



Université Mohamed Khider de Biskra  
Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et de la  
vie  
Département des sciences de la matière

# MÉMOIRE DE MASTER

Domaine des Sciences Matière  
Filière de Physique  
Spécialité physique des matériaux  
Réf. : Entrez la référence du document

---

Présenté et soutenu par :

**Mesmoudi Raounek**

Le : 18-6-2023

## Etude Numérique d'un Transistor à un Electron en Graphène par le Simulateur Atlas Silvaco

---

### Jury :

|     |                |     |                                 |            |
|-----|----------------|-----|---------------------------------|------------|
| Pr. | Meftah Afek    | Prf | Université Med Khider de Biskra | Présidente |
| Dr. | Boudib Ouahiba | MCB | Université Med Khider de Biskra | Rapporteur |
| Dr. | Boumaaref Ramy | MCA | Université Med Khider de Biskra | Examineur  |

Année universitaire : 2022-2023

# Remerciement

*Nous exprimons toute notre gratitude et remercions à Allah de nous avoir donné la force, la volonté et la bénédiction d'accomplir ce modeste travail.*

*Nous exprimons toutes les phrases de gratitude et de remerciements pour notre encadreur Madam Boudib Ouahiba, qui a guidé ce travail.*

*Pour son soutien, son dévouement et les conseils constructifs qu'il nous a donnés pendant tout ce temps.*

*J'espère que ce petit mot lui donnera la gratitude qu'il mérite.*

*Nous donnons notre immense respect et nos plus sincères remerciements à tous les membres du jury, Mr Boumaaref Ramy et Mme Meftah Afek*

*Davoir bien voulu juger mon travail.*

*Ce travail a été réalisé au l'université Mohamed Khider de Biskra du département de science de la matière.*



# Dédicace



*Je voulais tout d'abord, de dire : Louange à Allah qui m'a inspiré le courage et la capacité de faire et accomplir ce modeste travail, que je dédie :*

*À ma chère mère et à mon cher père, pour tous les sacrifices, les encouragements et le pouvoir qu'ils m'ont donné toute ma vie. Peu importe ce que je fais, ce ne sera pas suffisant pour rembourser ce que vous avez fait pour moi.*

*À mes chers frères : Hamza, Samir, et mes chers sœurs Siham, Stika, Khaoula et Amina pour leur amour et leur aide qu'ils trouvent ici l'expression de ma haute gratitude.*

*À mes chers amis : K. Habiba, Ch. Atham, M. Nour houda, M. Maroua et*

*A. Feriel*

*Une dédicace spéciale à mon cher prof Abdeselem Nora  
Amel*

*M. Raouneke*

## Résumé

Le transistor à un électron en graphène (GSET) est un nouveau dispositif actuel, il est utilisé dans plusieurs domaines comme électronique, informatique, ...etc. Le but de ce travail est de faire une étude numérique des propriétés électroniques de ce transistor en graphène. De plus, on a étudié les paramètres qui ont influencés sur le courant par le simulateur Atlas-Silvaco TCAD (Technical Computer Aided Design). On a résolu les équations Schrödinger-Poisson, à l'aide du formalisme des fonctions de Green hors équilibre (NEGF). On a calculé les fonctions d'ondes, distribution de potentiel, diagramme d'énergie sous l'effet de la polarisation de la grille. De plus, les caractéristiques du courant de transistor (GSET) en fonction de la tension du drain ou de la grille sous l'effet des paramètres physiques ou géométriques. On a obtenu que le courant augmente avec l'augmentation de la tension du drain, le dopage, la largeur et l'épaisseur de la couche du graphène.

Mot clés :

Transistor à un électron en graphène, GSET, point quantique, Schrödinger-Poisson, NEGF.

## *Table des Matières*

|                            |     |
|----------------------------|-----|
| Remerciement.....          | I   |
| Dédicace.....              | II  |
| Résumé.....                | III |
| Table des Matières.....    | IV  |
| Table des Figures.....     | VII |
| Liste des tableaux.....    | X   |
| Liste des symboles.....    | XI  |
| Introduction Générale..... | 1   |

### *Chapitre I : Généralité sur le graphène*

|  |           |
|--|-----------|
| <b>I.1 Introduction.....</b>                                       | <b>3</b>  |
| <b>I.2. Les formes de carbone.....</b>                             | <b>3</b>  |
| <b>I.3 Le graphène.....</b>  | <b>4</b>  |
| <b>I.4 Structure du graphène.....</b>                              | <b>5</b>  |
| I.4.1 Structure cristalline.....                                   | 5         |
| I.4.2 Structure électronique.....                                  | 6         |
| <b>I.5. Propriétés de graphène.....</b>                            | <b>7</b>  |
| I.5.1 Propriétés électroniques.....                                | 7         |
| I.5.2 Propriétés mécaniques.....                                   | 8         |
| I.5.3 Propriétés optiques.....                                     | 8         |
| <b>I.6 Les différentes méthodes pour obtenir le graphène .....</b> | <b>9</b>  |
| I.6.1 Exfoliation mécanique.....                                   | 9         |
| I.6.2 Graphène chimiquement exfolié.....                           | 9         |
| I.6.3 Graphène fabriqué par méthode CVD.....                       | 10        |
| I.6.4 Graphène épitaxie sur le carbure de silicium .....           | 12        |
| <b>I.7 Comparaison des méthodes d'obtention .....</b>              | <b>12</b> |
| <b>I.8 application du graphene.....</b>                            | <b>13</b> |
| I.8.1 Transistors.....   | 13        |
| I.8.2 Electrodes transparentes.....                                | 14        |
| I.8.3 Cellules photovoltaïques.....                                | 15        |
| I.8.4 Stockage d'Energie.....                                      | 16        |
| I.8.5 Ultrafiltration.....   | 16        |

### *Chapitre II : Transistors SET en graphène*

|                                |           |
|--------------------------------|-----------|
| <b>II. 1 Introduction.....</b> | <b>18</b> |
|--------------------------------|-----------|

|  |           |
|--|-----------|
| <b>II.2 Transistor à un électron.....</b>                                | <b>18</b> |
| II.2.1 Historique.....   | 18        |
| II.2.2 Définition.....   | 18        |
| <b>II.3 Principe de fonctionnement de SET.....</b>                       | <b>19</b> |
| <b>II.4 Effet de Blocage de Coulomb.....</b>                             | <b>21</b> |
| <b>II.5 Caractérisations du courant de SET.....</b>                      | <b>22</b> |
| <b>II.6 Application du SET courant de SET.....</b>                       | <b>23</b> |
| <b>II.7 Avantages et inconvénients des SET .....</b>                     | <b>24</b> |
| <b>II.8 Etude quantique .....</b>  | <b>25</b> |
| II.8.1 L'approche « espace des modes ».....                              | 26        |
| II.8.2 Calcul des fonctions de Green.....                                | 26        |
| <b>II.9 Calcul du courant de drain.....</b>                              | <b>27</b> |
| <b>II.10 Transistor à un électron en graphène.....</b>                   | <b>28</b> |
| <b>II.11 Transport électronique dans le graphène.....</b>                | <b>29</b> |
| <b>II.12 Mobilité dans le graphène.....</b>                              | <b>30</b> |
| <b>II.13 Ouverture d'une bande interdite dans le graphène.....</b>       | <b>30</b> |
| II.13.1 Nano rubans de graphène.....                                     | 31        |
| II.13.2 Bicouche de graphène.....  | 32        |
| II.13.3 Fonctionnalisation du graphène.....                              | 33        |
| II.13.4 Graphène sur SiC.....  | 33        |
| <b>II.14 Diagrammes de bandes d'énergie.....</b>                         | <b>34</b> |
| <b>II.15 Avantages et inconvénients des transistors en graphène.....</b> | <b>36</b> |
| <b>II.15.1 Avantages.....</b>  | <b>36</b> |
| <b>II.15.2 Inconvénients .....</b>                                       | <b>37</b> |

### *Chapitre III : Simulateur Atlas Silvaco*

|   |           |
|---|-----------|
| <b>III. 1 Introduction.....</b>                 | <b>39</b> |
| <b>III.2 Définitions.....</b>                   | <b>39</b> |
| <b>III.3 Travailler avec Atlas.....</b>         | <b>40</b> |
| <b>III.4 Spécification de la structure.....</b> | <b>41</b> |
| III.4.1. Maille (Mesh).....                     | 41        |

|  |           |
|--|-----------|
| III.4.2 Région.....  | 42        |
| III.4.3 Electrodes.....  | 43        |
| III.4.4 Dopage.....  | 43        |
| <b>III.5 Les matériaux et modèles utilisés.....</b>                        | <b>44</b> |
| III.5.1 Contact.....   | 44        |
| III.5.2 Matériel.....  | 44        |
| III.5.3 Modèles physiques.....   | 45        |
| III.5.4 Interface.....   | 45        |
| <b>III.6 Spécification de la solution.....</b>                             | <b>45</b> |
| <b><i>Chapitre IV : Résultats et discussion</i></b>                        |           |
| <b>IV.1 Introduction.....</b>  | <b>48</b> |
| <b>IV.2 Modèles physiques utilisés.....</b>                                | <b>49</b> |
| IV.2.1 Approche de la Fonction de Green Non Equilibre (NEGF).....          | 49        |
| <b>IV.3 Etude électrostatique de la structure a une grille.....</b>        | <b>51</b> |
| IV.3.1 Distributions du potentiel.....                                     | 51        |
| IV.3.2 Effet de la tension de grille $V_g$ .....                           | 53        |
| <b>IV.4 Etude électrostatique de la structure a plusieurs grilles.....</b> | <b>58</b> |
| <b>Conclusion générale.....</b>  | <b>61</b> |
| <b>Bibliographie.....</b>  | <b>63</b> |

