralité, pour aboutir à un nanotube semi-conducteur ou métallique. Le transport similaire des électrons et des trous est dû à la symétrie de la structure de bandes d'énergie. Ensuite, nous avons exposé quatre méthodes courantes de synthèse des nanotubes de carbone, particulièrement les SWNT, les méthodes CVD et HiPCO permettent de synthétiser des SWNT à l'échelle d'une production industrielle. Les procédés courants de séparation des nanotubes métalliques et semi-conducteurs ont été expliqués principalement pour fournir des SWNT semi-conducteurs homogènes pour les applications électroniques. A la fin du chapitre 2, les transistors à l'effet de champ basés sur les CNT sont brièvement présentés : les CNTFET conventionnels, les DG-CNTFET, les SB-CNTFET et les OG-CNTFET. Nous avons expliqué leur principe de fonctionnement, leur fabrication et leurs applications majeures associées.

Dans le troisième chapitre, la modélisation compacte physique et électrique du transistor à nanotube de carbone à modulation de hauteur de barrière aussi appelé C-CNTFET est décrite, le fonctionnement global de ce transistor, le calcul de la charge totale du nanotube et du courant sont présentés. A la fin du chapitre, des simulations et des interprétations des caractéristiques I-V sont détaillés. Il ressort que le nombre de sous bandes doit être augmenter dans les calculs

pour obtenir un courant convenable. Le courant I_{ds} est important pour les grands diamètres donc pour les faibles gaps et par conséquent, nous devons tenir compte du diamètre lors de la conception des circuits logiques à base de CNTFET.

Dans le quatrième chapitre nous avons expliqué tout d'abord le fonctionnement du transistor SB-CNTFET avec la mise en évidence de l'influence des barrières Schottky et des fonctions de transmissions associées. L'importance de ces barrières à l'interface nanotube/métal est argumentée selon les réalités technologiques telles que la nature du métal, l'épaisseur d'oxyde effective EOT, la longueur de la grille et le diamètre du nanotube de carbone.

Après avoir quantifié l'importance des barrières Schottky selon les paramètres technologiques, nous avons proposé une première approche de leur modélisation. Pour cela, la méthode Wentzel–Kramers–Brillouin "WKB" a été mise en œuvre en approximant la forme de la barrière de potentiel par une forme triangulaire.

Ensuite, le courant de drain est déterminé avec un calcul auto-cohérent du potentiel du canal. Comme, le régime balistique a été supposé, nous avons eu recours à l'équation de Landauer pour calculer le courant de drain. En effet, le courant I_{ds} est dégradé de façon exponentielle quand la hauteur de la barrière Schottky est plus élevée. Il faut choisir le diamètre du nanotube parce que les meilleures performances sont observées pour les plus grands diamètres des nanotubes ainsi que pour les plus faibles gaps. I_{ds} est plus grand pour les plus grands d_{tunnel} , pour les oxydes les plus mince et de haute permittivité diélectrique.

Les résultats obtenus seront utilisés dans le cadre des perspectives à ce travail dans les circuits logiques à base de ce composant. D'autre part, des études sont envisagées pour l'élaboration de ces transistors dans notre laboratoire en collaboration avec Mr Brahim Aissa de l'école polytechnique de Montréal Canada.

