

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DE CONSTANTINE 1
FACULTE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
Département d'Electronique

N° d'ordre :.....
Série :.....

THÈSE

Présenté pour obtenir le grade de
Doctorat en Science

Option
Electronique

Par

Mr : MOUATSI Abdelmalek

THÈME

**COMPOSANTS À HÉTÉROSTRUCTURE :
APPLICATION EN NANOÉLECTRONIQUE ET
NANOPHOTONIQUE**

Soutenu le : 03/ 10/2013

Devant le jury composé de:

<u>Président:</u>	-CHAABI Abdelhafid	Prof. à l'Université de Constantine 1
<u>Rapporteur:</u>	-MARIR –BENABBAS Mimia	Prof. à l'Université de Constantine 1
<u>Examineurs:</u>	-GUERGOURI Kamel	Prof. à l'Université d'Oum El-Bouaghi
	-KERROUR Fouad	M.C. à l'Université de Constantine 1
	-HOCINI Abdesselam	M.C. à l'Université de M'sila

Remerciements

*Ce travail a été effectué au laboratoire de Modélisation des Dispositifs à Energie Renouvelable et Nanométrie (MoDERNa), Département d'Electronique, Faculté des Sciences de l'Ingénieur de l'Université de Constantine 1 sous la direction du Professeur **Marir-Benabbas M.** que je remercie vivement pour son accueil et son encadrement.*

A aucun moment, elle n'a cessé de me soutenir je lui exprime ma profonde gratitude pour sa disponibilité, ses compétences, ses qualités humaines, ses conseils et critiques constructifs ont permis la réussite de ce travail. Je la remercie chaleureusement et amicalement. J'ai été très touché par la confiance qu'elle m'a témoignée tout au long de ce travail, en espérant être à la hauteur.

Je tiens également à remercier toutes les personnes qui m'ont fait l'honneur d'accepter de participer à mon jury de soutenance :

*A Monsieur **CHAABI Abdelhafid** Professeur au Département d'Électronique, de l'Université de Constantine 1, qui me fait l'honneur de présider le jury de cette thèse. Je le remercie pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail.*

*J'adresse mes très sincères remerciements à Monsieur **GUERGOURI Kamel** Professeur du Département de Physique, de l'Université d'Oum El-Bouaghi, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de faire partie de ce Jury. Il m'est aussi autant agréable de lui présenter mon profond respect et lui exprimer toute ma reconnaissance.*

*A Monsieur **HOCINI Abdesselam** Maître de Conférence au Département d'Électronique, de l'Université de M'sila, pour l'intérêt qu'il a témoigné à ce travail en acceptant de faire partie de ce Jury. Qu'il trouve ici toute ma reconnaissance et ma gratitude*

*A Monsieur **KERROUR Fouad** Maître de Conférences au Département d'Électronique, de l'Université de Constantine 1, chef d'équipe du laboratoire MoDERNa, pour m'avoir honoré en acceptant d'être membre de jury.*

Je ne pourrais terminer sans avoir à remercier particulièrement mes collègues du laboratoire ainsi que tous ceux ou celles qui m'ont apportés leur soutien.

SOMMAIRE

SOMMAIRE

INTRODUCTION GÉNÉRALE	1
-----------------------------	---

CHAPITRE I

LE NANOTUBE DE CARBONE

I.1. Introduction	4
I.2. Le carbone	5
I.3. Les formes classiques du Carbone	5
I.3.1. Graphite.....	5
I.3.2. Diamant.....	6
I.4. Les nouvelles formes du carbone	7
I.4.1. Graphene.....	7
I.4.2. Fullerènes.....	8
I.5. Les nanotubes de carbone	9
I.5.1. Structure géométrique.....	9
I.5.2. Les nanotubes multi -parois.....	10
I.5.3. Les nanotubes mono paroi.....	11
I.5.3.1. Zone de Brillouin du nanotube	15
I.5.3. Nanotube de carbones semi-conducteurs et métalliques.....	17
I.6. Méthodes de synthèse	17
I.6.1. Méthode de l'arc électrique.....	18
I.6.2. Ablation laser	18
I.6.3. Le dépôt chimique en phase vapeur CVD.....	19
I.6.4. Catalytique en phase gazeuse HiPCO (High-Pressure carbon monoxide).....	20
I.7. Les Propriétés des Nanotubes	21
I.7.1. Propriétés physiques.....	21
I.7.2. Propriétés électriques.....	21
I.7.4. Propriétés mécaniques	22

I.7.5. Propriétés thermiques.....	23
I.7.6. Propriétés optiques	24
I.7.7. Propriétés chimiques.....	25
I.8. Les Applications de nanotube de carbone	25
I.8.1. Transistor à effet de champ.....	26
I.8.2. Source d'émission par effet de champ.....	27
I.8.3. Autre application électronique	28
I.9. Conclusion.....	29

CHAPITRE II

GENERALITES SUR LES TRANSISTORS A EFFET DE CHAMP A BASE DE NANOTUBE DE CARBONE

II.1. Introduction	31
II.2. Les transistors FET à base de nanotubes de carbone (CNTFET)	31
II.3. Pourquoi choisir le nanotube de carbone?.....	34
II.4. Différents types de CNTFET.....	34
II.4.1. Le transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNTFET).....	35
II.4.2. Transistor à effet de champ double grilles (DG-CNTFET)	36
II.4.3 Transistor à barrière Schottky (SB-CNTFET)	38
II.4.4 Transistor à effet de champ commandé optiquement (OG-CNTFET)	39
II.5. Comparaison entre les dispositifs	39
II.6. Géométries de CNTFET.....	40
II.6.1. CNTFET an arrière-grille.....	40
II.6.2. CNTFET a grille supérieure.....	41
II.6.3. CNTFET Vertical	42
II.7. Paramètres physiques du CNTFET	44
II.7.1. Capacité de grille.....	44
II.7.2. Energie de bande interdite (Eg).....	45
II.7.3. Transport balistique	46
II.7.4. Mobilité importante	49
II.8. Comparaison entre le CNTFET et le MOSFET.....	48
II.9. Conclusion	49

CHAPITRE III

MODELISATION DE TRANSISTORS A BASE DE NANOTUBE DE CARBONE (CNTFET)

III.1. Introduction	51
III.2. Propriétés électroniques et structures des bandes d'énergies	52
III.3. Méthode de calcul de la structure de Bande	54
III.3.1. Généralités	54
III.3.1.1. Méthodes « ab-initio »	54
III.3.1.2. Méthodes semi-empiriques	55
III.3.2. Méthode de « Zone- folding » pour calculer la structure de bande du nanotube	55
III.3.2.1. Principes	55
III.3.2.2. La dispersion électronique E(k)	57
III.4. Modélisation physique du CNTFET	58
III.4.1. Cas unidimensionnel avec la statistique de Fermi-Dirac	61
III.4.2. Cas bidimensionnel 2D	64
III.5. Equation de courant de drain I_{ds}	66
III.6. Conclusion	71

CHAPITRE IV

RÉSULTATS ET DISCUSSION

IV.1. Introduction	73
IV.2. Simulation de la structure de bande (Dispersion électronique E(k))	73
IV.3. Modélisation et simulation de la Densité d'états (DOS)	76
IV.4. Simulation du courant de drain I(V)	77
IV.5. Simulation de la densité de charge	80
IV.6. Effet du diamètre de carbone nanotube (CNT)	81
IV.6.1. Effet du diamètre sur la dispersion électronique E(k)	81
IV.6.2. Effet du diamètre sur les courbes I-V	83
IV.7. Effet des sous bandes de nanotube du carbone (CNT)	84

IV.7.1. Effet des sous bandes sur la densité d'états (DOS).....	84
IV.7.2. Effet des sous bandes sur les courbes I-V.....	85
IV.7.3. Effet des sous bande sur les courbes I-V pour des diamètres différents.....	86
IV.8. Effet de la qualité d'oxyde sur les courbe I-V.....	88
IV.9. Validation des résultats de simulation.....	90
IV.10. Effet de la température sur l'énergie de gap (Eg).....	94
IV.11. Conclusion.....	95
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVE.....	97
PUBLICATIONS.....	99
BIBLIOGRAPHIE	100
LISTE DES FIGURES ET TABLEAUX	109

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GENERALE

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

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

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

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

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

Les nanotubes de carbone sont donc des composants élémentaires idéaux pour la réalisation de nano-dispositifs mécaniques, électroniques ou électromécaniques. Selon leur structure, les nanotubes de carbone (C NT) ont notamment la possibilité de pouvoir être semi-conducteurs ou métalliques. Cette propriété unique fait du nanotube de carbone un candidat intéressant pour la fabrication d'un nouveau composant électronique à base de nanotubes, le CNTFET (Carbon NanoTube Field Effect Transistor) [4].

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

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

Pour décrire le fonctionnement du transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone « CNTFET » et comprendre certains problèmes délicats liés aux variations de ses propriétés électroniques, nous avons développé un modèle analytique qui calcule la densité de charge, nous avons également simulé la dispersion de l'énergie pour différentes sous bandes qui est basée sur la méthode du « zone folding » et étudié leur effet (l'énergie des sous bandes) sur les propriétés électriques pour différents diamètres du CNT.

Pour ce faire, la synthèse de ce travail est présentée dans quatre chapitres :

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

✓ *Le chapitre II* concerne l'application la plus importante du CNT comme transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone dit CNTFET, ou nous essayerons de comprendre le principe de fonctionnement de plusieurs types de CNTFET et leurs caractéristiques physiques, ainsi que les différentes géométries possibles suivant la structure de grille. Nous terminons cette partie par une comparaison entre les caractéristiques du CNTFET et du MOSFET.

✓ *Le chapitre III* présente la structure de bandes d'un CNT et les méthodes de calcul de structures des bandes d'énergies, puis nous avons détaillé la méthode de « Zone folding » pour déterminer la dispersion d'énergie d'un nanotube de carbone de type zigzag dans le but d'avoir une formule avec les paramètres de sous bandes. Nous présentons ensuite le modèle que nous avons élaboré et qui consiste à calculer la densité de charge du nanotube de carbone pour le calcul du courant de drain.

✓ *Le chapitre IV* présente et discute les divers résultats obtenus par modélisation numérique dans le cadre de cette recherche. Une explication détaillée est donnée en commençant par la simulation de la structure de bande CNT et la modélisation du courant de drain dans le CNTFET.

Enfin, ce mémoire se termine par une conclusion générale qui récapitule l'ensemble des hypothèses adoptées et les résultats significatifs obtenus au cours de cette étude.

CHAPITRE I

*LE NANOTUBE DE
CARBONE*

CHAPITRE I: Le Nanotube de Carbone

I.1. Introduction

Le carbone est un vieux mais nouveau matériel. Il a été employé pendant des siècles allant du présent jusqu'à l'antiquité, mais pourtant beaucoup de nouvelles formes cristallines de carbone tout récemment ont été expérimentalement découvertes dans les dernières décennies [4].

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

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

I.2. Le carbone

Le quatrième élément le plus abondant dans notre système solaire, après l'hydrogène, l'hélium et l'oxygène, le carbone possède la particularité d'exister sous différentes structures physiques (polymorphisme) appelées allotropies. Il fut accepté pendant une longue période que cette famille de composés de carbone ne comportait que deux membres, le diamant et le graphite, auxquels d'autres structures, plus exotiques et issues de l'intervention humaine, pouvaient être assimilées [9]. Le carbone ($Z=6$) possède quatre électrons de valence et présente une structure électronique $1s^2 2s^2 2p^2$. Les liaisons chimiques que forme le carbone, tant dans ses allotropies que dans les molécules qu'il peut former avec d'autres éléments, ne peuvent être représentées, dans le modèle de l'électron localisé, que par l'incorporation du concept d'orbitales hybrides, issues du mélange d'orbitales atomiques [8-10]

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

Tableau I.1. Propriétés des différents types de liaison carbone-carbone [9].

I.3. Les formes classiques du Carbone.

I.3.1. Graphite

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

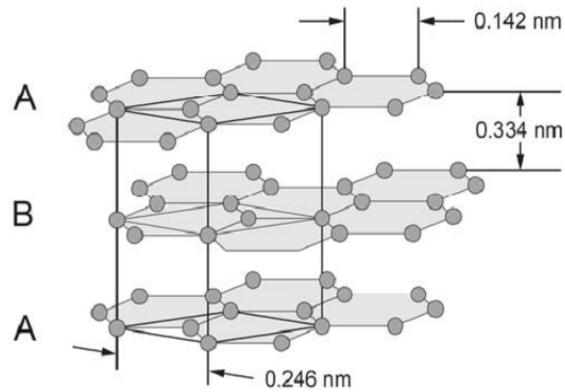


Figure I.1. Structure du graphite hexagonal [10,11]

Les liaisons au sein des plans sont covalentes, tandis que les liaisons inter-planaires sont de type Van der Waals, donc faibles. C'est pourquoi le graphite est facile à feuiller, et c'est le carbone tétravalent, les quatre électrons de valence se répartissant dans les orbitales s^2 et p^2 , dont les énergies sont assez proches [10-12]. Dans sa structure hexagonale, il n'est pas lié de manière covalente qu'à trois voisins. Les orbitales moléculaires de ces liaisons sont de type sp^2 , c'est-à-dire que chaque électron lié se trouve dans un état combiné une orbitale atomique s^2 et deux orbitales p^2 . Le quatrième électron de valence, initialement dans l'orbitale atomique p_z^2 qui est orthogonale aux plans graphitiques, forme alors des liaisons faiblement localisées avec ses voisins du même plan. Ce dernier électron peut donc participer à la conduction électrique du graphite [8,12].

I.3.2. Le Diamant

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

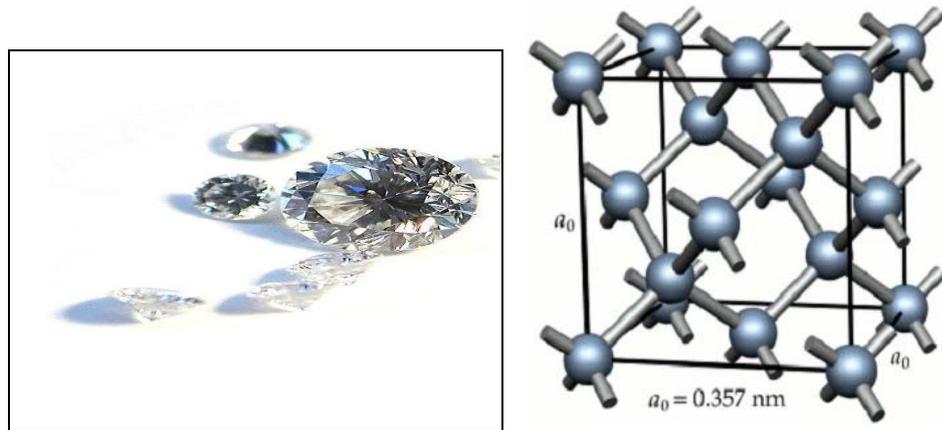


Figure I.2. Structure du diamant [10,13]

Chaque atome est lié à quatre voisins par des liaisons hybridées sp^3 . Contrairement au cas du graphite, tous les électrons de valence sont impliqués dans des liaisons covalentes, donc le diamant est isolant électriquement. En revanche, c'est le meilleur conducteur thermique connu, avec une conductivité thermique cinq fois supérieure à celle du cuivre [8,10]. Grâce à sa structure et à ce type de liaison chimique, le diamant est aussi le matériau le plus dur que l'on connaisse. C'est pourquoi il est utilisé dans de nombreuses applications comme le polissage ou le découpage.

I.4. Les nouvelles formes du carbone

I.4.1. Le Graphène

Le graphène est le nom que l'on donne à un plan de graphite lorsqu'il est isolé. Il possède donc également une structure hexagonale avec des liaisons de type sp^2 . Le graphène est à mi-chemin entre le graphite et le nanotube. Jusqu'à récemment, il était seulement un objet théorique, permettant notamment de modéliser les propriétés des nanotubes. Depuis quelques années, des techniques expérimentales permettant de l'isoler ont été mises au point et l'étude expérimentale est devenue possible [4, 11,13]. Il est ainsi, depuis quelques années, l'objet d'un intérêt croissant. Le graphène peut être considéré comme un matériau bidimensionnel (2D) parfait, puisqu'il n'est constitué que d'une seule couche d'atomes [8,10].

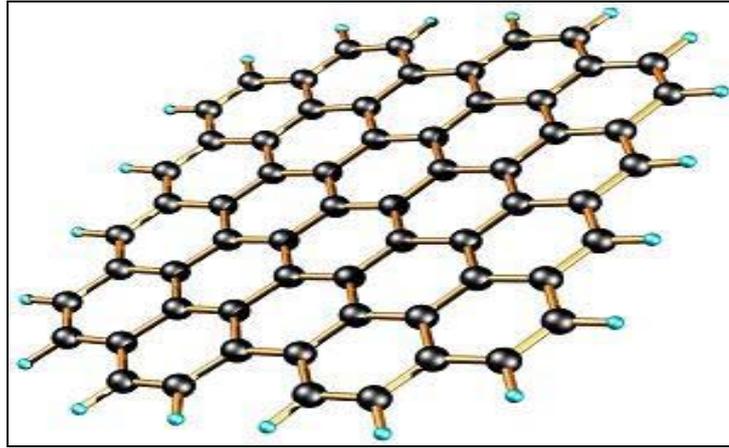


Figure I.3. Structure de graphène [4,8].

I.4.2. Fullerènes.

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

Le plus couramment étudié est le fullerène C_{60} , composé de plus de 60 atomes de carbone, 20 hexagones et 12 pentagones, tel un ballon de football (Figure I.4). Dans ces structures, chaque atome a trois voisins comme dans le cas du graphite, mais du fait de la courbure, les liaisons ne sont pas purement de type sp^2 . Elles sont en fait un mélange sp^2 et sp^3 . Grâce à leur symétrie, les fullerènes C_{60} ont un module d'incompressibilité supérieur à celui du diamant [8,11].

Avec les fullerènes, on entre dans le domaine des nanomatériaux, puisque leur taille est de l'ordre de quelques nanomètres à plusieurs dizaines de nanomètres. C'est aussi la porte d'entrée du carbone dans la physique mésoscopique, puisqu'il s'agit d'un matériau de faible dimension.

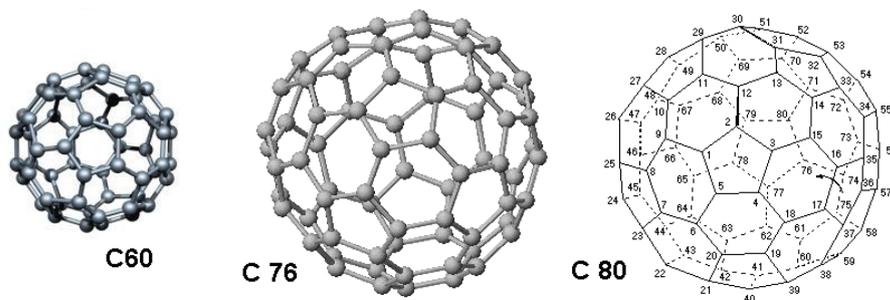


Figure I.4. Le fullerène C_{60} possède 60 atomes de carbones et le C_{76} possède 16 atomes de carbone supplémentaires [10,11].

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

I.5. Les nanotubes de carbone

I.5.1. Structure géométrique

Les nanotubes de carbone (CNT) est une des nouvelles formes du carbone ce qui les rapproche des autres matériaux du carbone tels que le graphène. Cependant, ils ont une structure très particulière, qu'on ne peut obtenir que dans des conditions de synthèses bien précises.

Structurellement, un nanotube de carbone CNT (Carbon NanoTube), est composé d'un ou plusieurs feuillets de graphène enroulé sur lui même, décrivant une géométrie tubulaire (figure I.5.). Ainsi, de la structure 2D (bidimensionnelle) du feuillet de graphène, on obtient un CNT avec une structure cylindrique unidimensionnelle (1D) dont le diamètre est de l'ordre du nanomètre [8,11].

La courbure des plans de graphène constitutifs des CNT induit une modification partielle de l'hybridation des liaisons C-C. Plus la courbure du tube sera importante, et donc le diamètre petit, plus l'hybridation sp^2 sera altérée. En sera en présence donc du caractère sp^3 partiel des liaisons constitutives des parois de CNT [46].

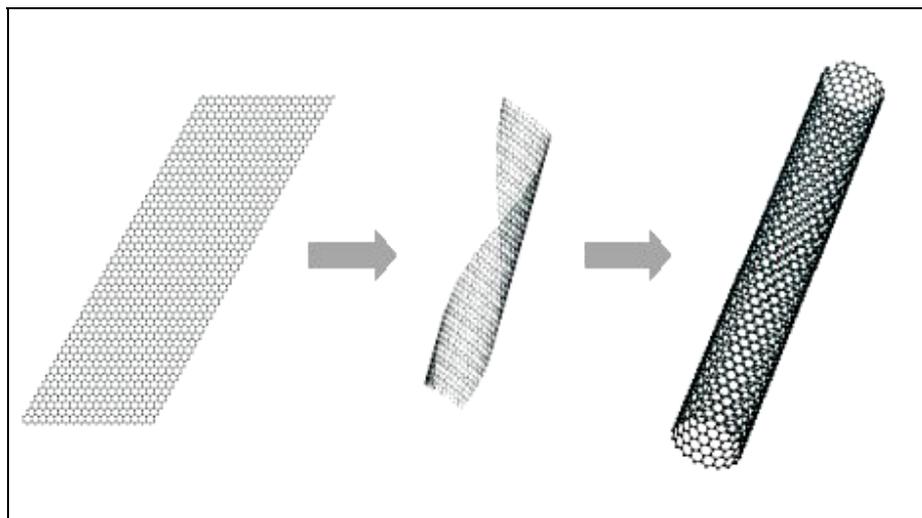


Figure I.5. Structure d'un nanotube de carbone [11].

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

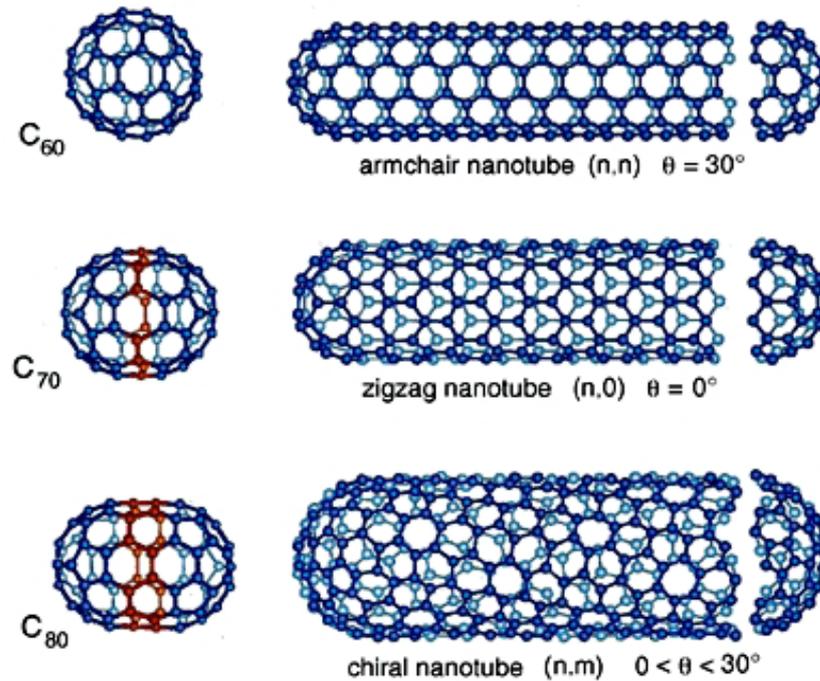


Figure I.6. Structure d'un nanotube de carbone avec Différents fullerènes [10,39].

Si le CNT est constitué d'un seul feuillet de graphène, on parle de nanotube mono-feuillet (SWNT, pour Single Wall NanoTube ou nanotube mono paroi), et s'il est constitué de plusieurs couches, on parle de nanotubes multi-parois (MWNT, pour Multi Wall NanoTubes ou nanotubes multi-feuillets) [15,16].

I.5.2. Les nanotubes multi parois (MWNT)

Lorsque deux parois ou plus forment le tube, on parle de nanotube multi-feuillets (MWNT pour "Multi-Walled NanoTube"). Ces nanotubes multi-feuillets(ou multi-parois) sont constitués d'un arrangement concentrique de feuilles de graphène, repliées sur elles-mêmes de manière à former des cylindres (FigureI.7). L'espacement entre les parois d'une telle structure est d'environ 0.34 nm. Le diamètre du plus petit tube interne détermine la taille du canal central du nanotube. Le diamètre interne d'un nanotube multi-feuillets est de l'ordre de 1-3 nanomètres, tandis que le diamètre externe est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres [16-18].

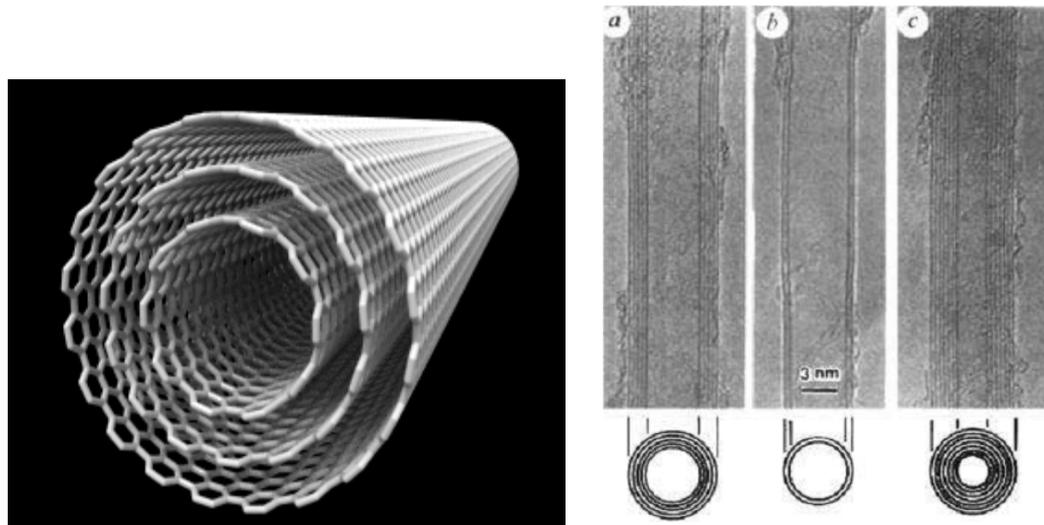


Figure I.7. Structure de MWCNT sous forme concentriques [4, 5,17].

Les nanotubes de carbones multi-feuillets peuvent présenter deux configurations différentes. La première configuration, décrivant un nanotube multi-feuillet parfait, est basée sur un emboîtement de tubes concentriques dit en « poupées russes » (figure I.7). La seconde configuration est basée sur l'enroulement en spirale d'un unique feuillet de graphène (figure I.8) [15,21].

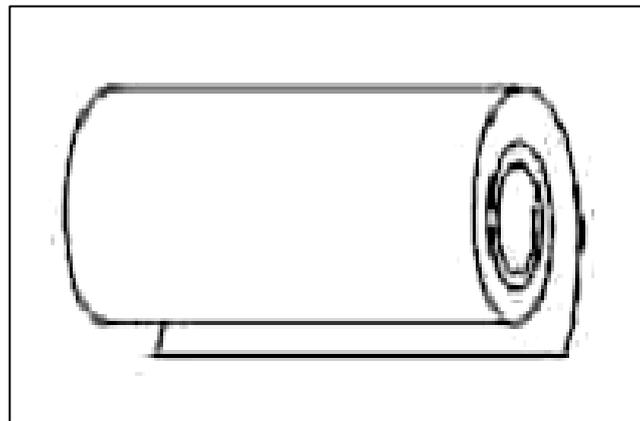


Figure I.8. Nanotubes multi-feuillets sous forme spirale [15-21].

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

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

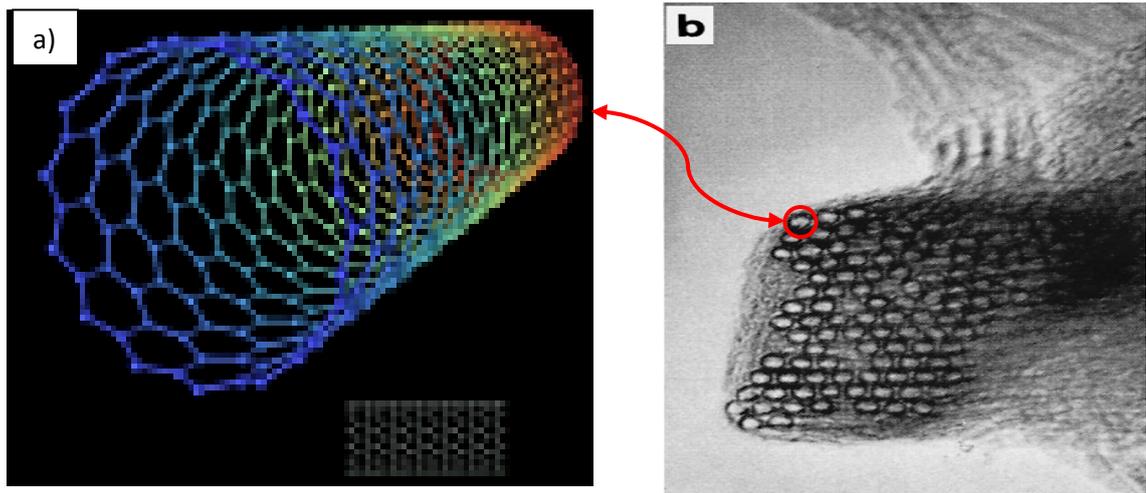


Figure I.9. Structure d'un nanotube de carbone : a) SWCNT structure, b) images TEM du fagot de nanotube de carbone [4,6,15].

La structure de ce nanotube SWCNT est déterminée par le couple de nombres entiers (n, m) définissant un vecteur caractéristique de l'enroulement appelé vecteur de chiralité \vec{c}_n [15,16].

Le vecteur chiral correspond à une section de nanotube perpendiculaire à l'axe du tube. Dans la Figure I.10, le treillis déroulé hexagonal du nanotube est représentée, dans laquelle OB est la direction de l'axe de nanotubes, et OA correspond au vecteur chiral, \vec{c}_n [17,18,20]:

$$\vec{c}_n = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (I.1)$$

En tenant compte de l'un des sites cristallographiquement équivalent O, A, B et B', et en faisant rouler la feuille en nid d'abeilles de sorte que les points O et A coïncident (et les points B et B' coïncident), un modèle de document de nanotube de carbone peut être construit. Le vecteur OB définit un autre vecteur nommé vecteur de translation, \vec{T} [17,18].

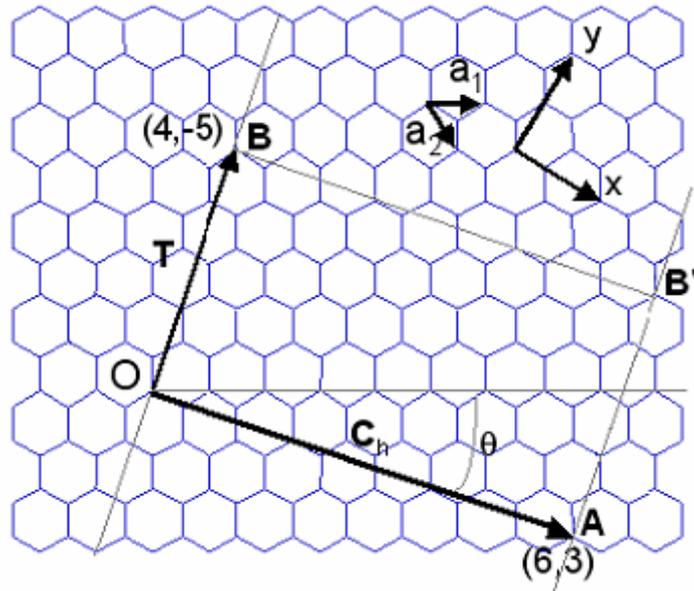


Figure I.10. Définition des vecteur de chiralité et translation [17,18]

Le rectangle généré par le vecteur chiral \vec{C}_n et le vecteur de translation \vec{T} , c'est à dire la OAB'B rectangle dans la figure I.6 est appelée la cellule unité pour le nanotube. (n, m) sont des nombres entiers ($0 \leq |m| \leq n$) et a_1, a_2 sont les vecteurs unitaires du réseau hexagonal [20]. a_1 et a_2 peuvent être exprimés à l'aide des coordonnées cartésiennes (x, y) en tant que :

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

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

Ici, selon la longueur de la liaison d'atomes de carbone, pour le graphite $a_{cc} = 1,42 \text{ \AA}$. C'est la même valeur est souvent utilisée pour les nanotubes. Mais, selon $a_{cc} = 1,44 \text{ \AA}$ est une meilleure approximation des nanotubes. Il doit vraiment dépendre de la courbure du tube. Une valeur légèrement plus grande pour plus de la courbure est connue. Nous voyons à partir des équations (I.2) et (I.3) que les longueurs des $a_1, a_2, |a_1|, |a_2|$ sont tous deux égaux à $\sqrt{3}a_{cc} = a$. Longueur du vecteur chiral est la longueur périphérique du nanotube [17,20] :

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

On peut aussi connaître l'angle d'hélicité θ caractérisant l'enroulement de la feuille de graphène. Cet angle est formé par le vecteur \vec{C}_n et le vecteur de base a_1 et il est exprimé par [19]:

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

Le diamètre du tube d_t est alors donnée par :

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

Le vecteur de translation T , qui est perpendiculaire au vecteur chiral, est exprimé en [10,19] :

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

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

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

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

Nous obtenons ainsi trois grandes catégories de nanotubes suivant le pliement du plan graphitique [19,23] :

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

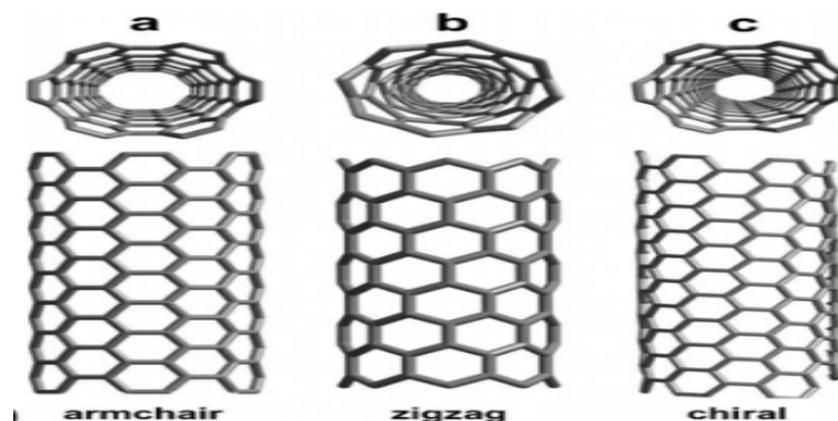


Figure I.11. Chiralité des nanotubes de carbone [19].