# Tableau des Figures

| <b>Chapitre I : Généralité sur le graphène</b>   |   |    |
|--|---|----|
| <b>Figure I.1 :</b>                              | Atome de carbone et ses formes.....   | 3  |
| <b>Figure I.2 :</b>                              | Structure idéalisée d'une seule feuille de graphène.....  | 4  |
| <b>Figure I.3 :</b>                              | a) Structure cristalline du graphène. La cellule unitaire contient deux atomes de carbone et les vecteurs du réseau forment un angle de $120^\circ$ . Ces atomes sont équivalents parce qu'ils ont le même nombre d'atomes voisins. b) Diagramme schématique des liaisons $\sigma$ dans le plan de graphène et des orbitales $\pi$ perpendiculaire à ce plan.....   | 5  |
| <b>Figure I.4 :</b>                              | a) Calcul ab initio de la structure de bandes d'énergie du graphène isolé. Les bandes $\sigma$ , $\pi$ et $\pi^*$ sont indiquées par les flèches violette, orange et verte respectivement. b) Première zone de Brillouin qui montre les points de haute symétrie $\Gamma$ , M, K et $K'$ . c) Calcul ab initio des structures de bande pour le graphène, biplan de graphène et graphite autour du point K et au voisinage du niveau de Fermi..... | 7  |
| <b>Figure I.5 :</b>                              | Les différentes étapes d'exfoliation mécanique du graphène à partir du graphite.....  | 9  |
| <b>Figure I.6 :</b>                              | Modèles moléculaires illustrant le processus de conversion du graphite en graphène dérivé chimiquement.....   | 10 |
| <b>Figure I.7:</b>                               | Principe du système CVD.....  | 11 |
| <b>Figure I.8 :</b>                              | Graphène synthétisé par la méthode CVD sur Ni. (A) Image optique du graphène sur Ni, les flèches marquent des zones couvertes par graphène ; (B) Image TEM du graphène sur Ni.....  | 11 |
| <b>Figure I.9 :</b>                              | Croissance de graphène sur un substrat de carbure de silicium. Ici quatre couches de graphène ont été formées.....  | 12 |
| <b>Figure I.10 :</b>                             | a) transistor à base de graphène. b) image par microscopie à balayage d'un nanotransistor à base de graphène.....   | 14 |
| <b>Figure I.11 :</b>                             | a) montre l'intégration du graphène comme une électrode transparente dans la diode électroluminescente organique OLED ; b) L'écran tactile n'est pas facilement cassable car elle est conçue à la base de graphène.....   | 15 |
| <b>Figure I.12 :</b>                             | Image de filtres à eau de graphène.....   | 16 |
| <b>Chapitre II : Transistors SET en graphène</b> |   |    |
| <b>Figure II.1 :</b>                             | i) Structure schématique du SET : ii) Circuit équivalent de SET.....  | 19 |
| <b>Figure II.2 :</b>                             | Évolution du diagramme en bande et du courant en fonction de la tension de grille dans un SET. (a) régime de blocage de Coulomb, (b) $\mu_1 = E_{FS}$ , le courant peut passer, premier pic de Coulomb, (c) $\mu_1 < E_{FD}$ , le courant ne peut plus passer, le courant redevient nul, (d) $\mu_2 = E_{FS}$ , début du deuxième pic de Coulomb.....   | 20 |
| <b>Figure II.3 :</b>                             | diagramme de stabilité les diamants du Coulomb .....  | 20 |

## Tableau des Figures

|  |  |    |
|--|--|----|
| <b>Figure II.4 :</b>                           | Caractérisation du courant $I_{DS} - V_G$ de SET (Oscillation de Coulomb).....   | 21 |
| <b>Figure II.5 :</b>                           | :(a) Oscillations de Coulomb du SET dans la Caractéristique $I_{DS} - V_G$ pour $V_{DS} = 120mV$ , et (b) Caractéristique $I_{DS} - V_{DS}$ illustrant l'annulation du phénomène de blocage de Coulomb. Les paramètres du SET sont : $T = 300K$ et $C_S = C_D = 0.05aF$  | 22 |
| <b>Figure II.6 :</b>                           | Caractéristiques I-V de SET pour jonction asymétrique représentant « l'état de l'escalier coulomb ».....   | 23 |
| <b>Figure II.7 :</b>                           | structure de transistor à un électron avec monocouche du graphène à gauche et image microscopie à force de balayage (a et b).....  | 28 |
| <b>Figure II.8 :</b>                           | Conductivité d'un flocon de graphène monocouche en fonction de la tension de la porte arrière. L'encart du haut montre la relation de dispersion du graphène aux énergies où les bandes de conduction et de valence se touchent dans le K et le K'.....  | 29 |
| <b>Figure II.9 :</b>                           | a) Un nanoruban de graphène armchair hydrogéné en bord. b) Un nanoruban de graphène Zigzag.....  | 31 |
| <b>Figure II.10 :</b>                          | Valeur de la bande interdite mesurée sur des dispositifs à effet de champ sur graphène exfolié tracée en fonction de la largeur W du ruban de graphène. Des valeurs de bande interdite de 300 meV sont atteintes pour des rubans de 15 nm.....   | 32 |
| <b>Figure II.11 :</b>                          | (a) Schéma d'une bicouche de graphène. Lorsque qu'un champ verticale E est appliqué, il apparait une différence de potentiel entre les deux couches de graphène et une bande interdite est ainsi créée. (b) L'équipe d'IBM met en évidence l'impact de la valeur de la polari- sation face arrière sur le ratio ION/IOFF du transistor. Un ratio de 100 est mesuré pour une polarisation arrière de -120V..... | 33 |
| <b>Figure II.12 :</b>                          | Cliché ARPES pris près du point de Dirac K. Les traits noirs indiquent une relation de dispersion parabolique au point K et une bande interdite ouverte.....   | 34 |
| <b>Figure II.13 :</b>                          | Diagrammes de bande d'énergie pour (a) des contacts métal semi-conducteur, (b) métal-métal et (c) métal-graphène. EC et EV sont les énergies pour les bandes de conduction et de valence, respectivement.....  | 35 |
| <b>Figure II.14 :</b>                          | La relation entre la DOS et l'énergie "juste" à l'interface métal-graphène (a) avant le contact, et pour (b) la physisorption et (c) chimisorption après le contact ouverte.....   | 36 |
| <b>Chapitre III : Simulateur Atlas Silvaco</b> |  |    |

## Tableau des Figures

|  |   |    |
|--|---|----|
| <b>Figure III.1 :</b>                        | Fenêtre DECKBUILD.....  | 40 |
| <b>Figure III.2 :</b>                        | Groupes de commande d'atlas et déclarations primaires.....  | 40 |
| <b>Figure III.3 :</b>                        | Exemple de maillage.....  | 41 |
| <b>Figure III.4 :</b>                        | Exemple de régions.....   | 42 |
| <b>Figure III.5 :</b>                        | Exemple des électrodes.....   | 43 |
| <b>Figure II.6 :</b>                         | Dopage.....   | 44 |
| <b>Chapitre IV : Résultats et discussion</b> |   |    |
| <b>Figure IV.2 :</b>                         | La distribution du potentiel dans la structure SET a une seule grille à base de Graphène.....   | 48 |
| <b>Figure IV.3 :</b>                         | La ligne de potentiel le long de la structure (OX).....   | 51 |
| <b>Figure IV.4 :</b>                         | Calcul le diagramme d'énergie de la hétérostructure à double barrière.....  | 52 |
| <b>Figure IV.5:</b>                          | Schéma de la band de conduction et les états liés aux électrons le long de OX sous Vds= 0 V et différentes vg.....                        | 52 |
| <b>Figure IV.6 :</b>                         | Variation du courant en fonction Vg à T=300 k et Vds=0.1V.....  | 53 |
| <b>Figure IV.7 :</b>                         | les effets de la largeur de graphène sur la valeur du courant Id en fonction de Vg à T=300 k et Vd=0.1V .....                             | 54 |
| <b>Figure IV.8 :</b>                         | les effets de l'épaisseur de graphène sur la valeur du courant Id en fonction de Vg à T=300 k et Vd=0.1V.....                             | 55 |
| <b>Figure IV.9 :</b>                         | L'effet de l'augmentation du dopage des couche de nanotransistor sur la valeur du courant Id en fonction de Vg à T=300 k et Vd=0.1V.....  | 56 |
| <b>Figure IV.10</b>                          | Comparaison de l'effet du Graphène sur la caractéristique Id-Vg vis à -vis la structure incluant l'In0.05Ga0.95As.....                    | 57 |
| <b>Figure IV.11</b>                          | Comparaison de l'effet du Graphène et Graphene évolue sur la caractéristique Id-Vg vis-à -vis la structure incluant l'In0.05Ga0.95As..... | 58 |
| <b>Figure IV.12:</b>                         | Structure sous étude de SET en Graphène comme couche canal.....   | 58 |
| <b>Figure IV.13</b>                          | bande de conduction sur le long de la structure du graphène.....  | 59 |
| <b>Figure IV 14</b>                          | Figure IV 14 : Les fonctions d'ondes pour les trois premiers états énergétiques.....  | 59 |

## Liste des Tableau

|   |    |
|---|----|
| Tableau I.1 : liste les valeurs maximales de mobilités obtenues à partir de mesure de Hall..... | 12 |
| Tableau II.1 : avantages et inconvénients des SET.....  | 24 |
| Tableau II.2 : la mobilité pour les matériaux les plus utilisés en microélectronique.....       | 30 |
| Tableau IV.1 : Paramètres du transistor à un électron a une seule grille.....                   | 49 |

## Liste des symboles et acronymes

|                  |  |
|------------------|--|
| 2D               | : deux Dimensions                            |
| HOPG             | : Highly Ordered Pyrolytic Graphite          |
| CVD              | : Chemical Vapor Deposition                  |
| ITO              | : Indium Tin Oxide                           |
| SiO <sub>2</sub> | : Dioxyde de silicium                        |
| TEM              | : Transmission Electron Microscopy           |
| ARPES            | : Angle Resolved Photo Emission spectroscopy |
| OLED             | : Organic Light-Emitting Diode               |
| SET              | : Single Electrone Transistor                |
| GSET             | : Graphene Single Electrone Transistor       |
| GNR              | : Graphene Nano Rubon                        |
| FET              | : Field Effect Transistor                    |
| NEGF             | : Non Equilibrium Green Fonction             |
| PQ               | : Points Quantiques                          |
| C <sub>D</sub>   | : Capacitance jonction-tunnel du Drain       |
| C <sub>G</sub>   | : Capacitance de la Grille                   |
| C <sub>S</sub>   | : Capacitance jonction-tunnel de la Source   |
| V <sub>g</sub>   | : Tension de grille                          |
| V <sub>d</sub>   | : Tension de drain                           |
| R <sub>S</sub>   | : Résistance de source                       |
| R <sub>d</sub>   | : Résistance de drain                        |
| I <sub>d</sub>   | : Courant de drain                           |
| L <sub>G</sub>   | : Longueur de Graphène                       |
| T                | : Température                                |
| GHz              | : Gegahertz                                  |

# Introduction générale

## Introduction générale

Les transistors sont les principaux éléments constitutifs des circuits intégrés et donc de tous nos appareils électronique (téléphones portables, tablettes numériques, ordinateurs portables, etc.). Ces appareils sont en amélioration constante des performances : plus de fonctions, plus d'efficacité, plus petite taille. Dispositifs subissent une miniaturisation régulière de leurs dimensions à l'échelle atomique et moléculaire. L'un des nano dispositifs les plus fascinants est le transistor à un électron (SET), en effet, la dimension des nanotransistor (SET) devient petite que les effets parasites et les effets quantiques, jusque-là relativement négligeables, jouent un rôle dominant. Arrivés à cette limite, les chercheurs sont contraints de se tourner vers de nouveaux matériaux pour poursuivre la miniaturisation, Parmi les matériaux qui ont suscité le plus d'intérêt chez les chercheurs, on peut citer carbone sous la forme nanotube malgré des caractéristique électronique exceptionnel on a très vite vue sa limite pour cette raison, En 2004, Novoselov et al a synthétisé pour la première fois un nouvel allotrope stable d'un matériau carboné [1]: le graphène qui offre les mêmes caractéristiques que nanotube de carbone.

Le graphène est un matériau deux dimensions à structure cristalline la forme hexagonale est souvent comparée à un réseau en nid d'abeille. Cette structure cristalline rend le graphène est un matériau aux nombreuses propriétés, telles que : la souplesse, conductivité électrique et thermique excellente, transparence et très grande mobilité de charges et bande interdite modifiable, propriétés mécaniques exceptionnelles [2]. Le graphène est un candidat pour remplacer le silicium dans certains domaines, notamment quand de grandes mobilités tant pour les électrons que pour les trous sont nécessaires. Pour cela nous avons choisi ce matériau pour l'étude des propriétés électroniques du transistor à un électron en graphène.