Références

- [1]: S. Iijima, Nature 354, 56 (1991).
- [2]: E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson, H. J. Dai, Nano Lett. 6, 96 (2006).
- [3]: Michael F. L. De Volder, Sameh H. Tawfick, Ray H. Baughman, A. John Hart*, Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications Michael, Science, vol 339, p 535-539 (1 Fevrier 2013).
- [4]: L. Xiao et al., Nano Lett. 8, 4539 (2008).
- [5]: E. C. Neyts, A. C. T. van Duin, A. Bogaerts, J. Am. Chem.Soc. 133, 17225 (2011).
- [6] : H. Liu, D. Nishide, T. Tanaka, H. Kataura, Nat. Commun. 2, 309 (2006).
- [7]: V. K. Sangwan, R. P. Ortiz, J. M. P. Alaboson, J. D. Emery, M. J. Bedzyk, L. J. Lauhon, T. J. Marks, M. C. Hersam, ACS Nano. 6, 7480 (2012).
- [8]: 2- Dong-Ming Sun, Chang Liu, Wen-Cai Ren, and Hui-Ming Cheng, small, Vol.9, No. 8, p 1188–1205 (2013).
- [9] : K. L. Jiang, Q. Q. Li, S. S. Fan, Nature. 419, 801 (2002).
- [10] : H. G. Chae, Y. H. Choi, M. L. Minus, S. Kumar, Compo Sci. Technol. 69, 406 (2009).
- [11] : A. Beigbeder et al., Biofouling. 24, 291 (2008).
- [12] : A. D. Franklin et al., Nano Lett. 12, 758 (2012).
- [13] : M. C. LeMieux et al., Science. 321, 101 (2008).
- [14] : T. Rueckes et al., Science. 289, 94 (2000).
- [15]: E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson, H. Dai, Nano Lett. 6, 96 (2006).
- [16]: Steve Park, Michael Vosguerichian and Zhenan Bao, Nanoscale, 5, 1727, (2013).
- [17]: Q. Cao, S. H. Hur, Z. T. Zhu, Y. Sun, C. Wang, M. A. Meitl, M. Shim, J. A. Rogers, Adv. Mater. 18, 304 (2006) .
- [18]: V. K. Sangwan, A. Southard, T. L. Moore, V. W. Ballarotto, D. R. Hines, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, Microelectron. Eng. 88, 3150 (2011).
- [19]: S. Aikawa, E. Einarsson, T. Thurakitserree, S. Chiashi, E. Nishikawa, S. Maruyama, Appl. Phys. Lett. 100, 063502 (2012).
- [20]: S. K. Lee, B. J. Kim, H. Jang, S. C. Yoon, C. Lee, B. H. Hong, J. A. Rogers, J. H. Cho, J. H. Ahn, Nano. Lett. 11, 4642 (2011).

- [21]: S. K. Lee, H. Y. Jang, S. Jang, E. Choi, B. H. Hong, J. Lee, S. Park, J. H. Ahn, *Nano Lett.* 12, 3472 (2012).
- [22]: T. Y. Kim, H. Kim, S.W. Kwon, Y. Kim, W. K. Park, D. H. Yoon, A. R. Jang, H. S. Shin, K. S. Suh, W. S. Yang, *Nano Lett.* 12, 743 (2012).
- [23]: B. J. Kim, S. K. Lee, M. S. Kang, J. H. Ahn, J. H. Cho, *ACS Nano.* 6, 8646 (2012).
- [24]: S. Lee, K. Lee, C. H. Liu, G. S. Kulkarni, Z. Zhong, *Nat. Commun.* 3, 1018 (2012).
- [25]: J. U. Park, S. W. Nam, M. S. Lee, C. M. Lieber, *Nat. Mater.* 11, 120 (2012).
- [26]: S. Jang, H. Jang, Y. Lee, D. Suh, S. Baik, B. H. Hong, J. H. Ahn, *Nanotechnol.* 21, 425201 (2010).
- [27]: W. J. Yu, S. Y. Lee, S. H. Chae, D. Perello, G. H. Han, M. Yun, Y. H. Lee, *Nano Lett.* 11, 1344 (2010).
- [28]: J.P. CLEUZIOU, thèse d'état, Université Toulouse III-Paul Sabatier U.F.R P.C.A., (2007).
- [29]: A. B. Kaul et P. R. Bandaru, California Institute of Technology, (2010).
- [30]: Lévy R., Nguyen T.K.T., Doty R.C., Hussain I., Nichols R.J., Schirin D.J., Bust M., Fernig D.G., *American Chemical Society* 126, 10076-10084 (2004).
- [31]: Naik R.R., Brott L.L., Clarson S.J., Stone M.O, *Science and Nanotechnology*, 2, 95-100 (2002).
- [32]: Wang S., Humphreys E.S., Chung S.Y., Delduco D.F., Lustig S.R., Wang H., Parker K.N., Rizzo N.W., Subramoney S., Chiang Y.M., Jagota A., *Nature Materials*, 2 196 (2003).
- [33]: Reed M.A. and Lee T., *American Scientific Publishers*, (2003).
- [34]: Si-Yu LIAO, thèse d'état, université de Bordeaux 1, (2011).
- [35]: Hermane MBITSI, thèse d'état, université d'Orléans, (2010).
- [36]: Y. L. Kim et al., *ACS Nano*, vol. 3, no. 9, pp. 2818-2826, 2009.
- [37]: W. Fu, L. Liu, K. Jiang, Q. Li, and S. Fan, *Carbon*, vol. 48, no. 7, pp. 1876-1879, Jun. 2010.
- [38]: J. GOGUET, thèse d'état, université Bordeaux 1, (2008).
- [39]: Alexandre Zahy RASLAN, thèse d'état, université Grenoble 1, (2009).
- [40]: Nikolaev P., Bronikowski M.J., Kelley Bradley R., Rohmund F., Colbert D.T., Smith K.A. et Smalley R.E. *CPL*, 313 :91-97 (2005).
- [41]: S. Frank, P. Poncharal, Z.L. Wang, and W.A de Heer. *Science*, 280 :1744, (1998).
- [42]: Z. Yao, C. Dekker et P. Avouris : *Top. Appl. Phys.*, 80, 147–171, (2001).
- [43]: A. Naeemi, G. Huang, J.D. Meindl, *ECTC '07. Proceedings. 57th*, pp. 420–428, (2007)
- [44]: T.W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. Hiura et al., *Nature*, 382, 54 (1996).
- [45]: Y. Sun et al., *Electronic Materials* 37 (2008).