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

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

Tableau I.2. La classification des nanotubes [19,23].

I.5.3.1. Zone de Brillouin du nanotube

Nous avons vu que la cellule unité d'un CNT est définie par les vecteurs \vec{C}_h et T. Par analogie à ce qui précède, on définit deux vecteurs unités K_1 et K_2 du réseau réciproque du nanotube dans le réseau réciproque 2D du graphène définis par les conditions d'orthogonalité [15]:

$$C_h.K_1=2\pi, C_h.K_2=0 \text{ et } T.K_1=0, T.K_2=2\pi \quad (I.8)$$

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

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

Où q désigne un entier. A la fin le vecteur d'onde k est quantifié selon la direction transverse (azimutale pour le tube). Seul le vecteur continu K_2 parallèle à T est un vecteur du réseau réciproque, K_1 ne donnant que les valeurs discrètes permises du vecteur d'onde k selon la direction du vecteur chiral \vec{C}_h . Notons que nous considérons K_2 continu, ce qui est valable dans le cas d'un tube suffisamment long pour ne pas avoir à considérer la quantification du vecteur d'onde selon cette direction [11,22].

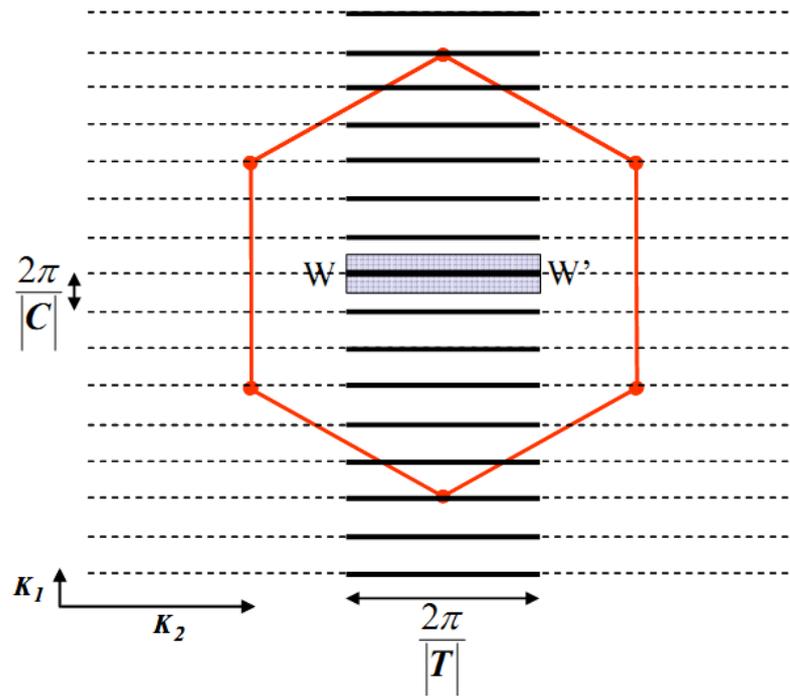


Figure I.12. La zone de Brillouin 1D d'un nanotube de carbone [21,22]

La zone de Brillouin du nanotube correspond au seul segment WW' compris dans le rectangle (figure I.12). Les lignes pointillées correspondent aux valeurs permises de K_1 espacées de :

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

Au final, la zone de Brillouin du nanotube considéré, étendue à l'espace réciproque 2D du graphène, correspond aux $N-1$ segments représentés en noir (figure I.12) de longueur [21,22].

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

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

I.5.3. Nanotube de carbones semi-conducteurs et métalliques

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

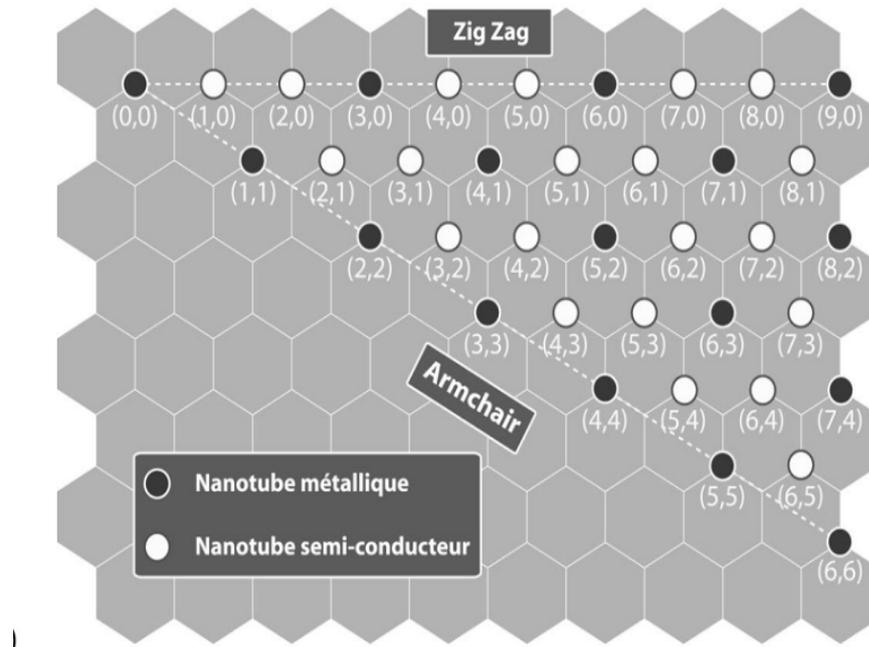


Figure I.13. Schémas des nanotubes métalliques et semi-conducteurs [24-26]

Par conséquent, les nanotubes de armchair (n, n) sont toujours métalliques, et les nanotubes de zigzag $(n, 0)$ sont métalliques lorsque n est égal à un multiple de 3. Pour un nanotube semi-conducteur, $(n-m)$ n'est pas un multiple de 3 [24-26]. La figure I.13, montre quels sont les nanotubes métalliques et ceux qui sont semi-conducteurs.

I.6. Méthodes de synthèse

Du point de vue de la technologie de fabrication, les nanotubes de carbone sont synthétisés principalement par quatre types de méthodes: l'arc électrique, l'ablation laser, le dépôt chimique en phase vapeur CVD (Chemical Vapor Deposition), et la croissance catalytique en phase gazeuse (HiPCO pour High-Pressure carbon monoxide). Ces méthodes permettent de produire des MWCNTs ou SWCNTs en grande quantité avec des diamètres précis [7].

I.6.1. Méthode de l'arc électrique

La technique de l'arc électrique est un procédé de synthèse haute température. Cette technique est basée sur l'évaporation du graphite par un arc électrique, amorcé entre deux électrodes en graphite (Figure I.14). Un plasma chaud (environ 6000 K) est formé et maintenu entre ces deux électrodes, l'anode étant progressivement sublimée [22]. Les espèces carbonées sublimées dans le plasma vont se recombiner à l'extérieur, et les produits formés vont se déposer sur les parois du réacteur. Les conditions de température à l'intérieur de l'enceinte sont très importantes pour la qualité et la quantité des nanotubes formés. La température est contrôlée en utilisant un gaz inerte (He, Ar...) à une certaine pression. Un collecteur refroidi par eau peut également être utilisé, suivant la géométrie du réacteur employé [27,28].

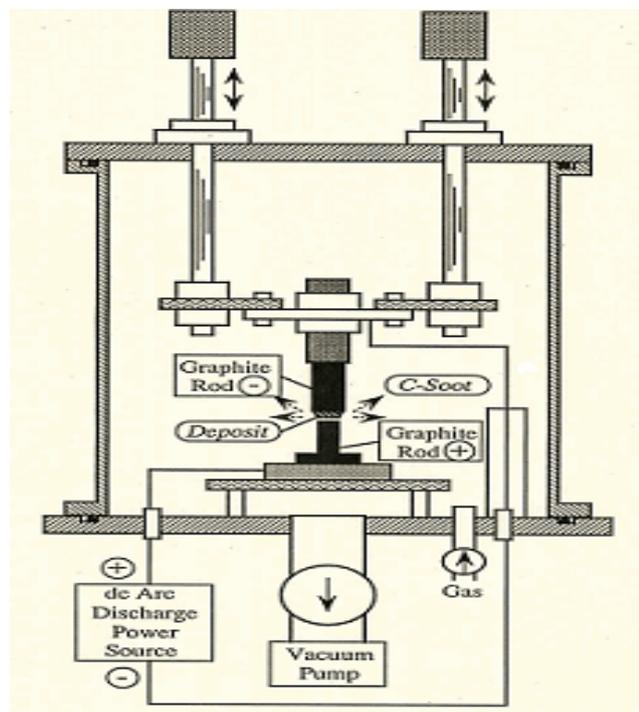


Figure I.14. Schéma représentant un réacteur de type arc électrique permettant la production de nanotubes de carbone [27,28].

I.6.2. Ablation laser

Ce procédé schématisé sur la figure I.15 consiste à bombarder, en présence d'un flux de gaz neutre à haute densité, une cible de graphite, avec un faisceau laser. La cible est généralement placée au milieu d'un tube en quartz. A l'extrémité du tube se trouve un collecteur en cuivre refroidi. Lorsque le laser est pulsé (la fréquence des pulses varie typiquement de 8 ns à 10 ms) la

cible est ablatée sous forme de petits agrégats qui ne peuvent se recombinaer selon une structure spécialisée que si le réacteur est placé dans un four à au moins 800°C [22,11, 27-29].

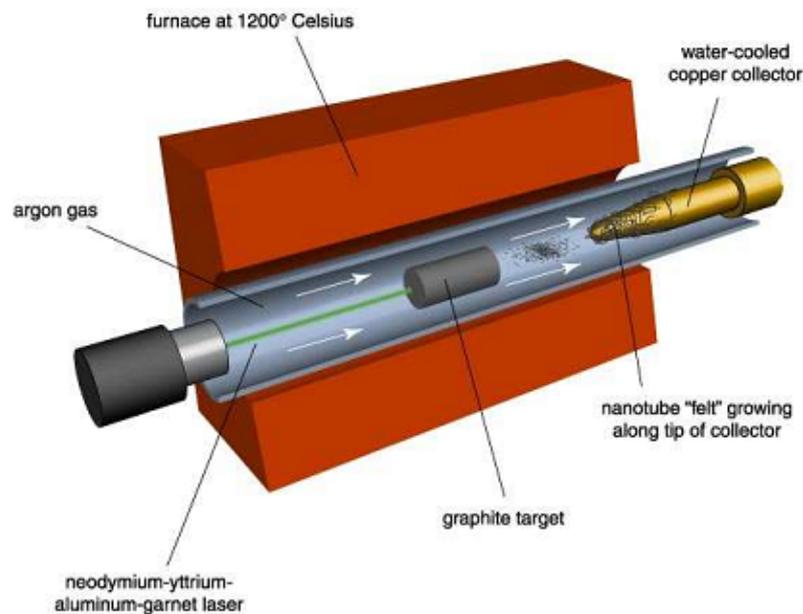


Figure I.15. Schéma représentant un réacteur de type ablation laser permettant la production de nanotubes de carbone [27-29].

Lorsque le laser est continu, la cible est chauffée par le laser à des températures supérieures à 3000K et sera progressivement vaporisée. Le gaz qui circule dans l'enceinte est échauffé au voisinage de la cible et joue le rôle d'un four local. La pression et le débit du gaz porteur permettent d'ajuster les gradients de température. Les espèces volatiles vaporisées ou expulsées en petits fragments de quelques atomes, sont transportées par le flux gazeux de la zone haute température jusqu'au collecteur en cuivre refroidi où elles se déposent [28,29].

Bien que ce procédé est coûteux mais il utilise un nombre restreint de paramètres de contrôle ce qui rend possible l'étude des conditions de synthèse.

I.6.3. Le dépôt chimique en phase vapeur CVD

Le principe d'élaboration de nanotubes de carbone par CVD (Chemical Vapor Deposition) repose sur la décomposition d'un gaz carboné à la surface d'une particule catalytique nanométrique. Dans cette méthode, des hydrocarbures (CH_4 , C_6H_6 ...) et de l'hydrogène sont mis en présence de catalyseurs métalliques (Fe, Co, Ni...), le tout dans un four porté à haute température ($> 700\text{C}$). Les nanotubes se forment alors sur les plots de catalyseurs. L'un des avantages de cette méthode est que les nanotubes se forment de façon continue (contrairement à

la méthode d'ablation laser par exemple). Nous pouvons espérer trouver des conditions expérimentales permettant de fabriquer des nanotubes purs avec un contrôle parfait du diamètre et de la chiralité. Par ailleurs, trois paramètres principaux gouvernent la croissance de nanotubes de carbone dans ce procédé : le catalyseur, le gaz injecté, et la température [22,28].

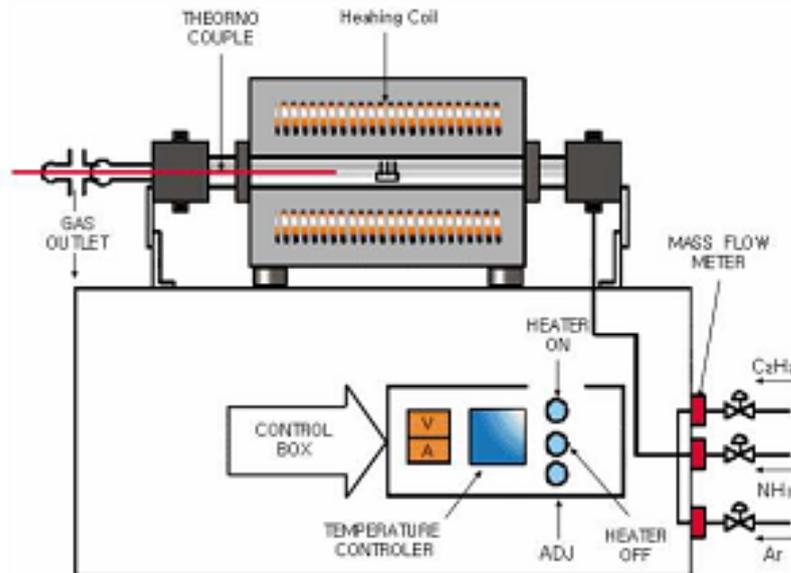


Figure I.16. Schéma représentant un réacteur CVD utilisé pour la croissance de nanotubes de carbone [22,28].

I.6.4. Catalyse en phase gazeuse HiPCO (High-Pressure carbon monoxide)

Le procédé HiPCO (High Pressure dismutation of CO : décomposition sous haute pression de CO) fait partie de la famille des procédés de décomposition catalytique à température moyenne. Un flux continu de penta carbonyle 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 mono-feuillets, est formé in situ par la décomposition du gaz précurseur [30,31].

De surcroît, 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 mono-feuillets exempts de toute 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 [7,23,27].

I.7. Propriétés des Nanotubes de Carbone

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

I.7.1. Propriétés physiques

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

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

Tableau I.3. Les caractéristiques dimensionnelles des nanotubes de carbone [30,31].

Les nanotubes de carbone mono-feuillet se regroupent sous forme de fagots (figure I.9.b) dont le diamètre peut varier de 10 à 30 nm. Un diamètre de 1 nm est de l'ordre de la taille de la double hélice de la molécule d'ADN indiquant le caractère moléculaire d'un nanotube de carbone. Par ailleurs, du fait de leur dimensions (nanométrique pour la section et micrométrique pour la longueur), les nanotubes de carbone sont considérés comme des molécules unidimensionnelles de fibres (longueur supérieure à $5\mu\text{m}$, diamètre inférieur à $3\mu\text{m}$ et rapport longueur/diamètre supérieur à 3) [17, 33,34].

I.7.2. Propriétés électriques

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

En effet les modélisations des bandes d'énergies confirment une des caractéristiques surprenantes des CNTs : leur comportement métallique ou semi-conducteur, en fonction de leur diamètre et de leur hélicité. La structure particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être importante le long de l'axe du nanotube [33].

La conductivité électrique d'un CNT métallique peut atteindre 10^5 S.cm^{-1} et celle d'un CNT semi-conducteur est comprise entre 0,1 et 100 S.cm^{-1} . Le cuivre est généralement utilisé dans les applications où une conductivité élevée est nécessaire, cependant il ne conserve pas sa conductivité apparente à l'échelle de dimensions nanométriques. La mobilité électronique mesurée sur un nanotube est jusqu'à 3 ordres de grandeur plus importantes que celle du cuivre ($100\,000 \text{ cm}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$) à 300 K [35-37].

A basse température, les nanotubes mono-feuillets métalliques, individuels ou regroupés en petits fagots, se comportent comme des fils quantiques, c'est-à-dire que la conduction a lieu au travers de niveaux électroniques discrets bien séparés quantiquement et cohérents sur plusieurs centaines de nanomètres. Les nanotubes de carbone peuvent également transporter des densités de courant remarquables, voisines de 10^{10} A/cm^2 soit au moins deux ordres de grandeur de plus que les métaux. Enfin, les nanotubes multi-feuillets peuvent être supraconducteurs à très basse température [27,38].

La résistivité électrique des nanotubes de carbone est de :

- ✓ 10^{-3} à $10^{-4} \Omega.\text{Cm}$ pour les nanotubes de carbone mono-feuillets métalliques.
- ✓ $10 \Omega.\text{Cm}$ pour les nanotubes de carbone mono-feuillets semi-conducteurs.
- ✓ $10^4 \Omega.\text{Cm}$ pour les nanotubes de carbones multi-feuillets.

Les nanotubes de carbone mono-feuillets possèdent de meilleures caractéristiques électriques que les multi-feuillets en raison notamment des interactions électriques, de type Van der Waals, qui surviennent entre les différents feuillets de graphène [32,36].

I.7.4. Propriétés mécaniques

La présence de fortes liaisons chimiques C-C dans le graphite rend les propriétés des nanotubes de carbone exceptionnelles. En effet une importante énergie, équivalente à 348 KJ.mol^{-1} , est nécessaire pour dissocier une telle liaison. Grâce à ces liaisons fortes entre les atomes, les nanotubes de carbone présentent un module d'Young équivalent à celui du diamant (tableau I.4) [10,11,38].

De plus, le nanotube de carbone est 100 à 200 fois plus résistant que l'acier pour un poids 6 fois moindre (à section équivalente). Il allie à cette exceptionnelle résistance à la déformation une très grande flexibilité. Ainsi, malgré sa rigidité élevée, le nanotube de carbone a une facilité

à se courber jusqu'à des angles très importants, à se déformer et à se tordre selon son axe. La courbure semble entièrement réversible jusqu'à un angle critique [38-41].

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

Tableau I.4. Quelques propriétés mécaniques des nanotubes de carbone [38-41].

Les nanotubes exhibent donc des propriétés mécaniques uniques. Leur grande flexibilité associé à un module d'Young élevé leur confèrent un comportement que certains n'hésitent pas à décrire comme étant un comportement super élastique. Ce sont donc vraiment des candidats idéaux pour ce type de fonctions électromécaniques [42-44].

I.7.5. Propriétés thermiques

Selon leur nombre de parois et le degré de perfection de leur structure, les nanotubes de carbone peuvent présenter une conductivité thermique très élevée pouvant atteindre 6000 W/mK (par comparaison, la conductivité thermique du diamant varie entre 1000 et 2600 W/mK) ce qui les place parmi les meilleurs conducteurs thermiques connus [32,35]. Tableau I.5.

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

Tableau I.5. Quelques caractéristiques thermiques des nanotubes de carbone [32,35,38].

La mesure des propriétés thermiques d'un nano-objet comme le nanotube est délicate. Cependant, quelques études expérimentales ont permis de mesurer la conductivité thermique de nanotubes multi feuillets, mais significativement plus faible que celle du graphite. Ces résultats sont a priori décevants, mais ils peuvent s'expliquer en considérant le fait que tous les feuillets

ont participé à la conduction thermique alors que seul le feuillet externe a été utilisé pour les mesures. Ces considérations permettent d'estimer la magnitude de la conduction d'un tube mono-feuillet au même ordre de grandeur que celle du graphite [38,45,46].

I.7.6. Propriétés optiques

Grâce à leur structure électronique les nanotubes possèdent des propriétés optiques remarquables. Les propriétés électro-optiques uniques des films de SWCNT rendent ce matériau particulièrement intéressant pour la conception de dispositifs optoélectroniques [32]. L'étude de ces propriétés optiques a permis de développer de nombreuses stratégies pour caractériser la fonctionnalisation des nanotubes de carbone [47,48]. Néanmoins il s'agissait d'études fondamentales des propriétés des SWCNTs, et ces publications comportaient soit uniquement des spectres de l'intensité réfléchie « R », soit de l'intensité transmise « T ». Des mesures de réflexion ont été réalisées sur les CNT (Figure I.17), ils sont capables d'absorber 99,9% de la lumière, ce qui est 3 fois mieux que les alliages réputés comme étant le matériau le plus sombre [49,10]. On peut déduire qu'il est très proche d'un corps noir.

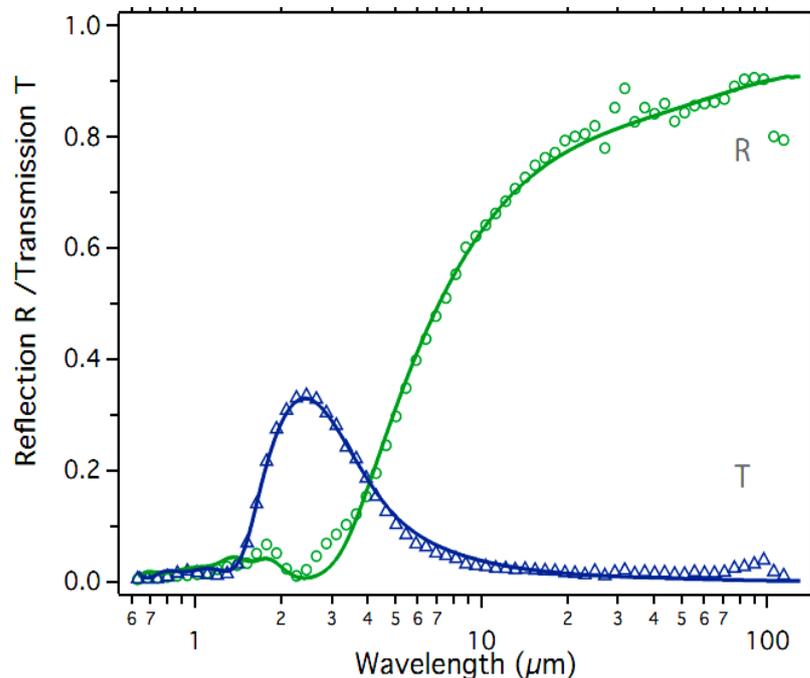


Figure I.17. Réflexion R (cercles) et transmission T (triangles) d'un film de nanotubes de carbone mono paroi [49].

I.7.7. Propriétés chimiques

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés chimiques très attrayantes. Il est en effet possible [10,11,15,32]:

- ✓ De fonctionnaliser leur surface par greffage moléculaire afin, par exemple, de procéder au tri des nanotubes selon leurs caractéristiques électroniques.
- ✓ D'intercaler des atomes ou des molécules (dopage) entre les nanotubes mono-feuillet d'un faisceau (intercalation inter-tubulaire) ainsi qu'entre les différentes parois d'un nanotube multi-feuillets (intercalation inter-planaire) afin par exemple de contrôler les propriétés électroniques des nanotubes semi-conducteurs. De remplir par capillarité le canal central des nanotubes de carbone mono- et multi-feuillets par des atomes ou des composés cristallins de façon à obtenir des nanofils encapsulés.
- ✓ La surface spécifique des nanotubes de carbone est de surcroît élevée, ce qui leur confère une très bonne capacité d'adsorption. Elle est voisine de 2700 m²/g pour les nanotubes mono-feuillet et est généralement inférieure à 1300 m²/g pour les nanotubes multi-feuillets.
- ✓ Par ailleurs, les nanotubes de carbone présentent une excellente inertie chimique et une très bonne stabilité à haute température sous atmosphère inerte. Ils sont ainsi insolubles dans les solvants organiques et dans l'eau.

I.8. les Applications de nanotube de carbone

Du fait de leurs propriétés exceptionnelles, les CNTs sont adaptés pour des applications multifonctionnelles couvrant une gamme variée de matériaux pour des usages biologiques ou électroniques. Par exemple, s'agissant de la conductivité (tableau I.6), les SWNTs (surtout les métalliques) sont en passe d'être efficacement utilisés comme interconnexions entre les niveaux métalliques dans la fabrication des circuits intégrés [17,50]. En comparaison avec du cuivre, les nanotubes permettent une meilleure conductivité électrique et thermique [27,38,35]. Par ailleurs, les nanotubes réagissent facilement avec beaucoup de produits chimiques [11].

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

Tableau I.6. Des applications électroniques réalisées avec des CNTs dans divers domaine [50,51].

En se basant sur les propriétés optoélectroniques ou photoniques non linéaires des filtres, des interrupteurs et des guides optiques qui peuvent être réalisés avec des nanotubes mono-parois pour les communications optiques [53].

La plupart des applications actuelles utilisent les propriétés structurales des nanotubes [50-53]:

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

Les propriétés chimiques peuvent aussi servir [17,50]:

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

I.8.1. Transistor à effet de champ

Les nanotubes semi-conducteurs peuvent servir de transistors. Le nanotube le candidat le plus prometteur en raison de leurs propriétés uniques et la taille nanométrique. Les transistors sont les blocs de construction de base de tous les circuits intégrés. Un transistor possède trois bornes, l'une d'entre elles (grille ou porte) commandant la circulation du courant entre les deux autres (source et drain) séparées par un canal en matériau semi-conducteur [28,49,51].

Dans les dispositifs classiques le canal est réalisé en silicium. Dans CNTFET le canal est formé par un seul semi-conducteur CNT. Sur les caractéristiques électriques des nanotubes de FET on remarque que l'on peut modifier la quantité de courant (I_{SD}) s'écoulant dans le canal de nanotubes par un facteur important en changeant la tension appliquée à une grille (V_G) figure I.18 [49,54].

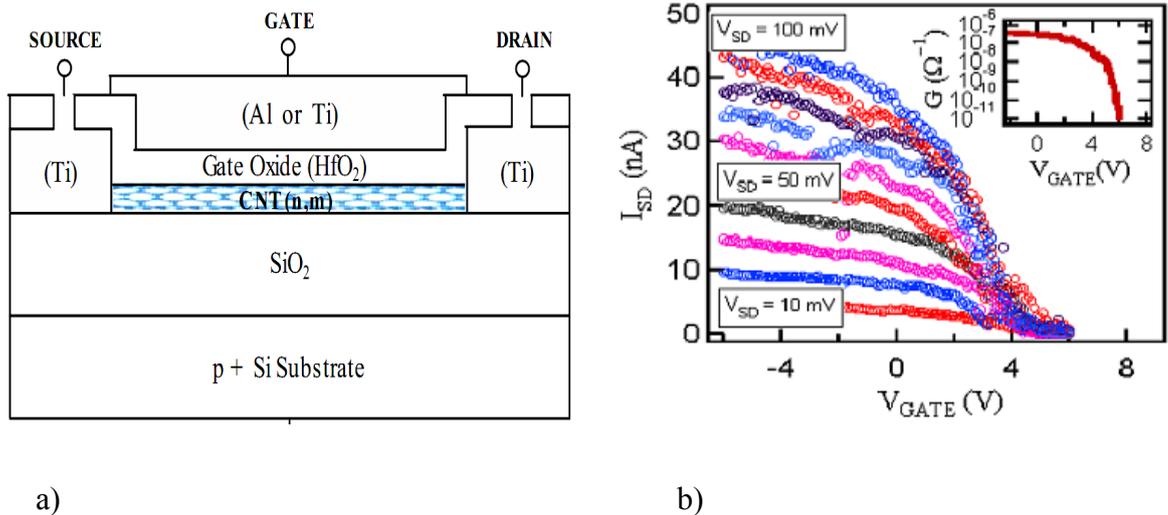


Figure I.18. a) Vue en coupe transversale d'un CNTFET, b) caractéristique électrique d'un CNTFE [54].

I.8.2. Source d'émission par effet de champ

Les dispositifs hyperfréquences à vide pour les systèmes de télécommunication installés dans les satellites et les engins spatiaux qui fonctionneront à des bandes de fréquences supérieures à celles actuellement disponibles requièrent des densités élevées de courant transportées par des électrons comprises entre 5 et 20 A/cm². Les cathodes à émission de champ fabriquées à partir de nanomatériaux dont la structure est riche en carbone présentent une alternative intéressante au remplacement à faible coût des cathodes thermoélectroniques [49,55].

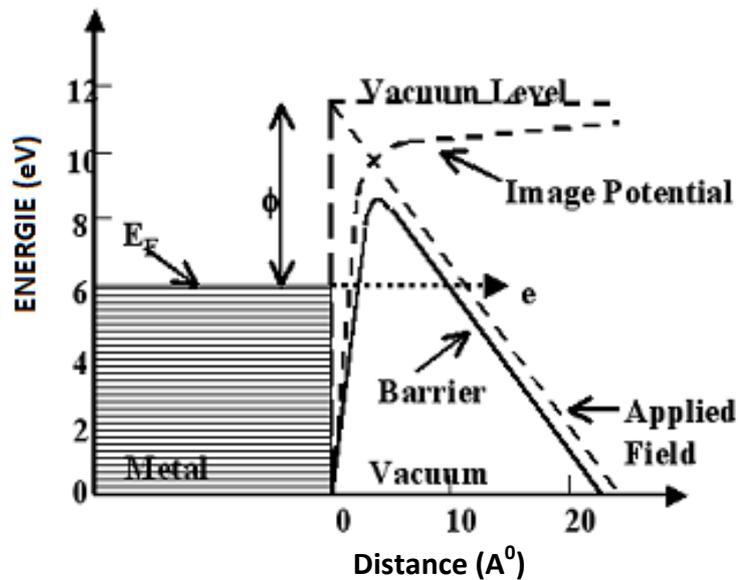


Figure I.19. Émission par effet de champ de films CNT [49,55]

Les nanotubes de carbone sont particulièrement bien adaptés à l'extraction d'électrons à température ambiante. Cette propriété, directement liée à leur forme, peut être mise en œuvre pour deux types d'applications [49]: la réalisation d'écrans plats et l'utilisation de micro-canon à électrons pour élaborer les circuits électroniques du futur.

Une des applications directe des nanotubes est la production d'écrans où la taille pourrait atteindre un mètre de diagonale. Grâce à l'introduction des nanotubes, de nouvelles structures d'écrans ne comportant pas de motifs inférieurs à $10\mu\text{m}$, donc facilement réalisables sur une grande surface [43].

I.8.3. Autres applications électroniques

Les NEMS

Les NEMS sont, rappelons le, des nano-systèmes électromécaniques de taille nanométrique dont les éléments sont libres de se mouvoir. On peut y inclure les oscillateurs et les diodes. Deux application que nous pensons intéressantes, sont actuellement étudiées et même utilisées dans des circuits, les NRAM et les nano-Switch, tous les deux formés par des nanotubes de carbone qui sont actionnés de manière électrostatique [38].

Les NRAM :

Les NRAM (Nonvolatile Random Access Memory) sont une nouvelle famille de mémoire informatique qui a pu apparaître grâce aux nanotubes de carbone, le principe étant d'utiliser des réseaux croisés de nanotubes activés électro-statiquement afin de former ou non un contact entre eux [38,9]. Lorsque deux nanotubes sont en contact on forme, l'état binaire 1 et dans l'autre cas le 0, chacune des lignes du réseau étant connectée à un plot. Une description d'un tel circuit est représentée sur la figure I.20.

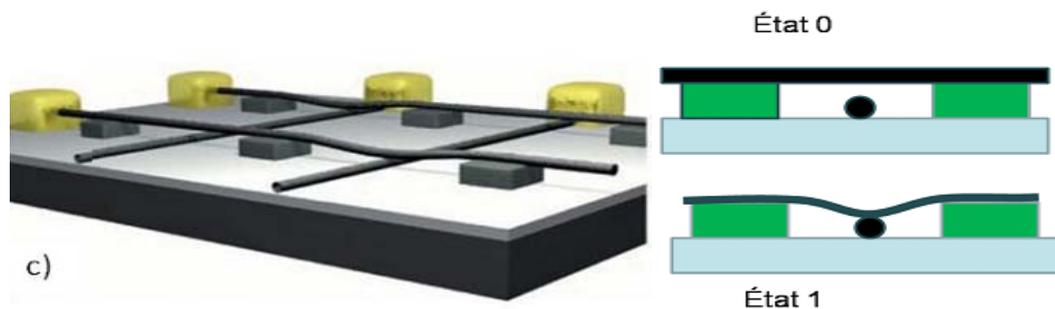


Figure I.20. Concept de NRAM en CNT [38,9]

Le photovoltaïque :

Les grandes densités de courant qu'ils peuvent supporter, leur stabilité chimique, leur faible résistivité et leur grande surface spécifique accessible, mettent les CNT au premier rang des candidats pour de nombreuses applications entrant dans le stockage et la production d'énergie [22].

Le domaine porteur du photovoltaïque pourrait dans le futur, utiliser des CNT et permettre aux cellules à base de polymères d'atteindre des rendements qui les rendraient compétitives (car moins chères à la production et moins polluantes) face aux technologies du silicium [22,24].

I.9. Conclusion

Ce chapitre, qui constitue une revue bibliographique sur les nanotubes de carbone a montré l'importance de ces nano-objets tant dans le domaine des nanosciences que dans le côté application. Leurs dimensions particulières ainsi que leurs propriétés diverses ouvrent à l'industrie des perspectives d'innovations nombreuses et prometteuses. À partir de la chiralité du maillage structural du SWNT, nous avons décrit les propriétés métalliques et semi-conductrices.

Ensuite, nous nous sommes intéressés aux quatre méthodes courantes de synthèse des nanotubes de carbone, particulièrement les SWNTs. Les méthodes CVD et HIPCO permettent de synthétiser des SWNTs à l'échelle d'une production industrielle.

Après cette étude bibliographique, nous allons analyser plus en détail dans le chapitre suivant Les composants électroniques les plus importants à base de nanotube de carbone : le CNTFET (Carbon NanoTube Field Effect Transistor).

CHAPITER II

**GÉNÉRALITÉ SUR LES
TRANSISTORS A BASE DE
NANOTUBE DE CARBONE**

CHAPITRE II :

GÉNÉRALITÉS SUR LES TRANSISTORS A EFFET DE CHAMP A BASE DE NANOTUBE DE CARBONE

II.1. Introduction

La croissance de l'industrie des semi-conducteurs dépend pour l'instant de sa capacité à miniaturiser des transistors. L'objectif de la démarche est de délivrer de meilleures performances à moindre coût. Aujourd'hui, le niveau de performances atteint peut être favorablement comparé aux meilleurs transistors en silicium [1,3,61].