Ce mémoire est séparé à quatre chapitres :

- ✓ Le premier chapitre, nous allons présenter une généralité sur le graphène.
- ✓ Le deuxième chapitre, nous présentons le principe de fonctionnement du transistor SET, méthodes d'obtentions de la bande interdite et diagramme d'énergie du graphène.
- ✓ Le troisième chapitre concerne la simulation du transistor par le simulateur Atlas Silvaco.
- ✓ Enfin, le quatrième chapitre expose les résultats et interprétation.

# **CHAPITRE I**

## **Généralité sur le graphène**

### I. 1 Introduction

George Beylerian dit, "le monde semble s'attendre à un approvisionnement sans fin de nouvelles options matérielles " [3]. Récemment, des couches uniques d'atomes de carbone (graphène) ont été obtenues expérimentalement [1]. Le graphène s'est vite avéré être un matériau fascinant, aux propriétés mécaniques et électroniques exceptionnelles [2]. Les qualités et propriétés uniques de ce nouveau matériau ont permis à de nombreux scientifiques et chercheurs de voir qu'il est qualifié pour provoquer une révolution scientifique dans le futur. Dans ce chapitre, nous présenterons une étude générale sur le graphène et ses méthodes de préparation, ainsi que ses applications dans divers domaines.

### I.2 Les formes de carbone

Depuis plus de 100 ans, les chimistes s'efforcent à synthétiser des molécules à base de carbone ayant différentes formes et propriétés physico-chimiques. Parmi les plus connues, on retrouve le carbone amorphe (Jenkins, 1973), le graphite (Acheson, 1896), le graphène (Novoselov, 2004-2005), le fullerène (Kroto, 1985), le nanotube de carbone (Iijima, 1991) et le diamant (Moissan, 1894). Aussi, des formes plus sophistiquées comme les nanorubans de graphène (Wakabayashi, 1999), les nanocornes (Iijima, 1999), les nanocônes (Naess, 2009) et les nanofibres de carbone (Morgan, 2005) ont été développées plus récemment.

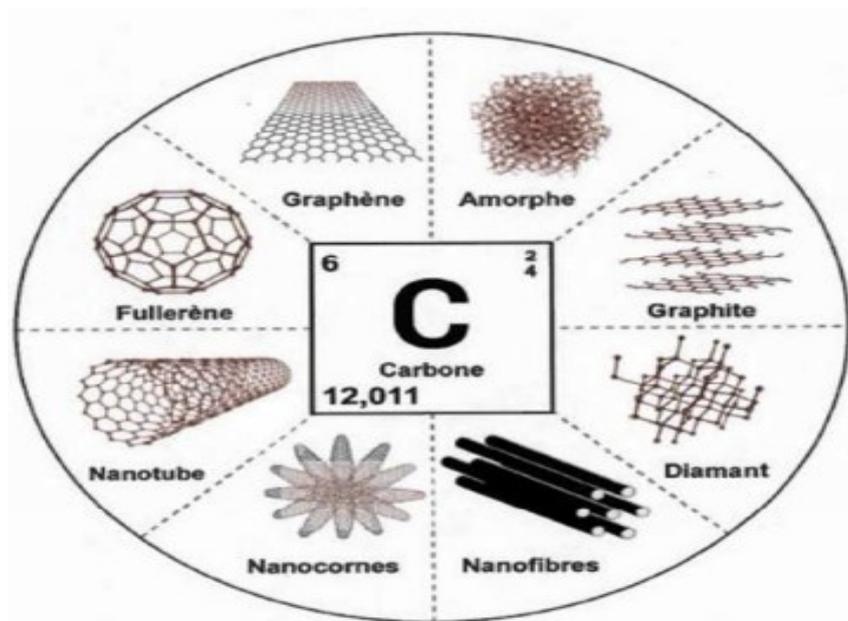


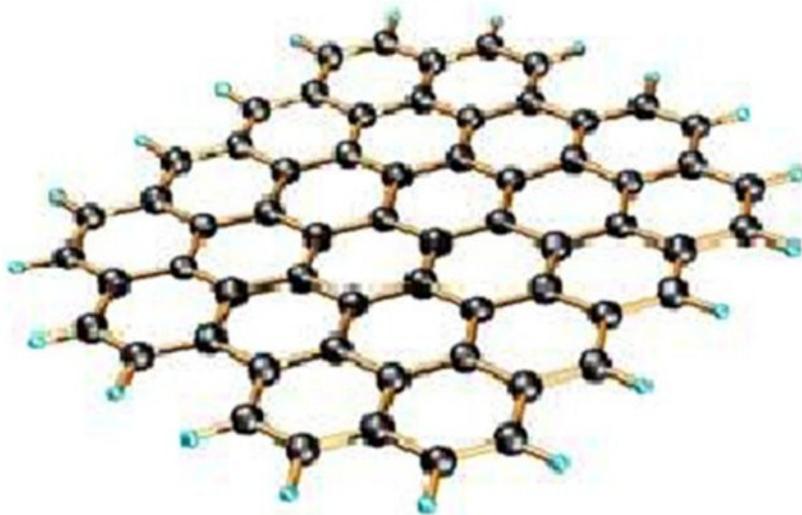
Figure I.1 : atome de carbone et ses formes. [4]

En général, ces molécules sont reconnues pour leurs propriétés électriques, leur dureté et leur résistance mécanique élevée, ainsi que pour leur stabilité chimique et thermique. [4]

### I.3 Le graphène

En 2004, le graphène a été isolé expérimentalement pour la première fois à partir du graphite [5], par les chercheurs Konstantin Novoselov et Andrei Geim de l'Université de Manchester, cette découverte leur a valu le prix Nobel de physique six ans plus tard.

Il est bien connu que le graphène est un cristal constitué d'un simple plan d'atomes de carbone repartis régulièrement sur un réseau hexagonal en forme de nid d'abeilles. Il constitue la brique élémentaire de nombreuses autres formes (allotropies) du carbone [6]. Le graphène est constitué d'une seule couche d'atomes de carbone. En termes simples le graphène est une couche mince assemblée dans un treillis en nid d'abeilles hexagonal. En termes plus complexes, il s'agit d'une allotropie de carbone dans la structure d'un plan d'atomes liés  $sp^2$  avec une longueur de liaison moléculaire de 0,142 nm. Ainsi, les couches de graphène empilées les unes sur les autres forment du graphite [7].



**Figure I.2** : Structure idéalisée d'une seule feuille de graphène [8].

## I.4 Structure du graphène

### I.4.1 Structure cristalline

Le graphène est un arrangement bidimensionnel d'atomes de carbone d'épaisseur monoatomique disposés suivant un réseau en nid d'abeilles (Figure I.3a). Ce matériau bidimensionnel a été isolé pour la première fois en 2004 par Novoselov travaillant avec Geim [2].

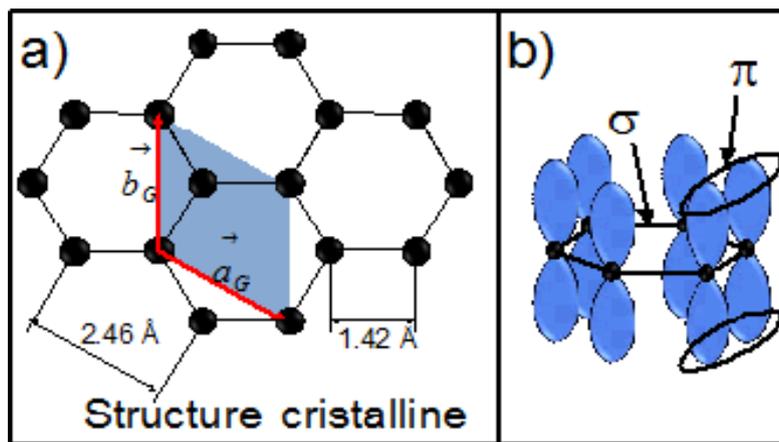
La structure cristallographique du graphène est constituée d'une cellule unitaire hexagonale avec 2 atomes de carbone. La distance entre atomes de carbone est 1.42 Å et la norme des vecteurs de base ( $\vec{a}_G$  et  $\vec{b}_G$ ) du réseau sont exprimées par :  $a_G = b_G = 2.46$  Å [9].

Les positions des atomes de carbone dans la cellule unitaire sont :

$$\vec{r}_1 = (0,0) \quad \text{et} \quad \vec{r}_2 = (1/3) \vec{a}_G + (2/3) \vec{b}_G \dots\dots\dots (I.1)$$

En tenant compte des atomes de carbone dans cette cellule, la densité planaire  $n_G$  des atomes de carbone dans une monocouche de graphène est :

$$n_G^c = \frac{2 \text{ atomes}}{[\frac{a_G^2 \sqrt{3}}{2}]} = 0.382 \text{ atomes}/\text{Å}^2 \dots\dots\dots (I.2)$$



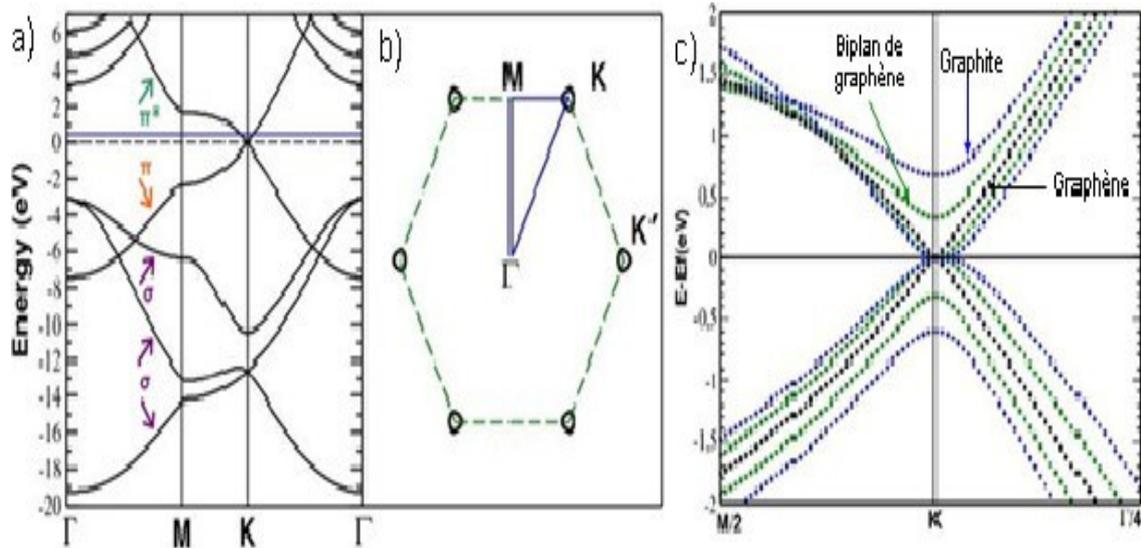
**Figure I.3 :** a) Structure cristalline du graphène. La cellule unitaire contient deux atomes de carbone et les vecteurs du réseau forment un angle de 120°C. Ces atomes sont équivalents parce qu'ils ont le même nombre d'atomes voisins. b) Diagramme schématisant des liaisons  $\sigma$  dans le plan de graphène et des orbitales  $\pi$  perpendiculaire à ce plan [10].