- [46] : J. Che et al. *Nanotechnology*, 11 :65, (2000).
- [47] : J.P. Small et al. *Solid State Communications*, 127 :181, (2003).
- [48] : M. Fujii et al. *Physical Review Letters*, 95, 065502, (2005).
- [49] : J. Hone et al. *Applied Physics Letters*, 77 :666, (2000).
- [50] : D.J. Yang et al. *Physical Review B*, 66:1654401, (2002).
- [51] : W. Yi et al. *Physical Review B*, 59 :9015, (1999).
- [52] : D.J. Yang et al. *Physical Review B*, 66:1654401, (2002).
- [53] : P. Kim et al. *Physical Review Letters*, 87 :2155021, (2001).
- [54] : J.P. Lu. *Physical Review Letters*, 79 :1297, (1997).
- [55] : E. Hernandez et al. *Physical Review Letters*, 80 :4502, (1998).
- [56] : A. Krishnan et al. *Physical Review B*, 58(20) :14013, (1998).
- [57] : M.M. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson. *Nature* 678, 381, (1996).
- [58] : M.4F. Yu et al. *Physical Review Letters*, 84(24) :5552, (2000).
- [59] : Hirsch A. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 41, No. 11,(2002).
- [60] : Zu4Po Yang, Lijie Ci, James A. Bur, Shawn4Yu Lin, and Pulickel M. Ajayan; *Nano Lett.*, Vol. 8, No. 2, (2008).
- [61] : W. S. Su, T. C. Leung, et C. T. Chan, *Physical Review B*, vol. 76, no. 23, p. 235413, déc. (2007).
- [62] : D. F. Holcomb, *Am. J. Phys.* 67, 278, (1999).
- [63] : M. S. Purewal, et al., *Phys. Rev. Lett.* 98, 186808, (2007).
- [64] : S. Heinze, J. Tersoff, R. Martel, V. Derycke, J. Appenzeller et P. Avouris, *Physical Review Letters*, vol. 89, no. 10, no. 106801, pp. 106801-1-106801-4, (2002).
- [65] : Y. M. Lin, J. Appenzeller, J. Knoch et P. Avouris, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 4, no. 5, pp. 481-489, (2005).
- [66] : A. Javey, R. Tu, D. B. Farmer, J. Guo, R. G. Gordon et H. Dai, *Nano Letters*, vol. 5, no. 2, pp. 345-348, (2005).
- [67] : J. Borghetti, V. Derycke, S. Lenfant, P. Chenevier, A. Filoramo, M. Goffman, D. Vuillaume et J.-P. Bourgoin, *Advanced Materials*, vol. 18, no. 19, pp. 2535-2540, (2006).
- [68] : S.-Y. Liao, C. Maneux, S. Frégonèse et T. Zimmer, *JNTE 08*, Toulouse, France, 19-21 novembre, (2008).
- [69] : A. Javey, J. Guo, D. B. Farmer, Q. Wang, D. Wang, R. G. Gordon, M. Lundstrom et H. Dai, *Nano Letters*, vol. 4, no. 3, pp. 447-450, (2004).
- [70] : S. Datta, *Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering*, vol. 3 Cambridge University Press, (1997).