En effet, leurs caractéristiques physiques (la densité de courant atteignable, la fréquence de transition théorique et le rapport I_{on}/I_{off}), ainsi que leur polyvalence et leur maturité, positionnent les CNTFETs (Carbon Nanotube Field Effect Transistor) parmi les nano-composants les plus attractifs du point de vue de leur intégration dans les nano-systèmes du futur. De nombreuses démonstrations de faisabilité ont prouvé que ces transistors à nanotubes peuvent servir de base à la fabrication de diverses fonctions électroniques de faible complexité (mémoires non volatiles, portes logiques,.....etc.) [38].

Dans le prochain chapitre on discutera en détail le transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone et nous essayerons ainsi de comprendre les caractéristiques physiques de plusieurs types de CNTFET qui peuvent ouvrir des perspectives nouvelles, nous croyons fortement que des nanotubes de carbone offrent un FET avec de meilleures caractéristiques pour les dispositifs par rapport aux MOSFET conventionnels.

II.2. Les transistors FET à base de nanotubes de carbone (CNTFET)

A partir de leur découverte, grâce à leurs dimensions nanométriques et leurs caractéristiques électriques de type semi-conducteur, des nombreuses équipes scientifiques se sont intéressées à la réalisation des dispositifs types transistors à effet de champ en utilisant les nanotubes de

carbone(CNT). Les premiers transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone (CNTFET) ont été signalés en 1998 [9,17]. Ce sont des dispositifs simples fabriqués avec l'architecture suivante :

Un nanotube de carbone semi- conducteur, déposé sur un substrat de silicium dopé avec un oxyde de surface d'épaisseur t_{ox} , est placé entre deux électrodes métalliques ; celles-ci portent respectivement le nom de drain (D) et de source(S). Une tension V_{DS} est appliquée entre les deux électrodes et un champ électrique est créé en imposant une différence de potentiel V_{GS} entre la source (S) et le substrat dopé qui est utilisé comme une grille(G). Le courant I_{DS} circulant entre la source et le drain est mesuré en fonction de la tension V_{DS} et V_{GS} . Il s'agit ici d'une configuration classique de transistors à effet de champ (Field Effect Transistors (FET)) figure II.1 [56,58]. Différents types de CNTFET ont été développé, des CNTFETs au comportement similaire à celui des transistors CMOS et des CNTFET qui possèdent un comportement totalement inaccessible aux transistors de technologie CMOS [60,61].

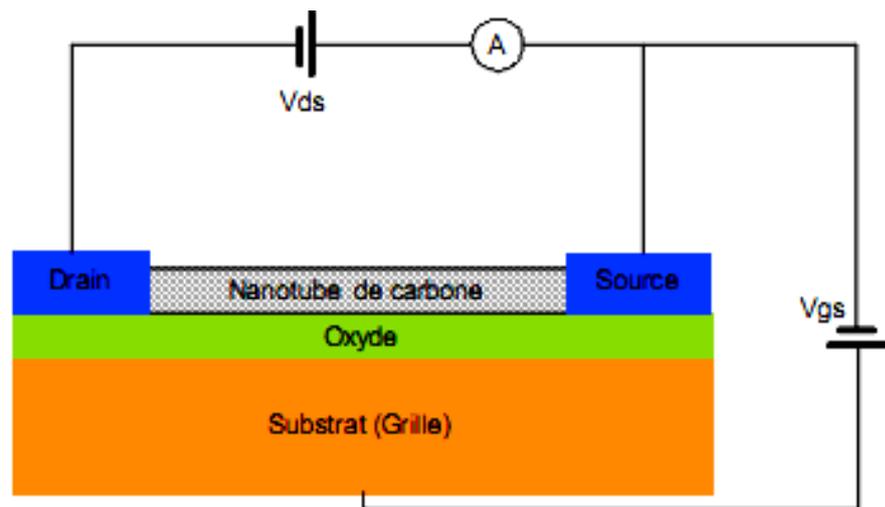


Figure II.1. (a) Schéma du montage électrique réalisé d'un transistor à nanotubes de carbone [56]

La structure physique du CNTFET est très similaire à celle du MOSFET, est les caractéristiques de transfert $I-V$ sont également très prometteuses et elles suggèrent que les CNTFET ont le potentiel pour être un remplacement réussi de MOSFET en nanoélectronique. Pour construire des CNTFETs type P et type N , il faut réaliser le dopage du CNT (dopage $n+$ ou $p+$) [57,62].

Les nanotubes de carbones mono-parois (SWCNT) ont naturellement un comportement de semi-conducteurs de type « P ». En d'autres termes, les porteurs induits dans le nanotube sont

des charges positives (les trous). Ceci est expliqué par plusieurs théories. Une des explications est que les nanotubes sont dopés par des atomes étrangers pendant la synthèse ou l'absorption d'oxygène (figure II.2.a) [4].

Différentes approches sont possibles pour doper un semi-conducteur. La technologie de Silicium actuelle utilise un dopage chimique par implantation d'ions donneurs ou accepteurs qui se substituent aux atomes de Silicium dans le réseau cristallin. Cette technique est également utilisable dans les nanotubes de carbone en substituant des atomes de bore ou azote à des atomes de carbone [63-65].

Les nanotubes du type *P* peuvent être exposés sur un composé qui donne des électrons, par exemple des métaux alcalins (tels que le lithium, le sodium, le potassium, le rubidium, le césium, le chlorure de potassium ou l'iodure de césium, respectivement) pour former des nanotubes de carbone de type *N* figure II.2.b. Le dopage s'opère par transfert de charge du dopant vers le nanotube [66,106].

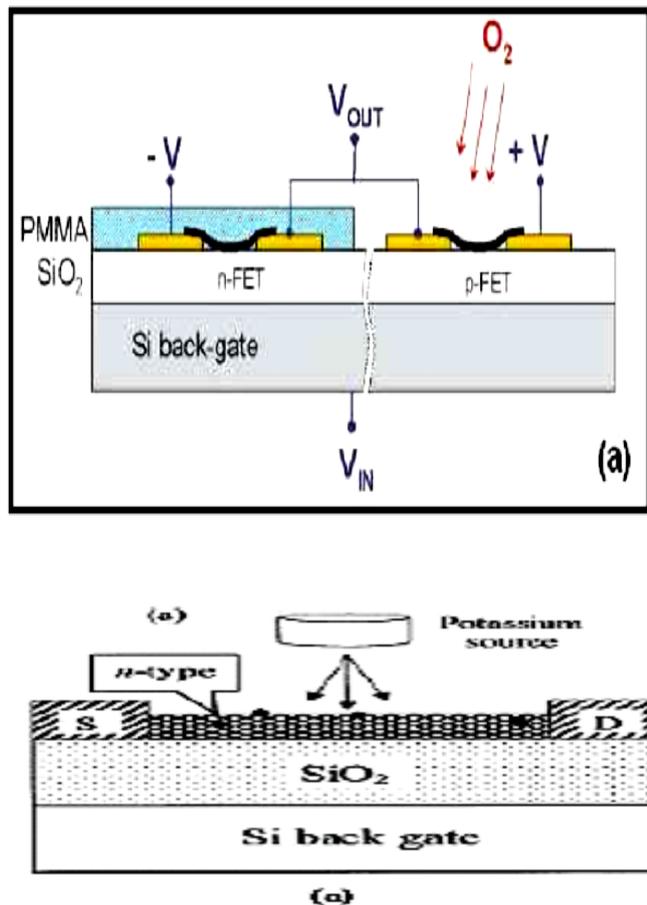


Figure II.2. Dopage d'un CNTFET type *P* pour créer un CNTFET type *N* par le recuit et le dopage avec l'oxygène; b) CNTFET type *N* par le dopage avec le potassium [64-66].

II.3. Pourquoi choisir le nanotube de carbone ?

Les propriétés remarquables de nanotubes de carbone sont les suivantes [10,38-46]:

- ✓ Les nanotubes de carbone peuvent être métalliques ou semi-conducteurs selon leur diamètre, leur longueur et leur hélicité du roulant, et ne nécessitant pas de dopage
- ✓ La bande interdite de semi-conducteur de nanotubes de carbone peut être modifiée en continu en faisant varier le diamètre des nanotubes. La bande interdite de nanotubes semi-conducteurs diminue avec l'augmentation du diamètre.
- ✓ Les nanotubes de carbone individuels sont capables de transporter le courant électrique à des densités nettement plus élevés que la plupart des métaux et des semi-conducteurs
- ✓ Les nanotubes ont une conductivité thermique élevée (~2000W/m/K, alors que celle du cuivre est de 400W/m/K).
- ✓ Les nanotubes sont également inertes et n'ont pas d'états de surface, ce qui les rend tout à fait compatible avec d'autres matériaux tels que les oxydes.
- ✓ Les nanotubes peuvent être soit augmenté à certains endroits, ou tout simplement dispersés dans la solution.
- ✓ Les dispositifs à nanotube consomment moins d'électricité qu'un appareil équivalent de Si.

Ces propriétés font du nanotube de carbone un meilleur dispositif que les autres dispositifs moléculaires. La recherche de pointe se concentre sur le développement de différents dispositifs à base de nanotubes de carbone et sur l'utilisation de leurs propriétés uniques basées sur la technologie semi-conducteur pour la taille minimale possibles.

II.4. Différents types de CNTFET

Les différents types de CNTFET qui ont été signalés dans la littérature actuellement, il y en a quatre structures possible pour le CNTFET: le transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNTFET), à barrière Schottky ((SB) CNTFET) ; à grille optique (OG-CNTFET) et CNTFET à double grille ((DG)-CNTFET) [61].

Grossièrement, ces transistors fonctionnent à partir du même principe : il s'agit de 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 différence principale 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 [67].

II.4.1. Le transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNTFET)

Le transistor à nanotube de carbone à modulation de hauteur de barrière ou aussi CNTFET conventionnel (C-CNTFET) est réalisé à partir d'un nanotube de carbone mono-paroi ayant un dopage de type $n/i/n$ ou $p/i/p$ [60]. Le principe de fonctionnement du transistor à effet de champ conventionnel à base de nanotube de carbone (Carbon Nanotube Field Effect Transistor pour CNTFET) est très similaire à un MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor) en considérant le remplacement du matériau de canal pour profiter du transport balistique dans le CNT. 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 [68,94]. La hauteur de potentiel de cette barrière est modulée par le potentiel de grille. Dès que l'énergie des porteurs devient supérieure à cette barrière, le transistor devient passant et le courant est de nature thermoïonique et unipolaire.

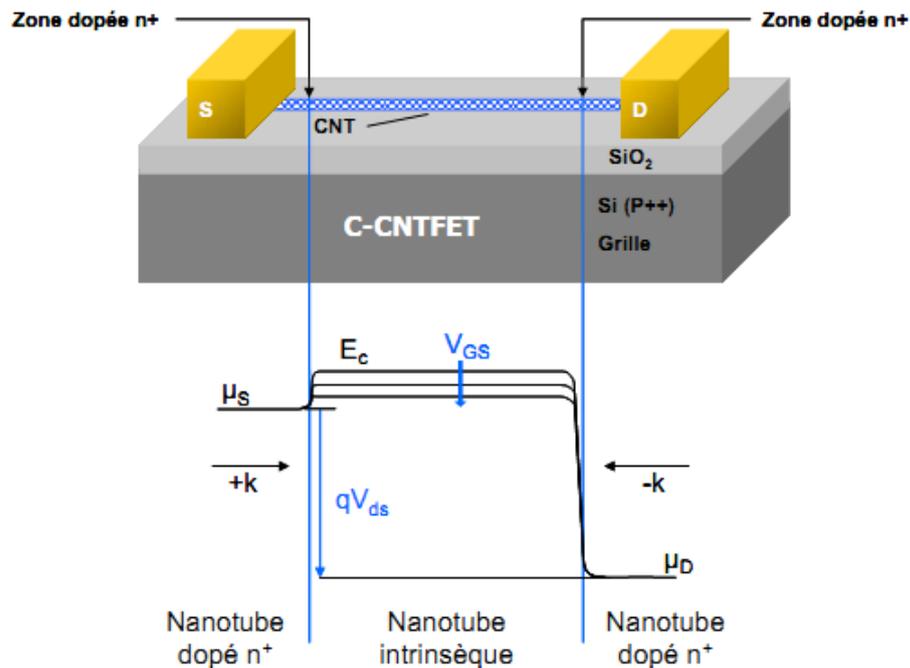


Figure II.3. Le transistor CNTFET à modulation de la hauteur de barrière ou C-CNTFET coupe transversale du transistor et profil de la bande d'énergie de la bande de conduction [68,94]

Dans le cas idéal, les performances d'un tel transistor sont très prometteuses avec une pente sous le seuil qui ne dépasse pas les 60mV/décade. Mais, comme le dopage des zones d'accès n'est pas très bien maîtrisé, des barrières Schottky peuvent se former à l'interface entre le métal des accès source, drain et le nanotube de carbone. Ces barrières ont une influence directe sur les performances de commutation du transistor et peuvent accroître la pente sous le seuil vers des valeurs bien supérieures à 60mV/décade [60,61]. La représentation schématique du transport d'électron montrant le vecteur d'onde dans un CNTFET de type N est présenté sur la figure II.4 selon l'évolution du schéma des bandes d'énergie en fonction de la polarisation.

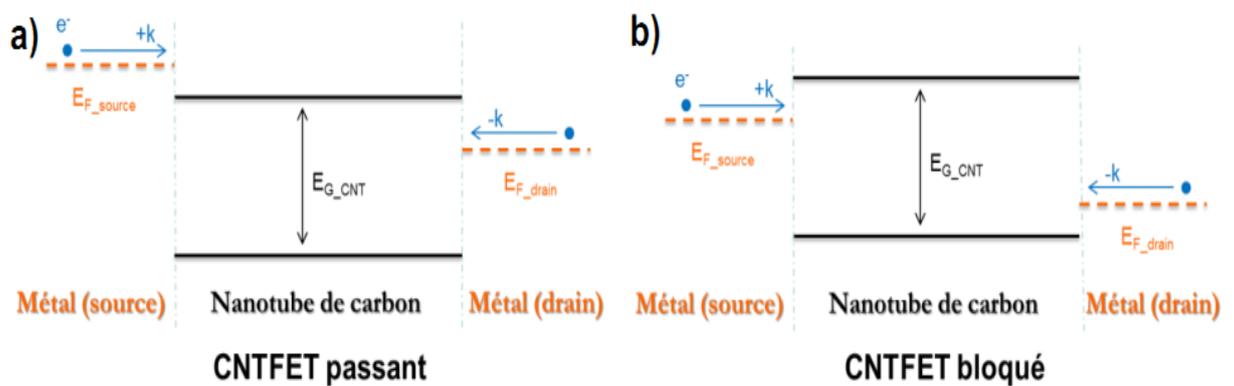


Figure II.4.Diagrammes d'énergie d'un CNTFET type *N* sous deux conditions de polarisation montrant l'état passant (a) et l'état bloqué (b). La polarisation V_{DS} est positive dans les deux cas. Dans a), V_{GS} est fortement positif. Dans b), il est faiblement positif [60,67].

La polarisation de la grille module le potentiel électrique du canal pour autoriser ou bloquer le transport d'électrons. En effet, dans les CNTFETs de type *N*, les électrons injectés côté drain et côté source contribuent au courant balistique selon la direction du vecteur d'onde longitudinal, $-k$ ou $+k$, respectivement. C'est-à-dire que les deux contributions sont de même nature mais de sens opposé. Dans les CNTFETs de type *P*, le même principe de fonctionnement est valable avec un transport de trous dans la bande de valence [67].

II.4.2. Transistor à effet de champ double grilles (DG-CNTFET)

Les CNTFETs double grille (DG-CNTFET pour Dual-Gate CNTFET ou Double-Gate CNTFET) sont particulièrement intéressants pour les concepteurs d'architecture innovante notamment pour les circuits numériques. Technologiquement il est difficile de fabriquer des

transistors en silicium fonctionnant en régime balistique, puisque le libre parcours moyen est inférieur à 20 nm à température ambiante [69]. Par contre, grâce au libre parcours moyen élevé dans le nanotube, il est parfaitement possible de concevoir des circuits logiques avec des CNTFETs double grille [70,71]. Décrit une amélioration du transistor à modulation de hauteur de barrière : au lieu d’avoir un dopant chimique et/ou un choix de métal spécifiques pour obtenir des zones d’accès source et drain de type *N* ou *P*, ces zones d’accès sont dopées électrostatiquement en polarisant une grille supplémentaire (aussi appelée grille arrière ou Back Gate -BG-) [72,73] Comme indiqué sur la figure II.5, la grille avant, située entre le nanotube et la grille arrière, écran l’effet de la grille arrière. L’évolution de la quantité de charge dans le canal de nanotube de carbone selon la modulation des deux grilles. Le principe du fonctionnement du DG-CNTFET est d’utiliser la grille arrière comme une pré -polarisation du transistor (figure II.5), Ensuite, la grille avant permet de bloquer ou laisser passer les porteurs désignés. Dans les CNTFETs à double grille, le substrat en silicium joue un rôle important (celui de la grille arrière) en déterminant le type du porteur majoritaire ainsi que le courant I_{on} du dispositif [72-74]:

- Lorsque V_{gs-Si} est suffisamment négative (quelques centaines de mV), le dispositif fonctionne comme un FET de type P enrichi avec une tension de seuil négative et une pente sous le seuil.
- Lorsque V_{gs-Si} est positive (quelque centaines de mV), le dispositif fonctionne comme un FET de type N avec une tension de seuil positive.
- Lorsque la grille arrière est flottante (ou $V_{gs-Si}= 0V$), le transistor est bloqué.

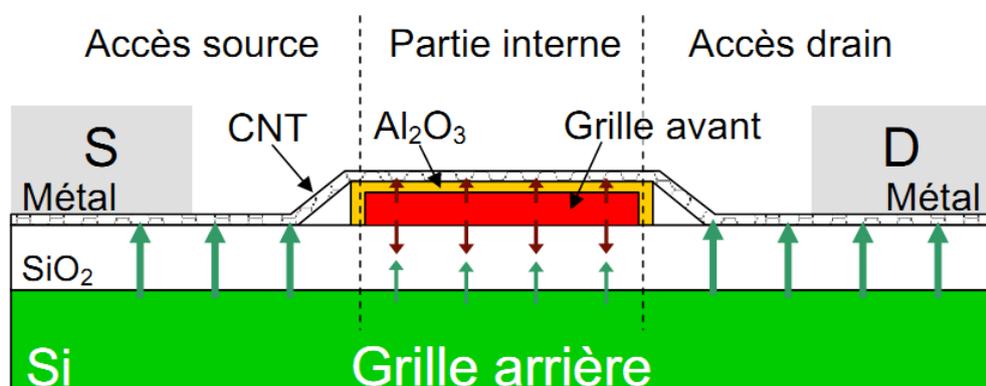


Figure II.5. Un DG-CNTFET avec l’effet du grille avant et arrière [72,73]

II.4.3 Transistor à barrière Schottky (SB-CNTFET)

Le CNTFET à barrière Schottky (SB-CNTFET pour Schottky-Barrier CNTFET) est un transistor particulier, il présente une caractéristique fortement ambipolaire par rapport au CNTFET conventionnel unipolaire ou faible ambipolaire [60,75]. Ils peuvent avoir des caractéristiques de type *N* ou de type *P* selon la tension de grille. Ceci limite l'utilisation de ce type de transistor dans les circuits logiques conventionnels. De plus, le rapport I_{on}/I_{off} est plutôt faible. Ces barrières sont rendues plus ou moins passantes aux porteurs selon la polarisation de grille [62,78].

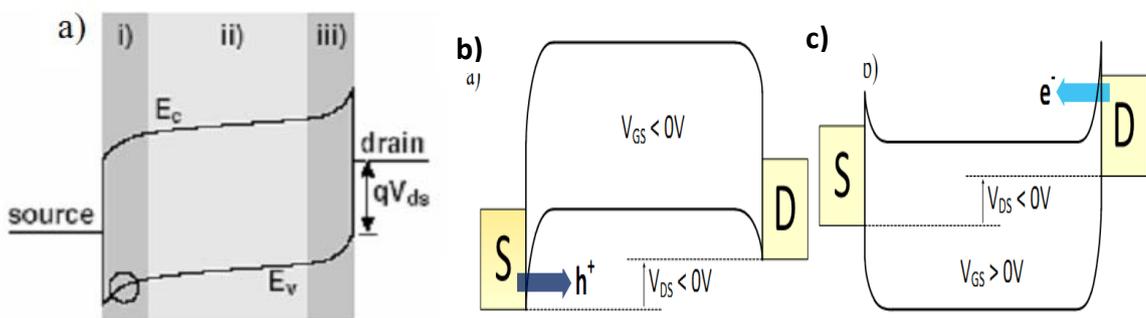


Figure II.6. Diagramme de bande d'énergie $V_{DS} < 0$ et a) sans polarisation de grille, b) avec polarisation de grille négative et c) positive [14].

Le principe de fonctionnement du SB-CNTFET est donc 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 I.6.a).

Lorsque $V_{GS} < 0$ V, les bandes de conduction et de valence du « corps » du nanotube (partie ii de la Figure I.6.a)) sont alors suffisamment remontées, les trous peuvent alors passer à travers la barrière Schottky affinée : un courant par effet tunnel apparaît (Figure II.6.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 II.6.c)) [76,77].

Des réalisations ont été démontrées à partir de ce transistor (SB-CNTFET), des conceptions de cellule de mémoire SRAM (Static Random Access Memory) en prenant quatre ou six SB-CNTFETs (4T ou 6T SRAM) ont été proposées [78,87].

II.4.4. Transistor à grille commandée optiquement (OG-CNTFET)

Un transistor de nanotube à commande optique (OG-CNTFET pour Optically-Gated CNTFET) est basée sur le CNTFET conventionnel de type *P* avec un oxyde de grille en SiO_2 et une grille arrière. Il est couvert par un film mince de polymère photosensible P₃OT [80]. Sous illumination, le polymère photosensible induit un état modifié de la conductance du canal en nanotube de carbone (figure II.7). 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 et y générant des paires électrons-trous. Il est possible de choisir la longueur d'onde à laquelle le dispositif sera sensible en choisissant le polymère photosensible. Sur ce type de transistors, des caractérisations électriques et optoélectroniques ont été proposé pour plusieurs applications en nanoélectroniques et nanophotonique [79,80].

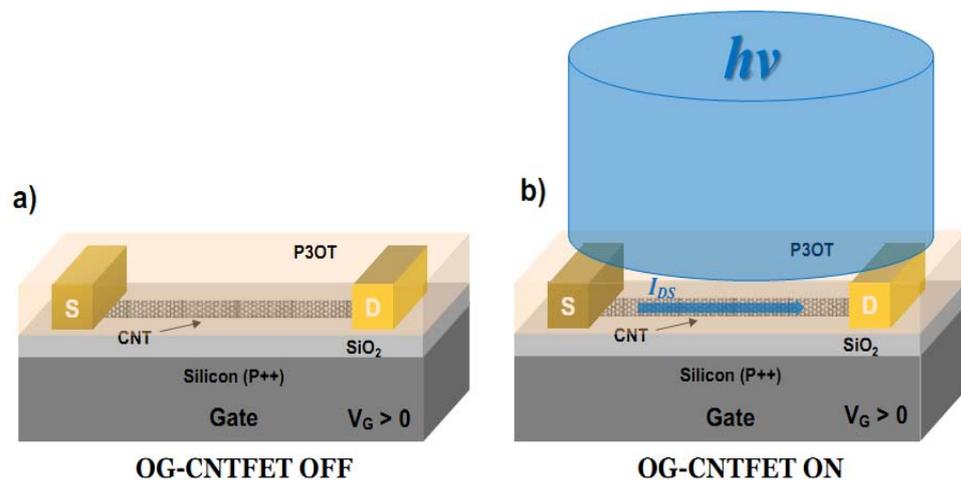


Figure II.7. Schéma d'un OG-CNTFET montrant une polarisation positive de la grille : a) état bloqué ; b) état passante [79,80].

II.5. Comparaison entre les dispositifs

Le tableau II.1. ci-dessous compare succinctement les 4 types de CNTFETs présentés ci-dessus. Toutes les données présentées ont pour des dispositifs avec un seul nanotube de diamètre. Les longueurs sont différentes, il est donc utile que l'on normalise les valeurs de courant. Avec une longueur inférieure à 300nm, le transport est balistique, alors qu'au-delà, le transport des porteurs de charge est supposé être majoritairement diffusif [58,61,68].

Propriété	SB- CNTFET	PG-CNTFET	CNTFET-DG	C-CNTFET
Diamètre	1,4nm	1,4nm	1,4nm	1,6nm
t_{ox} (nm)	15	4	10	8
Matériau diélectrique	ZnO ₂	Al ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	HfO ₂
Metal S/D	Ti	Ti	Ti	Pd
Longueur du NT	260nm	600nm	600nm	80nm
V_{ds} (V)	0.5	0.5	0.6	0.5
I_{ON} (uA/um)	335	71	7	2500
I_{ON}/I_{OFF}	10 ⁴	10 ⁴	10 ⁴	10 ⁶
Pente sous le seuil S(mV/dec)	n-type 312 p-type 130	p-type 63	100lorsque V_{gsAl}	N type :80 P type :70
Transconductance A d'état passant	P type :1160	-	-	N type :6250 P type :3125
Tension de seuil	N type :0.3 P type :-0.5	P type :-0.5	N type :0.3 P type :-1	N type :-0.6 P type :0.5

Tableau II.1. Comparaison des caractéristiques des différents types de CNTFET [61,58,68]

II.6. Géométries du gille d'un CNTFET

II.6.1. CNTFET a grille arrière

La plus générale et la plus simple à fabriquer consiste à utiliser la substrat comme grille. Le premier CNTFET à grille arrière a été fabriqués sur une plaquette de silicium Si oxydé, avec épaisseur d'oxyde de silicium SiO₂ atteignant plusieurs dizaines de nanomètres (dans une estimation de 100 à 150 nm). Un nanotube de carbone sera déposé entre deux métaux nobles qui présentent les électrodes préfabriquées par lithographie. Les métaux nobles sont un type de métal qui pourrait résister à l'attaque d'acide et ne se corrode pas facilement [81]. En comparaison avec un MOSFET silicium, La plaquette de silicium, qui est fortement dopée, se comporte comme une grille arrière. Cette grille, dans le cas d'un substrat dopé permet d'appliquer un potentiel électrostatique sur l'ensemble de l'échantillon [82,91]

Avec cette structure on trouve quelque limitation comme les résistances élevées de contact en ($\geq 1\text{M ohm}$), transductance faible ($g_m \approx 1\text{nS}$) et conduit de faible courant (pour nano ampères) [82]. Un autre inconvénient de la géométrie ouverte est que l'exposition des nanotubes de carbone à l'air conduit à des caractéristiques de type P [59].

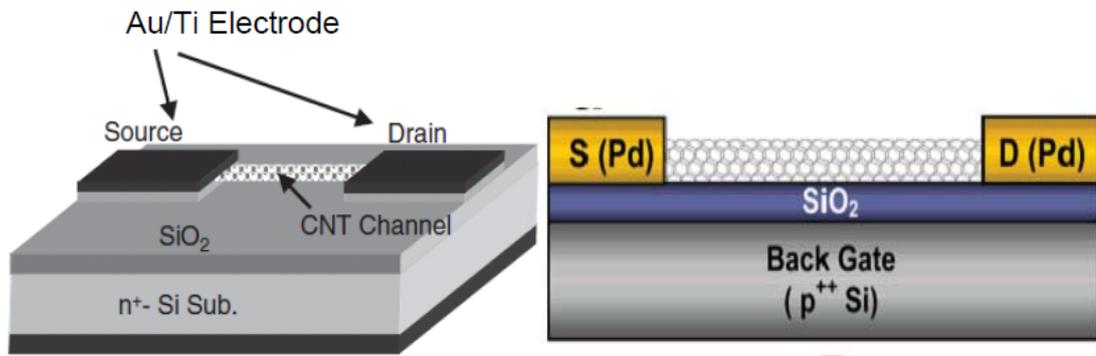


Figure II.8. Un exemple d'un CNTFET à grille arrière [81,82].

II.6.2. CNTFET a grille supérieures

CNTFET discuté jusqu'ici utiliser le substrat conducteur comme électrode de grille arrière, généralement avec des diélectriques de grille d'épaisseur considérable ($\sim 100\text{ nm}$ ou plus)

Le dispositif de transistors CNT à grille supérieure technologiquement le plus compétents fabriqué à ce jour, il permet une comparaison plus directe avec les principales caractéristiques de FET à base de silicium (MOSFET). Figure II.9 montre la structure de transistors CNTFET à grille supérieures avec ses caractéristiques [81,82].

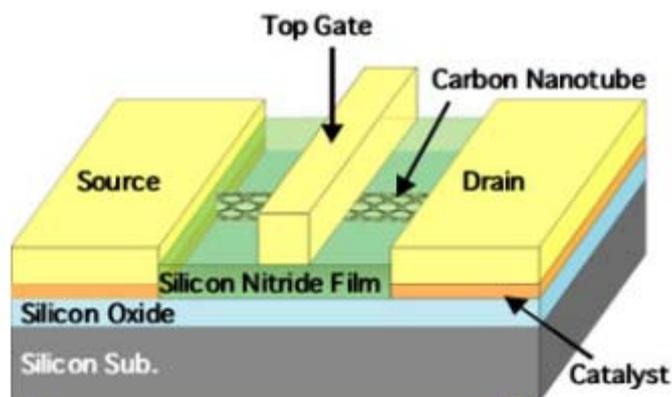


Figure II.9. Un exemple de grille supérieure de CNTFET [82].

Les performances de cette conception se révèle être beaucoup mieux que le CNTFET à grille arrière. En raison de la géométrie du dispositif, le champ électrique augmente et la résistance de contact a été considérablement réduite en raison d'un choix différent de matériau [91].

En revanche, cette structure grille supérieure permet la fabrication à la fois des dispositifs de type « *N* » ainsi que des dispositifs de type « *P* » [59].

Un avantage supplémentaire est qu'elle peut être adaptée pour des fonctionnements à haute fréquence, ce qui n'est pas possible avec des dispositifs à grille-arrière en raison de la grande capacité de recouvrement entre la grille, source et drain [64].

La tension de seuil a été abaissée par rapport à la grille arrière ce qui implique une augmentation de passage de courant dans le CNTFET. Le tableau II.2 présente une comparaison entre les 2 structures :

Paramètres	CNTFET à grille arrière	CNTFET à grille supérieures
Tension de seuil V_{th}	-12V	-0.5
Courant de drain I_{DS}	Dans l'ordre de nano ampère	Dans l'ordre de microampère
Transductance	$\approx 1\text{Ns}$	$3.3\mu\text{S}$
I_{on}/I_{off}	10^5	10^6

Tableau II.2. Comparaison entre CNTFET à grille – arrière et a grille supérieure [81,91].

II.6.3. CNTFET Vertical (V-CNTFET)

Ce nanotube de carbone FET a grille vertical à été proposé par les chercheurs IBM Technologies. Ils présentent un CNTFET alignés verticalement dans laquelle la source et le drain sont empilés verticalement [93].

Par rapport aux transistors planaires, il a deux avantages évidents. Tout d'abord, le canal est posé à la surface du substrat, et la longueur du canal est déterminée par la longueur de la couche diélectrique entre les électrodes source et drain.

De cette façon, il est plus facile de fabriquer des CNTFET avec des canaux courts et une longueur de canal inférieure à 20nm en utilisant la lithographie ordinaire. [92,93].

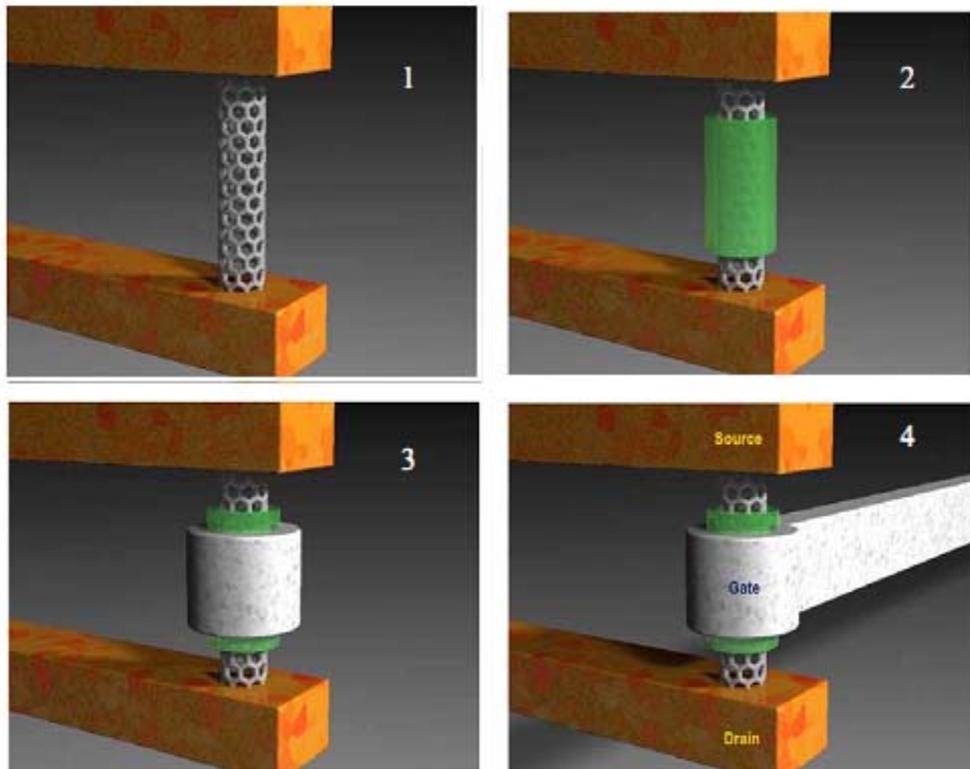


Figure II.10. A première version du CNTFET vertical proposé [58].

Le concept de transistor vertical permet également d'avoir des densités plus élevées, car les zones de source et de drain peuvent être disposées l'une au-dessus de l'autre. La comparaison des transistors à base de CNT ne se limite pas aux dispositifs simulés pour l'année 2016, mais peut être faite avec des modèles plus avancés dans les années à venir, qui croient profondément que le V-CNTFET est un dispositif comparable à Si-MOSFET [58,93].

La comparaison entre un V-CNTFET et un transistor MOSFET de l'année 2016 est donnée dans le tableau II.3.