Chaque atome de carbone dans le graphène est lié de façon covalente à trois autres atomes à travers des liaisons  $\sigma$  (chevauchement frontal) d'orbitales hybrides  $sp^2$  (Figure I.3b), ces liaisons sont très fortes. Les orbitales  $p_z$  (chevauchement latéral) perpendiculaires au plan du graphène, forment des liaisons  $\pi$  qui sont responsables de la conduction électronique parallèlement au plan du graphène [10].

### I.4.2 Structure électronique

Le graphène isolé est un matériau idéal qui n'existe pas dans la nature. Les premiers calculs de la structure de bandes d'énergie du graphène ont été développés en 1947 par Wallace [11]. Dans ses calculs, il a négligé l'interaction entre plans de carbone et supposé que la conduction se produit exclusivement dans le plan de carbone. Enfin, il a montré que ce matériau (graphène) possède un comportement semi-métallique. D'autre part, les calculs 'abinitio' développés beaucoup plus tard par Varchon et al [12], ont permis d'obtenir la structure de bandes du monoplan de graphène isolé (Figure I.4.a), suivant le parcours  $\Gamma$ -M-K- $\Gamma$  représenté par le triangle en bleu dans la première zone de Brillouin hexagonale (Figure I.4.b). Au point de haute symétrie K de la zone de Brillouin (point de Dirac), les bandes  $\pi$  et  $\pi^*$  se touchent au niveau de Fermi (0eV), (ligne tiret en noir) et la relation de dispersion  $E(k)$  est linéaire ( $E$  : énergie et  $k$  : module du vecteur du réseau réciproque). Une relation de dispersion linéaire est caractéristique du monoplan de graphène.

La (figure I.4c) montre la structure de bandes suivant le Parcours M/2-K- $\Gamma$ /4 pour le cas du graphène (courbe, noire), biplan de graphène (en empilement AB, courbe verte) et graphite (courbe bleue). Dans le cas du biplan de graphène et du graphite, la relation de dispersion est parabolique au point K et il existe un écart entre les bandes  $\pi$  et  $\pi^*$ , plus bas pour le biplan de graphène ( $\sim 0.33\text{eV}$ ) que pour le graphite ( $\sim 0.70\text{eV}$ ) [12].



**Figure I.4 :** a) Calcul ab initio de la structure de bandes d'énergie du graphène isolé. Les bandes  $\sigma$ ,  $\pi$  et  $\pi^*$  sont indiquées par les flèches violette, orange et verte respectivement. b) Première zone de Brillouin qui montre les points de haute symétrie  $\Gamma$ , M, K et  $K'$ . c) Calcul ab initio des structures de bande pour le graphène, biplan de graphène et graphite autour du point K et au voisinage du niveau de Fermi. [12]

## I.5. Propriétés de graphène

Le graphène possède des propriétés étonnantes, et ce qui distingue ces propriétés c'est qu'elles viennent répondre à un certain nombre de défauts rencontrés dans d'autres matériaux comme les nanotubes, le graphite ...etc.

Parmi ces propriétés on a :

### I.5.1 Propriétés électroniques

Les orbitales hybride  $SP^2$  qui lient les atomes de carbone permet d'obtenir un transport pouvant excéder le micromètre à température ambiante, la mobilité électronique peut parfois atteindre les  $\mu = 200\,000\text{ cm}^2\text{ v}^{-1}\text{s}^{-1}$ , si le graphène est suspendu entre deux électrodes, un tel mode de transport conférerait aux dispositifs électronique en graphène, tels que transistors et autre, vitesse de fonctionnement très supérieur à celle des transistors à semi-conducteurs. La conductivité électrique intrinsèque de graphène est très basse mais pas nulle, cependant le niveau de Fermi peut être modifié par l'application d'un champ électrique, de sorte à ce que le matériau soit dopé p ou n suivant la polarisation appliquée. Donc la conductivité électronique de graphène est devenue très élevée, à température ambiante, il peut même dépasser celle de cuivre [13].

La valeur de la mobilité de graphène change en fonction de la nature du substrat sur laquelle a été déposé. A titre exemple pour du graphène exfolié mécaniquement puis déposé sur un substrat de silicium, il manifeste une mobilité électronique à température ambiante de l'ordre de  $\mu \approx 15 \cdot 10^3 \text{ cm}^2/(\text{V.s})$  [14]. Le graphène déposé sur un substrat de nitrure de bore hexagonale (h-BN) il manifeste une mobilité électronique de l'ordre de  $\mu \approx 1 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/(\text{V.s})$  [15].

### I.5.2 Propriétés mécaniques

Le graphène a présenté un grand intérêt en raison de ces propriétés électroniques, mais il est aussi tout à fait remarquable en ce qui concerne ses propriétés mécaniques, ces propriétés découlent des liaisons covalentes qui sont formées entre les atomes de carbone. Les premières mesures sur les propriétés mécaniques ont été publiées en 2008, elles parlent d'une force de rupture de l'ordre de  $40 \text{ Nm}^{-1}$ , le graphène a une excellente stabilité celle-ci a été montrée par la réalisation d'une membrane de graphène suspendu (sans la présence d'un substrat, ce qui affirme la stabilité de ce dernier, ce matériau est 100 fois plus résistant que l'acier. En plus de sa résistance mécanique il a la particularité d'être le matériau le plus élastique avec une élasticité égale à 0.5 Téra-pascal (Tpa) donc il peut se plier puis déplier. [16,13]

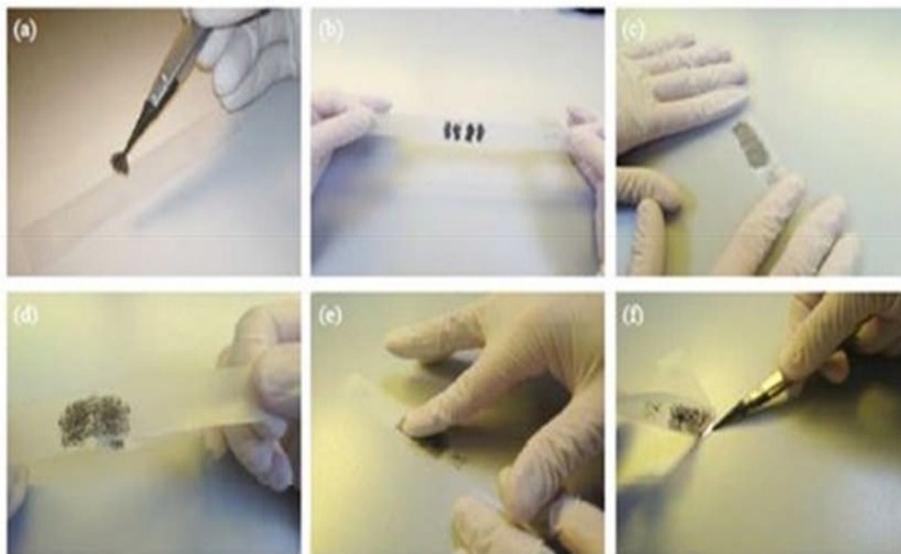
### I.5.3 Propriétés optiques

Les propriétés optiques du graphène sont tout aussi fascinantes que les propriétés électroniques desquelles elles découlent, car autant répondent-elles remarquablement bien aux lois fondamentales, autant réservent-elles un potentiel de découverte de phénomènes nouveaux. D'une part, la physique du système fait en sorte que l'absorption de la lumière sur une large gamme d'énergie peut être décrite en termes de constantes fondamentales, des mesures ont montré que le graphène atténue la lumière visible d'environ 2.3%, c'est une diminution substantielle pour une seule couche atomique de matériau, la propriété de bonne transparence optique laisse entrevoir une application électro-optique importante. Il s'agit de la combiner avec la haute conductivité électrique de type métallique de graphène, on envisage en effet de remplacer le matériau semi-conducteur ITO (Indium tin Oxyde), utilisé en film mince de moins bonne transparence (80%), par le graphène pour réaliser la fonction de transparence contrôlable électriquement dans les affichages par cristaux liquides [6].

### I.6 Les différentes méthodes pour obtenir le graphène

#### I.6.1 Exfoliation mécanique

L'exfoliation est la méthode qui a permis d'isoler le premier feuillet de graphène en 2004 par l'équipe de Geim à l'université de Manchester. Elle consiste à obtenir du graphène à partir de graphite et de scotch. En utilisant du HOPG (Highly Oriented Pyrolythic Graphite choisi pour sa qualité cristalline supérieure) ou du graphite naturel (sous forme de grains), quelques plans de graphite sont arrachés par le scotch. La force entre les plans de graphène est faible. Le graphite arraché est placé sur un substrat isolant, composé de 300 nm d'oxyde de silicium ( $\text{SiO}_2$ ) à la surface d'un cristal de silicium. Après avoir transféré des morceaux de graphène sur la plaque de silicium, il faut ensuite repérer au microscope optique les quelques bouts de graphène. Cette partie est la plus longue et généralement les morceaux de graphène obtenus font quelques  $\mu\text{m}^2$ [05].



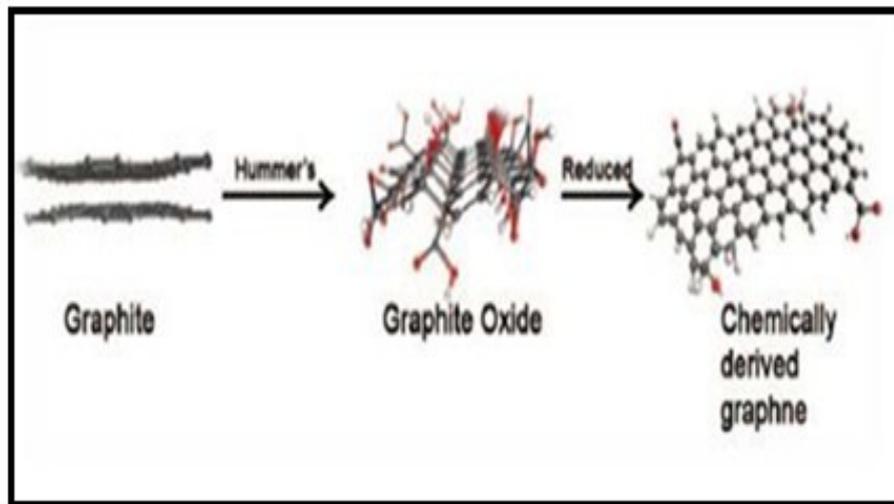
**Figure I.5 :** les différentes étapes d'exfoliation mécanique du graphène à partir du graphite.