- [71] : J. Guo, M. Lundstrom et S. Datta, *Applied Physics Letters*, vol. 80, p. 3192-3194, 2002.
- [72] : J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley et C. Dekker, *Nature*, vol. 391, p. 59-62, (1998).
- [73] : P. Avouris, R. Martel, V. Derycke et J. Appenzeller, « Carbon Nanotube Transistors and Logic Circuits », *Physica B*, vol. 323, p. 6-14, (2002).
- [74] : A. Raychowdhury, S. Mukhopadhyay et K. Roy, *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 23, no. 10, p. 1411-1420, (2004).
- [75] : D. K. Ferry et S. M. Goodnick, Cambridge University Press, vol.6, (1997).
- [76] : M. Lundstrom, vol. X, Addison-Wesley Publishing Company, (1992).
- [77]: R. Marki and C. Azizi, the 2nd SIEPCPC at KACST, Riad, Kingdom of Saudia Arabia, 27th - 30th April (2013).
- [78]: R. Marki and C. Azizi and M. Zaabat, NMCA ,Oum El Bouagui, Ageria, May 23rd-25th (2011).
- [78]: R. Marki and C. Azizi, CINA, Skikda, Algeria, 05- 06 of December, (2012).
- [79] : M. Freitag, J. C. Tsang, A. Bol, D. Yuan, J. Liu, et P. Avouris, *Nano Letters*, vol. 7, no. 7, p. 2037-2042, Aug, (2009).
- [80] : S. Datta, Cambridge University Press, 1997.
- [81] : S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, 1995.
- [82] : D. Jiménez, X. Cartoixà, E. Miranda, J. Suñé, F.A. Chaves, et S. Roche, *Nanotechnology*, vol. 18, 2007, p. 025201.
- [83] : A.A. Odintsov, *Physical Review Letters*, vol. 85, Juillet. 2000, p. 150.
- [84] : D. Jiménez, X. Cartoixà, E. Miranda, J. Suñé, F. Chaves, et S. Roche, *Computational Electronics*, vol. 5, Déc. 2006, p. 361-364.
- [85] : D.K. Ferry, S.M. Goodnick, et J. Bird, Cambridge University Press, (2009).
- [86] : M. NAJARI, thèse d'état, université de Bordeaux 1, (2010).
- [87] : R. Yan, A. Ourmazd, et K. Lee, *Electron Devices*, *IEEE Transactions on*, vol. 39, (1992).
- [88] : R. Marki and C. Azizi, *Int. J. Nanoparticles*, Vol. 6, Nos. 2/3, (2013).
- [89] : J. Knoch and J. Appenzeller, "Tunneling phenomena in carbon nanotube field-effect transistors," *physica status solidi (a)*, vol. 205, no. 4, pp. 679-694, (2008).
- [90] : D. Lu, Y. Li, U. Ravaioli, and K. Schulten, *Physical Chemistry B*, vol. 109, no. 23, pp. 11461-11467, Jun. (2005).
- [91] : G. Pennington and N. Goldsman, *Physical Review B*, vol. 68, no. 4, p.045426, Jul. 2003.
- [92]: R. Marki and C. Azizi, CINA, Skikda, Algeria, 05- 06 December, (2012).

[93]: R. Marki and C. Azizi, BIAMS11, Annaba, Algeria , 25- 28 June, (2012).

[94]: R. Marki and C. Azizi, SIPE 11, Béchar, Algeria, 16- 17 January, (2013).

Résumé :

La réduction progressive des dimensions des transistors selon la loi de Moore constitue le principal stimulant à l'intégration de circuits de plus en plus complexes; en effet, les dimensions étant réduites, la vitesse de fonctionnement d'un circuit augmente ainsi que la densité d'intégration.