Caractéristique	V-CNTFET	MOSFET (2016)
V _{dd} (V)	0.4	0.4
Courant de conduction (μA/μm)	2500	1500
g _m (μS/μm)	15000	1000
t (C _{grille} *V _{dd} /I _{dd})	0.08	0.15
S (mV/dec)	65	70
Fuite (Leakage) (μA/μm)	2.5	10
Effective t _{ox} (nm)	1	0.4-0.5

Tableau II.3. Comparaison de V-CNTFET et MOSFET (2016) [61,92,93]

II.7. Paramètres physiques du CNTFET

Pour un transistor CNTFET les paramètres physiques principaux sont celles du canal du transistor CNTFET. En fait, ce sont les dimensions du nanotube (diamètre, longueur) et la capacité de la grille qui est déterminée aussi par l'épaisseur d'oxyde [65,81].

II.7.1. Capacité de grille

Les nanotubes étant similaires dans la plupart des dispositifs, la valeur de la capacité de grille dépend essentiellement de l'épaisseur de l'oxyde, de la longueur de la grille et du type d'oxyde utilisé. Par contre quelque soit le type de grille les valeurs de capacités restent très petites et leur mesure reste difficile [83].

La capacité de la grille (C_G) MIC (Métal – Isolateur – CNT) dépend de deux géométries différentes – planaire ou coaxiale [83,84].

Le CNTFET avec la grille planaire constitue la majorité des transistors à base de nanotube fabriqués jusqu'à aujourd'hui, en raison de leur simplicité et de leur compatibilité avec les technologies existantes [61,91]. Dans le cas de la capacité MIC planaire (figure II.11a), le C_G est calculé ainsi :

$$C_G = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_{ox}}{\ln((t_{ox})/d_t)} \tag{II.1}$$

Où d_t est le rayon du nanotube, t_{ox} est l'épaisseur d'oxyde, ε_{ox} est le constant diélectrique.

Le CNTFET avec la grille coaxiale est une forme idéale ; il est spécialement intéressant parce que sa géométrie permet une électrostatique meilleure que son homologue planaire [84]. Dans le cas de la capacité MIC coaxiale (figure II.11b), le C_G (capacité du gris) est calculée comme suit:

$$C_G = \frac{2 \pi \epsilon_0 \epsilon_{ox}}{\ln(2(t_{ox} + d_t) / d_t)} \tag{II.2}$$

Où d_t est le rayon du nanotube, t_{ox} est l'épaisseur d'oxyde, ϵ_{ox} est la constante diélectrique, L est la longueur de la grille.

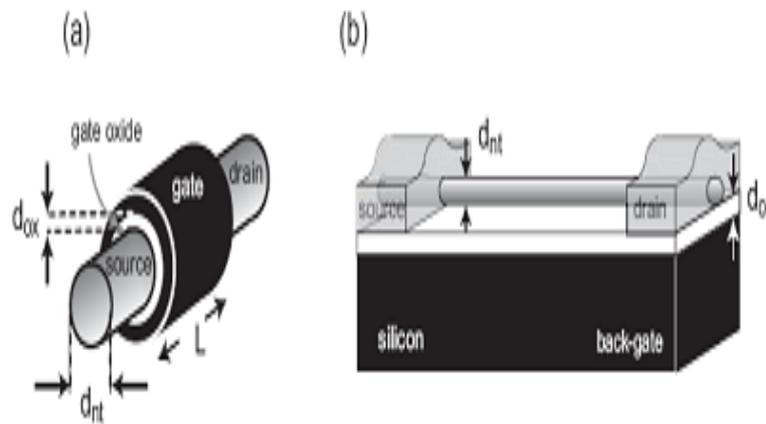


Figure II.11. deux configuration du CNTFET : a) grille coaxiale et b) grille plane [61,83,84]

II.7.2. Energie de la bande interdite (E_g).

Pour les CNTFETs, il est possible de contrôler le gap énergétique par le diamètre. En effet, pour les nanotubes semi-conducteurs, plus le diamètre est faible, plus les niveaux d'énergie autorisés sont éloignés des points K , ce qui engendre une bande interdite E_g plus grande [4,11]. Plus le diamètre du nanotube est petit, plus cet effet est marqué des calculs analytiques montrent que E_g est inversement proportionnelle au diamètre [22]. Par exemple, l'énergie de la bande interdite E_g d'un nanotube de diamètre $d_t=1.6$ nm est d'environ 0.6eV [85].

$$E_g \approx 0.8/d_t \tag{II.3}$$

La tension de seuil des transistors étant dépendante du gap d'énergie du canal, on peut créer des CNTFETs avec des tensions de seuils différentes, qui pourraient notamment être utilisés pour des circuits se composent avec des réseaux de CNTFETs et des résistances.

En optimisant les valeurs des diamètres des CNTFET il est possible de réaliser une famille de portes logiques multi-values [106]. Ces dernières années de nouvelles méthodes sont apparues liées à des développements théoriques et analytiques [86].

II.7.3. Transport balistique

Le diamètre du nanotube est de l'ordre du nanomètre et de quelques centaines de nanomètres à quelques dizaines de micromètres de longueur. D'après le rapport de ses dimensions, le nanotube est considéré comme un élément monodimensionnel (1D). Ce confinement monodimensionnel n'autorise le déplacement des électrons que dans deux directions opposées. Pour des nanotubes dont la longueur du canal ne dépasse pas 300nm, il n'y a pas de dispersion des porteurs [86] : la distance entre deux électrodes étant plus courte que la distance moyenne parcourue par l'électron entre deux collisions, le transport est dit balistique.

Pour s'assurer que le CNTFET fonctionne en régime balistique, il faut satisfaire les hypothèses suivantes [87]:

- ✓ Les dispersions des porteurs sont supprimées dans le nanotube intrinsèque jouant le rôle du canal du transistor. Les porteurs qui traversent le canal du drain à la source ne reviennent donc pas en arrière vers la source (cela signifie que la réflexion des porteurs au drain est négligée).
- ✓ Le courant du drain devant rester constant le long du canal, il est calculé au début du canal avec le potentiel V_{CNT} (potentiel de surface de nanotube de carbone). Au début du canal, les électrons venant de la source remplissent des états « $+k$ » et les électrons venant du drain remplissent des états « $-k$ » (voir figure II.12).

Le courant I_{ON} est limité par la somme des charges introduites dans le canal par la grille. De plus, le courant du drain est exprimé par les paramètres physiques du CNTFET (par exemple, la longueur et le diamètre du nanotube, correspondant à la longueur et à la largeur du canal du transistor traditionnel) [88]. Le courant du drain n'est pas dépendant de la mobilité des porteurs.

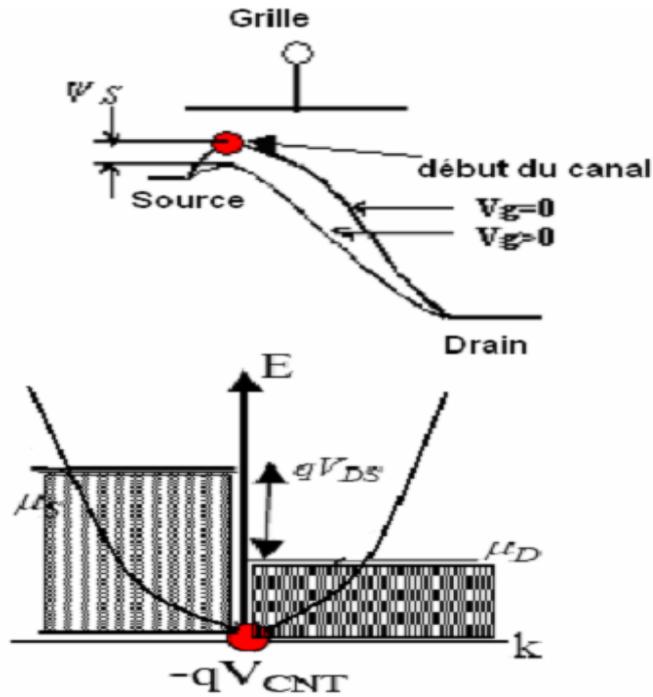


Figure II.12. Structure de bande d'énergie d'un CNTFET, les régions ombrées sont la source et drain [88]

Le potentiel V_{CNT} est défini par quatre capacités C_D , C_S , C_Q (capacité quantique qui n'est pas montrée dans la figure II.13) et en particulier C_G . Car la capacité totale de la grille du CNTFET (C_T) se compose de deux C_Q et C_G intrinsèque en série, ce C_T est donc calculée [87,88]:

$$1/C_T = 1/C_G + 1/C_Q \tag{II.3}$$

En effet, C_G étant beaucoup plus grande que les trois autres capacités, la capacité totale C_T du CNTFET est inférieure à (ou limitée supérieurement à) la capacité quantique C_Q , particulièrement en cas d'utilisation d'un matériau diélectrique de grille élevée « high- κ » [83].

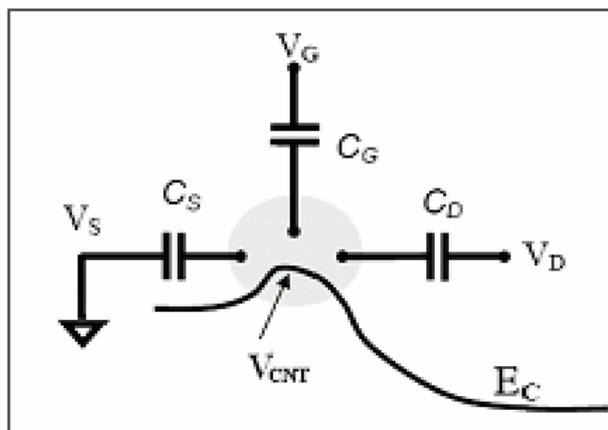


Figure II.13. Les capacités contribuent à définir le potentiel de surface de nanotube de carbone V_{CNT} [89]

II.7.4. Mobilité

La mobilité est la conductance par charge élémentaire, elle détermine la vitesse de déplacement des porteurs dans le semi-conducteur. Pour atteindre de meilleures performances (essentiellement en termes de vitesse de transport et de commutation), un canal court et une grande mobilité sont nécessaires. Les nanotubes de carbone présentent généralement de très petits diamètres (permettant un excellent contrôle électrostatique du canal) sans subir de dégradation de la mobilité; ceux-ci constituent donc des candidats très prometteurs pour dépasser les limites des dispositifs conventionnels à l'échelle nanométrique [35,36].

Des nanotubes de carbone semi-conducteur avec une longueur d'environ des dizaines de micromètres, des contacts électriques ohmiques pour assurer que la mesure de résistance correspond à la résistance du nanotube. Dans ces longs transistors, le transport des porteurs s'effectue par diffusion, ce qui permet la mesure de la mobilité intrinsèque du nanotube semi-conducteur. La mobilité intrinsèque à température ambiante a été mesurée à $79\,000\text{cm}^2/\text{Vs}$ [89].

Cette valeur dépasse toutes les valeurs de mobilité connues des semi-conducteurs et ouvre une voie prometteuse pour l'utilisation des nanotubes dans les transistors à haute fréquence (grâce à leur fréquence élevée), dans les capteurs chimiques ou biologiques (ils agissent alors comme des canaux de détection des différentes molécules) [38].

II.8. Comparaison entre le CNTFET et le MOSFET

Dans cette section, nous allons donner une brève comparaison entre la performance du CNT FET et MOSFET [90,91].

- ✓ En cas de Si-MOSFET la commutation se produit par modification de la résistivité de canal, mais pour CNTFET la commutation se produit par la modulation de la résistance de contact.
- ✓ CNTFET est capable de délivrer des courants d'entraînement trois à quatre fois plus élevé que le MOSFET Si à une surmultiplication de 1 V.
- ✓ CNTFET a une transconductance environ quatre fois plus élevée par rapport à MOSFET.
- ✓ La vitesse moyenne du porteur dans le CNFET est presque le double de celle du MOSFET.

L'avantage de performance courant I_{ON} du CNTFET est soit en raison de la capacité de grille élevée ou en raison de l'amélioration de transport dans le canal. L'amélioration de la vitesse dans le canal pour le CNTFET est due à l'accroissement de la mobilité et de la structure de bande de CNTFET [4,91]. Le tableau II.4 présente quelques propriétés des transistors CNTFET et MOSFET :

	CNT-FET 1 μ m	CNT-FET 1.4 μ m	CNT-FET 3 μ m	MOSFET 100nm	MOSFET 1.4nm
Longueur de grille (nm)	1030	1400	2000	130	14
Courant I_{ON} (mA/ μ m)	0.7	3	3.5	1.4	0.4
Courant I_{off} (nA/ μ m)	7	7	1	3	100
Transductance (mS/ μ m)	200	6700	6000	1000	360
Pente sous le seuil (mV/decade)	700	80	70	90	70
Resistance "ON" (Ω / μ m)	1400	360	340	2600	4200

Tableau II.4. Comparaison entre les CNTFET et MOSFET pour plusieurs longueurs des grilles [4,90].

II.9. Conclusion

Nous avons présenté et d'écrit brièvement le CNTFET avec les différentes polarisations de type P ou N , puis nous avons cité quelques types de transistor CNTFET tel que le SB-CNTFET et C-CNTFET avec un résumé sur le principe de fonctionnement de chaque composant.

Nous avons aussi présenté les principes géométriques qui dépendent du CNTFET, basé sur la description de grille, qui sera utilisé pour mettre en œuvre des moyens d'évaluation des circuits à base de CNTFET.

En particulier, dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés physiques et caractéristiques spécifiques en particulières de CNTFET qui ouvrent des perspectives nouvelles

et la possibilité de réaliser de nouvelles fonctions, inaccessibles à d'autres composants, plus conventionnels.

Dans les chapitres suivants, il semble intéressant d'étudier et de modéliser plus précisément ce composant.

CHAPITRE III

**MODELISATION DE TRANSISTORS
A BASE DE NANOTUBE DE
CARBONE (CNTFET)**

CHAPITRE III :

MODELISATION DE TRANSISTORS A BASE DE NANOTUBE DE CARBONE (CNTFET)

III.1. Introduction

Avec l'avancée actuelle de l'outil informatique aussi bien sur le plan de la rapidité de traitement de l'information que sur le plan de la capacité de stockage des données, la simulation numérique basée sur la modélisation physique peut être utilisée pour prévoir et assurer une meilleure compréhension du comportement d'un phénomène physique. Cette approche devient plus souhaitable pour comprendre les phénomènes physiques résultant de la diminution des dimensions du dispositif.

Les propriétés électroniques atypiques des nanotubes promettent de nombreuses applications en nanoélectronique. Dans ce but, il est important de comprendre les régimes de conduction pilotant le transport électronique au sein de ce nano-objet. Lorsque les dimensions du composant diminuent, l'ensemble des propriétés physiques du système se discrétisent. Les niveaux d'énergie propres de la structure se quantifient et une connaissance précise de la structure électronique devient indispensable. Ces dernières années de nouvelles méthodes sont apparues liées à des développements théoriques et à analytique [86].

Dans cette partie, nous détaillons les modèles utilisés pour déterminer les propriétés électroniques dans le cas des nanotubes de carbone type zigzag. nous commençons par la structure et les propriétés électroniques du CNT puis une présentation de la méthode de « zone-folding » (repliement de zone) permettant d'obtenir la structure des bandes et sous bandes d'un nanotube de carbone dans laquelle sont calculés les paramètres relatifs aux matériaux tels que les largeurs de bande interdite, les densités d'états, en vue de déterminer l'effet de sous bandes sur ces paramètres. Dans cet objectif, nous avons développé un modèle analytique basé sur des

approximations classiques dans le but d'avoir les caractéristiques $I-V$ du transistor à base de nanotube de carbone, ainsi que l'effet de sous bande sur les caractéristiques électriques.

III.2. Propriétés électroniques et structures de bandes d'énergies

La structure électronique du carbone est $1s^2, 2s^2, 2p^2$. Dans le graphène, le carbone est hybridé sp^2 et seules les orbitales $|pz\rangle$ perpendiculaires à la feuille de graphène contribuent au transport électronique. Les atomes de carbone présentent trois liaisons de valence σ (hybridées sp^2) dans le plan de graphène. Les orbitales pz , perpendiculaires à ce plan, vont elles former des liaisons π . L'essentiel des propriétés de conduction est dicté par ces dernières. Dans la zone de Brillouin, la bande de conduction π^* et la bande de valence π convergent aux points K et forment des vallées [4,8].

La structure électronique de bande de nanotube de carbone peut être obtenue à partir de celle du graphène, en imposant des conditions aux limites appropriées suivant la circonférence du nanotube figure III.1. Les bandes de valence et de conduction se rejoignent à l'énergie de Fermi en six points de la première zone de Brillouin qui sont les points K . En ces points, le gap du semi-conducteur s'annule, le graphène est alors un semi-métal dont la surface de Fermi se réduit à seulement six points K . Au voisinage de ces points K , les points de contact des bandes de valence et de conduction peuvent être approximés avec une bonne précision par un cône centré sur le niveau de Fermi. Le nanotube, constitué d'un enroulement d'un plan de graphène, impose par sa géométrie une périodicité qui quantifie le vecteur d'onde k suivant la direction perpendiculaire à son axe [4,22]. Il faut donc avoir:

$$k_{\perp} = n\pi/d_{NTC} \quad (\text{III.1})$$

où d_{NTC} est le diamètre du nanotube et n , un entier.

Ainsi, le nanotube peut être conducteur si et seulement si un des 6 états (k_x, k_y) correspondant au niveau de Fermi du graphène satisfait à cette relation (figure III.1).

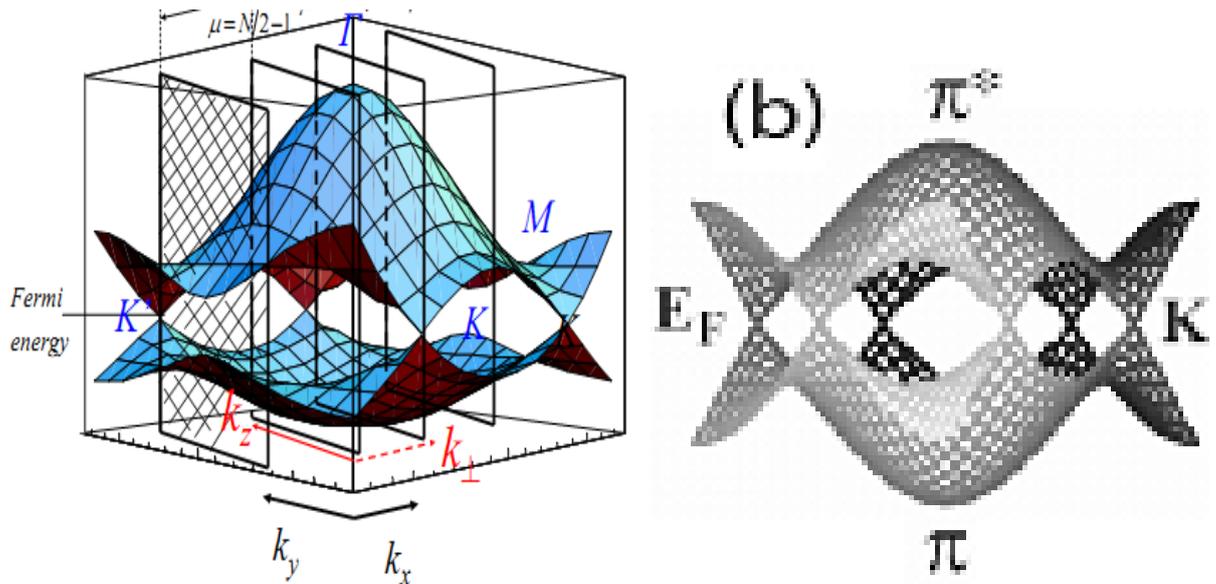


Figure III.1. a) Energie de valence et de conduction en fonction du vecteur d'onde k , b) Structure de bande d'une couche de graphène [4,94]

Dans la zone de Brillouin, au point K , la différence entre les deux bandes décrit la bande interdite du nanotube $E_g(eV)$:

$$E_g \approx 0.8/d_t \quad (\text{III.2})$$

d_t est le diamètre du nanotube.

Si les courbes des deux bandes se croisent, alors le nanotube présente des propriétés métalliques ; sinon, le nanotube présente des propriétés semi-conductrices.

La figure III.2.a montre la disposition des différentes sous-bandes pour les bandes de conduction et de valences associées à un nanotube de chiralité $(19, 0)$. Cette chiralité permet de donner un nanotube semiconducteur de bande interdite égale à $\sim 0,55\text{eV}$ comme le montre la figure III.2.b pour les deux premières sous bandes de la bande de conduction et de valence qui résulte également du modèle de liaisons fortes [94].

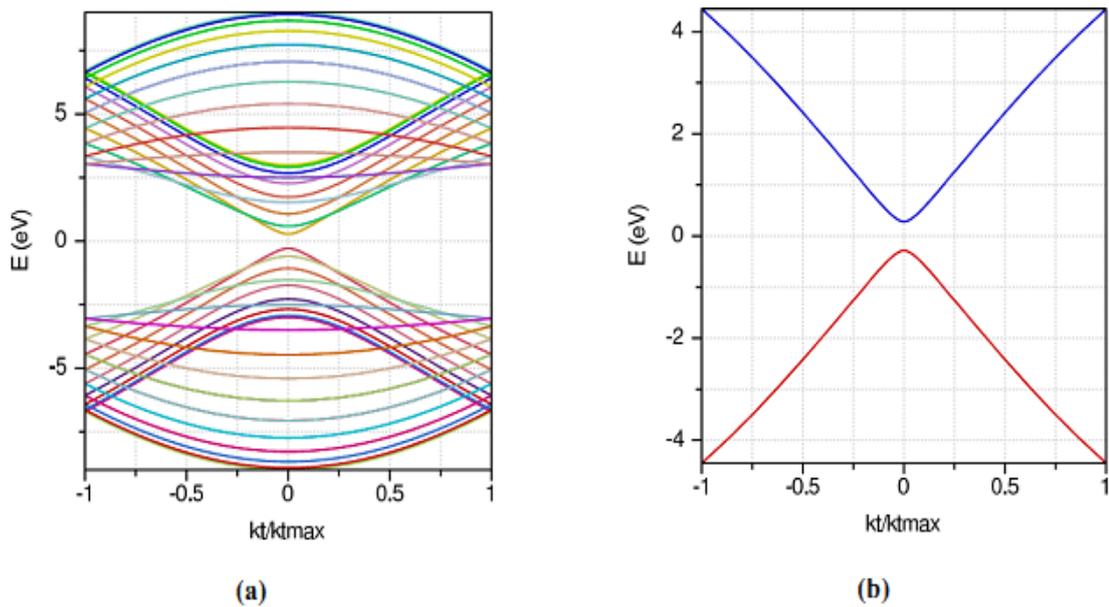


Figure III.2. a) Profil de bande d'énergie d'un nanotube de carbone semiconducteur de chiralité (19,0) résultant du calcul par la méthode de liaison forte. (b) présentation de la première sous-bande [94]

III.3. Méthode de calcul de la structure de bande

III.3.1. Généralités

Lorsque les dimensions du composant diminuent, l'ensemble des propriétés physiques du système se discrétisent. Les niveaux d'énergie propres de la structure se quantifient et une connaissance précise de la structure électronique devient indispensable. De manière plus générale, il existe un certain nombre de méthodes permettant de déterminer de manière théorique la structure de bande d'un matériau. Elles peuvent être classées principalement en deux catégories [12]:

III.3.1.1. Méthodes « ab-initio »

La première catégorie correspond aux méthodes dites « ab-initio », type Hartree-Fock (post Hartree-Fock quand la prise en compte de la corrélation entre électrons est plus précise) ou théorie de la densité fonctionnelle (DFT) qui sont des méthodes ne nécessitant pas l'utilisation de paramètre empirique. Ces méthodes se rapprochent fortement de la résolution exacte de l'équation de Schrödinger et leur degré d'approximation reste faible. Par exemple dans le cas de la méthode post Hartree-Fock, seule l'interaction entre électrons n'est pas parfaitement prise en

compte et donc traitée par une approche de champ moyen initialement, puis corrigée ensuite [95,96].

III.3.1.2. Méthodes semi-empiriques

Les méthodes de cette deuxième catégorie utilisent, comme leur nom l'indique, des paramètres empiriques obtenus à partir des mesures expérimentales ou des résultats des calculs ab-initio. La résolution de l'équation de Schrödinger est alors simplifiée, ce qui peut parfois être accompagné d'une précision moins importante des résultats obtenus, évoluant inversement au nombre d'approximations considérées, mais permet de traiter de plus gros systèmes. Suivant le niveau de précision recherché du modèle, il est donc nécessaire de savoir faire un compromis entre finesse des résultats et temps de calcul [97]. Parmi le nombre de méthodes empiriques disponibles, on peut distinguer principalement deux approches. La première considère le solide comme une boîte d'électrons libres, où l'influence des ions n'est pas prise en compte dans un premier temps. La seconde méthode est l'approximation des liaisons fortes, aussi connue sous le nom de méthode LCAO (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques) [97]. C'est une méthode issue de la chimie et qui considère la position des atomes dans le cristal.

III.3.2. La méthode de « Zone- folding » pour calculer la structure de bande du nanotube

III.3.2.1. Principes

Comme nous l'avons déjà vu précédemment, les propriétés des nanotubes de carbone peuvent être déduites de celles du graphène. On a vu dans le chapitre I qu'un nanotube de carbone pouvait être considéré comme l'enroulement d'un plan de graphène sur lui-même de façon à former un tube. On a également constaté que cet enroulement impose des conditions aux limites périodiques qui induisent une quantification du vecteur d'onde du nanotube ainsi limité à un certain nombre de valeurs permises [98,20].

Selon la direction parallèle à l'axe du tube, les états sont des fonctions de Bloch et la composante K_1 du vecteur d'onde est continue. Selon la direction transverse, la composante K_2 du vecteur d'onde est quantifiée et ne peut prendre qu'un nombre limité de valeurs discrètes [99]. La zone de Brillouin du nanotube est donc constituée d'un nombre fini de lignes parallèles, dont la longueur, le nombre et l'orientation sont définis par le couple d'indices chiraux (n,m) [21,22].

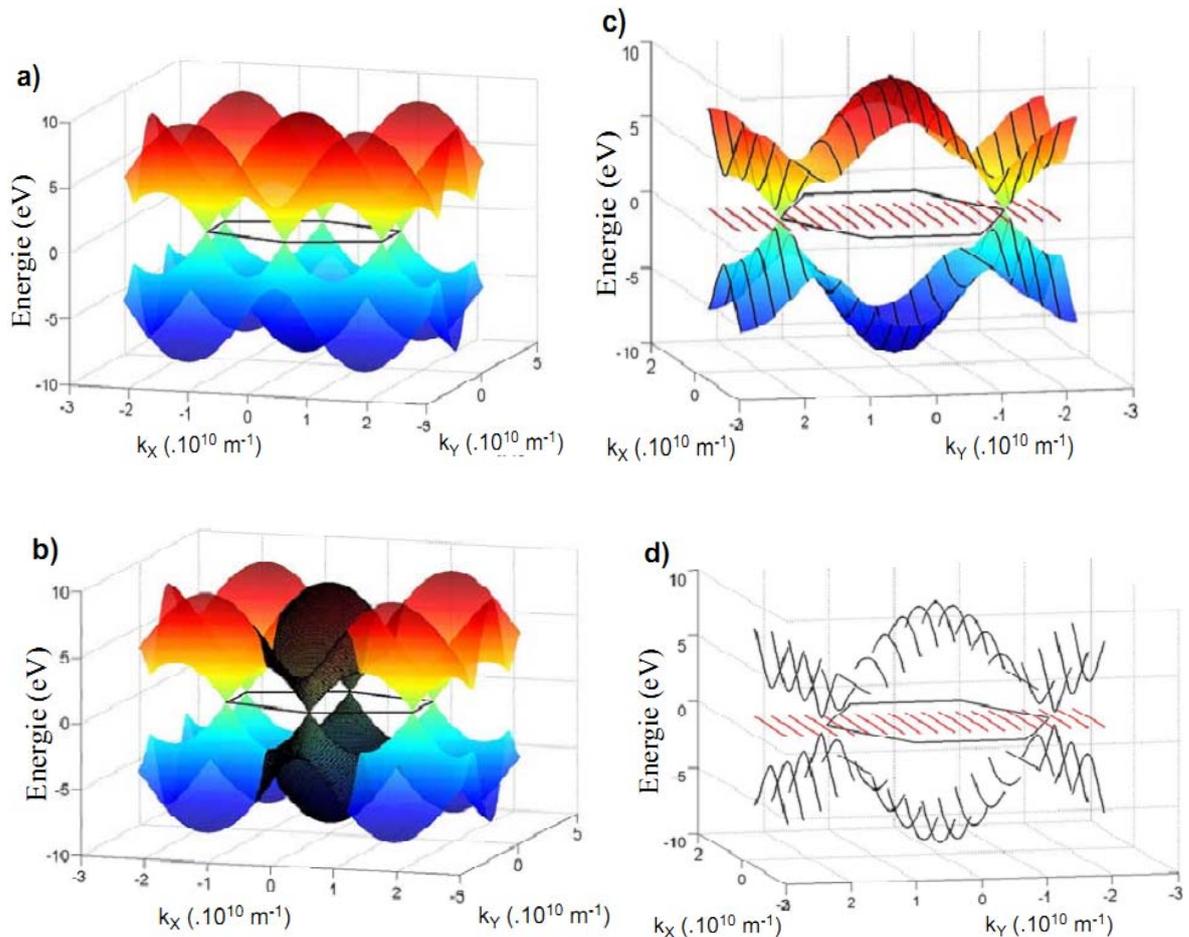


Figure III.3. a) Structure de bande du graphène. L'hexagone noir représente la zone de Brillouin. b) La même figure que précédemment à laquelle a été ajoutée en noir le domaine $E(k)$ à partir duquel va être déduite la structure de bande du CNT selon les dimensions du nanotube c-d) Zone $E(k)$ extraite de la figure précédente [94].

Le principe de la méthode de « zone-folding » (ZF) est de considérer que la structure de bandes d'un nanotube peut être obtenue à partir d'une série des coupes de la structure de bande du graphène, effectués selon les différentes valeurs permises du vecteur d'onde k du nanotube [94,100].

Il est important de rappeler que la méthode de « zone-folding » (ZF) a principalement deux avantages comparativement aux autres méthodes [101]:

- ✓ les calculs sont très rapides pour un degré de précision satisfaisant,
- ✓ en fonction de la chiralité, le nombre d'atomes présents dans la cellule unitaire d'un nanotube peut être de plusieurs centaines, ce qui rend difficile l'utilisation de méthodes ab-initio et pertinente la méthode de ZF.

III.3.2.2. La dispersion électronique $E(k)$.

La relation de dispersion électronique des SWNTs peut être déduite directement de celle du graphène en tenant compte des considérations précédentes. Pour déterminer la structure des bandes des nanotubes, l'approche la plus simple consiste à calculer d'abord la structure de bandes d'un plan de graphène, qui est infini dans deux dimensions. Dans le cas le plus simple, ce calcul donne la relation de dispersion suivante pour la structure électronique d'une couche de graphène [102].

Le calcul de la dispersion électronique du graphène effectuée par la méthode des liaisons fortes est présente comme suit :

$$E_{2D}(k_x, k_y) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}} \quad (\text{III.3})$$

La structure unidimensionnelle (1D) de bande d'un nanotube est donnée par l'approche de "zone folding" (repliement des zones) à l'aide de la structure de bande bidimensionnelle (2D) de graphène (Equation (III.3)). On remplace le vecteur d'onde continu du graphène par un vecteur "semi-quantifié", c'est-à-dire continu selon la direction parallèle à l'axe du nanotube (k) et quantifié selon la direction de la circonférence (k, q onde suivant les ligne indiquée par q) figure III.4. On obtient alors un système de $2N$ équations décrivant les bandes 1D du CNT [92,103].

$$E_{NT}(k, q) = E_{2D} \left(k \frac{K_2}{|K_2|} + qK_1 \right) \quad (\text{III.4})$$

$$K_1 = \frac{-t_2 b_1 + t_2 b_2}{N} \quad \text{et} \quad K_2 = \frac{m b_1 - n b_2}{N}$$

$$\text{Avec} \quad b_1 = b(1/2, 3/2) \quad \text{et} \quad b_2 = b(1/2, -3/2), \quad b = 4\pi/3a$$

Depuis la condition $C_h.T = 0$ est satisfaite, t_1 et t_2 peuvent être exprimées en fonction de m et n [92] comme suit:

$$t_1 = \frac{2m + n}{N} \quad \text{et} \quad t_2 = -\frac{2n + m}{N}$$

$E_{NT}(k,q)$ présente la dispersion d'énergie de nanotube de carbone 1D, E_{2D} Les valeurs de la dispersion d'énergie pour la structure de graphène 2D représenter sur la figure III.4.

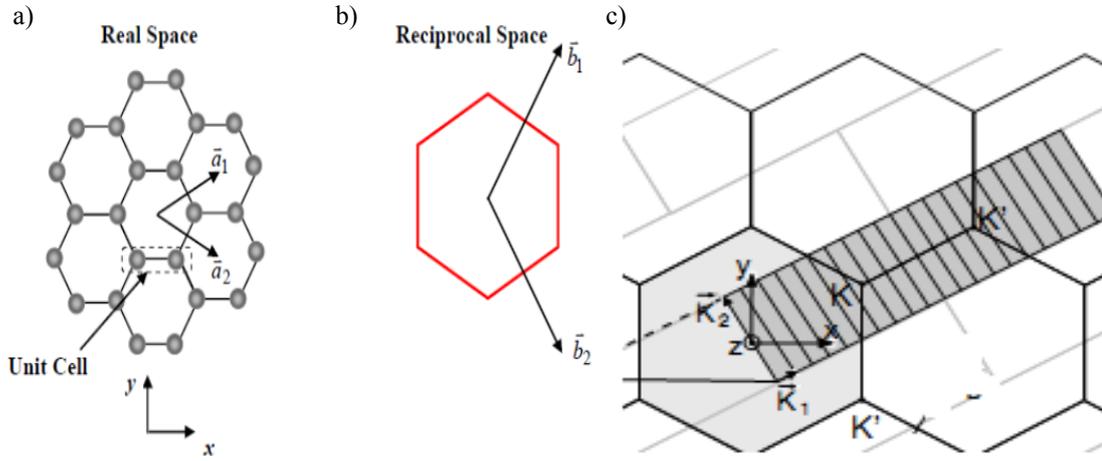


Figure III.4. Zone de Brillouin et espace réciproque, (a) vecteur de base dans le treillis hexagonal de graphène, (b) zone de Brillouin réciproque correspondant aux vecteurs de base b_1 et b_2 , (c) les valeurs permises de k sur les lignes équidistantes de N parallèles à l'axe de tube [92].

Cependant, par cette méthode, les relations de dispersion des CNTs obtenues sont fortement dépendantes de la structure de bande électronique du graphène [103].