[17]

#### I.6.2 Graphène chimiquement exfolié

Cette méthode implique la production d'oxyde de graphite à partir de graphite, puis la synthèse de graphène voir (Figure I.6). Cette technique a été démontrée pour la première fois par R. Ruoff et son groupe en 2006. Le graphite est chimiquement modifié en un oxyde de graphite

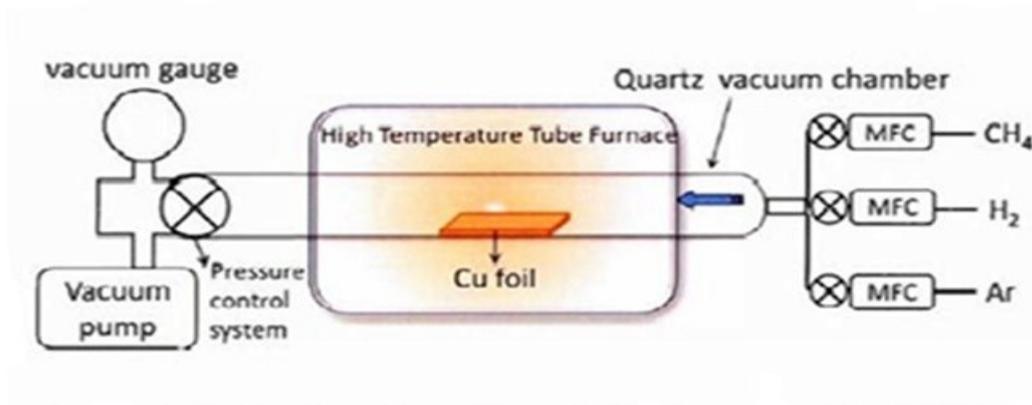
intermédiaire dispersible dans l'eau par oxydation selon la méthode de Hummers. L'oxyde de graphite est un empilement stratifié de feuilles qui exfolie complètement à l'application de la force mécanique. Le plus grand avantage de cette méthode est son faible coût et son énorme évolutivité [18].



**Figure I.6 :** Modèles moléculaires illustrant le processus de conversion du graphite en graphène dérivé chimiquement [19].

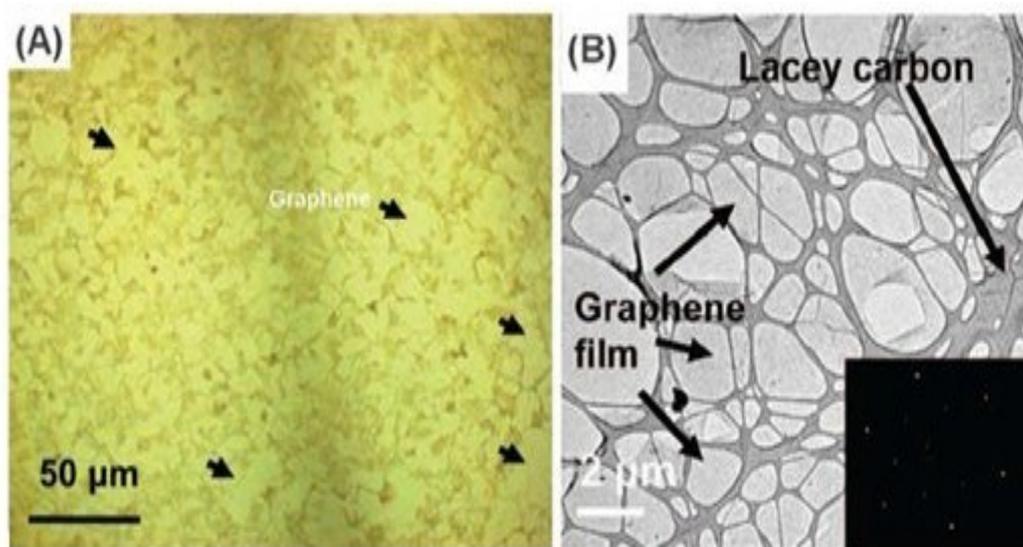
### I.6.3 Graphène fabriqué par méthode CVD

Récemment, en 2010, le graphène a été fabriqué par CVD (Chemical Vapor Deposition) (Figure I.7). C'est la décomposition catalytique à haute température d'un gaz carboné (méthane, éthylène, etc.) sur un substrat métallique. Cette méthode est la plus utilisée et permet une production à grande échelle du graphène de haute qualité avec une large granulométrie et facilement transférable vers un autre substrat. Cependant, les films de graphène obtenus peuvent être discontinus et présentent des régions bicouches chevauchées, ce qui peut altérer les propriétés mécaniques et électriques. Le schéma suivant présente le système de la CVD qui se divise en trois compartiments : compartiment des gaz et du précurseur, la chambre (four) et le système de pompage. [5]



**Figure I.7:** principe du système CVD [20]

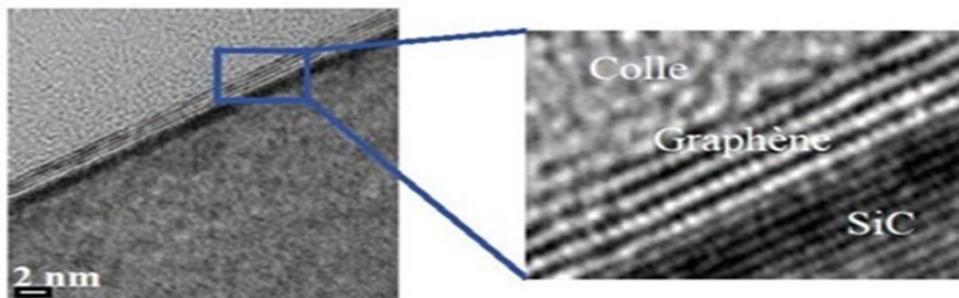
En effet, le substrat est introduit au centre d'un tube en quartz, qui est placé dans une fournaise, et soumis à un flux d'hydrogène, sous une certaine pression, pour éliminer toute trace d'impureté ou d'oxyde de cuivre. Ensuite, la température de la fournaise est augmentée jusqu'à 950°C-1000°C et la vapeur de l'hydrocarbure (qui est la source du carbone) est acheminée vers le centre du tube avec un certain débit afin d'interagir avec le cuivre et amorcer la croissance du graphène.



**Figure I.8 :** graphène synthétisé par la méthode CVD sur Ni. (A) Image optique du graphène sur Ni, les flèches marquent des zones couvertes par graphène ; (B) Image TEM du graphène sur Ni. [21]

### I.6.4 Graphène épitaxie sur le carbure de silicium

C'est une technique qui permet d'obtenir du graphène à partir de la sublimation du carbure de silicium à haute température et très basse pression. C'est-à-dire qu'en chauffant le matériau entre 1 000°C et 1500 oc dans un système ultravide, il y a évaporation de la silice laissant ainsi une surface riche en atomes de carbone qui se réorganiseront en une couche de graphène. Étant donné que le matériau de base utilisé est de même type que le matériau désiré, ce processus est appelé homoépitaxie dans le cas contraire la dénomination changerait et serait appelé hétéroépitaxie [22].



**Figure I.9 :** croissance de graphène sur un substrat de carbure de silicium. Ici quatre couches de graphène ont été formées.

### I.7 Comparaison des méthodes d'obtention

Le tableau ci-dessous liste les valeurs maximales de mobilités obtenues à partir de mesure de Hall

**Tableau (I.1) :** liste les valeurs maximales de mobilités obtenues à partir de mesure de Hall. [23]

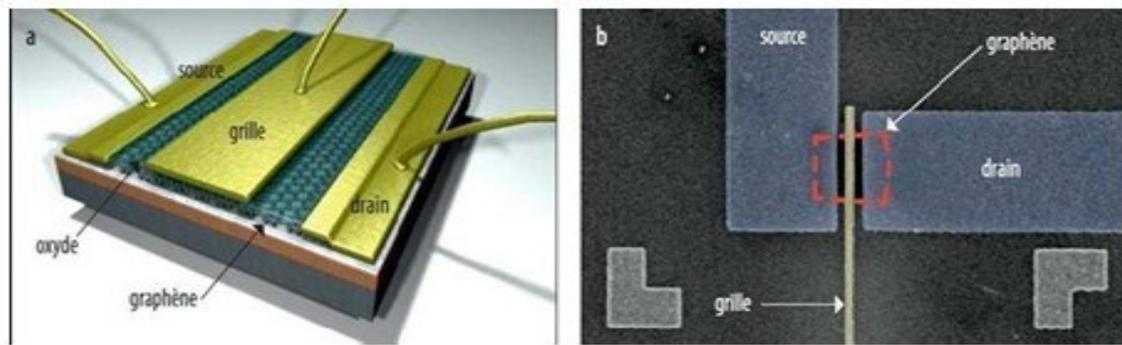
| Type de graphène                    | Mobilité en $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ à $T=300\text{K}$ |
|-------------------------------------|---|
| Graphène exfolié sur $\text{SiO}_2$ | 10 000  |
| Graphène CVD sur métal              | 5 000   |
| Graphène épitaxié (face silicium)   | 2 000   |
| Graphène chimiquement exfolié       | Inferieur a 100   |

### I.8 Application du graphène

Le graphène a de vastes potentialités d'applications notamment dans le domaine de l'électronique, du stockage d'énergie et des matériaux composites. Ci-dessous sont explicités les domaines applicatifs porteurs à ce jour.

#### I.8.1 Transistors

Les performances exceptionnelles du graphène, en particulier concernant la conductivité électronique, font de ce dernier, au premier abord, un concurrent tout désigné pour succéder au silicium dans le domaine des composants électroniques. Cependant, à ce jour, le niveau de maturité technologique est encore loin d'être atteint. Pourtant, des progrès sont réalisés dans la conception de transistor haute fréquence au graphène capable d'atteindre des fréquences de 26 GHz, 100GHz et 300 GHz. Cependant, le graphène a une bande interdite nulle, empêchant le canal des transistors à base de graphène d'être complètement fermé à l'état off. Plusieurs approches sont envisagées pour ouvrir une bande interdite dans le graphène. Il est possible de structurer le graphène en fines bandes, appelées nano-rubans de graphène, qui en dessous de 100 nm de largeur présentent une bande interdite non nulle. De plus, l'énergie de la bande interdite créée peut être contrôlée car elle augmente lorsque la largeur du nano-ruban diminue. Une autre possibilité est d'utiliser du graphène bicouche qui possède une bande interdite dont l'énergie est contrôlable, lorsqu'on applique un champ électrique. Enfin, appliquer une contrainte uniaxiale au graphène permet également d'ouvrir une bande interdite, dont l'énergie dépend du niveau de contrainte. Les solutions proposées par ces trois approches sont complexes à mettre en œuvre, surtout lorsqu'on envisage une énergie de bande interdite supérieure à 350 meV. De plus, la réalisation de composant électronique utilisant du graphène nécessite un graphène homogène et de très bonne qualité structurale ce qui n'est pas atteint, à l'heure actuelle, dans l'optique d'une production de masse [05].



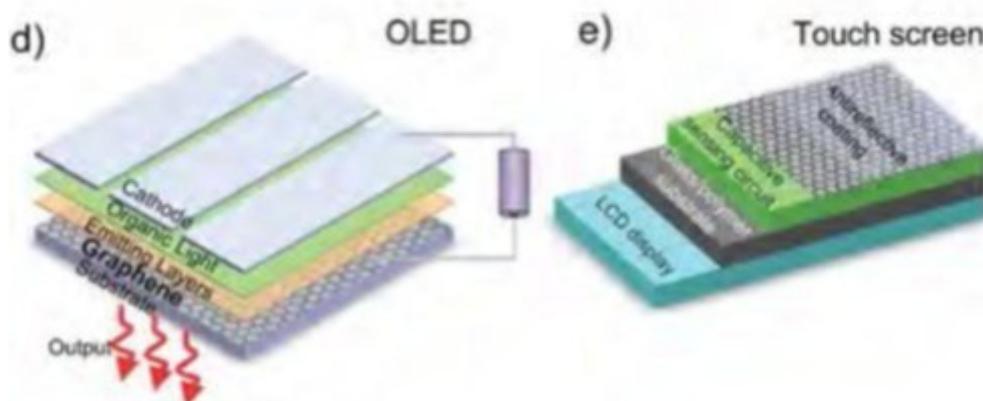
**Figure I.10 :** a) transistor à base de graphène. b) image par microscopie à balayage d'un nanotransistor à base de graphène [06].