Durant cette dernière décennie, Le marché des télécommunications, du multimédia, de l'automobile, de l'avionique et d'autres applications sécurisées continue à croître à un rythme soutenu avec l'apparition d'applications diverses et complexes qui réclament une puissance de calcul de plus en plus importante tout en ayant un niveau de fiabilité et de sécurité de plus en plus élevé. L'augmentation de la densité d'intégration et l'amélioration des performances sont rendues possibles par la diminution de la taille des transistors à effet de champ qui constituent un élément de choix pour la génération des fonctions de base.

C'est dans ce cadre que se situent les travaux de doctorat par une description physique et fonctionnelle des nanotransistors à effet de champ. Ensuite les différents phénomènes physiques qui régissent son fonctionnement seront détaillés ainsi que les effets dispersifs qui limitent ses performances.

Mots clés : CNT, modélisation, CNTFET.

Abstract :

In this paper, one of the most promising electron devices – carbon nanotube field effect transistor (CNT FET) is investigated. At the beginning, the carbon nanotube properties are presented. The main contribution of this paper is the new analytical model of CNT FET current – voltage characteristics. Developed model describes behavior of CNTFET in very good manner and, at the same time, the model is relatively simple. Using the developed model, simulations were performed. The results obtained by using two models are in very good agreement with already known and published ones.

Keywords: Compact modeling, CNTFET, CNT.

الملخص:

أنابيب الكربون هي أشد قساوة من الفولاذ، لكن الاستخدامات الأكثر أهمية لهذه الجزيئات الماكروية الشبيهة بالخيوط قد تكون في الأدوات الإلكترونية الأسرع والأكثر كفاءة وتحملًا. ومنذ عهد قريب أصبحت هذه الأنابيب موضوعًا للمجالات الهندسية أيضًا. إن العديد من الصفات الاستثنائية التي تنسب إلى الأنابيب النانوية - ومن بينها الرجوعية *eresilienc* المفرطة،

ومقاومة الشد strength tensile والاستقرارية الحرارية - وقرت تنبؤات رائعة للإنسالات الميكروية (الروبوتات الصغيرة) robots microscopic، ولأجسام السيارات المقاومة للتشوه عند الصدمات، وللأبنية المقاومة للزلازل. لكن أول المنتجات استخداماً للأنابيب النانوية لم يستغل أيًا من هذه الصفات، فأوائل التطبيقات كانت كهربائية. إن بعضًا من سيارات الشركة جنرال موتورز تحتوي حاليًا على قطع من البلاستيك أضيفت إليها أنابيب نانوية. يمكن لهذا البلاستيك أن يُكهرب أثناء الطلاء مما يجعل الطلاء يلتصق بسهولة ويسر. كما أن هناك منتجين للإضاءة والعرض مبنين على الأنابيب النانوية في طريقتيها إلى السوق.

ربما تستفيد التطبيقات الأكثر أهمية، على المدى البعيد، من مزايا أخرى من الخواص الإلكترونية الفريدة للأنابيب النانوية. فأنابيب الكربون النانوية تستطيع، من حيث المبدأ، أن تقوم بالدور نفسه الذي يقوم به السيليكون في الدارات الإلكترونية، إنما على مقياس جزيئي حيث يتوقف السيليكون وأشبه الموصلات الأخرى عن العمل. فإن المهندسين يواجهون عقبات كبيرة في الاستمرار. وخلال هذا العقد، ستبدأ المواد والسيرورات التي أقيمت عليها ثورة الحواسيب في مواجهة الحدود الفيزيائية الأساسية. ولا تزال هناك حوافز اقتصادية كبيرة لتقليص حجم الأدوات أكثر فأكثر، لأن سرعة أدوات الإلكترونيات الميكروية وكثافتها وكفاءتها ترتفع كلها بسرعة بتناقص حجم شكلها الأصغري. لقد أعطت التجارب في السنوات العديدة الماضية الباحثين أملاً بأنه يمكن صنع الأسلاك والأدوات الفعالة التي لا تتجاوز أبعادها عشرات النانومترات أو أقل من ذلك من الأنابيب النانوية، ودمجها في الدارات الإلكترونية التي تعمل عندئذ بسرعة أكبر كثيرًا وتستهلك طاقة أقل بكثير من تلك الأدوات الموجودة حاليًا.

الكلمات المفتاحية

CNTFET, CNT, النمذجة