III.4. Modélisation physique du CNTFET

On fait comme si la vitesse des porteurs était de $\pm v_T$ (vitesse thermique) ou v_F (vitesse de Fermi). On compte les particules qui traversent une surface S entre deux collisions (une collision peut se faire dans un sens ou dans l'autre, les effets s'annulent). Elle est alors un cylindre de hauteur :

$$\delta x = v_T \tau \quad (III.5)$$

τ : est le temps moyen séparant deux collisions successive (le temps de relaxation)

Le courant total (sens + pour la densité de charge négatif ρ_- , et sens - pour ρ_+) s'écrit :

$$\delta J = (\rho_- - \rho_+) \delta x \quad (III.6)$$

En remplaçant δx de l'équation (III.5) dans (III.6) on aura :

$$\delta J = (\rho_- - \rho_+) \tau v_T \quad (\text{III.7})$$

δJ est le courant dans le sens des x correspondant à la charge traversant S pendant la durée τ

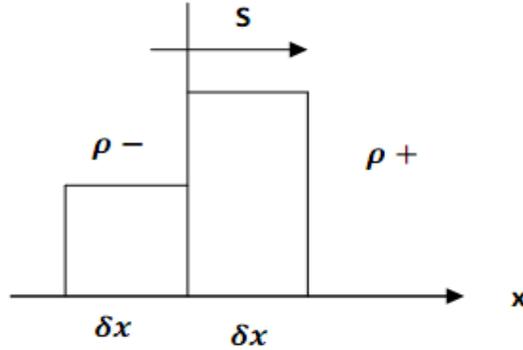


Figure III.5. Diagramme de densité de charge

Donc pendant une seconde, on a une densité de courant :

$$J = \frac{\delta J}{\tau} = v_T (\rho_- - \rho_+) = -v_T^2 \tau \frac{\delta \rho}{\delta x} \quad (\text{III.8})$$

On a $m v_T^2 = kT$, ce qui donne l'expression de densité de courant de diffusion est :

$$J_D = \tau \frac{kT}{m} \frac{\delta \rho}{\delta x} \quad (\text{III.9})$$

Cas d'un système en équilibre :

Dans un système d'équilibre thermique la résistivité est donnée par :

$$\rho = \rho_0 \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right) \quad (\text{III.10})$$

Pour trouver le courant de diffusion à l'équilibre il suffit de calculer la dérivée $\delta \rho / \delta x$:

$$\frac{\delta \rho}{\delta x} = \rho \left(-\frac{qV}{kT} \frac{\delta V}{\delta x} \right) \quad (\text{III.11})$$

Sachant que : $E = -\delta V / \delta x$ ou E étant le champ électrique.

En remplaçant $\delta\rho/\delta x$ de l'équation (III.11) dans (III.8) on trouve :

$$J_D = \tau \frac{kT}{m} \frac{\rho q}{kT} E \quad (\text{III.12})$$

Sachant que $\mu=q\tau/m$, et $\sigma=\rho q\tau/m$ Donc :

$$J_D = -\sigma E$$

σE est le courant de conduction J_C , on a donc $J_C + J_D = 0$.

Cas d'un système hors équilibre :

Il existe dans un système hors équilibre une vitesse moyenne d'entraînement v , donnant une densité totale de courant $J_E = J_C + J_D$ non nul. On a maintenant un courant $J_E = \rho v$ donc :

$$\rho v = \rho \frac{q\tau}{m} E - \frac{\tau kT}{m} \frac{\delta\rho}{\delta x} \quad (\text{III.13})$$

En multipliant l'équation (III.13) par $(m/\tau\rho)$, on trouve l'équation des forces suivante :

$$\frac{m v}{\tau} = qE - kT \frac{\delta}{\delta x} \log|\rho| \quad (\text{III.14})$$

Sachant que : $E = -\delta V/\delta x$,

D'où $-\frac{m v}{\tau}$ est la grandeur d'une fonction qu'on appelle le quasi-niveau de fermi ϕ .
Donc l'équation (III.14) devient :

$$\frac{\delta\phi}{\delta x} = q \frac{\delta V}{\delta x} + kT \frac{\delta}{\delta x} \log|\rho| \quad (\text{III.15})$$

En intégrant l'équation (III.15) on trouve l'équation de résistivité comme suit :

$$\rho = \rho_0 \exp\left(-\frac{qV}{kT} - \phi\right) \quad (\text{III.16})$$

Avec $\rho_0 = \frac{ekT}{q\lambda_{th}^2}$, Φ s'ajoute donc au niveau de Fermi, Avec λ_{th} la longueur de thermique, qui sera la longueur de normalisation utilisée ultérieurement dans mes calculs.

III.4.1. Cas unidimensionnel avec la statistique de Fermi-Dirac

A partir de la statistique de Fermi Dirac la formule qui donne le courant de diffusion est la même à la différence de v_F (vitesse de Fermi) qui remplace v_T :

$$J_D = -v_F^2 \tau \frac{\delta\rho}{\delta x} \quad (III.17)$$

Pour calculer le courant de diffusion il est nécessaire d'exprimer $\frac{\delta\rho}{\delta x}$. Pour cela on a utilisé La statistique de Fermi Dirac à une dimension qui est donné par :

$$dx = \frac{2L}{h} \frac{dp}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (III.18)$$

L : longueur de la structure.

P : moment

$$\text{Avec } E = \frac{p^2}{2m} + qV$$

Pour avoir la densité linéique de charge, on divise dx par L d'où :

$$\rho = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (III.19)$$

$$\frac{d\rho}{\delta x} = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dV} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{(qV + \frac{p^2}{2m}) - E_F}{kT}\right)} \quad (III.20)$$

Posons : $X = \frac{\frac{p^2}{2m} + qV - E_F}{kT}$ donc L'équation (III.20) devient :

$$\frac{d\rho}{\delta x} = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{1 + \exp(X)} \right] \right) \frac{q}{kT} \frac{dV}{dx} dp \quad (\text{III.21})$$

La fonction à intégrer n'a que des valeurs autour de $m v_F$:

$$\frac{d}{dX} \left[\frac{1}{1 + \exp(X)} \right] = \frac{-\exp(X)}{(1 + \exp(X))^2} \quad \text{Si : } X=1, \text{ la fonction vaut } \frac{-2.7}{(3.7)^2}$$

A : $X=1$ correspond $\frac{p^2}{2m} - E_F - qV \cong kT$, et comme $kT + qV \ll E_F$, $(p^2/2m)$ est voisine de $\frac{1}{2} m v_F^2$. ($v_T \approx 10^4$, $v_F \approx 10^6$).

Au de la, les valeurs de la fonction diminuent rapidement en $\exp(-X)$. On peut donc faire l'intégrale en prenant un développement linéaire en p :

$$dX = \frac{p dp}{mkT} \cong \frac{v_F}{kT} dp \quad \text{D'où } dp = \frac{kT}{v_F} dX, \text{ donc l'équation (III.21) devient :}$$

$$J_D = -v_F^2 \tau \frac{2q}{h} \frac{q}{v_F} \frac{dV}{dx} \int \frac{d}{dX} \left[\frac{1}{1 + \exp(X)} \right] dX \quad (\text{III.22})$$

$$\text{Avec : } \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dX} \left[\frac{1}{1 + \exp(X)} \right] dX = -1$$

On a :

$$J_D = v_F \tau \frac{2q^2}{h} \frac{dV}{dx} = -\tau v_F \frac{2q^2}{h} E \quad (\text{III.23})$$

On pose donc que :

$$\sigma = \tau v_F \frac{2q^2}{h} \quad (\text{III.24})$$

On a comme dans la statistique de Maxwell Boltzmann qui est une loi de probabilité ou la distribution utilisée en physique statistique pour déterminer la répartition des particules entre différents niveaux d'énergie. Elle est notamment à la base de la théorie cinétique des gaz.

$J_C + J_D = 0$, Donc

$$J_C = -J_D = \tau \cdot v_F \cdot (2q^2/h) \cdot E \quad (\text{III.25})$$

En présence d'une vitesse moyenne d'entraînement v , donc le courant total $J_C + J_D$ n'est plus nul. On a maintenant un courant $J_E = \rho v$ d'où : $J_E = J_C + J_D$

La substitution des équations (III.17) et (III.24) dans cette dernière équation de courant donne :

$$\rho v = v_F \tau \frac{2q^2}{h} E - \tau v_F^2 \frac{\delta \rho}{\delta x} \quad (\text{III.26})$$

On peut trouver l'équation des forces en multipliant l'équation (III.26) par le terme $(m/\rho\tau)$ par la proposition de :

$$\rho \cong \frac{2q}{h} m v_F \quad (\text{III.27})$$

On obtient :

$$\frac{\delta \rho}{\delta x} = \frac{2q}{h v_F} \left(qE - \frac{m v}{\tau} \right) \quad (\text{III.28})$$

De cette équation on peut déduire la résistivité du tube de carbone, donc on peut calculer la résistance d'un nanotube de carbone avec :

$$R_{CNT} = \rho (L/S) \quad (\text{III.29})$$

L : la longueur du nanotube de carbone,

S : section du nanotube de carbone,

III.4.2. Cas bidimensionnel 2D

Comme dans le cas unidimensionnel, on a :

$$J_D = -v_F^2 \tau \overrightarrow{\text{grade}} \rho \quad (\text{III.30})$$

Puis, successivement :

$$dx = \frac{2 Ll}{h^2} \cdot \frac{2 \pi PdP}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{III.31})$$

L : longueur et l : périmètre du CNT.

Avec :

$$E = \frac{P^2}{2m} + qV \quad (\text{III.32})$$

D'où ;

$$\rho = \frac{q}{h^2} \int \frac{2\pi PdP}{1 + \exp\left(\frac{\left(\frac{P^2}{2m}\right) + qV - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{III.33})$$

$$PdP = mkTd\left(\frac{P^2}{2mkT}\right) \quad (\text{III.34})$$

Ce qui permet d'intégrer ρ . Pour intégrer cette expression on pose :

$$X = \frac{P^2}{2mkT} \quad \text{et} \quad A = \exp\left(\frac{qV - E_F}{kT}\right) \quad (\text{III.35})$$

$$\rho = \frac{2q}{h^2} \int_0^\infty 2mkT \frac{dX}{1 + A \exp X} = \frac{2q}{h^2} 2\pi mkTI \quad (\text{III.36})$$

$$I = \int_0^{\infty} \frac{dX}{1 + A \exp X} = \int_0^{\infty} \left(1 - \frac{A \exp(X)}{1 + \exp(X)} \right) dX \quad (\text{III.37})$$

$$I = \int_0^{\infty} dX - \frac{A \exp(X) dX}{1 + A \exp(X)} = B - \int_0^{\mu_0} \frac{d\mu}{1 + \mu} \quad (\text{III.38})$$

Avec $\mu_0 = A \exp(B)$

$$I = B - \log(1 + A \exp(B)) + \log(1 + A^{-1}) \quad (\text{III.39})$$

$$I = I(B) + I(0)$$

$$B \longrightarrow \infty \Rightarrow I = -\log A + \log(1 + A) = \log(1 + A^{-1}) \quad (\text{III.40})$$

$$I = \log \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right) \right) \quad (\text{III.41})$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial X} = \frac{2q}{h^2} 2\pi m kT \left(\frac{-q}{kT} \frac{\partial V}{\partial X} \right) \frac{\exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right)}{1 + \exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right)} \quad (\text{III.42})$$

Ce qui s'écrit :

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial X} = -\frac{2q^2}{h^2} 2\pi m \frac{\exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right)}{1 + \exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right)} \frac{\partial V}{\partial X} \quad (\text{III.43})$$

D'où :

$$\vec{J}_D = v_F^2 \tau \frac{2q^2}{h^2} 2\pi m \frac{\exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right)}{1 + \exp \left(\frac{E_F - qV}{kT} \right)} \overrightarrow{\text{grade} V} \quad (\text{III.44})$$

Dans l'expression précédente, les ordres de grandeur sont $E_F \approx 1 \text{ eV}$, $k_B T \approx 25 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$.

La tension appliquée est de l'ordre de 25mV également (qui donne une zone dépeuplée de l'ordre de la longueur de Debye).

Par hypothèse on posera, que : $\exp((E_F - qV)/kT) \gg 1$ D'où :

$$\begin{aligned} \vec{J}_D &= v_F^2 \tau \frac{2q^2}{h^2} 2\pi m \overrightarrow{\text{grade}V} \\ \vec{J}_D &= v_F^2 \tau \frac{2q^2}{h^2} 2\pi m \cdot \vec{E} \end{aligned} \quad (\text{III.45})$$

D'où :

$$\sigma = v_F \tau \frac{2q^2}{h} \frac{2\pi m v_F}{h} \quad (\text{III.46})$$

$\frac{2\pi m v_F}{h} \cdot l$ Représente le nombre d'état perpendiculairement à l'axe du cylindre puisque v_F est la vitesse maximale des porteurs.

III.5. Equation de courant de drain I_{ds}

Considérons un système balistique unidimensionnel de longueur L relié à deux réservoirs (les électrodes amenant le courant) (voir figure III.6.a). Les contacts entre le système et les réservoirs sont 'parfaits', c'est-à-dire qu'on considère qu'il n'y a pas de réflexion des électrons allant du système vers les réservoirs (ce n'est pas nécessairement le cas dans l'autre sens). Ceci a pour conséquence que tous les électrons de vecteur d'onde $+k$ proviennent uniquement du réservoir 1 (de gauche) et ces états se dépeuplent uniquement dans le réservoir 2 (de droite) et réciproquement pour $-k$ [67,87].

Ainsi, sous polarisation nulle, le courant doit être nul ce qui implique que le potentiel du fil est aligné aux potentiels des réservoirs. Lorsqu'on applique une différence de tension entre les réservoirs, la variation de potentiel dans les réservoirs va être négligeable en raison de la très forte densité d'état [86,106] :

$$(\mu_1 - \mu_2) = -q(V_1 - V_2) \quad (\text{III.47})$$

Par contre, dans le conducteur mésoscopique, le quasi-niveau de Fermi des électrons de vecteur d'onde $+k$ va s'aligner avec celui du réservoir de gauche car aucun électron provenant du

réservoir de droite ne peut être dans un état de vecteur d'onde positif (figure III .6.b); Idem pour $-k$ et le réservoir de droite. Il apparaît une distribution hors-équilibre qui va entraîner l'apparition d'un courant. A fin de calculer le courant, on considère que seuls les électrons de vecteur d'onde positif et d'énergie comprise entre μ_1 et μ_2 vont conduire le courant [86].

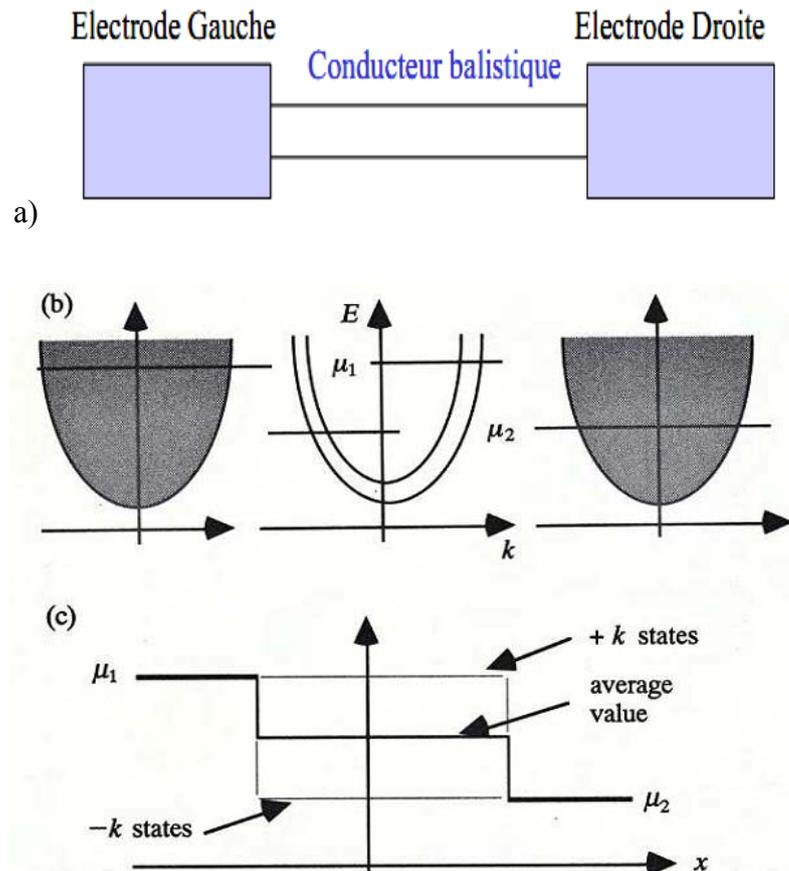


Figure III.6. (a) Schéma d'un conducteur balistique 1D connecté à 2 contacts appelés aussi réservoirs (b) Structure de bande électronique, (c) Potentiel dans le système, on définit une valeur moyenne entre le potentiel des états $+k$ et $-k$ (pseudo niveau de Fermi) [67].

À l'équilibre, les niveaux de Fermi de chaque zone sont alignés. Ainsi, les niveaux de Fermi des métaux (ou des accès) sont alignés avec le milieu de la bande interdite du nanotube intrinsèque. Les hypothèses suivantes sont posées [87,88] :

- le canal est suffisamment court (50-200 nm) pour que le transport y soit balistique (pas de dispersion des porteurs),

- les électrons issus de la source remplissent les états $+k$ de la partie intrinsèque du canal (Figure III.6.c)) et ceux issus du drain remplissent les états $-k$ à condition que les contacts soient « sans réflexion ».

Ces hypothèses nous permettent de calculer la charge de manière « simple » (i.e. sans se préoccuper de la réflexion des porteurs aux interfaces) et d'utiliser le formalisme de Landauer dans le calcul du courant. Les états sont alors remplis selon la distribution de Fermi correspondante (Figure III.7).

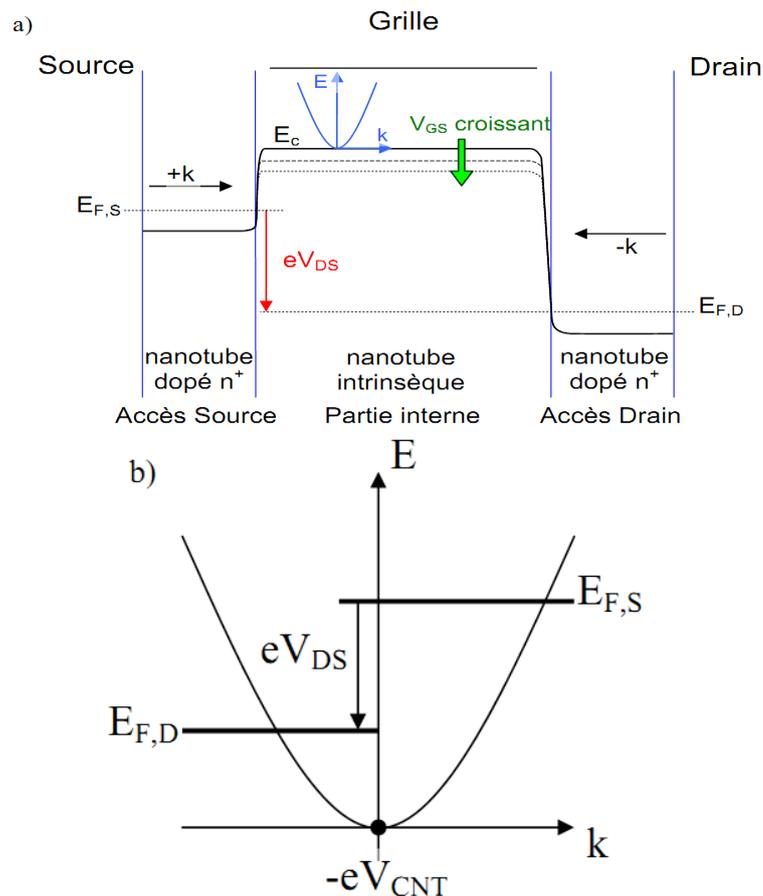


Figure III.7. a) Représentation schématique simplifiée du bas de la bande de conduction selon l'axe source-drain pour $V_{DS} > 0$ V. b) Niveau d'énergie des électrons dans la bande de conduction selon le vecteur d'onde dans la partie interne dont le bas de bande est modulé par le potentiel de canal V_{CNT} [106].

Lorsque la tension V_{GS} augmente, elle augmente le potentiel du canal V_{CNT} , qui abaisse la bande de conduction de la partie interne, et permet le passage des électrons (un courant non nul existe alors si V_{DS} est non nul). Une augmentation de V_{GS} implique également une augmentation du nombre d'électrons dans la bande de conduction de la partie interne. Cette charge provoque

une différence de potentiel entre V_{GS} et V_{CNT} à travers la capacité d'oxyde de grille C_{INS} (lorsque V_{GS} augmente, V_{CNT} n'est pas augmenté de la même quantité) [67,106].

Dans la littérature, deux manières de prendre en compte la charge accumulée dans le canal du transistor à nanotube sont décrites : soit cette charge est calculée de manière numérique (par résolution des fonctions de Green non-équilibrées ou de l'équation de Boltzmann [104]).

Le régime « classique » correspond au cas du transistor MOS Silicium, où C_Q est très supérieur à C_{INS} , (la capacité de l'oxyde de grille). Dans ce cas, V_{GS} est supérieur à V_{CNT} , le régime de fonctionnement dépend de la charge accumulée dans le canal.

À l'inverse, le régime quantique correspond à $C_Q \ll C_{INS}$, on a alors $V_{GS} \approx V_{CNT}$. La capacité grille-source C_{GS} est, selon le régime, plus ou moins dépendante de la capacité d'oxyde ou de la capacité quantique. La capacité grille-source est définie par [88] :

$$C_{GS} = \frac{dQ_{CNT}}{dV_{GS}} \quad (\text{III.48})$$

Avec Q_{CNT} la charge stockée dans le canal.

Définissons également le potentiel du canal [104]:

$$V_{CNT} = V_{GS} + \frac{Q_{CNT}}{C_{INS}} \quad (\text{III.49})$$

Selon l'équation III.49, il est nécessaire de connaître la charge Q_{CNT} pour évaluer le potentiel du canal.

$$Q_{CNT} = q \rho_{CNT} L \quad (\text{III.50})$$

L : la longueur de grille, ρ_{CNT} densité totale de charge dans le nanotube donné par la relation III.27.

Le courant drain-source dans la structure CNTFET est calculé par la formule de "Landauer-Buttiker" qui suppose un canal unidimensionnel avec un transport balistique. Après intégration, la forme analytique du courant de drain est établie [62, 106].

$$I = \frac{2q}{h} \int_{E_c}^{\infty} [f(E - \mu_1) - f(E - \mu_2)] M(E) dE \quad (\text{III.51})$$

M est le nombre de canal pour les électrons se propageant d'électrode 1 vers 2 (supposé indépendant de l'énergie).

$$f(E - \mu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right)} \quad (\text{III.52})$$

La distribution de fermi des deux niveaux μ_1 et μ_2 , dans notre cas source et drain respectivement.

En développant la fonction de Fermi en le remplace dans l'équation (III.51) pour développer l'équation du courant, finalement on trouve la formule suivante [61] :

$$I_{DS} = \frac{4qk_B T}{h} \sum_p [\ln(1 + \exp \zeta_S) - \ln(1 + \exp \zeta_D)] \quad (\text{III.53})$$

Avec $\zeta_i = (V_{CNT} - \Delta_p - \mu_i) / k_B T$ avec $i = (S, D)$.

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 axial des électrons, il en résulte que la bande de conduction est constituée de multiples sous bandes comme il est montré sur la figure III.8.

Dans cette résolution, le diamètre de nanotube d_t est impliqué dans le calcul de l'énergie de la première sous-bande Δ_1 de conduction, dans la détermination du nombre de sous-bandes (p) nécessaire pour le calcul du courant. [105]:

$$\Delta_1 = \frac{V_{\pi} \cdot a}{d} = \frac{E_g}{2} \quad \text{Avec} \quad \Delta_p = \Delta_1 \frac{6p - 3 - (-1)^p}{2} \quad (\text{III.54})$$

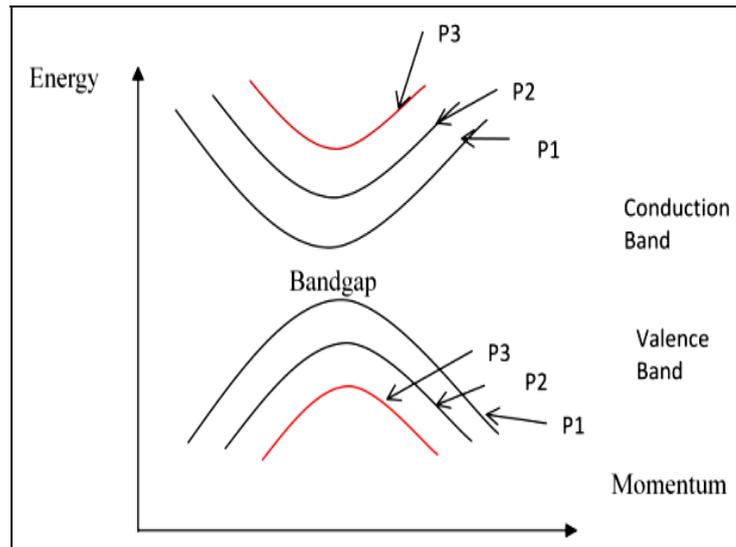


Figure III.8. schéma de principe montrant les 3 premières sous bandes [106] .

Si le nanotube est posé sur un plan d'oxyde de hauteur t_{ox} , de permittivité ϵ_{ox} , la capacité est [83] :

$$C_{INS} = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_{ox}}{\ln((t_{ox})/d_t)} \quad (\text{III.55})$$

Si le nanotube intrinsèque est entouré de grille coaxiale, toutes deux séparées par un oxyde d'épaisseur t_{ox} , l'influence de la grille est plus importante [84] :

$$C_{INS} = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_{ox}}{\ln[2(t_{ox} + d_t)/d_t]} \quad (\text{III.56})$$

III.6. Conclusion

Cette étude porte sur la modélisation numérique de la résistance d'un Nanotube de Carbone dans des transistors à base de nanotubes de carbone, CNTFET. La description du fonctionnement de ce transistor à accès source et drain dopés met en évidence la nécessité de calculer la charge et le potentiel du canal afin d'évaluer finalement le courant de drain. Plusieurs travaux décrivant la relation entre l'énergie et l'onde de propagation k , nous avons mis en application un calcul basé sur la physique de l'énergie de sous-bandes. Ce calcul, obtenu à partir d'une méthode « zone-folding » pour la simulation de la dispersion d'énergie $E(k)$.

Le potentiel est également fonction de la polarisation de grille. Pour le calcul de la densité de charge, on a utilisé une statistique classique avec des hypothèses simplificatrices basées sur la statistique de Maxwell-Boltzmann et la statistique de Fermi-Dirac. Le modèle intègre une approche de calcul analytique pour la densité de charge. Ensuite, le courant de drain, calculé en utilisant le formalisme de Landauer, est fonction du potentiel du canal.

CHAPITER IV

RESULTATS ET DISCUSSION

CHAPITRE IV :

RÉSULTATS ET DISCUSSION

IV.1. Introduction

Ce chapitre présente les résultats obtenus de la recherche effectuée. Une explication détaillée en commençant par la simulation de la structure de bande CNT à la simulation du courant de drain dans le CNTFET, ainsi que les effets géométriques seront discutés.

La discussion sera basée sur les résultats de la simulation de l'effet de diamètre du CNT sur l'évolution des performances du transistor. Nous présenterons les profils énergétiques de la sous-bande le long du canal et leur effet sur les caractéristiques de transistor CNTFET, puis une étude thermique du dispositif sera présentée.

IV.2. Simulation de la structure de bande (Dispersion électronique $E(k)$).

La méthode de « zone-folding » nous a permis de mettre en avant l'influence de la chiralité (n,m) sur les structures des bandes obtenues et donc sur le caractère métallique ou semi-conducteur des nanotubes étudiés. Nous nous intéressons plus particulièrement aux nanotubes semi-conducteurs type zigzag, la simulation de la structure de bande ne peut être réalisée que lorsque l'équation de la dispersion d'énergie $E(k)$ (énergie en fonction d'onde) est déterminée.

Toutefois, l'équation de dispersion d'énergie $E(k)$ doit être liée à la première, deuxième et troisième sous bande afin de déterminer la position des sous bandes dans la structure de bande. Autour du cône Dirac, cette équation devient, par développement limité autour de k_F (autour de $k=0$ ou les bandes sont supposées de forme circulaire) et en accord avec les autres formalismes utilisés dans la littérature [99], l'équation de dispersion d'énergie $E(k)$ peut être exprimée par :

$$E_q^\pm(k) \cong \pm \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{2}{d_t}\right)^2 \cdot \left(q \pm \frac{\alpha}{3}\right)^2 + k^2} \quad (\text{IV.1})$$

$$\Delta E_g = E_{q=0}^+(k=0) - E_{q=0}^-(k=0) = \frac{2a\gamma_0}{d_t} \quad (\text{IV.2})$$

Où ΔE_g est l'énergie de gap, d_t est le diamètre de nanotube CNT, γ_0 est l'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone, sa valeur varie entre 2,5 et 3,03 eV, a correspond à la distance entre deux atomes de carbone ($a=0.142\text{nm}$), q est un variable entier, $q=0, \dots, N-1$, compte les bandes disponibles, N est le nombre des cellules graphitiques unitaires dans une circulation de graphène enroulé en nanotube (voir chapitre I), tandis que k est la partie du vecteur d'onde qui décrit continuellement les états dans une sous-bande donnée (associé à la direction parallèle à l'axe de nanotube de carbone) [99-101].

α est le reste de la division de $(n-m)$ par 3. $\alpha = 0$ si le nanotube est métallique et $\alpha = \pm 1$ s'il est semiconducteur. La relation détaillée entre les indices et la relation de quantification de la 1^{re} Zone de Brillouin (ZB) du graphène sont illustrées sur la figure IV.1 :

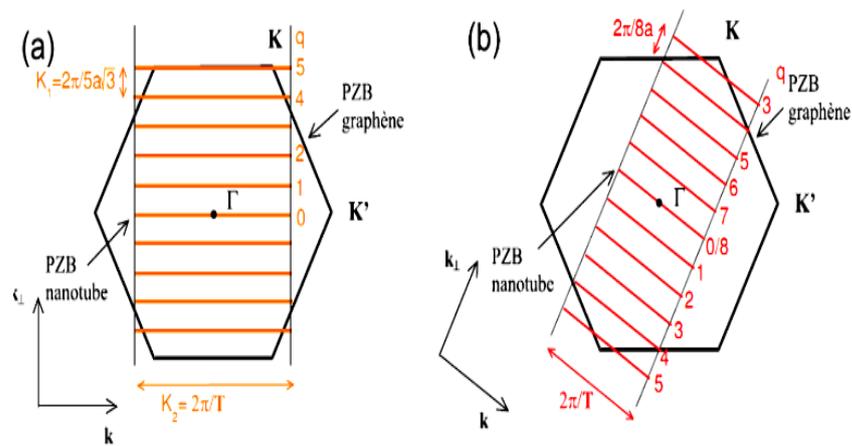


Figure IV.1. Première zone de Brillouin du nanotube de carbone: a) pour un armchair (cas d'un métal), b) pour le type zigzag (cas de semi-conducteur) [101].

Notons que l'indice q est aussi appelé moment (ou indice) rotationnel.

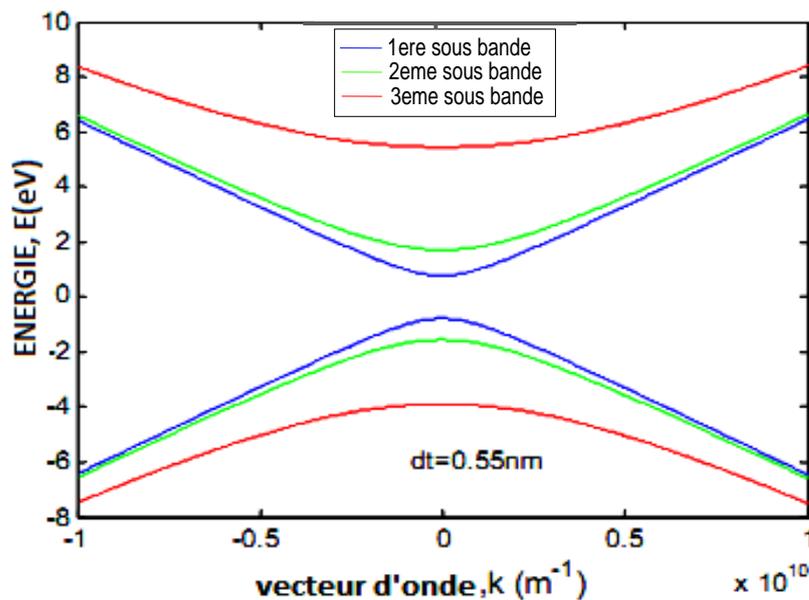


Figure IV.2. La dispersion électronique d'énergie $E(k)$ avec les sous-bandes de CNT

La figure IV.2 montre les courbes de simulation de la dispersion d'énergie $E(k)$ basée sur l'équation (IV.1) qui est valable près de $k=0$. Ces courbes sont tracées pour les trois premiers sous bandes. La simulation montre que la première sous bande a un écart de bande court par rapport a la deuxième et la troisième sous bande qui est la plus grande.

Ceci indique que les porteurs se déplacé facilement de la bande de valence a la bande de conduction dans la première sous bande en raison de sa petite bande interdite par rapport aux autres sous bandes

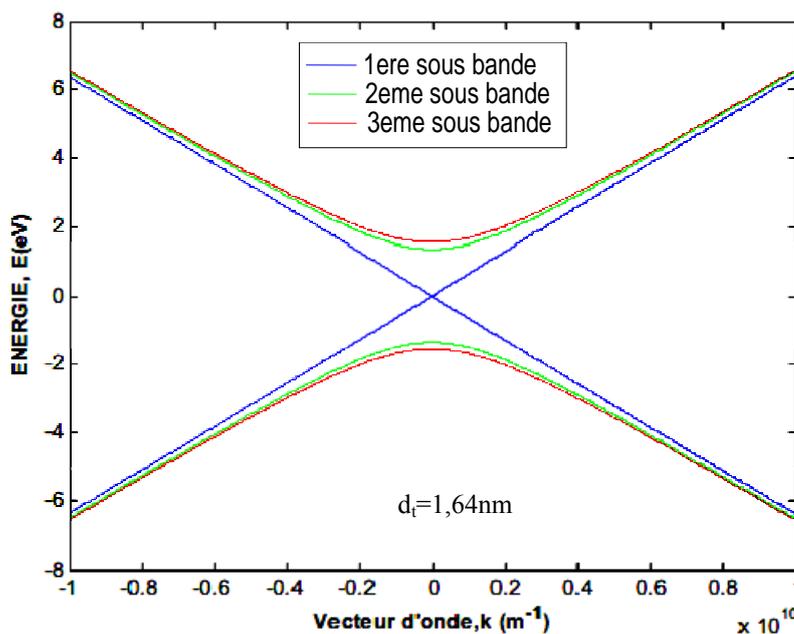


Figure IV.3. La dispersion électronique d'énergie $E(k)$ avec les sous-bandes de CNT, le cas d'un métal.