### I.8.2 Electrodes transparentes

Certains dispositifs électroniques sont construits avec des architectures simples et des matériaux ont des propriétés très spéciales, à titre d'exemple pour fabriquer OLED, un écran tactile, une cellule photovoltaïque, on a besoin des électrodes qui permettent de passer le courant et la lumière en même temps en plus flexibles et rigides. [24]

ITO (oxyde d'indium étain) est parmi les matériaux qui possèdent une conductivité électrique et une transmission optique importantes, ce matériau est largement utilisé dans les applications technologiques mais il manifeste des propriétés mécaniques indésirables (fragile et sa flexibilité est trop limitée) alors dans le futur on voulait le remplacer par le graphène car :

- Stable chimiquement (inerte) et thermiquement.
- Transparent
- Conductivité électrique élevée.
- Flexible.
- Dur plus fort que l'acier.
- On peut faire facilement un contact ohmique car son travail de sortie est similaire de l'ITO [24].



**Figure 1.11 :** a) montre l'intégration du graphène comme une électrode transparent dans la diode électroluminescente organique OLED ; b) L'écran tactile n'est pas facilement cassable car elle est conçu à la base de graphène [25].

### I.8.3 Cellules photovoltaïques

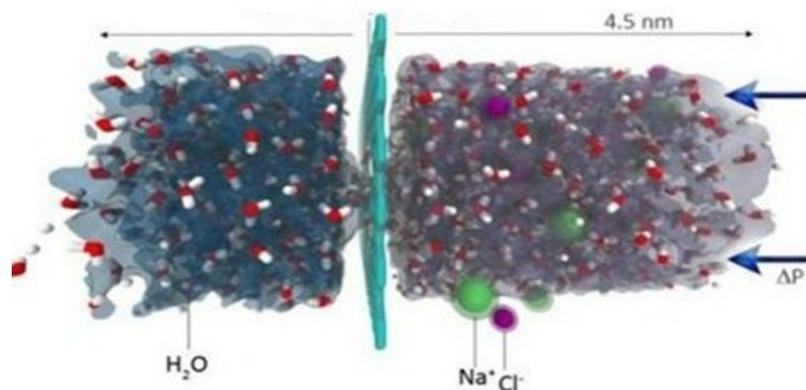
Le graphène offre de très faibles niveaux d'absorption de la lumière (environ 2,7% de la lumière blanche) tout en offrant une mobilité élevée des électrons, le graphène peut être utilisé comme alternative au silicium ou à l'ITO dans la fabrication de cellules photovoltaïques. Le silicium est actuellement largement utilisé dans la production de cellules photovoltaïques, cela dit, les cellules de silicium sont très coûteuses à produire, par contre, les cellules à base de graphène sont potentiellement beaucoup moins cher. Lorsque des matériaux tels que le silicium transforment la lumière en électricité, ils produisent de la chaleur, ceci signifie qu'une quantité importante d'énergie est perdue sous forme de chaleur. Des recherches publiées récemment ont prouvé que lorsque le graphène absorbe un photon, il génère en réalité plusieurs électrons. De plus, alors que le silicium est capable de générer de l'électricité à partir de certaines bandes de longueurs d'onde, le graphène est capable de fonctionner sur toutes les longueurs d'onde, ce qui signifie que le graphène a le potentiel d'être aussi efficace, sinon plus, que le silicium, l'ITO ou l'arséniure de gallium (également largement utilisé). Le fait que le graphène soit flexible et mince signifie que les cellules photovoltaïques à base de graphène pourraient être utilisées dans les vêtements ; pour aider à recharger votre téléphone portable, ou même utilisé comme écrans ou rideaux photovoltaïques rétro-équipés pour aider à alimenter votre maison [26].

### I.8.4 Stockage d'Energie

Alors que tous les domaines de l'électronique ont progressé à un rythme très rapide au cours des dernières décennies (en référence à la loi de Moore qui stipule que le nombre de transistors utilisés dans les circuits électroniques doublera tous les 2 ans). Les solutions de stockage d'énergie se sont développées à un rythme beaucoup plus lent. Le problème est le suivant : une batterie peut potentiellement contenir beaucoup d'énergie, mais cela peut prendre beaucoup de temps à charger, un condensateur, par contre, peut être chargé très rapidement, mais ne peut pas contenir autant d'énergie (comparativement parlant). Le graphène pourrait être utilisé dans le stockage de l'énergie, en vue d'accélérer le rythme de développement des solutions de stockage[27].

### I.8.5 Ultrafiltration

Une autre propriété remarquable du graphène est que, même s'il laisse passer l'eau, il est presque complètement imperméable aux liquides et aux gaz (même les molécules d'hélium relativement petites). Cela signifie que le graphène pourrait être utilisé comme un milieu d'ultrafiltration pour agir comme une barrière entre deux substances. L'avantage de l'utilisation du graphène est qu'il est seulement 1 atome unique d'épaisseur et peut également être développé comme une barrière qui mesure électroniquement la tension et les pressions entre les 2 substances (parmi beaucoup d'autres variables) [08].



**Figure I.12 :** Image de filtres à eau de graphène

**CHAPITRE II**

**TRANSISTOR SET**

**EN GRAPHENE**

### II. 1 Introduction

De par ses propriétés fascinantes, le graphène apparaît comme un matériau prometteur pour de nombreuses applications technologiques. Sa grande conductivité électrique pourrait être exploitée dans la fabrication de futurs dispositifs nanoélectroniques comme les transistors à un électron ou que on ‘appelle single électron transistor (SET) ce qui nous intéresse dans ce travail. Dans ce chapitre, nous présenterons un historique de (SET), la définition et le principe de fonctionnement de transistors à un électron ainsi que ses applications dans divers domaines. De plus, nous avons fait connaissance des transistors à un électron à base graphène et de la mobilité dans le graphène ainsi que, différentes techniques pour obtenir une bande interdite dans le graphène finalement, les avantages des transistors en graphène.

### II.2 Transistor à un électron

#### II.2.1 Historique

Le premier transistor à un électron basé sur le blocage de Coulomb est rapporté en 1986 par les chercheurs K. K. Likharev and D. V. Averin [28]. Finalement, son rêve est devenu réalité avec la découverte du nanotube de carbone par Sumio Ijima en 1991 au laboratoire NEC, Tsukuba, Japon. Cette découverte est devenue la rampe de lancement des nanosciences et des nanotechnologies d’aujourd’hui [29]. Depuis lors, dans le monde entier, des scientifiques, des chercheurs, des ingénieurs et des technologues ont commencé à étudier diverses façons de synthétiser des matériaux de la taille du nanomètre et ont finalement conduit au développement de points quantiques (PQ). Ce PQ est une nanoparticule dont toutes les dimensions sont réduites à moins de 100 nm, ce qui est le principal élément constitutif du transistor à électron unique (SET) [30].

#### II.2.2 Définition

Un transistor à un seul électron (SET) est composé d’un point quantique et le schéma descriptif d’un SET est illustré à la (figure II.1.i). La source des électrons est séparée du drain par des jonctions tunnels et la grille par une jonction capacitive pour bien confiner les électrons dans le point quantique. Il est nécessaire que la résistance des jonctions tunnel soit suffisamment grande et la température ne soit pas trop élevée. C’est ce qu’on appelle le blocage de Coulomb et le fonctionnement du transistor est de voir l’îlot comme un piège dans lequel est contenu un (ou plusieurs) électrons [31]. Le circuit électrique équivalent de ce transistor est présenté dans la figure I.1.ii, et les jonctions tunnel sont représentées par des couples résistif –capacitif ( $R_{S(D)}$  et  $C_{S(D)}$ ) [32].

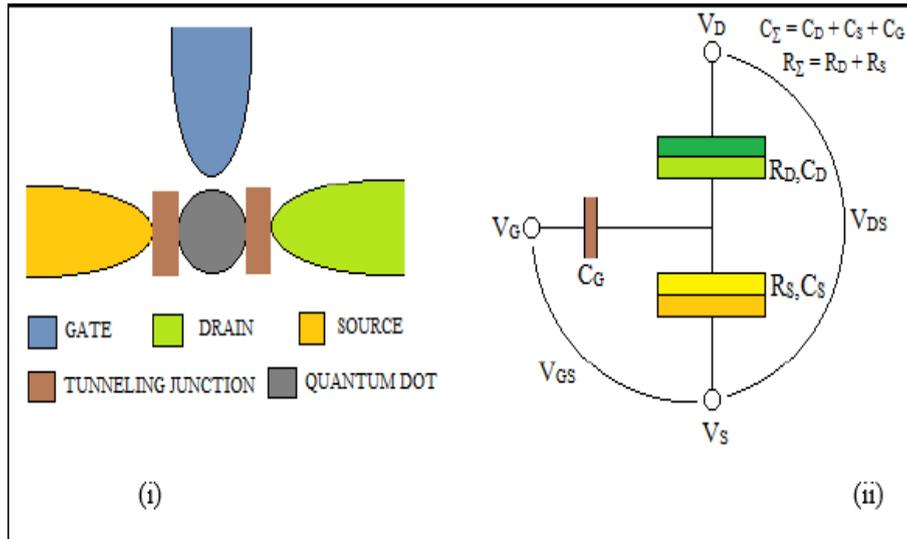


Figure II.1 : i) Structure schématique du SET : ii) Circuit équivalent de SET [32].

### II.3 Principe de fonctionnement de SET

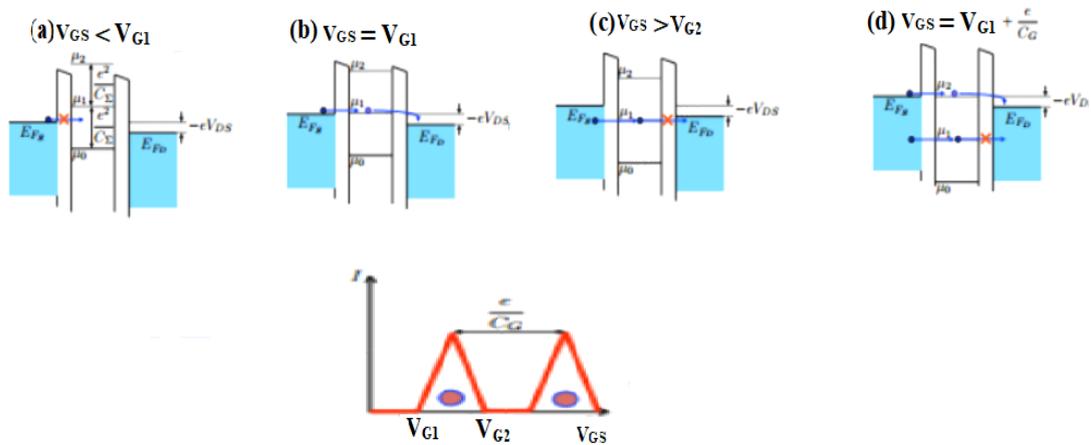
Le principe de fonctionnement de SET est similaire à celui d'une double jonction tunnel, et s'explique qualitativement en considérant les niveaux de Fermi des électrodes source et drain, ainsi que le niveau de Fermi dans l'îlot, comme illustré dans la (figure II.2). L'écart énergétique entre un niveau à  $n$  électrons et un niveau à  $n + 1$  électrons dans le point quantique, c'est à dire l'énergie à apporter, via la tension de grille, au système, est toujours en  $\frac{e^2}{C_\Sigma}$ .

$$C_\Sigma = C_S + C_D + C_G \dots\dots\dots (II.1)$$

Où :  $C_\Sigma$  présente la capacité totale du point quantique (l'îlot).