Dans le cas d'un métal, la figure IV.3. présente la simulation de la dispersion d'énergie $E(k)$ pour un diamètre $d_t=1,64\text{nm}$, la simulation montre que l'écart de la première bande est nul ce qui facilite le déplacement des quantités importants d'électrons, (déplacement des électrons dans un métal).

Par contre, les autres sous bandes présentent un écart d'énergie important qui diminue le déplacement des porteurs, les sous bande non pas proche de premier sous bande ce qui diminue le déplacement des porteurs de 3^{ème} sous bande vers le 1^{ère} sous bande

IV.3. Modélisation et simulation de la densité d'états (DOS)

Comme la structure de bande est unidimensionnelle 1D, la densité d'état (Density of States, DOS) obtenue par dérivation de celle-ci présente des pics appelés singularités de van Hove(SvH) en bas (et haut) de chaque sous-bande. De plus, dans le cas des bandes linéaires, la densité d'état est constante [94,106].

L'équation de la DOS peut être obtenue en substituant l'équation de $dk=2\pi dN/L_x$, pour la dérivation de l'équation (IV.2). On note que l'équation utilisée (équation (IV.1)) réorganisé en terme de vecteur d'onde k et simplifier pour donner l'équation suivante :

$$k = \sqrt{\frac{4\beta^2}{E_g} \left(E - \frac{E_g}{2} \right)} \quad (\text{IV. 3})$$

$$\beta = \left(\frac{2}{d_t} \right)^2 \cdot \left(q \pm \frac{\alpha}{3} \right)^2 \quad (\text{IV.4})$$

$$E_g = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2\beta} \quad (\text{IV.5})$$

Le résultat donne de l'équation DOS était :

$$DOS = \frac{dN}{dEL_x} = \frac{\beta}{2\pi\sqrt{E_g}} \left(E - \frac{E_g}{2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{IV.6})$$

Le terme β utilisé est tirée de l'équation (IV.2) qui se compose de l'équation de sous bande. Cela signifie que chaque sous-bande aura sa propre valeur β , ce qui permet la simulation de DOS à différentes sous bandes.

La densité des états de SWCNT, tel que discutée précédemment est donnée par l'équation (IV.6) ou nous simulons la première sous bande présentée sur la figure IV.4. :

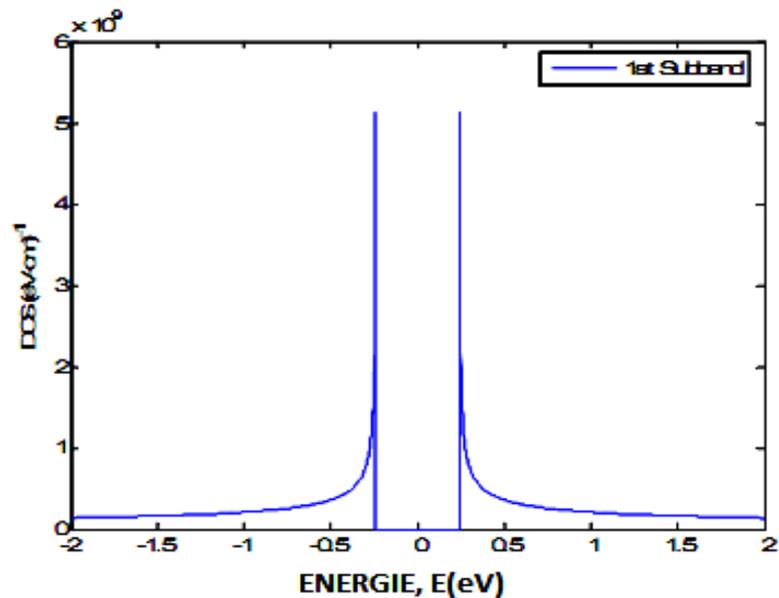


Figure IV.4. Densité d'Etat pour la première sous bande

Lorsqu'on a tracé la variation de dispersion d'énergie ' $E(k)$ ', la densité d'états de nanotube $DOS(E)$ varie en conséquence de $E(k)$ comme l'indique la Figure IV.4. Nous pouvons observer une densité d'états symétrique autour du niveau de Fermi avec le maximum et le minimum juste au-dessus de la bande de conduction et juste au-dessous de la bande de valence respectivement

IV.4. Simulation du courant de drain $I(V)$

Comme on le savait déjà à propos du silicium semi-conducteur, la caractéristique $I(V)$ se compose de deux régions, linéaires et de saturation. Toutefois, cette recherche décrit sur la modélisation du courant de drain $I(V)$.

Les courbes présentées dans cette partie sont les caractéristiques calculées d'un transistor à nanotube de carbone. Connaissant le jeu de paramètres associés à la géométrie du transistor à nanotube utilisé, le courant de drain peut alors être calculé en utilisant l'organigramme (figure IV.5) suivant:

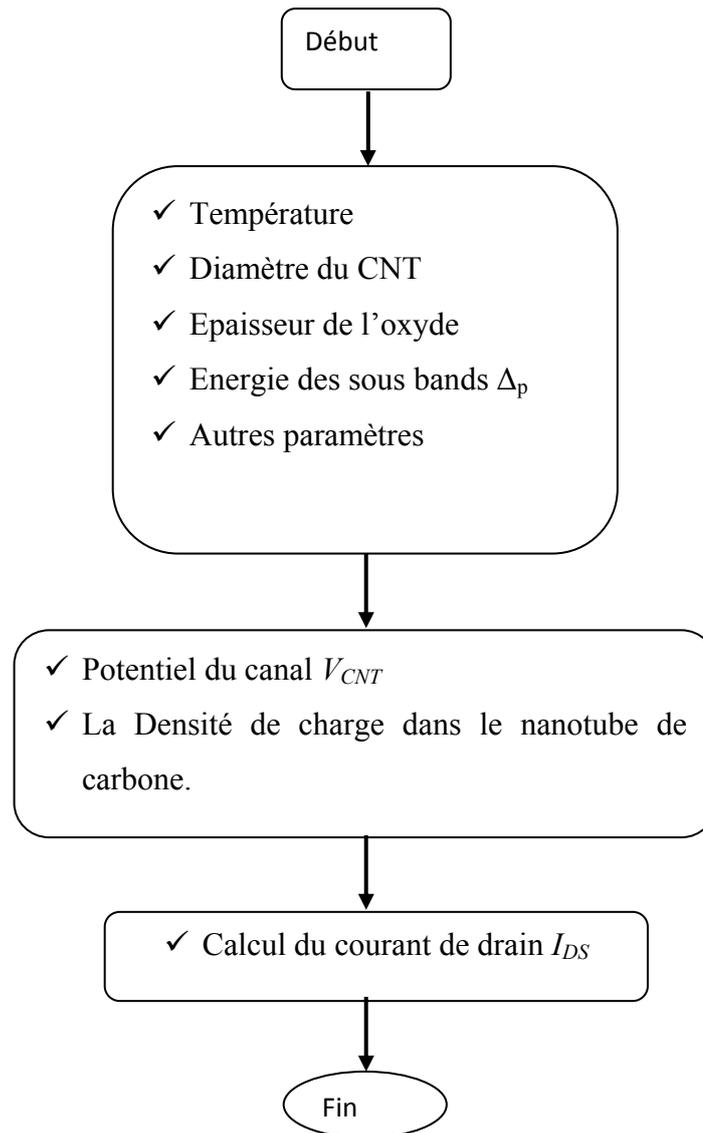


Figure IV.5. Organigramme de calcul du courant de drain

La simulation établie par MATLAB 7 utilisant les différentes équations montre précédentes, sur un nanotube de carbone de géométrie coaxial avec un diamètre de 0.55nm et une longueur de 200nm a été simulée avec une couche de SiO_2 comme couche d'oxyde (figure IV.6). L'épaisseur de la couche d'oxyde a été considérée égale à de $t_{ox}=2\text{nm}$.

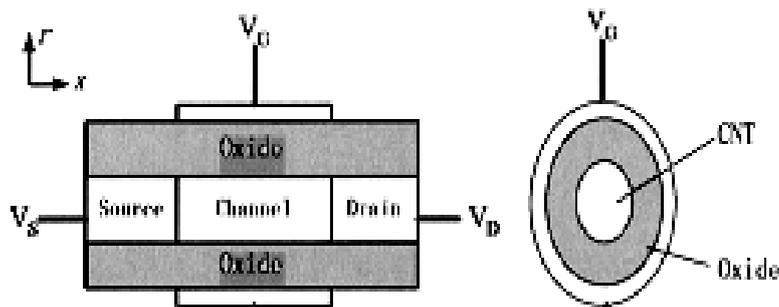


Figure IV.6. Géométrie coaxial du CNTFET. Le canal est de 200nm de long. Le diamètre du CNT est 0.55nm. L'oxyde de la grille est du SiO₂ avec une épaisseur de 2nm.

Les figures IV.7 et IV.8 montrent respectivement deux caractéristiques $I_{DS}=f(V_{DS})$ et $I_{DS}=f(V_{GS})$ du modèle. Sur La figure IV.7 on a présenté la caractéristique I_{DS} en fonction de V_{DS} paramétrées par V_{GS} . Nous remarquons que le courant de drain varie linéairement avec V_{DS} jusqu'à une valeur dite tension de saturation V_{DSsat} ou la variation de I_{DS} devient faible (presque constant). Il se crée Donc, deux régions correspondant aux deux régimes de fonctionnement (l'une linéaire, l'autre saturée). Le courant de saturation I_{DSat} atteint sa valeur maximale pour une tension V_{DS} maximale.

Il est intéressant de noter que le courant de drain diminue avec V_{GS} jusqu'à son annulation

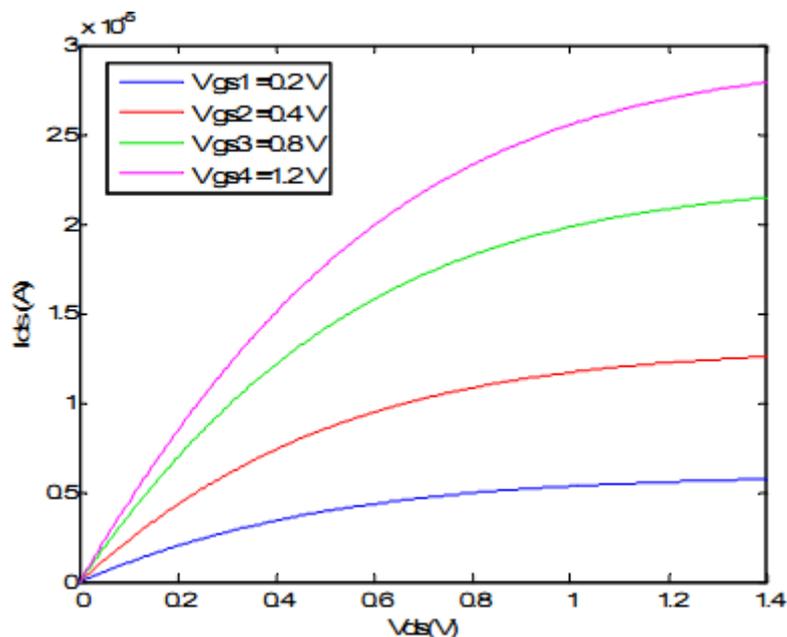


Figure IV.7. Variation du courant de drain en fonction de V_{DS} pour différents valeur de V_{GS} .

Sur la figure IV.8 on remarque que pour un fort potentiel de drain, un courant de porteur est important, Plus V_{GS} augmente, plus le niveau d'énergie de l'ensemble des sous bande est diminué. Il y a alors plus de porteurs dans la bande de conduction donc le courant augmente.

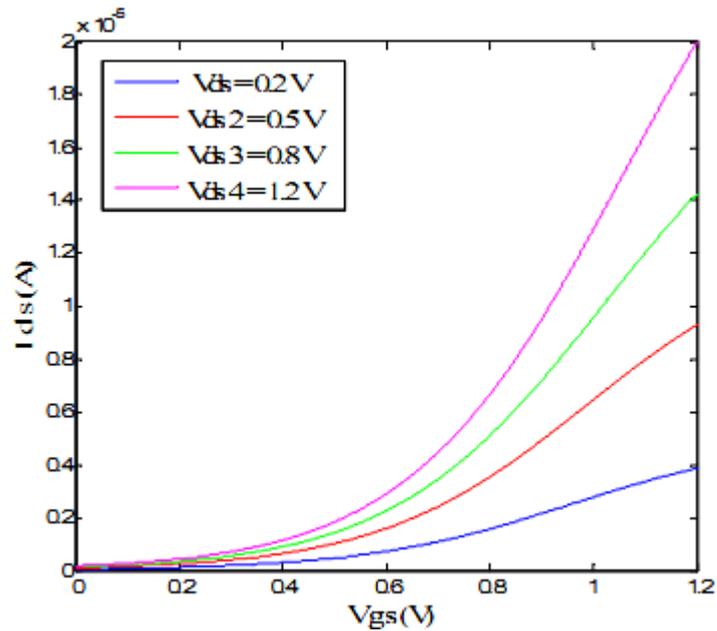


Figure IV.8. Variation du courant de drain en fonction de V_{GS} pour différentes valeurs de V_{DS} .

IV.5. Simulation de la densité de charge

Basé sur les équations précédentes de densité de charge, la figure IV.9. représente la variation de la densité de charge en fonction de V_{GS} ,

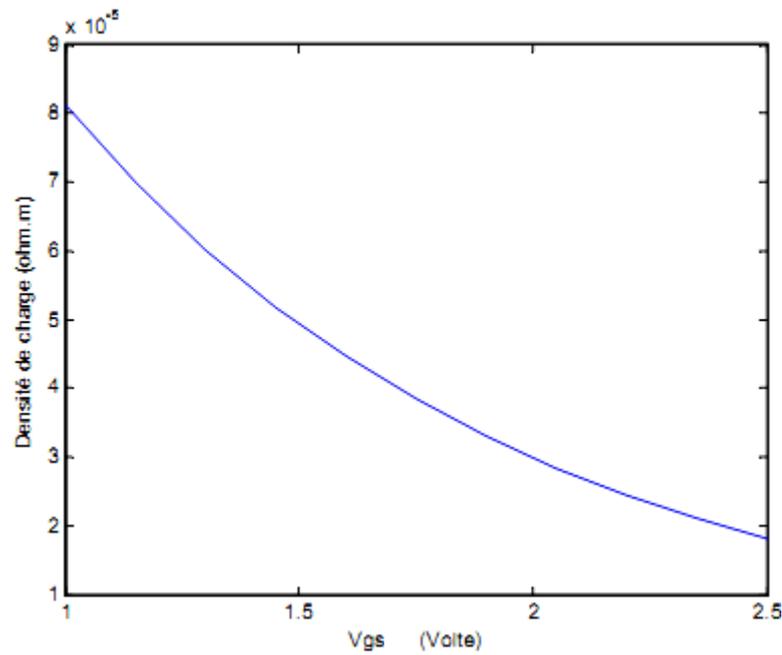


Figure IV.9. Variation de la densité de charge en fonction de (V_{GS})

On remarque une diminution exponentielle de la densité de charge en fonction de V_{GS} cette diminution peut être due à la diminution de niveau d'énergie de l'ensemble des sous bande qui implique une augmentation des porteur qui diminue la collision entre eux (passage des porteur sans collision).

Par rapport à Boltzmann, la seule différence est qu'au lieu de mettre $m v_T^2$ on a $m v_F^2$ donc la résistance du nanotube par unité de longueur s'écrit :

$$R_{CNT} = \frac{h}{2q^2} \frac{1}{\tau v_F} \quad (IV.7)$$

$$\tau = \frac{1}{v_{coll}}, \quad v_{coll} : \text{fréquence de collision.}$$

Ce qui est la résistance adoptée en générale. Le coefficient multiplicateur qui est souvent présent décrit les moindres de la trajectoire électronique.

IV.6. Effet du diamètre de carbone nanotube (CNT)

IV.6.1. Effet du Diamètre sur la Dispersion Electronique $E(k)$

Le rappel de l'équation (IV.2), l'énergie de gap est inversement proportionnel au diamètre du tube du canal de transistors CNT. Plus le diamètre du canal est grand, plus l'énergie de gap est

devenu plus petit, presque nul et a tendance à se comporter comme métallique. Si le diamètre de tube plus petite, l'énergie de gap devenue grand et le CNT se comporte alors comme isolant.

Pour le CNT avec le diamètre de 1.8nm, l'écart de bande pour chaque sous-bande diffère clairement l'un de l'autre. Cependant, quand le diamètre augmente a $d_t=3.91\text{nm}$, l'écart de bande pour la première, deuxième et troisième sous-bande devient trop étroit (Figure IV.10.)

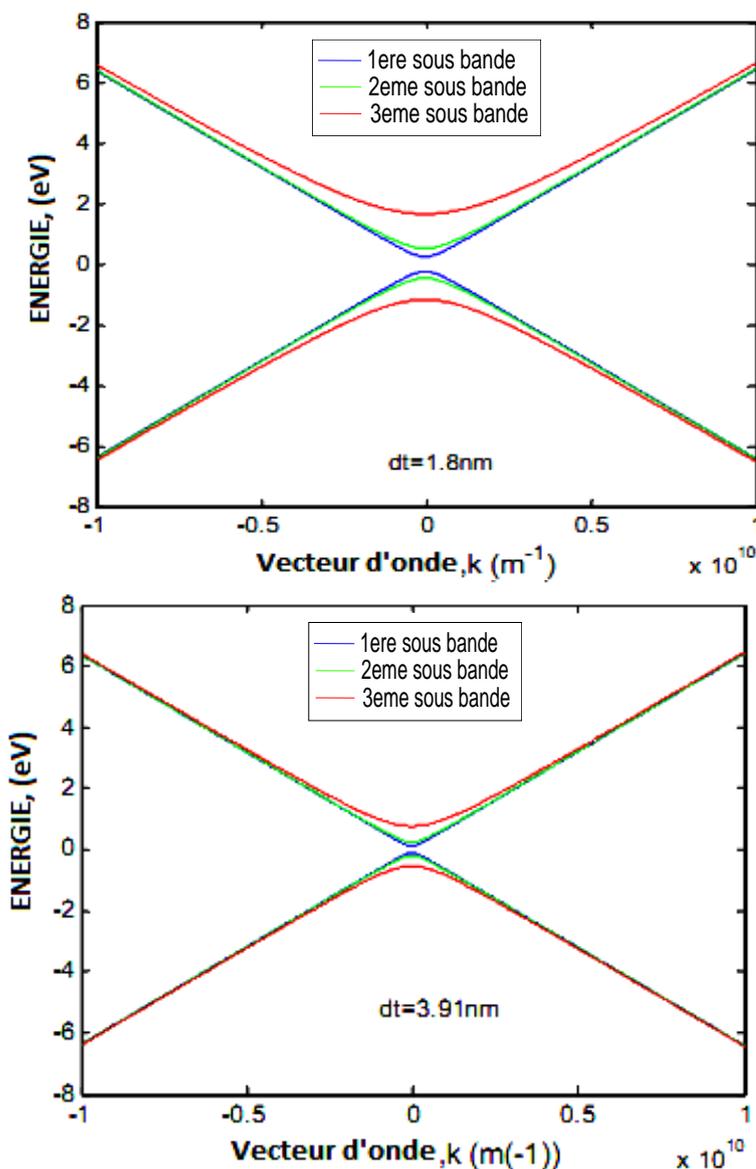


Figure IV.10. Effet de sous bande sur la dispersion d'énergie $E(k)$: a) $d_t=1.8\text{nm}$, b) $d_t=3.9\text{nm}$.

Les deux premières sous-bandes se croisent en raison d'une courbure plus importante de la première sous-bande et plus faible de la seconde pour $d_t=1.8\text{nm}$, mais pour $d_t=3.9\text{nm}$ les deux premières sous-bandes ont une courbure quasi identique contrairement à celle obtenues pour $d_t=1.8\text{nm}$. Ces résultats sont donc dépendants de la position de les lignes de la Zone de Brillouin

(ZB) du nanotube coupent celle du graphène à proximité des points *K*. Ce phénomène n'est pas limité aux deux cas étudiés et peut être observé pour l'ensemble des tubes zigzag semi-conducteurs dont l'indice *n* se suit sans être multiple de 3.

IV.6.2. Effet du diamètre sur les courbes I-V

Les caractéristiques de transfert pour différentes valeurs du diamètre du CNT sont indiquées sur les figure IV.11 et IV.12, elles montrent bien l'effet significatif du diamètre. On remarque en effet que le courant augmente avec l'augmentation du diamètre.

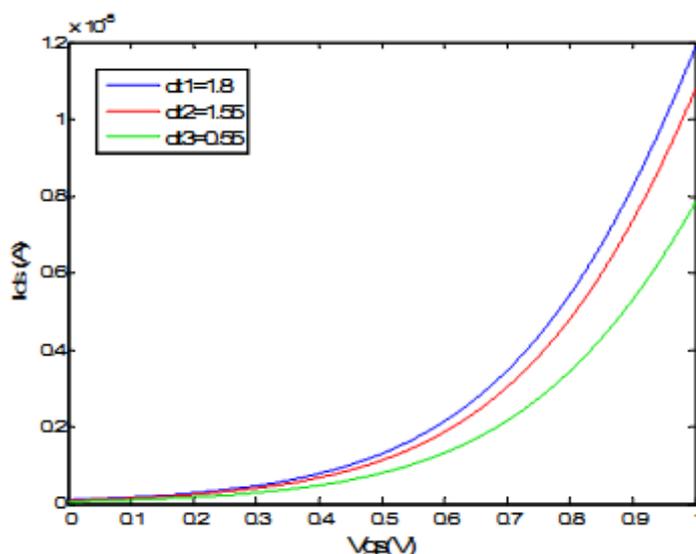


Figure IV.11. Variation du courant I_{DS} en fonction de V_{GS} pour différentes valeur du diamètre du CNT ($V_{ds}=0.6v$).

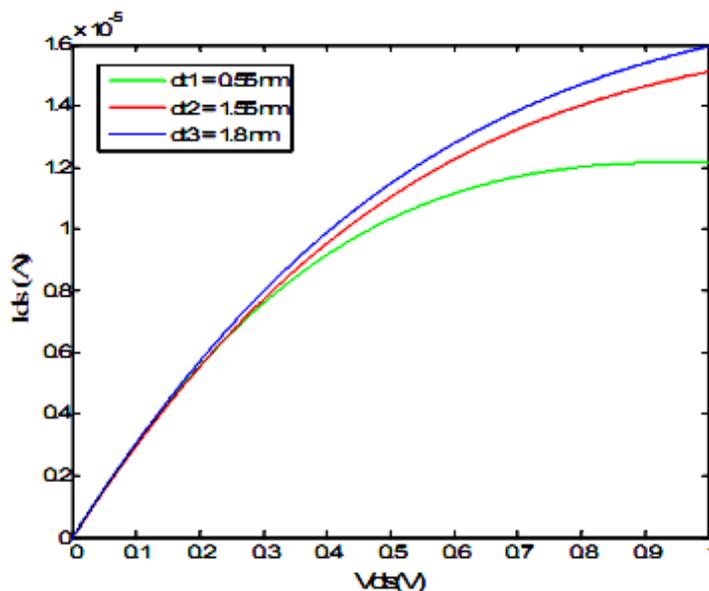


Figure IV.12. Variation du courant I_{DS} en fonction de V_{DS} pour différentes valeur du diamètre du CNT ($V_{gs}=0.4V$).

Le courant I_{DS} augmente avec l'augmentation de diamètre du nanotube de carbone due au passage des quantités importantes d'électrons, car la structure de bande est dépendante du diamètre de nanotube comme montré sur la figure IV.10.

IV.7. Effet des sous bandes de nanotube de carbone (CNT)

IV.7.1. Effet des sous bandes sur la densité d'états (DOS)

Basé sur l'équation (IV.6), la densité d'état (DOS) est simulée pour les trois sous bandes sur la figure IV.13. Notez que la simulation est seulement pour le semiconducteur de type zigzag $(n, 0)$.

La simulation au-dessous montre la densité d'état en fonction de l'énergie. Le DOS pour la première sous-bande pour cette simulation est le même que celui simulé précédemment, mais cette simulation inclut les deuxièmes et les troisièmes sous-bandes.

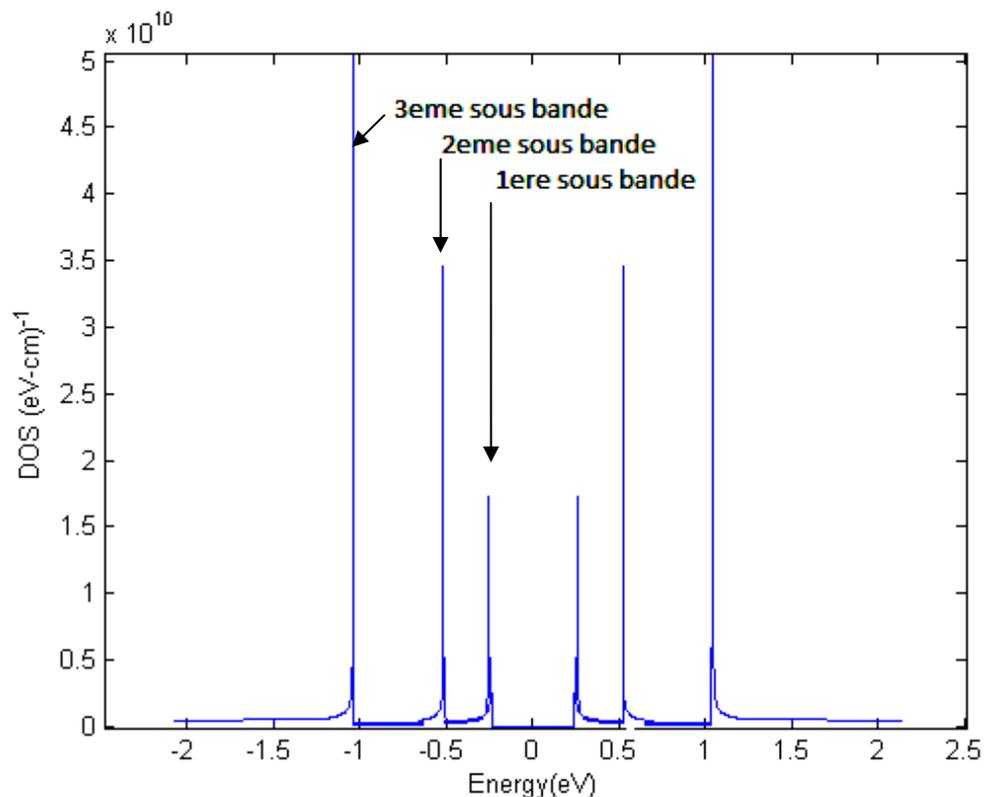


Figure IV.13. Densité d'état (DOS) pour les trois premières sous bande.

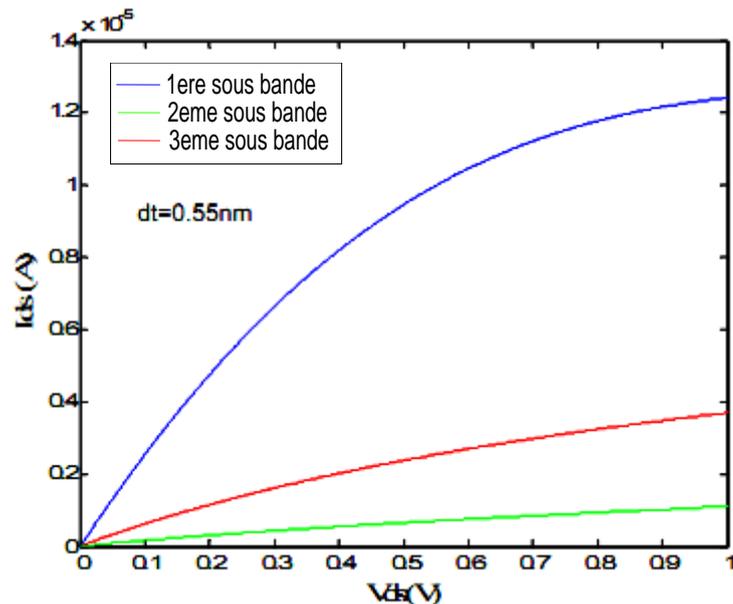
Comme nous le savons déjà, des états zéro disponibles entre la bande de conduction et la bande de valence ont indiqué qu'un écart de bande substantiel existe dans le CNT. Cet écart est bien exprimé par le résultat de simulation de la bande d'énergie $E(k)$.

Le niveau d'énergie qui peut être occupé par les états dans la première sous-bande est plus petit que dans la deuxième et troisième sous-bande. Ainsi que le DOS est aussi la plus petite

parmi les trois sous-bandes. Ceci s'explique par le fait que le DOS est proportionnel à l'énergie et puisque la première sous-bande à la dispersion d'énergie plus petite comparée à la deuxième et troisième sous bande,

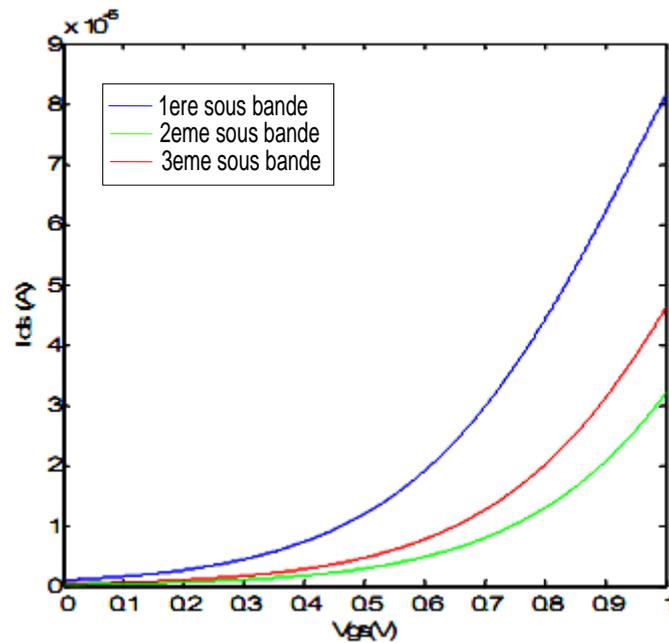
IV.7.2. Effet des sous bandes sur les courbes I - V

La figure IV.14 présente la variation du courant de drain I_{DS} en fonction de la tension de drain appliquée V_{DS} , pour la contribution de la 1ere, 2eme, 3eme sous bande en prenant une tension de grille égale $V_{GS}=0.4$ Volt. La figure IV.14 montre que les courbes ne sont pas similaires, dans la région linéaire. Le courant du drain I_{DS} augmente lorsque la tension V_{DS} augmente .cette augmentation est importante pour la 1^{ère} sous bande par rapport a la 3eme sous bande.



La figure IV.14.variation de I_{DS} en fonction V_{DS} pour les trois premières sous bandes

La figure IV.15 montre le courant de drain I_{DS} en fonction de la polarisation de grille appliquée, V_{GS} pour la contribution des 1ere, 2eme, 3eme sous-bandes. Les courbes ne sont plus semblables, dénotant le remplissage plus de sous-bandes de 1ere par apport à 2eme et 3eme sous bande aide à l'augmentation de courant totale.



La figure IV.15. variation de I_{DS} en fonction V_{GS} pour les trois premiers sous bande

Cette augmentation due au passage de grande quantité de porteur du au petit écart de bande gap de la première sous bande par rapport au 2eme et 3eme sous bande.

IV.7.3. Effet des sous bandes sur les courbes I-V pour des diamètres différents

La figure IV.16 présente la variation du courant de drains I_{DS} en fonction de la tension appliquée V_{DS} pour les trois premières sous bandes et 2 diamètres différent du canal CNT.

On voit clairement que le courant de drain pour la première sous bande est plus grand que celui de la troisième sous bande, cette augmentation diminue lorsque le diamètre du nanotube augmente.

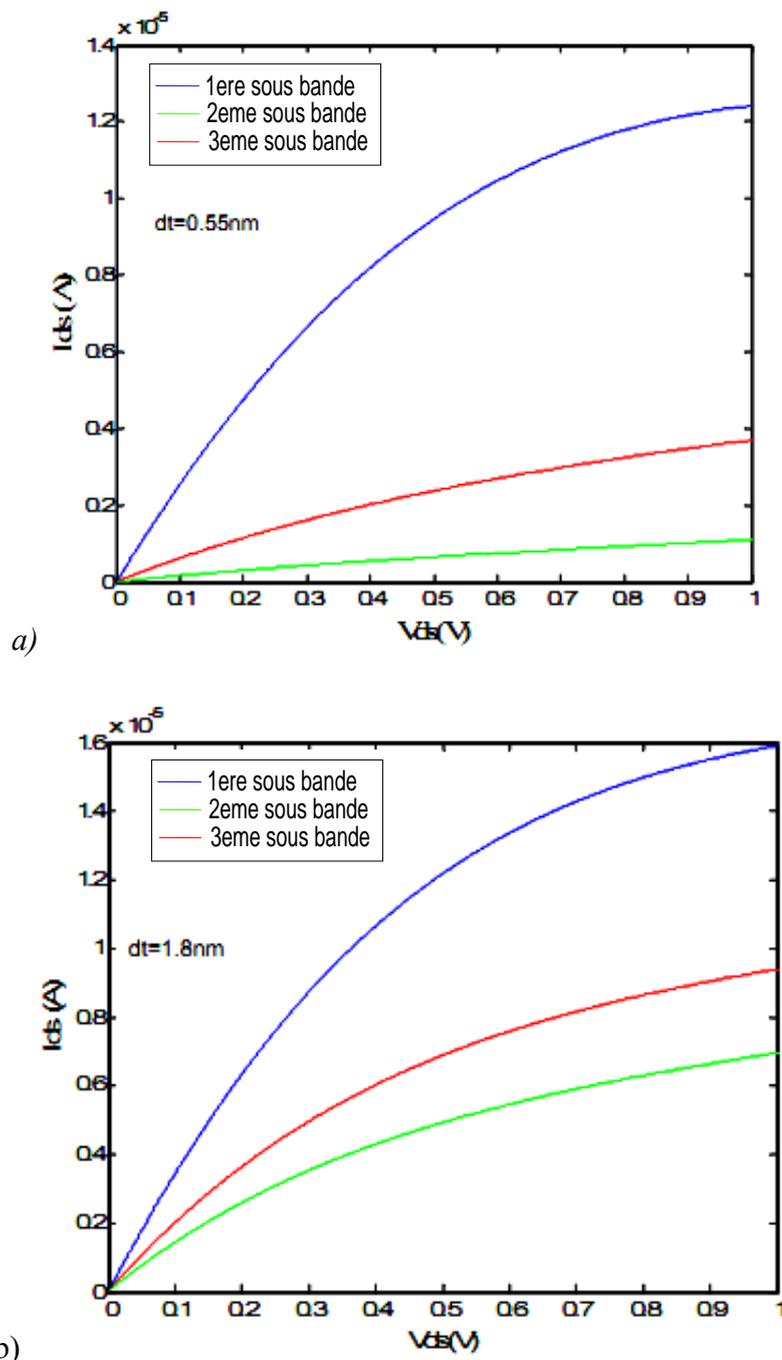


Figure IV.16.variation de I_{DS} en fonction V_{DS} pour les trois premiers sous bande : a) $d_t=0.55\text{nm}$, b) $d_t=1.8\text{nm}$)

En terme d'effet de sous bande base sur la figure IV.15, lorsque la tension du drain $V_{DS}=1$ Volt on aura comme résultants $I_{DS}=1.24 \cdot 10^{-5}$ A pour la premier sous bande a $d_t=0.55\text{nm}$ et $I_{DS}=1.6 \cdot 10^{-5}$ A pour $d_t=1.8\text{nm}$ de la même sous bande. Par contre pour la deuxième et la 3^{ème} sous bande $I_{DS}=0.38 \cdot 10^{-5}$ A, $I_{DS}=0.10 \cdot 10^{-5}$ A et $0.92 \cdot 10^{-5}$ A, $I_{DS}=0.68 \cdot 10^{-5}$ A respectivement pour $d_t=0.55\text{nm}$ et $d_t=1.8\text{nm}$.