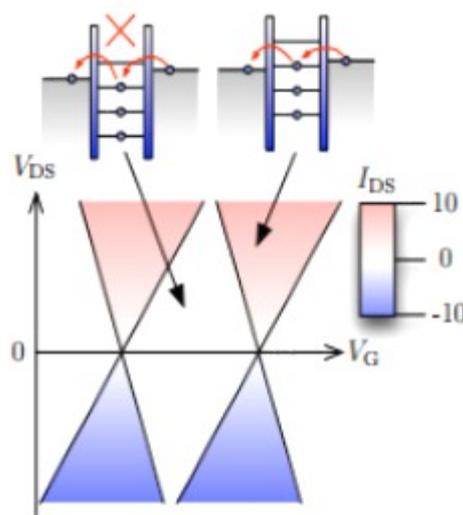
On considère une tension drain-source  $V_{DS}$  est inférieur de la tension de seuil. Tant que la tension de grille est insuffisante pour faire passer le premier électron (c'est-à-dire  $\mu_1 > E_{FS}$ ), l'électron ne peut pas passer ; nous sommes en régime de blocage de Coulomb. À  $V_{GS} = V_{G1}$  (figure II.2.b), l'électron peut passer. Mais lorsqu'on augmente la tension de grille au-delà de  $V_{G2}$ , l'électron est "piégé" sur l'îlot car il ne peut pas sortir ( $\mu_1 < E_{FD}$ , figure II.2.c). Le courant a donc été non nul sur la plage  $[V_{G1} V_{G2}]$ , créant ainsi un pic sur la caractéristique courant-tension de grille. Il faut atteindre la tension  $V_G = V_{G1} + e/C_G$  pour voir l'apparition d'un nouveau pic de courant (figure II.2.d). L'écart de tension entre les pics est donc de  $\frac{e}{C_G}$ , où  $C_G$  fait office de

"capacité de grille". Ces pics sur la caractéristique courant-tension de grille sont couramment appelés "Oscillations de Coulomb".



**Figure II.2 :** Évolution du diagramme en bande et du courant en fonction de la tension de grille dans un SET. (a) régime de blocage de Coulomb, (b)  $\mu_1 = E_{FS}$ , le courant peut passer, premier pic de Coulomb, (c)  $\mu_1 < E_{FD}$ , le courant ne peut plus passer, le courant redevient nul, (d)  $\mu_2 = E_{FS}$ , début du deuxième pic de Coulomb [33].

Nous obtenons un diagramme de stabilité du courant en diamants du Coulomb lorsque en intégrant cette courbe pour plusieurs valeurs de tension de drain  $V_{DS}$ , où les diamants du Coulomb représentent les zones de blocage de Coulomb (les régions blanches où le courant source-drain est bloqué), tel que schématisé dans la (figure II.3).



**Figure II.3 :** diagramme de stabilité les diamants du Coulomb.

Il est à noter que les électrons ne circulent qu'un par un dans ces structures, et les oscillations de Coulomb sont fortement dégradées lorsque la température est telle que

$$k_B T \geq \frac{e^2}{C_G} \dots \dots \dots (II.2)$$

### II.4 Effet de Blocage de Coulomb

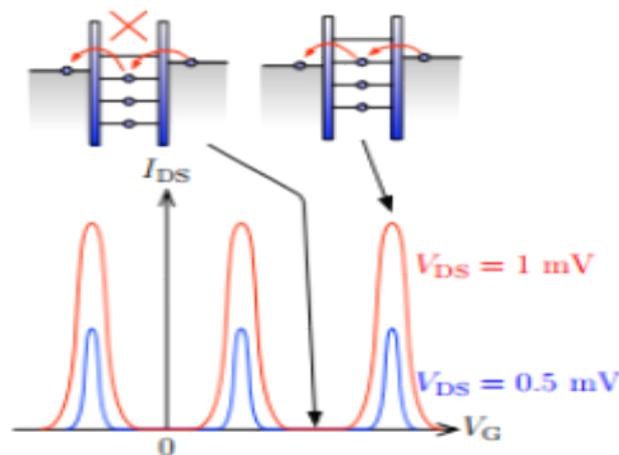
L'effet tunnel à double jonction consiste à faire franchir des électrons à travers des barrières de potentiel à condition d'avoir des énergies suffisantes. Dans la pratique, nous avons comme principe de le modéliser par une capacité C en parallèle avec une résistance tunnel  $R_t$ , et considérer l'effet tunnel par la conduction de l'électron au sein de ce dispositif. On appelle ce phénomène, l'effet de blocage de Coulomb et l'énergie de charge  $E_c$  de l'îlot est :

$$E_C = (q)^2/2C_\Sigma \dots \dots \dots (II.3)$$

Une caractéristique importante à prendre en compte : l'énergie de charge est toujours présente à toutes les températures. Cependant, pour observer l'effet de blocage de Coulomb, il faut remplir la condition de l'équation suivante : [34].

$$E_C = (q)^2/2 C_\Sigma \gg K_B T \dots \dots \dots (II.4)$$

Le blocage de Coulomb est un mécanisme qui permet dans des structures de basses dimensionnalités, de contrôler le passage de porteur de charge à l'unité. Ce phénomène est surtout basé sur la quantification de la charge électrique, et les possibilités de traverser des structures fines (une faible épaisseur d'isolant) par effet tunnel [35].

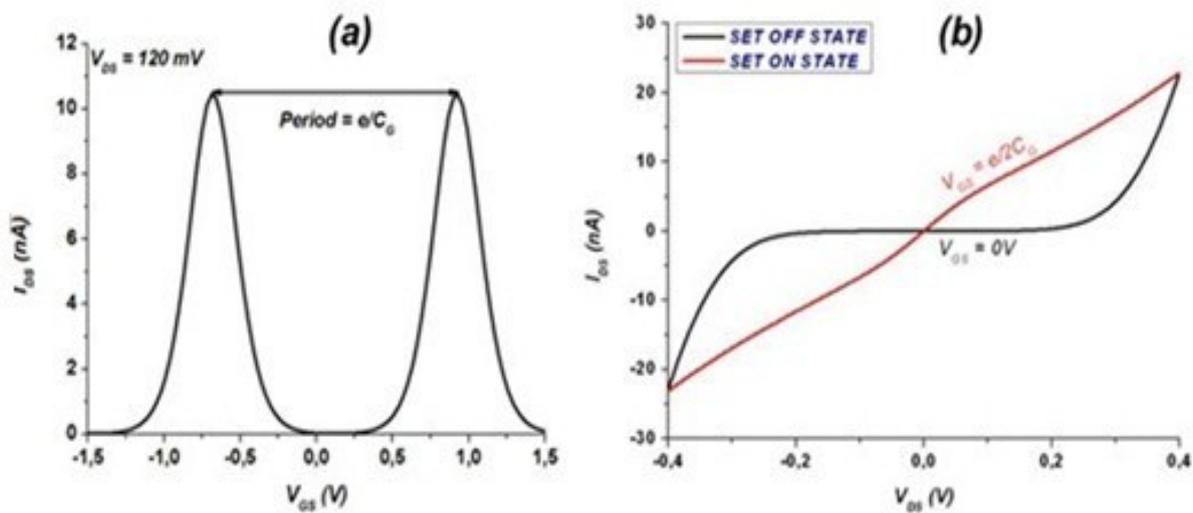


**Figure II.4** : Caractérisation du courant  $I_{DS}$ - $V_G$  de SET (Oscillation de Coulomb).

La figure II.4 présente la caractéristique du courant I-V de transistor à un électron, le courant dans ce dispositif est bloqué, sauf pour certaines valeurs périodiques du potentielle de grille  $V_G$ . Donc, on a la possibilité de contrôler le flux de porteurs, électron par électron [35].

### II.5 Caractérisations du courant de SET

Le courant SET peut varier en fonction de la tension  $V_g$ . En fait, nous pouvons basculer entre les états "bloqué" ou "passant" à intervalles réguliers. Ce phénomène est appelé oscillation de Coulomb (figure II.5.a).



**Figure II.5 :**(a) Oscillations de Coulomb du SET dans la Caractéristique  $I_{DS} - V_{GS}$  pour  $V_{DS} = 120$  mV, et (b) Caractéristique  $I_{DS} - V_{DS}$  illustrant l'annulation du phénomène de blocage de Coulomb. Les paramètres du SET sont :  $T = 300$  K et  $C_S = C_D = 0.05$  aF [36].

Dans la théorie orthodoxe, des conditions nécessaires doivent être satisfaites pour pouvoir observer un comportement SET (avec le blocage de Coulomb) [37]. Ces conditions sont :

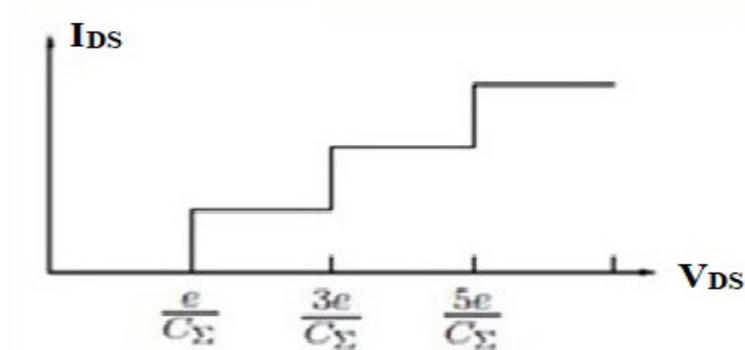
- ✚ La résistance  $R_Q$  des jonctions tunnel doit être supérieure à la résistance quantique :  $R_Q = h/e^2 \approx 26$  k $\Omega$  pour que l'électron puisse être localisé sur l'îlot.
- ✚ Le co-tunneling est ignoré.
- ✚ La capacité totale de l'îlot, égale à la somme des capacités de l'îlot avec son environnement  $C_\Sigma = C_D + C_S + C_G + C_{\text{substrate}}$ ,  $e^2/(2C_\Sigma) > a k_B T$ ,  $k_B$  étant la constante de Boltzmann et  $T$  la température de l'environnement. La constante  $a$  est définie entre 5 et 10. La capacité totale de condition. Les paramètres qui contribuent dans la valeur de la capacité sont notamment la taille de l'îlot (de l'ordre de 3 nm) et la constante diélectrique de l'oxyde de la jonction qui doit être

la plus faible possible [38].

Dans la Figure II.5.b, nous présentons une variation du courant  $I_{DS}$  en fonction de  $V_{DS}$  dans la structure symétrique, c'est - à- dire ( $C_S = C_D$ ). Pour  $V_{GS} = 0V$ , Le courant est nul. Lorsqu'ont appliqué une tension inférieure de la tension du seuil  $V_{th}$  qui donne par la relation suivante :

$$|V_{DS}| \leq \frac{e}{C_{\Sigma}} \dots\dots\dots (II.5)$$

Cette tension connue sous le nom « palier de Coulomb » car aucun électron peut à traverser la barrière du potentiel, ce phénomène appelé l'effet de blocage du Coulomb. Maintenant, on applique une polarisation supérieure à la tension du seuil, l'électron aura été transféré dans le point quantique et il quittera donc le point immédiatement, la caractéristique I-V de la structure symétrique est présentée en (figure II.5.b). Par contre, dans structure asymétrique ( $C_S \neq C_D$ ) donnerait lieu à une caractéristique I-V en forme d'escalier (voir figure II.6). Et qu'on appelle l'escalier de Coulomb [39].