En conclusion, le courant de drain I_{DS} de 1^{ère} sous bande est important par rapport aux autres sous bande, ce décalage de courbe est dû à la variation de l'énergie de gap E_g de première aux

3^{ème} sous bande. Ce qui indique que le remplissage de la seconde et troisième sous-bandes sont remplis par un apport à la première sous-bande, cette variation est significative lorsque d_t augmente.

IV.8. Effet de la qualité d'oxyde sur les courbe I-V

En raison de l'échelle du FET, on souffre de nombreuses limitations comme effet de canal court, tunnel ... etc.

Pour surmonter ces limitations de nombreuses solutions ont été proposées par différents chercheurs. L'utilisation d'un matériau diélectrique élevée d'isolant de grille est l'une des solutions proposées [83,84].

Nous avons essayé de voir l'effet de l'utilisation de différents matériaux diélectriques comme isolant de grille dans CNTFET. Pour cette simulation, nous avons utilisé la structure présente au-dessus (figure IV.6) de CNTFET avec différents matériaux diélectriques. Les matériaux diélectriques considérés avec leurs constantes diélectriques (ϵ) sont présentés dans le tableau IV.1.

Nom d'oxyde	La formule Chemic	Constant diélectriques (ϵ)
Oxide d'aluminium	Al ₂ O ₃	10
Hafnium Dioxide	HfO ₂	15
Oxide de zirconium	ZrO ₂	18-40
Oxide de Titanium	TiO ₂	50

Tableau IV.1 Liste des oxydes considérés pour l'isolation de la grille avec différent constant diélectrique [83,84]

La figure IV.17 présente la variation de potentiel de surface pour différentes constantes diélectrique(ϵ), Nous remarquons que le potentiel de surface V_{cnt} varie linéairement avec ϵ , cette variation est très importante pour des constantes diélectriques qui varient entre $\epsilon=3.6$; 40, par contre cette variation devient faible ou presque constante quand le constant diélectrique (ϵ) est supérieur à 50.

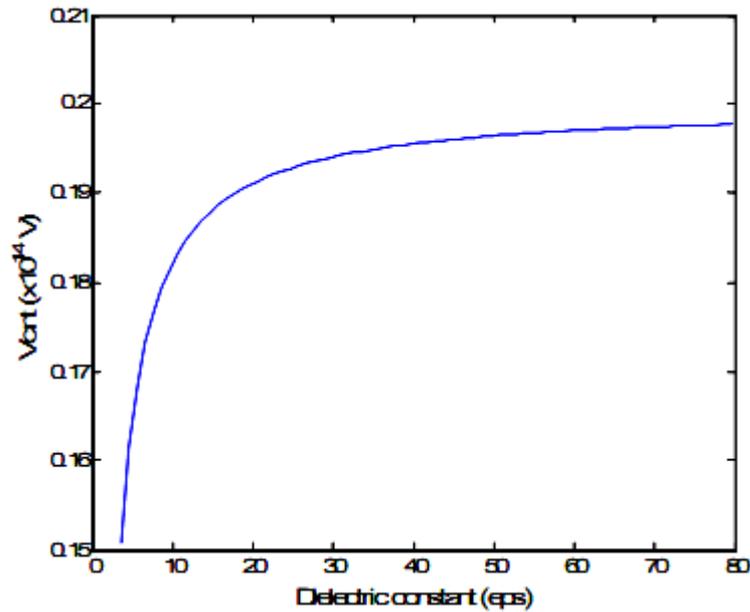


Figure IV.17. Variation de potentiel de surface V_{CNT} pour différent diélectriques constant ϵ .

Un oxyde souvent utilisé dans les transistors dus de sa permittivité relative grande est l'oxyde Zirconium aussi appelé (ZrO_2). La simulation de courant $I(V)$ présente sur la figure IV.18 avec plusieurs constants diélectriques est la suivante:

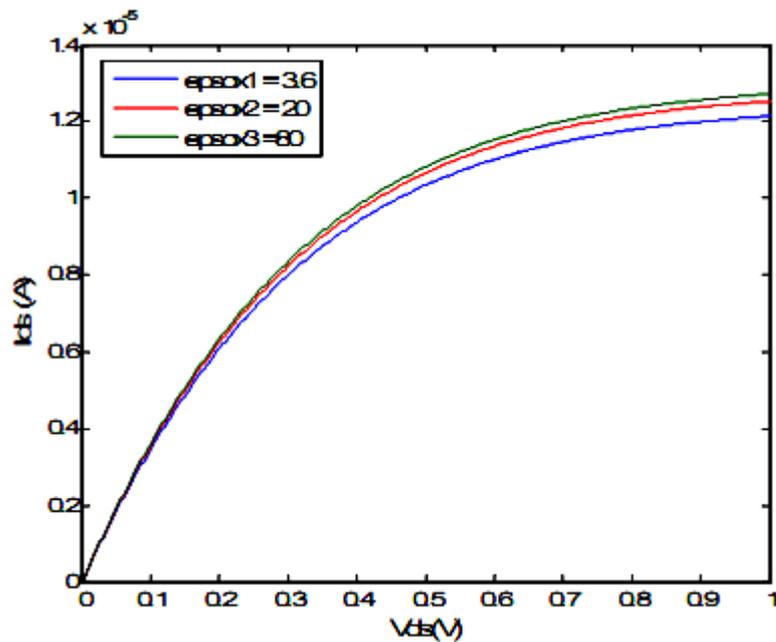


Figure IV.18. Variation de courant I_{DS} - V_{DS} pour $\epsilon_r=3.6$; 20 ; 80.

En observe sur la figure IV.18 que le courant de drain augmente pour des constantes diélectriques élevés, cette augmentation est claire dans la région de saturation.

On montre des résultats de simulation dans la figure IV.19 qui est tracé entre la constante diélectrique d'oxyde et le courant de saturation correspondant. On peut dire qu'il y a une augmentation de courant de saturation pour le constant diélectrique croissant mais le degré de cet effet positif est incrémenté pour le matériel avec un constant diélectrique plus haut.

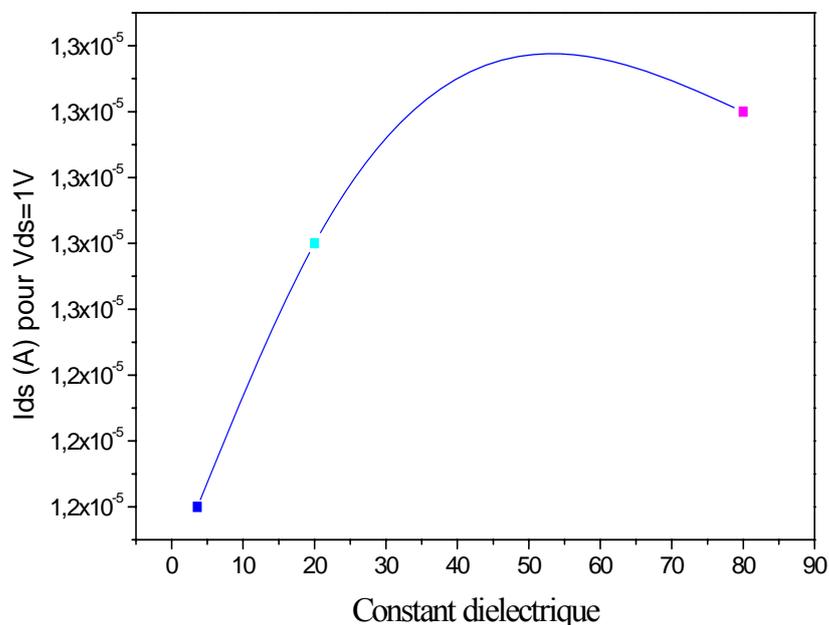


Figure IV.19. Variation de courant I_{DS-sat} en fonction de constant diélectrique ϵ .

IV.9. Validation des résultats de simulation

Afin de pouvoir vérifier l'exactitude de notre modèle on compare les résultats à ceux des simulations présentées dans [72, 81, 93,108] et de la simulation de Monte-Carlo dans [106,107]. En effet, cette approche(MC) a été développée et basée sur la méthode particulière de Monte Carlo pour résoudre les équations de transport classiques de Boltzmann couplée à une résolution de l'équation de Poisson 2D à symétrie cylindrique.

Sur la base des Figure IV.20., IV.21 et IV.22 nous pouvons dire que :

Il y a un bon accord global entre les résultats issus de notre modèle et les résultats issus de simulation par la méthode de Monte-Carlo et d'Ali A. Orouji et all [72], spécialement dans la zone saturée de la courbe $I_{DS}(V_{DS})$; le niveau du courant I_{DS} est similaire dans les deux cas.

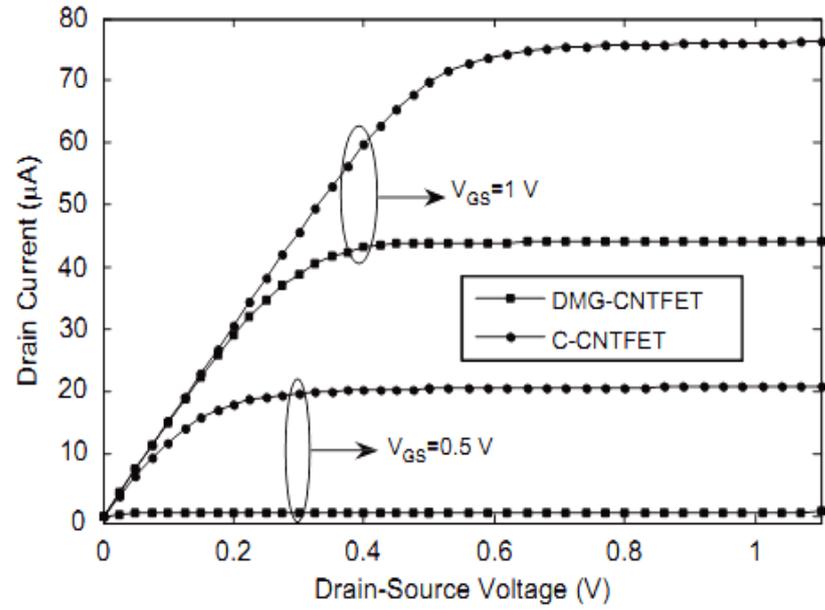


Figure IV.20. Caractéristique IDS-VDS de C-CNTFET et DMG-CNTFET de la référence [72]

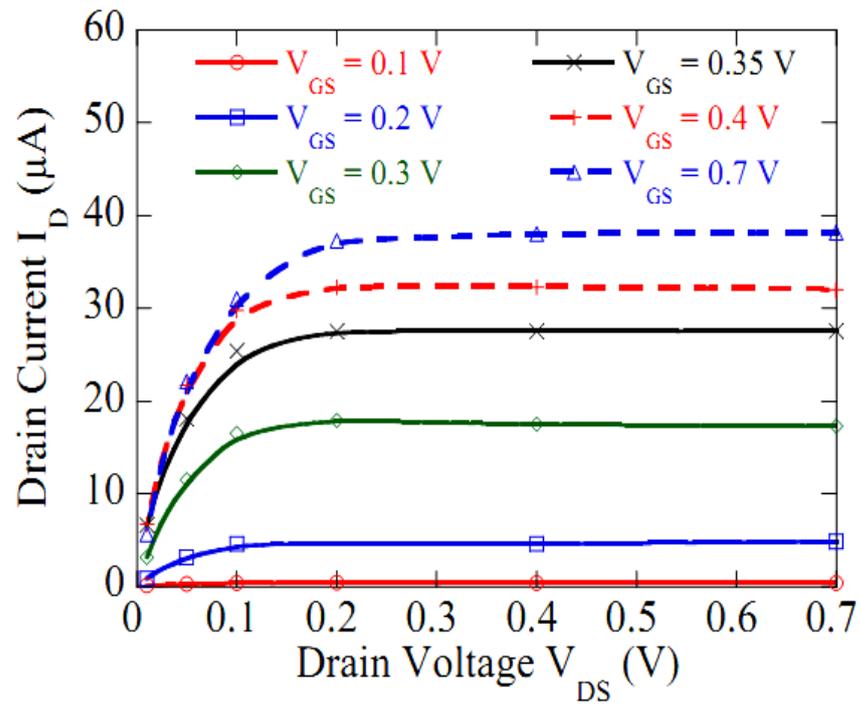


Figure IV.21. Les Caractéristiques électriques d'un CNTFET obtenue par la méthode Monte Carlo [107].

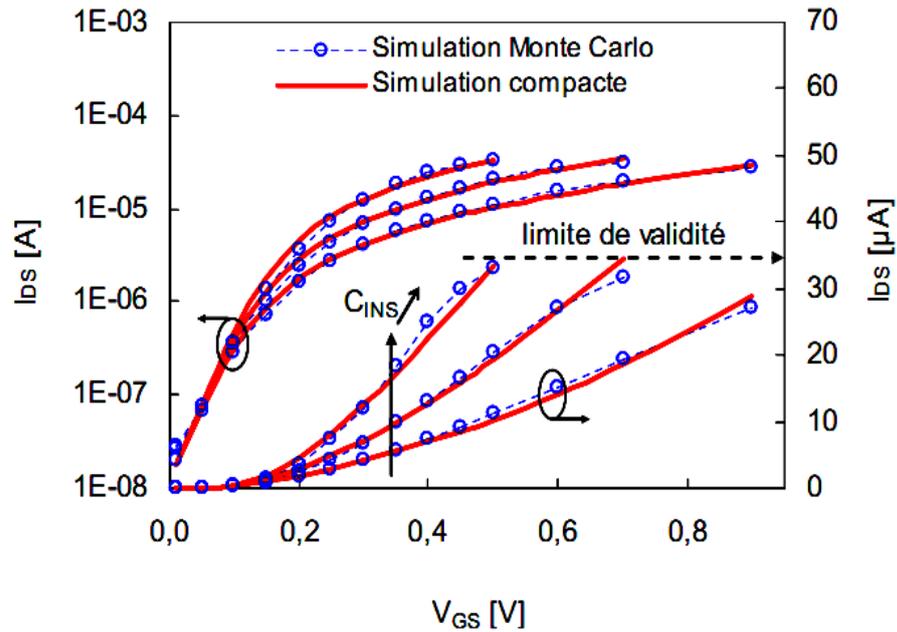


Figure IV.22. Courant de drain I_{DS} en fonction de la tension grille-source V_{GS} à $V_{DS} = 0,4$ V [106,107]

Dans la zone ohmique, le niveau du courant issu de la simulation est plus petit que celui de la littérature et de Monte-Carlo. Quand V_{DS} augmente, le courant I_{DS} issu de la simulation augmente moins vite que celui de la courbe dans les figures IV.21 et IV.22.

Sur la figure VI.23 on remarque un bon accord global entre les résultats présentés sur les figure et de notre model, lorsque le diamètre augmente le courant I_{DS} augmente sauf que nous remarquons un écart significatif entre les deux résultats, ceci est certainement dû aux différentes approximations faites.

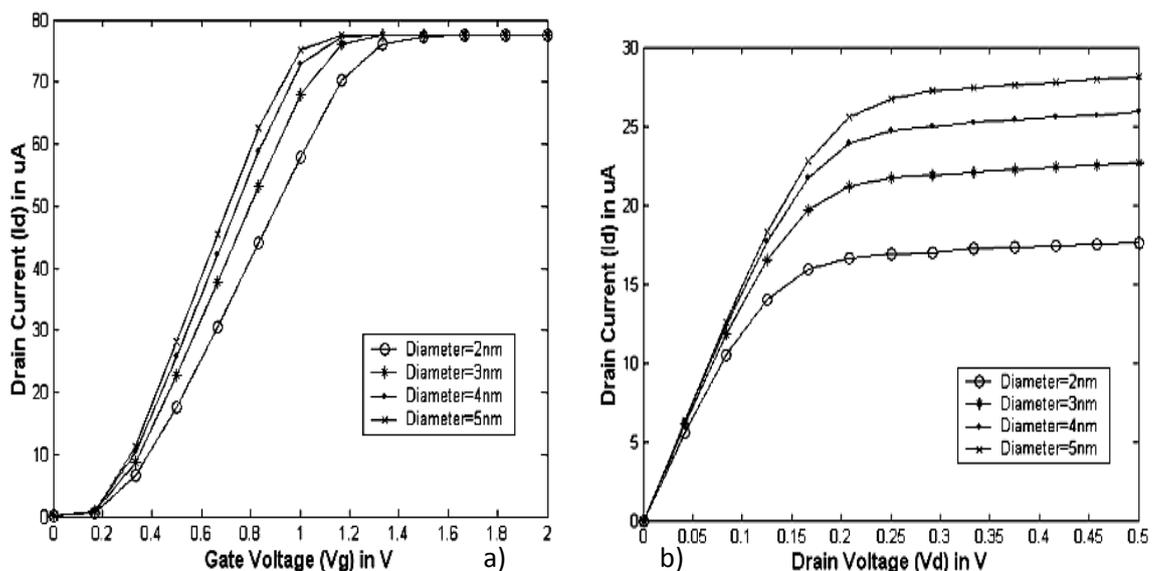


Figure IV.23. Effet du diamètre sure les caractéristiques électriques de CNTFET a) I_{DS} - V_{GS} , b) I_{DS} - V_{DS} [91]

Zahra Arefinia et al. ont présenté dans [108] et Rasmita Sahoo, et al. ont présenté dans [83] Sur les figure IV.24 et IV.25 des résultats de simulation obtenues par le modèle développé sur l'effet d'oxyde sur les caractéristiques de nanotube de carbone avec un nanotube d'un diamètre de 1.1 nm ce qui correspond à une chiralité de (14, 0) et largeur d'oxyde de $t_{ox}=1.5\text{nm}$.

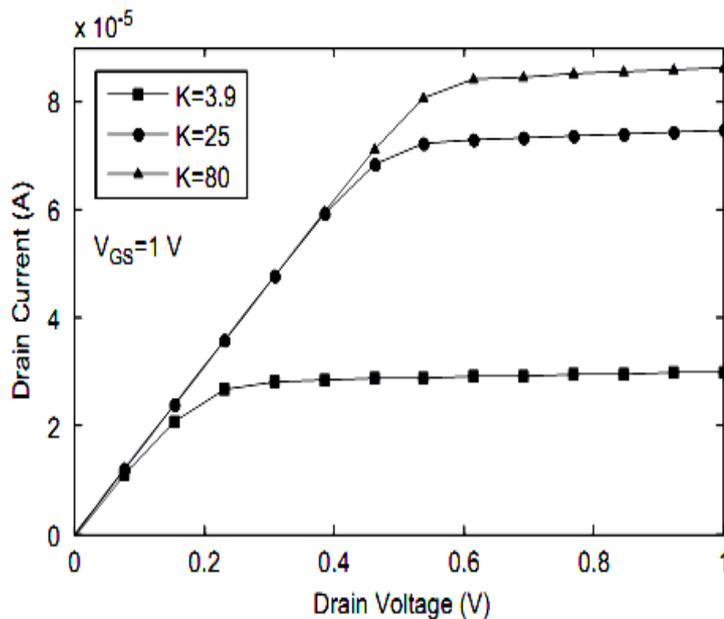


Figure IV.24. Effet de diélectrique ϵ sur les caractéristiques électriques de CNTFET [108]

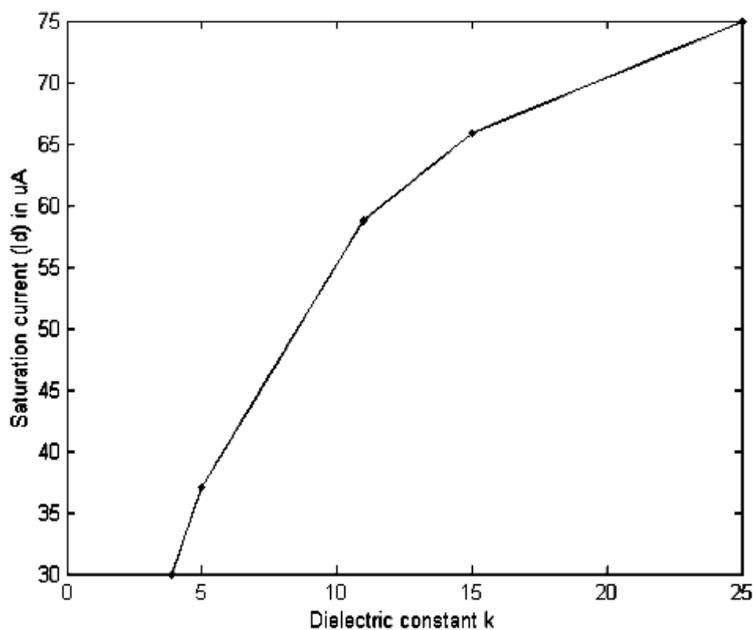


Figure IV.25. Variation de courant de saturation en fonction de diélectrique constant [83]

Bien que les allures soient comparables, nous remarquons un écart significatif entre les deux résultats, ceci est certainement dû aux différentes approximations faites dans notre modèle, ainsi

qu'a l'existence des effets dispersifs que le modèle n'a pas pris en considération. L'erreur sur les résultats de simulation par rapport aux résultats expérimentaux est importante.

IV.10. Effet de la température sur l'énergie de gap (E_g)

Le calcul de la structure de bande électronique de nanotubes de carbone dans les sections précédentes supposé que c'était indépendant de la température. Cependant, en matériaux semi-conducteurs vrac, il est bien connu que les interactions électron-phonon dépendent de la température des paramètres structuraux est conduisent à une réduction de la bande interdite avec la température. En fait, pour le silicium, des travaux expérimentaux et théoriques ont montré que la bande interdite suit la variation en température comme suit :

$$\Delta E_g^{Si}(T) = -4.73 \times 10^{-4} \frac{T^2}{T + 636(K)} \quad (\text{IV.8})$$

Avec T est la température en kelvin (K).

Pour les nanotubes, photoluminescence et la spectroscopie Raman [109] indiquent en général que la bande interdite n'est pas fortement dépendante de la température.

Figure IV.26 représente le spectre de photoluminescence d'un seul nanotube de carbone en fonction de la température. Le décalage est clairement visible dans les données, et à la température ambiante la bande interdite est réduite de moins de 8 meV à partir de la limite de température faible.

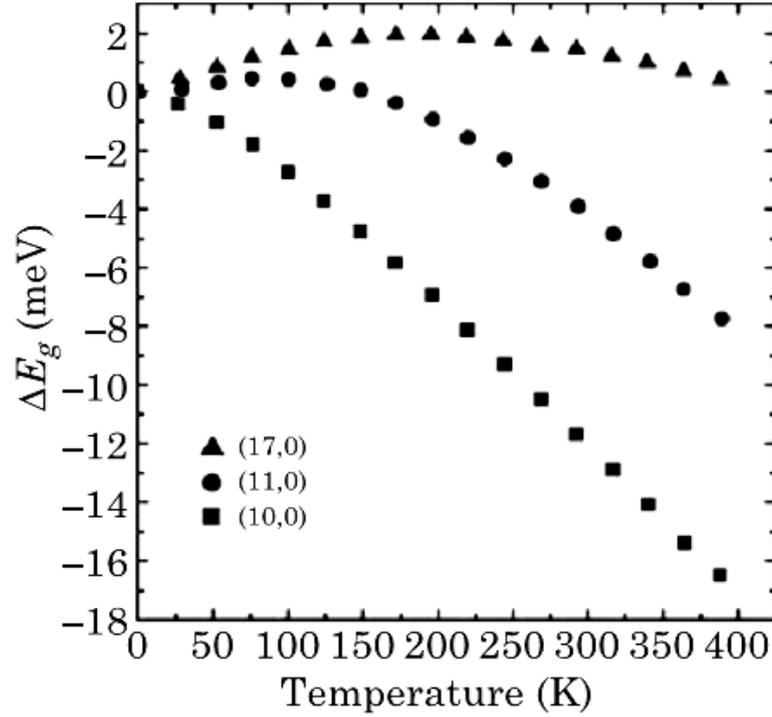


Figure IV.26. Effet de température sur la bande gap de nanotube de carbone [109]

La dépendance en température de la bande interdite des nanotubes peut être approchée par une équation de la forme

$$\Delta E_g(T) = \frac{\alpha_1 \Theta_1}{e^{\Theta_1/T} - 1} + \frac{\alpha_2 \Theta_2}{e^{\Theta_2/T} - 1} \quad (\text{IV.9})$$

Où α_1 , α_2 , Θ_1 , Θ_2 sont des constantes représentant les deux phonons efficaces qui régissent la variation en température. le premier mode qui décrivent le comportement à basse température et le deuxième mode, les propriétés à haute température. Le comportement de la largeur de bande interdite en fonction de la température peut être ainsi reproduit avec ce modèle simplifié, à condition que les constantes de l'équation. (IV.9) dépendent de la chiralité et de diamètre [109].

IV.11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons élaboré un modèle physique numérique basé sur des sous-bandes d'énergie. Ce calcul, obtenu à partir d'une méthode de la « zone folding », l'analyse des simulations de caractéristiques I_{DS} (V_{DS}) qui est basé sur le modèle de calcul de la densité de charge et de dispersion de l'énergie $E(k)$ pour les trois premières susbande ont montré que le diamètre de CNT avait un impact significatif sur le courant de drain et la largeur de bande interdite de la sous-bande.

La première sous-bande a un effet important dans les caractéristiques de CNTFET (bandes d'énergie, les caractéristiques I-V, DOS) par rapport à la deuxième sous-bande et le troisième, cet effet est important lorsqu'il y a augmentation du diamètre CNT.

Les résultats du modèle sont comparés avec ceux obtenus par des résultats de simulation par d'autres méthodes et approximations donnés par la littérature.

Pour étudier l'effet thermique sur le comportement du transistor, nous avons présenté une simulation de l'effet de température sur la bande de gap qui ouvre l'étude de l'effet de température sur les caractéristiques I-V de CNTFET.

CONCLUSION GÉNÉRALE

CONCLUSION GENERAL ET PERSPECTIVE

La recherche des nouveaux matériaux semi-conducteurs et des nouveaux dispositifs (pour remplacer le silicium et le MOSFET) doit conduire à une nouvelle révolution au sein des industries électroniques. Les nanotechnologies sont un secteur innovant et prometteur qui présente des nombreuses perspectives d'applications. Afin que les attentes à leur égard deviennent des réalités, un important effort de recherche fondamentale et appliquée est au préalable nécessaire. Le nanotube de carbone (CNT) est à ce jour l'un des candidats les plus prometteurs pour faire passer le transistor à effet de champ (FET) à l'échelle nanométrique, Les transistors à effet de champ à base de nanotubes de carbone (Carbon NanoTube Field Effet Transistors, CNTFET) figurent aujourd'hui parmi les dispositifs susceptibles de remplacer la technologie CMOS. Des recherches intensives sont en cours afin de déterminer les caractéristiques des transistors à nanotube de carbone (CNTFET).

Le travail présenter a été focalisé sur l'analyse des transistors CNTFET; Les quatre contributions importantes sont présentées dans les quatre chapitres du manuscrit :

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

Dans le deuxième chapitre Nous avons présenté l'application la plus important du CNT est le CNTFET avec les différentes polarisations de type P ou N, puis nous avons cité quelques types de ce composant. En particulier, dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés physiques et caractéristiques spécifiques en particulier celle du CNTFET qui ouvrent des perspectives nouvelles et la possibilité de réaliser des nouvelles fonctions, inaccessibles à d'autres composants, plus conventionnels.

Dans le troisième chapitre On a bien détaillé les équations physiques de la modélisation afin de déterminer les performances électroniques et dispersion d'énergie pour les sous bandes du

CNT. Ensuite, le courant de drain, calculé en utilisant le formalisme de Landauer, est fonction du potentiel du canal Qui est lié à la densité de charge. On a utilise une statistique classique avec des hypothèses simplificatrice. Le modèle intègre une approche de calcul analytique pour la densité de charge.

En fin, une simulation mathématique est effectuée en se basant sur les expressions des équations fournies précédemment. Les résultats obtenus sont présentés et interprétés dans le quatrième chapitre. Nous avons analysé l'influence des variations des paramètres du CNTFET (diamètre du canal, sous bande d'énergie, qualité d'oxyde) sur les performances électroniques dans les CNTFETs.

À la fin de la thèse, nous avons analysé l'influence de la température sur la bande interdite E_g du nanotube de carbone qui offre une future perspective d'étudier l'effet de la température sur les performances électroniques du CNTFET.

Cette étude pourrait être suivie par d'autres études surtout sur l'effet de température et l'effet d'environnement d'application telle que l'humidité, la pression et les gaz de l'atmosphère de travail, ainsi que des études sur différentes structures de CNTFET (CNTFET à barrière Schottky,...) et sur les défauts pouvant apparaître dans ces structures.

*LISTE DES
PUBLICATIONS*

LISTE DES PUBLICATIONS :✓ Conférences Internationales :

- **A.Mouatsi, M.Marir-Benabbas, H.Baudrand**, 11th Mediterranean Microwave Symposium Hammamet, Tunisia 08-10 September 2011.
- **A.Mouatsi, M.Marir-Benabbas, H.Baudrand**, *11th International Conference on Condensed Matter and Statistical Physics ICCMSP 2011 Agadir /Maroc de 20 – 21 Octobre 2011.*
- **A.Mouatsi, M.Marir-Benabbas, H.Baudrand**, *First Euro-Mediterranean Conference on Materials and Renewable Energies (EMCMRE-1) Marrakech /Maroc 21-25 Novembre 2011.*
- **A.Mouatsi, M.Marir-Benabbas, H.Baudrand**, *the 6th international conference on Sciences of Electronic, Technologies of Information and Telecommunications SETIT 2012 Sousse/Tunisia de 21-24 mars 2012.*

✓ Publications internationales:

- **A.Mouatsi, M.Marir-Benabbas, H.Baudrand**, “ *Effect of Subbands Energy in the CNTFET Characteristics for Different Nanotube Diameter*”, International Review of PHYSICS – Vol. 6, n. 1, pp. 68-72, Février 2012.
- **A.Mouatsi, M.Marir-Benabbas, H.Baudrand**, «*Subband Energy Effect in the CNTFET Characteristics* », Sciences of Electronics, Technologies of Information and Telecommunications (SETIT), 2012 6th International Conference on Digital Object Identifier: 10.1109/SETIT.2012.6481907, Publication Year: 2012 , Page(s): 166 – 170, IEEE Conference Publications
- **Abdelmalek Mouatsi & Mimia Benabbas-Marir**, “*Band Structure of CNT Effect On The CNTFET Performances*”, International Journal of Nanotechnology and Application (IJNA), ISSN 2277-4777, Vol. 3, Issue 2, Jun 2013, 9-14 , Impact Factor(JCC)=1.765.

BIBLIOGRAPHIE

-
- [1] Hervet Fanet, “Micro et nanoélectronique : Bases • Composants • Circuits”, Dunod, Paris, (2006).
- [2] Joshua B. Edel and Andrew J. deMello, “Nanofluidics; Nanoscience and Nanotechnology”, Imperial College London, London, UK, (2009).
- [3] Gerhard Wilde, “Nanostructured Materials”, frontiers of nanoscience Series Editor: Richard E. Plamer, Vol. 1, The University of Birmingham, UK, (2009).
- [4] H. S. Philipwong, D. Akinwande, “Carbon Nanotube and Graphene Device Physics”, Cambridge University Press, New York, (2011).
- [5] S. Iijima, Helical, “microtubules of graphitic carbon”, Nature, vol. 354, (1991), 56–58.
- [6] S. Iijima and T. Ichihashi, “Single-Well carbon nanotubes of 1 nm diameter,” Nature, vol. 363, (1993), pp. 603–605.
- [7] Mark H. Rummeli, Paola Ayala and Thomas Pichler “Carbon Nanotubes and Related Structures: Production and Formation”, Edited by Dirk M. Guldi and Nazario Martín, WILEY-VCH Verlag. Weinheim, (2010).
- [8] Michael BOZLAR “Modification de surface des nanotubes de carbone par un polymère conducteur électrogénéré pour la réalisation de nanocomposites multifonctionnels”, Thèse doctorat, école centrale paris, (2007).
- [9] Robertson, J.,” Diamond-like amorphous carbon”. Materials Science and Engineering: R: Reports 2002, 37 (4-6), 129-281.
- [10] Jean-Malo Chehab, Guillaume Saint-Pierre, “ T.P.E. Les Nanotubes de Carbone dans le Domaine Médical”, 1^{ère} S, Lycée d’Hulst - Paris 7^{ème}, 2007-2008.
- [11] Sandra RIZK, “Elaboration Et Caractérisation De Nanostructures Carbonees Par Procédé Cvd Assisté Par Plasma Microonde”, Thèse doctorat, Université Henri Poincaré, Nancy I, (2009).
- [12] H. Rafii-Tabar, “Computational modelling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes”, Physics Reports, 390, (2004), 235–452.
- [13] Sébastien Ruffinatto, “Le diamant pour la bioélectronique : De la fonctionnalisation chimique à la modification physique par des nanotubes de carbone”, Thèse de doctorat, Université De Grenoble, (2012).
- [14] Henryk A. Witek, Stephan Irle, Guishan Zheng, Wibe A. de Jong, Keiji Morokuma “Modeling carbon nanostructures with the self-consistent charge density-functional tight-

- binding method: Vibrational spectra and electronic structure of C_{28} , C_{60} , and C_{70} ”, The Journal Of Chemical Physics, 125, (2006), 214706.
- [15] Peter J. F. Harris, “carbon nanotubes and related structures new materials for the twenty-first century”, Cambridge University Press, New York, (2004).
- [16] Mark D. Taczak, “Controlling the Structure and Properties of Carbon Nanotubes”, MITRE Nanosystems Group, (2007), <http://www.mitre.org/tech/nanotech>.
- [17] Prabhakar R. Bandaru, “Electrical Properties and Applications of Carbon Nanotube Structures”, journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol.7, (2007), 1–29.
- [18] Zhi Chen, “Nanotubes for Nanoelectronics”, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, Edited by H. S. Nalwa, Vol. 7, (2004), 919–942.
- [19] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus and R. Saito, “Physics of Carbon Nanotubes”, Carbon, Vol. 33, No. 7, (1995), 883-891.
- [20] J.H. Lee, B.S. Lee, “Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM”, Computational Materials Science, 51, (2012), 30–42.
- [21] Shiren Wang, “functionalization of carbon nanotubes: characterization, modeling and composite applications”, Doctorate of Philosophy, florida state university, (2006).
- [22] Diana salem, “synthese de nanotube de carbon monofeuillets individuels et composites modeles polymeres – nanotubes de carbone. Application a l’effet photovoltaïque”, Thèse de doctorat, université de Strasbourg, (2012).
- [23] Xuan Tinh THAN, “croissance catalytique et etude de nanotubes de carbone multi-feuillets produits en masse et de nanotubes de carbone ultra-long individuels a quelques feuillets”, Thèse de Doctorat, Université Montpellier II, (2011)
- [24] M.P. Anantram and F. Léonard, “Physics of carbon nanotube electronic devices”, Rep. Prog. Phys, 69, (2006), 507–561.
- [25] Egill Skúlason, “Metallic and Semiconducting Properties of Carbon Nanotubes”, Modern Physics, (2005).
- [26] T. Belin, F. Epron, “Characterization methods of carbon nanotubes: a review”, Materials Science and Engineering B, 119, (2005), 105–118.
- [27] Emmanuel Flahaut, “synthese par voie catalytique et caracterisation de composites nanotubes de carbone-metal-oxyde. Poudres et materiaux denes”, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, (1999).

- [28] Aurélien GOHIER, “cinétique de croissance de nanotubes de carbone mono-parois et multi-parois orientés par procédé plasma”, Thèse de Doctorat, Université de Nantes, (2007).
- [29] Cyril Tinguely, “Réalisation d'interconnexions de faible résistivité à base de nanotubes de carbone biparois pour la nano-électronique”, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, (2010).
- [30] Marie-Faith Fiawoo « Etude par Microscopie Electronique en Transmission de la germination et la croissance des Nanotubes de carbone synthétisés par dépôt chimique en phase vapeur », Thèse de Doctorat, Université Paris Sud, (2009).
- [31] Pakniat, Razieh, Zandi, Mohammad Hossein, “Synthesis of Carbon Nanotube by Laser Chemical Vapor Deposition by means of Nd:Yag s laser Second Harmonic”, *Int. J. Sci. Emerging Tech*, Vol. 2, No. 3, (2011), 71-74.
- [32] Hermane Mbtsi, “Synthèse de nanotubes de carbone pour l’obtention de vias d’interconnexions électriques et de drains thermiques”, Thèse de Doctorat, Université d’Orléans, (2010).
- [33] Paul L. McEuen, Michael S. Fuhrer and Hongkun Park, “Single-Walled Carbon Nanotube Electronics” *IEEE Transactions on Nanotechnology*, Vol. 1, No. 1, (2002), 78-85.
- [34] Kinneret Keren, Rotem S. Berman, Evgeny Buchstab “DNA-Templated Carbon Nanotube Field-Effect Transistor”, *Reports SCIENCE*, Vol.302, (2003), 1380-1382.
- [35] Noor Mazni Ismail, Azizan Aziz and Mariatti Jaafear, “Thermal stability and electrical conductivity of multiwalled carbone nanotube (MWCNT)/polymethyl Methacrylate(PMMA) Nanocomposite prepared via the Coagulation Method”, 2nd ASEAN - APCTP Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology, AIP Conf. Proc. 1455, (2012), 212-215.
- [36] Menghe Miao, “Electrical conductivity of pure carbon nanotube yarns”, *CARBON*, 49, (2011), 3755 – 3761.
- [37] T. Mizutani, Y. Ohno, S. Kishimoto, “Electrical properties of carbon nanotube FETs”, *Invited Paper, Proc. of SPIE*, Vol.7037, (2008), 703703-1-703703-9.
- [38] Ricart Thibault, “Etude de nano-systèmes électro-mécaniques (NEMS) à base de nanotubes de carbone pour applications hyperfréquences”, Thèse Doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III, (2008).

- [39] Dong Qian, Gregory J Wagner and Wing Kam Liu, Min-Feng Yu, Rodney S Ruoff, "Mechanics of carbon nanotubes", *Appl Mech Rev*, Vol. 55, No. 6, (2002), 495-533.
- [40] Alexandre Zahy RASLAN, "Conception, fabrication et caractérisation de microactionneurs à base de nanotubes de carbone", Thèse De Doctorat, Université Grenoble I, (2009).
- [41] P. A. Gowri Sankar, K. Udhaya kumar, "Mechanical and Electrical Properties of Single Walled Carbon Nanotubes: A Computational Study", *European Journal of Scientific Research*, Vol.60, No.3, (2011), 324-340
- [42] Ph. Avouris, T. Hertel, R. Martel, T. Schmidt, H.R. Shea, R.E. Walkup, "Carbon nanotubes: nanomechanics, manipulation, and electronic devices", *Applied Surface Science*, 141, (1999), 201–209.
- [43] Guanghua Gao, Tahir Caginy and William A Goddard, "Energetics, structure, mechanical and vibrational properties of single-walled carbon nanotubes", *Nanotechnology*, 9, (1998), 184–191.
- [44] Paras M. Agrawal, Bala S. Sudalayandi, Lionel M. Raff, Ranga Komanduri, "A comparison of different methods of Young's modulus determination for single-wall carbon nanotubes (SWCNT) using molecular dynamics (MD) simulations", *Computational Materials Science*, 38, (2006), 271–281.
- [45] J. Hone, "Carbon Nanotubes: Thermal Properties", *Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, (2004), 603-610.
- [46] Florent Seichepine, "Réalisation d'interconnexions de faible résistivité à base de nanotubes de carbone biparois pour la microélectronique", Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III, (2011).
- [47] S. Berger, F. Iglesias, P. Bonnet, C. Voisin, G. Cassabois, J.-S. Lauret, C. Delalande, and P. Roussignol, "Optical properties of carbon nanotubes in a composite material: The role of dielectric screening and thermal expansion", *Journal of Applied Physics*, 105, (2009), 094323.
- [48] H. Kataura, Y. Kumazawa, Y. Maniwa, I. Umezu, S. Suzuki, Y. Ohtsuka and Y. Achiba, "Optical Properties of Single Wall Carbon Nanotubes", *Synthetic Metals*, 103, (1999), 2555-2558.
- [49] Cyrielle Roquelet, "Transfert d'énergie dans des composés nanotube de carbone/porphyrine", Thèse de doctorat, école normale supérieure de Cachan, (2012).

- [50] Pulicke M.Ajayan and Otto Z. Zhou, "Applications of Carbon Nanotubes", *Topics Appl. Phys.*, 80, (2001), 391–425.
- [51] C. Schonenberger, "Charge and spin transport in carbon nanotubes", *Semicond. Sci. Technol.*, 21, (2006), 1–9.
- [52] Jia Chen, "Carbon Nanotubes for Potential Electronic and Optoelectronic Applications", *ICCAD'06*, November 5-9, (2006), San Jose, CA.
- [53] Phan Ngoc Minh and Phan Hong Khoi, "Carbon nanotube: a novel material for applications", *APCTP–ASEAN Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology (AMSN08)*, *Journal of Physics: Conference Series*, 187, (2009) 012002.
- [54] Yuji Awano, Shintaro Sato, Mizuhisa Nihei, Tadashi Sakai, Yutaka Ohno, and Takashi Mizutani, "Carbon Nanotubes for VLSI: Interconnect and Transistor Applications", *Proceedings of the IEEE*, Vol. 98, No. 12, (2010), 2015-2031 .
- [55] Eric Minoux, "Etude et développement de sources électroniques à émission de champ à base de nanotubes de carbone. Application aux tubes hyperfréquences", *Thèse Doctorat, école Polytechnique*, (2006).
- [56] Lorraine Rispal, Udo Schwalke, "Structural and electrical characterization of carbon nanotube field-effect transistors fabricated by novel self-aligned growth method", *International Conference on Design & Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era*, (2008), 1-5.
- [57] jing guo, siyuranga o. koswatta, neophytos neophytou, and mark lundstrom, "Carbon Nanotube Field-Effect-Transistors", *International Journal of High Speed Electronics and Systems*,
- [58] Wolfgang Hoenlein, Franz Kreupl, Georg Stefan Duesberg, Andrew Peter Graham, Maik Liebau, Robert Viktor Seidel, and Eugen Unger, "Carbon Nanotube Applications in Microelectronics", *IEEE transactions on components and packaging technologies* , Vol. 27, No. 4, (2004), 629-634.
- [59] P.A. Alvi, K.M. Lal, M.J. Siddiqui and S. Alim, H. Naqvi, "Carbon nanotubes field effect transistors: A review", *Indian Journal of pure and Applied Physics*, Vol. 43, (2005), 899-904.
- [60] Joerg Appenzeller, Joachim Knoch, Richard Martel, Vincent Derycke, Shalom J. Wind, Senior and Phaedon Avouris, "Carbon Nanotube Electronics", *IEEE transactions on nanotechnology*, Vol. 1, No. 4, (2002), 184-189.
- [61] Ian O'Connor, Junchen Liu, Frédéric Gaffiot, Fabien Prégaldiny, Christophe Lallement, Cristell Maneux, Johnny Goguet, Sebastien Frégonèse, Thomas Zimmer, Lorena Anghel, Trong-Trinh Dang, and Régis Leveugle, "CNTFET Modeling and Reconfigurable Logic-Circuit Design", *IEEE transactions on circuits and systems*, Vol. 54, No. 11, (2007), 2365-2379.

- [62] Arijit Raychowdhury, Ali Keshavarzi, Juanita Kurtin, Vivek De and Kaushik Roy, "Carbon Nanotube Field-Effect Transistors for High-Performance Digital Circuits—DC Analysis and Modeling Toward Optimum Transistor Structure", *IEEE transactions on electron devices*, Vol. 53, No. 11, (2006), 2711-2717.
- [63] Jia Chen, Marcus Freitag, Christian Klinke, Ali Afzali, James Tsang and Phaedon Avouris, "Charge Transferred Doping and Electroluminescence in Carbon Nanotube Transistors", *Proceedings of 5th IEEE Conference on Nanotechnology*, Nagoya, Japan, (2005).
- [64] RamBabu.Busi, Swapna.P, Kalyan Babu.K, Y.Srinivasa Rao, "Carbon Nanotubes Field Effect Transistors: A Review", *International Journal Of Electronics & Communication Technology (IJECT)*, Vol. 2, SP-1, (2011), 204-208.
- [65] T. Mizutani, Y. Nosho and Y. Ohno, "Electrical properties of carbon nanotube FETs", *International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology*, *Journal of Physics: Conference Series*, 109, (2008), 012002.
- [66] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller, and Ph. Avouris, "Controlling doping and carrier injection in carbon nanotube transistors", *Applied Physics Letters*, Vol. 80, No.15, (2002), 2773-2775.
- [67] D.T.Trinh, "Portes Logiques à Base de CNTFETs – Dispersion des Caractéristiques et Tolérance aux Défauts", *Thèse de Doctorat*, Université Polytechnique de Grenoble, (2008).
- [68] Khairul Alam, and Roger Lake, "Role of Doping in Carbon Nanotube Transistors With Source/Drain Underlaps", *IEEE transactions on nanotechnology*, Vol. 6, No. 6, (2007), 652-658.
- [69] I. O'Connor, J. Liu, D. Navarro, F. Gaffiot, "Dynamically Reconfigurable Logic Gate Cells and Matrices using CNTFETs", *International Conference on Design & Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era*, (2008).
- [70] J. Liu, I. O'Connor, D. Navarro and F. Gaffiot, "Design of CNTFET-based reconfigurable logic gate", *Electronics Letters*, Vol. 43, No. 9, (2007).
- [71] Sébastien Frégonèse, Cristell Maneux, and Thomas Zimmer, "A Compact Model for Dual-Gate One-Dimensional FET: Application to Carbon-Nanotube FETs", *IEEE transactions on electron devices*, Vol. 58, No. 1, (2011), 206-215.
- [72] Ali A. Orouji, Zahra Arefinia, "Detailed simulation study of a dual material gate carbon nanotube field-effect transistor", *Physica E*, 41, (2009), 552–557.
- [73] Johnny Goguet, Sébastien Frégonèse, Cristell Maneux, Thomas Zimmer, "A Charge Approach for a Compact Model of Dual Gate CNTFET", *International Conference on Design & Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era*, (2008).

- [74] Xuebei Yang, Student, and Kartik Mohanram, "Modeling and Performance Investigation of the Double-Gate Carbon Nanotube Transistor" IEEE electron device letters, Vol. 32, No.3, (2011), 231-233.
- [75] J. Appenzeller, J.M. Lin, J.Knock, P.Avouris, "Band to Band Tunneling in Carbon Nanotube Field Effect Transistors", Phys.Rev.Lett.93, (2004), 1-4 .
- [76] M. J. Sharifi and M. Sanaeepur, "Current-Voltage Characteristic of Schottky-Barrier CNTFET Considering Resonant Transmission", International Journal of Recent Trends in Engineering, Vol 2, No. 5, (2000), 48-52.
- [77] Julia Van Meter Cline, "Characterization of Schottky Barrier Carbon Nanotube Transistors and their Applications to Digital Circuit Design", Masters of Science in Electrical Engineering and Computer Science, Massachusetts Institute of Technology, (2004)
- [78] Montassar Najari, Sébastien Frégonèse, Cristell Maneux, Hassène Mnif, Nouri Masmoudi, and Thomas Zimmer, "Schottky Barrier Carbon Nanotube Transistor: Compact Modeling, Scaling Study, and Circuit Design Applications". IEEE transactions on electron devices, Vol. 58, No. 1, (2011), 195-205.
- [79] Si-Yu Liao, Montassar Najari, Cristell Maneux, Sebastien Fregonese, and Thomas Zimmer, Hassène Mnif, and Nouri, "Optically-Gated CNTFET compact model including source and drain Schottky barrier", International Conference on Design & Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era, (2010).
- [80] WeiSheng Zhao, Christian Gamrat, Guillaume Agnus, Vincent Derycke, Arianna Filoramo and Jean-Philippe Bourgoi, "Behaviorial Model of Carbon Nanotube Programmable Resistors", 9th IEEE Conference on Nanotechnology, (2009), 713-716.
- [81] Dinh Sy Hien, Nguyen Thi Luong, Thi Tran Anh Tuan and Dinh Viet Nga, "Modeling of planar carbon nanotube field effect transistor and three dimensional simulation of current-voltage characteristics", Workshop on Advanced Materials Science and Nanotechnology (AMSN08), Journal of Physics: Conference Series, 187, (2009), 012049.
- [82] M R Tambekar, S R. Nade, A Gajarushi, "Analysis of Back Gate and Gate All Around CNTFET Structure" ICWET'11, Mumbai, Maharashtra, India, February 25-26, (2011),1144-1147.
- [83] Rasmita Sahoo, R. R. Mishra, "Carbon Nanotube Field Effect Transistor: Basic Characterization and Effect of High Dielectric Material", International Journal of Recent Trends in Engineering, Vol 2, No. 7, (2009), 40-42.
- [84] R.T.Weitz, U.Zchieschang, A.F.Aliaga, D.Kalblein, M.Burghard, K.Kern, H.Klauk: "Highly Reliable Carbon Nanotube Transistors with Patterned Gates and Molecular Gate Dielectric", Nano Letters, vol.9,No.4, (2009).1335-1340.

- [85] Chun-Wei Chen, Ming-Hsien Lee and S J Clark, "Band gap modification of single-walled carbon nanotube and boron nitride nanotube under a transverse electric field", *Nanotechnology*, 15, (2004), 1837–1843.
- [86] Stephan Roche, Thierry Poiroux, Gilles Lecarval, Sylvain Barraud and François Triozon, "simulation, modelling and characterization of quasi-ballistic transport in nanometer sized field effect transistors: from TCAD to atomistic simulation", *Int. J. Nanotechnol.*, Vol. 7, Nos. 4/5/6/7/8, (2010), 348-366.
- [87] Anisur Rahman, Jing Guo, Supriyo Datta and Mark S. Lundstrom, "Theory of Ballistic Nanotransistors", *IEEE transactions on electron devices*, Vol. 50, No.9, (2003),1853-1864.
- [88] A. Raychowdhury, S. Mukhopadhyay, K. Roy, "A Circuit-Compatible Model of Ballistic Carbon Nanotube Field-Effect Transistors", *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, Vol. 23, (2004), 1411-1420.
- [89] T. Dürkop, E.Cobas, M. S. Fuhrer, "High-Mobility Semiconducting Nanotubes". *AIP Conf. Proc.*, 685, (2003), 524.
- [90] Kuldeep Niranjana, Sanjay Srivastava, Jaikaran Singh, Mukesh Tiwari, "Comparative Study: MOSFET and CNTFET and the Effect of Length Modulation", *International Journal of Recent Technology and Engineering (IJRTE)*, Vol. 1, Issue-4, (2012), 74-78.
- [91] Rasmita Sahoo and R. R. Mishra, "Simulations of Carbon Nanotube Field Effect Transistors", *International Journal of Electronic Engineering Research*, Vol.1, No.2, (2009), 117–125.
- [92] Jingqi Li, Chao Zhao, Qingxiao Wang, Qiang Zhang, Zhihong Wang, X.X. Zhang, A.I. Abutaha, H.N. Alshareef, "Vertically aligned carbon nanotube field-effect transistors", *Carbon*, 50, (2012), 4628 – 4632.
- [93] Youngki Yoon, James Fodor, and Jing Guo, "A Computational Study of Vertical Partial-Gate Carbon-Nanotube FETs", *IEEE transactions on electron devices*, Vol. 55, No. 1, (2008), 283-288.
- [94] M. Montassar NAJARI, "Modélisation compacte des transistors à nanotube de carbone à contacts Schottky et application aux circuits numériques", *Thèse de Doctorat, Université Bordeaux 1*, (2010).
- [95] Marc BESCOND, "modélisation et simulation du transport quantique dans les transistors mos nanométriques", *Thèse De Doctorat, Université de Provence (Aix-Marseille I)*, (2004).
- [96] Mimia MARIR-BENABBAS, « Modélisation des transistors à effet de champ à dopage modulé : Performances physiques et potentielles des hétérostructures (HEMTs) à gaz bidimensionnel à très haute mobilité électronique », *Thèse De Doctorat, Université de Constantine*, (1993).

- [97] P. Godts, D. Depreeuw, E. Constant et J. Zmmermann, « Methodes generales de modelisation du transistor a effet de champ a heterojonction », *Revue Phys. Appl.* 24, 151-170, 1989.
- [98] J. C. Charlier, X. Blase, S. Roche, “Electronic and transport properties of nanotubes”, *Reviews of Modern Physics*, Vol. 79, (2007), 677-726.
- [99] L. Xinghui, Z. Changchuna, L. Yukui, “Energy band structure effect of individual single-walled carbon nanotubes on field emission characteristics”, *Physica. B*, 344, (2003), 243–248.
- [100] V. N. Popov and L. Henrard, “Comparative study of the optical properties of single-walled carbon nanotubes within orthogonal and non-orthogonal tight-binding models”, *Phys. Rev. B*, vol. 70, (2004), 1-12.
- [101] Zaida Parra-Mejias, Steven Compernelle, Liviu Chibotaru and Arnout Ceulemans, “description of nanotubes using line group symmetry”, *AIP Conf. Proc.*, 591, (2001), 442.
- [102] S. Reich, J. Maultzsch, and C. Thomsen, “Tight-binding description of graphene,” *Physical Review B*, 66, (2002), 035412.
- [103] T. L. Lia, J. H. Ting, “An exhaustive classification scheme for single-wall carbon nanotubes,” *Physica. B*, 393, (2006), 195-203.
- [104] R. Nizam, S. Mahdi, A. Rizvi and A. Azam, “Calculating the Electronic Transport Properties of Different Carbon Nanotube Based Intramolecular Junctions”, *Iranica Journal of Energy & Environment*, Vol. 1, (2010), 359-366.
- [105] A. Raychowdhury, K. Roy, “Carbon-Nanotube-Based Voltage-Mode Multiple-Valued Logic Design”, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 4, (2005), 168-179.
- [106] Johnny GOGUET, “Contribution à la modélisation physique et électrique compacte du transistor à nanotube”, Thèse de Doctorat, Université Bordeaux 1, (2009).
- [107] H. Cazin d'Honincthun, S. Galdin-Retailleau, A. Bournel, P. Dollfus and J.P. Bourgoin, « Monte Carlo study of coaxially gated CNTFETs: capacitive effects and dynamic performance”, *Comptes Rendus Physique*, vol. 9, no. 1, pp. 67-77, 2008.
- [108] Zahra Arefinia, Ali A. Orouji, “Investigation of the novel attributes of a carbon nanotube FET with high-k gate dielectrics”, *Physica E*, 40, (2008), 3068– 3071
- [109] R. B. Capaz, C. D. Spataru, P. Tangney, M. L. Cohen, and S.G. Louie, “Temperature dependence of the band gap of semiconducting carbon nanotubes”, *Phys. Rev. Lett.* 94, (2005), 036801.

LISTE DES TABLEAUX

ET

FIGURES

Liste des figures

Figure I.1. Structure du graphite hexagonal	6
Figure I.2. Structure du diamant	7
Figure I.3. Structure de graphene	8
Figure I.4. Le fullerène C_{60} possède 60 atomes de carbones et le C_{76} possède 16 atomes de carbone supplémentaires	8
Figure I.5. Structure d'un nanotube de carbone	9
Figure I.6 Structure d'un nanotube de carbone avec Différents fullerènes	10
Figure I.7 Structure de MWCNT sous forme concentriques	11
Figure I.8. Nanotubes multi-feuillets sous forme spirale	11
Figure I.9. Structure d'un nanotube de carbone : a) SWCNT structure, b) images TEM du fagot de nanotube de carbone	12
Figure I.10. Définition des vecteur de chiralité et translation	13
Figure I.11. Chiralité des nanotubes de carbone	14
Figure I.12. La zone de Brillouin 1D d'un nanotube de carbone	16
Figure I.13. Schémas des nanotubes métalliques et semi-conducteurs	17
Figure I.14 Schéma représentant un réacteur de type arc électrique permettant la production de nanotubes de carbone	18
Figure I.15. Schéma représentant un réacteur de type ablation laser permettant la production de nanotubes de carbone	19
Figure I.16 Schéma représentant un réacteur CVD utilisé pour la croissance de nanotubes de carbone	20
Figure I.17. Réflexion R (cercles) et transmission T (triangles) d'un film de nanotubes de carbone mono paroi	24
Figure I.18. a) Vue en coupe transversale d'un CNTFET, b) caractéristique électrique d'un CNTFE	27
Figure I.19. Field Emission de films CNT	28
Figure I.20. Concept de NRAM en CNT	29
Figure II.1. (a) Schéma du montage électrique réalisé d'un transistor à nanotubes de carbone	32

Figure II.2. a) Dopage d'un CNTFET type P pour créer un CNTFET type N par le recuit et le dopage avec l'oxygène; b) CNTFET type N par le dopage avec le potassium	33
Figure II.3. Le transistor CNTFET à modulation de la hauteur de barrière ou C-CNTFET coupe transversale du transistor et profile de la bande d'énergie de la bande conduction	35
Figure II.4. Diagrammes d'énergie d'un CNTFET type N sous deux conditions de polarisation montrant l'état passant (a) et l'état bloqué (b). La polarisation V_{DS} est positive dans les deux cas. Dans a), V_{GS} est fortement positif. Dans b), il est faiblement positif	36
Figure II.5. Un DG-CNTFET avec l'effet du grille avant et arrière	37
Figure II.6. Diagramme de bande d'énergie $V_{DS} < 0$ et a) sans polarisation de grille, b) avec polarisation de grille négative et c) positive	38
Figure II.7. Schéma d'un OG-CNTFET montrant une polarisation positive de la grille : a) état bloqué ; b) état passante	39
Figure II.8. Un exemple d'un CNTFET a grille arrière	41
Figure II.9. Un exemple de grille supérieure de CNTFET	41
Figure II.10. A première version du CNTFET vertical proposé	43
Figure II.11. deux configuration du CNTFET : a) grille coaxiale et b) grille plane	45
Figure II.12. Structure de bande d'énergie d'un CNTFT, les régions ombrées sont la source et drain	47
Figure II.13. Les capacités contribuent a définir le potentiel de surface de nanotube de carbone V_{CNT}	47
Figure III.1. Energie de valence et de conduction en fonction du vecteur d'onde k	53
Figure III.2. a) Profile de bande d'énergie d'un nanotube de carbone semiconducteur de chiralité (19,0) résultant du calcul par méthode de liaison forte. (b) présentation de la première sous-bande	54
Figure III.3. a) Structure de bande du graphène. L'hexagone noir représente la zone de Brillouin. b) La même figure que précédemment à laquelle a été ajoutée en noir le domaine $E(k)$ à partir duquel va être déduite la structure de bande du CNT (10,0) selon les dimensions du nanotube c-d) Zone $E(k)$ extraite de la figure précédente	56

Figure III.4. Zone de Brillions et espace réciproque, (a) vecteur de base dans le treillis hexagonal de graphene, (b) zone de Brillions réciproque correspondant vecteur de base b_1 et b_2 , (c) les valeurs permises de k sur les lignes équidistantes de N parallèles à l'axe de tube	58
Figure III.5. Diagramme de densité de charge	59
Figure III.6. (a) Schéma d'un conducteur balistique 1D connecté à 2 contacts appelés aussi réservoirs (b) Structure de bande électronique, (c) Potentiel dans le système, on définit une valeur moyenne entre le potentiel des états $+k$ et $-k$ (pseudo niveau de Fermi)	67
Figure III.7. a) Représentation schématique simplifiée du bas de la bande de conduction selon l'axe source-drain pour $V_{DS} > 0$ V. b) Niveau d'énergie des électrons dans la bande de conduction selon le vecteur d'onde dans la partie interne dont le bas de bande est modulé par le potentiel de canal V_{CNT}	68
Figure III.8. schéma de principe montrant les 3 premiers sous bandes	71
Figure IV.1. Première zone de Brillouin du nanotube de carbone: a) pour un armchair (cas d'un métal), b) pour le type zigzag (cas de semi-conducteur)	74
Figure IV.2. La dispersion électronique d'énergie $E(k)$ avec les sous-bandes de CNT	75
Figure IV.3. La dispersion électronique d'énergie $E(k)$ avec les sous-bandes de CNT, le cas d'un métal.	75
Figure IV.4. Densité d'Etat pour la première sous bande	77
Figure IV.5. Organigramme de calcul du courant de drain	78
Figure IV.6. Coaxial géométrie du CNTFET. Le canal est 50nm long. Le diamètre du CNT est 1nm. L'oxyde de la grille est SiO_2 avec une épaisseur de 2nm.	79
Figure IV.7. Variation du courant de drain en fonction de V_{DS} pour différents valeur De V_{GS}	79
Figure IV.8. Variation du courant de drain en fonction de V_{GS} pour différentes valeurs De V_{DS}	80

Figure IV.9. Variation de la densité de charge en fonction de $(V_{GS}-V_t)$	81
Figure IV.10. Effet de sous bande sur la dispersion d'énergie $E(k)$: a) $dt=1.8nm$, b) $dt=3.9nm$.	82
Figure IV.11. Variation du courant de drain en fonction de V_{GS} pour différentes valeur du diamètre du CNT, ($V_{ds}=0.6$).	83
Figure IV.12. Variation du courant de drain en fonction de V_{DS} pour différentes valeur du diamètre du CNT, ($V_{gs}=0.4V$).	83
Figure IV.13. Densité de l'Etat pour les trois premières sous bande	84
La figure IV.14. variation de I_{DS} en fonction V_{DS} pour les trois premiers sous bande	85
La figure IV.15. variation de I_{DS} en fonction V_{GS} pour les trois premiers sous bande	86
La figure IV.16. variation de I_{DS} en fonction V_{DS} pour les trois premiers sous bande : a) $dt=0.55nm$, b) $dt=1.8nm$	87
Figure IV.17. Variation de potentiel de surface V_{CNT} pour différent diélectriques constant ϵ .	89
Figure IV.18. Variation de courant $I_{DS}-V_{DS}$ pour $\epsilon=3.6 ; 20 ; 80$.	89
Figure IV.19. Variation de courant I_{DS-sat} en fonction de constant diélectrique ϵ .	90
Figure IV.20. Caractéristique $I_{DS}-V_{DS}$ de C-CNTFET et DMG-CNTFET de la référence	91
Figure IV.21. les Caractéristiques électriques d'un CNTFET obtenue par la méthode Monte Carlo	91
Figure IV.22. Courant de drain I_{DS} en fonction de la tension grille-source V_{GS} à $V_{DS} = 0,4 V$	92
Figure IV.23. Effet du diamètre sure les caractéristiques électriques de CNTFET a) $I_{DS}-V_{GS}$, b) $I_{DS}-V_{DS}$	92
Figure IV.24. effet de constant diélectrique ϵ sur les caractéristiques électriques de CNTFET	93
Figure IV.25. variation de courant de saturation en fonction de diélectrique constant	93
Figure IV.18. Effet de température sur la bande gap de nanotube de carbone	95

Liste des tableaux

Tableau I.1. Propriétés des différents types de liaison carbone-carbone	5
Tableau I.2. La classification des nanotubes.	15
Tableau I.3. Les caractéristiques dimensionnelles des nanotubes de carbone.	21
Tableau I.4. Quelques propriétés mécaniques des nanotubes de carbone.	23
Tableau I.5. Quelques caractéristiques thermiques des nanotubes de carbone	23
Tableau I.6. Composition électronique réalisés avec des CNTs dans divers domaine des applications	26
Tableau II.1. Comparaison des caractéristiques des différents types de CNTFET	40
Tableau II.2. Comparaison entre CNTFET a grille – arrière et a grille supérieure	42
Tableau II.3. Comparaison de V-CNTFET et MOSFET (2016)	44
Tableau II.4. compare entre les CNTFET et MOSFET pour plusieurs longueurs des grilles	49
Tableau IV.1 Liste des oxydes considéré pour l'isolation de la grille avec différent constante diélectrique	88

Résumé :

Depuis la découverte des nano-objets 1D, ne cessent de révéler des propriétés physiques remarquables. À cet égard, Les nanotubes de carbone (CNT) ont des un candidats prometteurs pour application dans des dispositifs futurs de la nanoélectroniques, en particulier le transistor à effet de champ à base de nanotube de carbone (CNTFET).

C'est dans ce contexte que se situe ce travail de thèse qui présente un modélisation de transistor nanotube de carbone qui est essentiel de comprendre les propriétés électriques du transistor proposé a l'échelle nanométrique.

Après une étude descriptive qui donne une vus générales sur les nanotubes de carbone (CNT) et les transistors a base de nanotube de carbone(CNTFET), nous avons étudié les effets de sous bande a l'aide d'un calcule analytique sur les caractéristiques électriques de transistor a base de nanotube de carbone.

Les caractéristiques électriques de CNTFET sont obtenu par une modélisation d'un model basé sur la résolution unidimensionnel puis bidimensionnel, en vue de déterminer la densité de charge, nous déduisons ainsi les caractéristiques du CNTFET.

Enfin, Une simulation est effectuée en se basant sur le modèle présente dans cette étude, D'après les résultats de simulation, de toute évidence les sous-bande d'énergie a un effet sur la structure de bande et les caractéristique électriques de CNTFET obtenus, il ya un bon accord avec les résultats théoriques dans la littérature.

Mots clé : CNTFET ; Dispersion d'énergie ; sous bande d'énergie ; zone folding approximation ; modélisation

Abstract:

Since their discovery 1D nano-object are constantly revealing remarkable physical properties. In this regard, carbon nanotubes (CNT) have shown to be a promising candidate as a material for the future nanoelectronic devices, in particular the carbon nanotube field effect transistor (CNTFET).

It is in this context that this thesis which presents a modeling of CNTFET that is essential to understand the electrical properties of the transistor proposed in nanoscale. After a descriptive study which gives general seen carbon nanotubes (CNT) and carbon nanotube transistors (CNTFET), we studied the effects of a sub-band using an analytical calcule in the electric characteristics of CNTFET.

CNTFET electrical characteristics are obtained by modeling of a model based on one-dimensional and two-dimensional resolution in order to determine the charge density, and we deduce the characteristics of the CNTFET.

Finally, a simulation is performed based on the model presented in this study, The results of simulation clearly sub-band energy has an effect on the band structure and electrical characteristics obtained CNTFET there is a good agreement with the theoretical results in the literature.

Keywords: CNTFET; dispersion energy; sub-and energy; area folding approximation, modeling

ملخص :

منذ اكتشاف مواد النانو أحادية البعد لم تنفك هذه المواد على إظهار خصائص فيزيائية ملحوظة و في هذا الصدد ظهرت أنابيب الكربون النانوية (CNT) لتكون مرشحا و اعدا كمادة لأجهزة النانو الإلكترونية في المستقبل و لا سيما في ميدان الترونزيستور ذات تأثير الحقل (CNTFET). في هذا السياق هذه الأطروحة تقدم نمذجة الترونزيستور بأنبوب الكربون النانوي المهمة لفهم الخصائص الكهربائية في مقياس النانومتر.

بعد دراسة نظرية التي تعطي نظرة عامة لأنابيب الكربون النانوية و كذلك الترونزيستور (CNTFET) قمنا بدراسة تأثير النطاقات الفرعية باستخدام الحسابات التحليلية على الخصائص الكهربائية للترونزيستور (CNTFET).

النتائج المحصل عليها بواسطة برمجة نموذج في البعدين الثنائي و الأحادي باستعمال إحصائيات فيرمي ديراك لتحديد كثافة الشحنة و استنتاج خصائص الترونزيستور. (CNTFET). على أساس النموذج المقدم في هذه الدراسة، نتائج المحاكاة تبين تأثير النطاقات الفرعية على مجال الطاقة و الخصائص الكهربائية للترونزيستور (CNTFET) . النتائج قدمت و نوقشت.

كلمات مفتاحية: CNTFET؛ النطاقات الفرعية؛ مجال الطاقة؛ نموذج.