**Figure II.6:** Caractéristiques I-V de SET pour jonction asymétrique représentant « l'état de l'escalier coulomb ».

## II.6 Application du SET

- Les transistors à électron unique (SET) sont des capteurs de charge efficaces pour lire les qubits de spin ou de charge confinés dans des points quantiques [40].
- Le transistor à un électron unique peut également être utilisé pour détecter des signaux infrarouges à température ambiante. En excitant des électrons au-dessus d'une barrière énergétique induite électriquement, tant la gamme de longueurs d'onde détectables et la sensibilité du dispositif peuvent être contrôlées [40].

- Un SET ayant une fonction mémoire non volatile est une clé pour la logique SET programma.
- Une nouvelle voie vers une nouvelle norme de température absolue peut être développée par l'utilisation de réseaux à un seul électron 1D [40].
- Le SET est la possibilité de mesurer les énergies d'addition d'électron (la distribution du niveau d'énergie) en points quantiques et autres objets à l'échelle nanométrique.

### II.7 Avantages et inconvénients de SET

Les avantages et des inconvénients de SET sont résumés dans le tableau au-dessous.

**Tableau II.1** : avantages et inconvénients de SET [39].

| <b>Les avantages des transistors à un électron SET</b>  | <b>Les inconvénients des transistors à un électron SET</b>  |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Faible consommation d'énergie.</li><li>• Haute sensibilité.</li><li>• Taille compacte.</li><li>• Vitesse de fonctionnement élevée</li><li>• Circuit simplifié</li><li>• Principe de fonctionnement simple</li></ul> | <ul style="list-style-type: none"><li>• Il est en fait difficile de fabriquer des transistors à un seul électron.</li><li>• La technique de lithographie est une autre limitation majeure des dispositifs a un électron en raison de la difficulté de fabrication à température ambiante.</li></ul> |

Dans ce travail, on étudie le transport quantique dans ce transistor à un électron. En effet, un dispositif électrique est souvent composé d'une région active (C) connectée à deux réservoirs appelés parfois source (S) et drain (D) de très grandes dimensions devant C. S et D sont tellement grands qu'ils sont considérés comme étant constamment en équilibre thermodynamique et tous les phénomènes hors équilibre sont localisés dans C. L'approche NEGF permet de traiter C comme un système ouvert et de prendre en compte l'effet du couplage avec S et D à travers des termes appelés "Self-énergie" (SE) [41].

Pour résoudre les équations Schrödinger-Poisson à 2D à l'aide du formalisme des fonctions de Green hors équilibre (NEGF). Dans ce cas, on nécessite un outil de calcul numérique très puissant et un temps de calcul très grand. L'approche de l'espace des modes permet de transformer sous certaines conditions un problème 2D en des problèmes 1D indépendants.

## II.8 Etude quantique

On écrit l'équation de Schrödinger dans le cas cartésien bidimensionnel comme suit :

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m^*} \left( \frac{\partial \psi(x,y)}{\partial x} \right) \right) \right) - \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{1}{m^*} \left( \frac{\partial \psi(x,y)}{\partial y} \right) \right) \right) + U\psi(x,y) = E\psi(x,y) \dots \dots \dots (II.6)$$

Où :

- $\hbar$  : Constante de Planck.
- $U$  : Energie du potentiel électrostatique.
- $m^*$  : la masse effective d'électron.
- $\psi(x,y)$  : la fonction d'onde.
- $E$  : Energie dans l'ilot.

On écrit l'équation de Poisson dans le cas cartésien bidimensionnel comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \epsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \rho = 0 \dots \dots \dots (II.7)$$

$$\rho = -q[p - n + N_D - N_A] \dots \dots \dots (II.8)$$

Où :

$V$  : Le potentiel électrostatique

$\epsilon$  : Constante diélectrique du matériau

$\rho$  : La densité de charge

$P$  : La concentration de trou

$n$  : La concentration des électrons

$N_D$  : Concentration d'atomes donneurs

$N_A$  : Concentration d'atomes accepteurs

$q$  : La charge d'électron

### II.8.1 L'approche « espace des modes »

Pour étudier de manière efficace les effets quantiques, l'approche « **espace des modes** » ou « **mode space** » est très répandue. Elle a pour l'objectif de découpler l'équation de Schrödinger 2D stationnaire.

L'approche de l'espace de mode permet pour transformer sous certaines conditions un problème 2D en un problème 1D indépendants. Donc l'équation (II. 6) devient :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_x^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\psi}_i + U\tilde{\psi}_i(x) = E_i\tilde{\psi}_i(x) \dots\dots\dots(II.9)$$

$E_i$ : L'énergie longitudinale.

$\tilde{\psi}_i(x)$  : Le coefficient d'expansion de la fonction  $\psi(x, y)$ .

### II.8.2 Calcul des fonctions de Green

Le formalisme des fonctions de Green hors- équilibre (NEGF) constitue une méthode pertinente pour décrire les effets quantiques des nano-transistors, et permet de décrire les propriétés électriques et physiques du canal (plus particulièrement le courant et les charges). En effet, les fonctions Green permettent de se concentrer sur la partie active de composant et de remplacer l'influence des contacts externes par self- énergies. Le concept de self-énergie peut également servir à décrire les interactions électron-électron et électron-phonon [42].

Définition tout d'abord la matrice G de la fonction de Green retardée qui est la réponse (propagation) du système suite à une son excitation selon l'axe source-drain par une énergie E. Pour la sous- bande i, G est donnée par [43] :

$$G(E) = [EI - H - \Sigma_S - \Sigma_D]^{-1} \dots\dots\dots(II.10)$$

Où :

$\Sigma_S$  et  $\Sigma_D$  sont les self-énergies de la source et du drain respectivement.

$E$ : L'énergie longitudinale (x).

$I$  : La matrice identité

$H$  : Représente la matrice de l'hamiltonien du système par l'expression.

## II.9 Calcul du courant de drain

Le courant de drain est calculé en fonction du coefficient de transmission de la source au drain est donné par la fonction de Green [43].

$$T_{SD} = Tr[\Gamma_S G \Gamma_D G^T] \equiv T_{SD} = Tr[\Gamma_S \Gamma_D] \dots\dots\dots (II.11)$$

Le courant transmis dans le canal s'écrit alors :

$$I(E_i) = \frac{q}{h} \int_0^{+\infty} D \times [f(\mu_S - E_i - E_{k_j}) - f(\mu_D - E_i - E_{k_j}) A_D] Tr[\Gamma_S A_D] \cdot dE_{k_j} \dots\dots\dots (II.12)$$

Où :  $D = \frac{2}{\pi h} \sqrt{\frac{m_y^*}{2E_{k_j}}}$  présente la densité d'états transversale (inclue la déénérescence de spin).

La fonction  $f(\mu - E)$  est la distribution de Fermi Dirac donnée par :

$$f(\mu - E) = \frac{1}{1 + e^{(\mu - E)/k_B T}} \dots\dots\dots (II.13)$$

$f_{-1/2}$  : est l'intégrale de Fermi-Dirac qui prend en compte la contribution des modes transverses [44].

$\mu_S$  et  $\mu_D$  : présentent le niveau de Fermi de la source et du drain respectivement.

$A_D$  et  $A_S$  : sont les fonctions de la densité spectrale des contacts s'expriment alors par :

$$A_D = G \Gamma_D G^T \quad \text{et} \quad A_S = G \Gamma_S G^T \quad \dots\dots\dots (II.14)$$

Où :  $G^T$  est la matrice transposée de G.

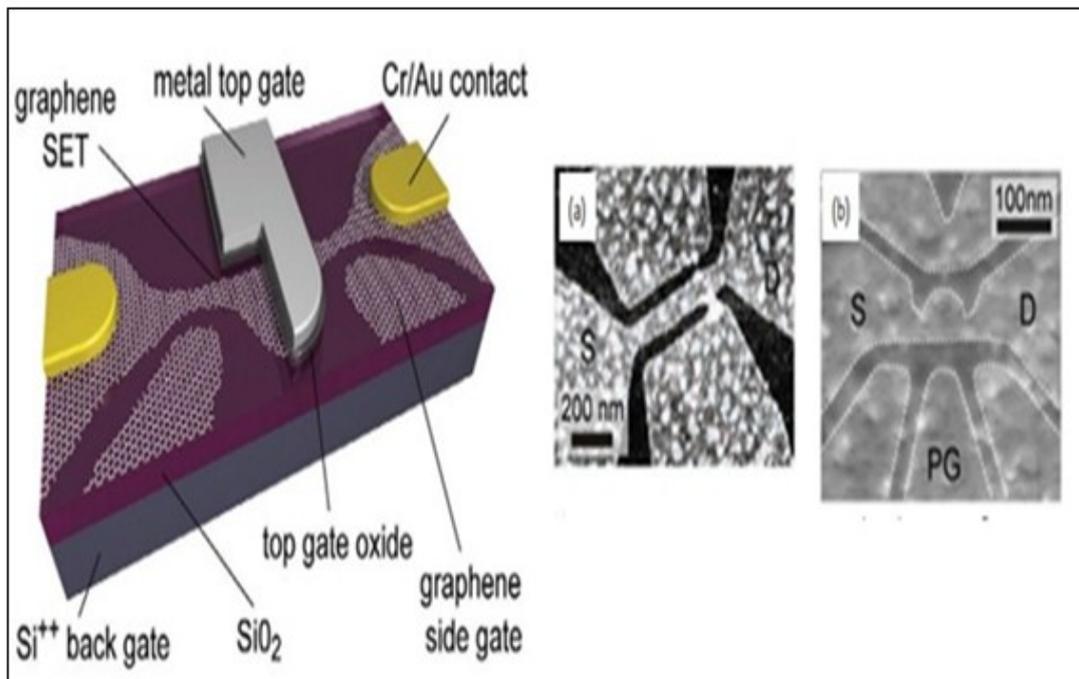
On note que  $T_{SD}$  est indépendant de l'énergie transverse, il peut être déplacé en dehors de l'intégrale, donc l'équation (II.12)

$$I(E_i) = \frac{q}{h^2} \sqrt{\frac{m_x^* k_B T}{2\pi^3}} \times [f_{-1/2}(\mu_S - E_i) - f_{-1/2}(\mu_D - E_i)] Tr[\Gamma_S A_D](E_i) \dots\dots\dots (II.15)$$

### II.10 Transistor à un électron en graphène

Le graphène est un matériau prometteur pour la nanoélectronique en raison de sa grande mobilité de porteur à la température ambiante et d'excellentes propriétés mécaniques. Cependant, le rapport Ion/Ioff dans un transistor à canal en graphène est très faible en raison de l'absence d'une bande interdite. Par conséquent la monocouche de graphène n'est pas directement adaptée aux circuits numériques. Ces propriétés électriques beaucoup plus simples et plus efficaces que le silicium.

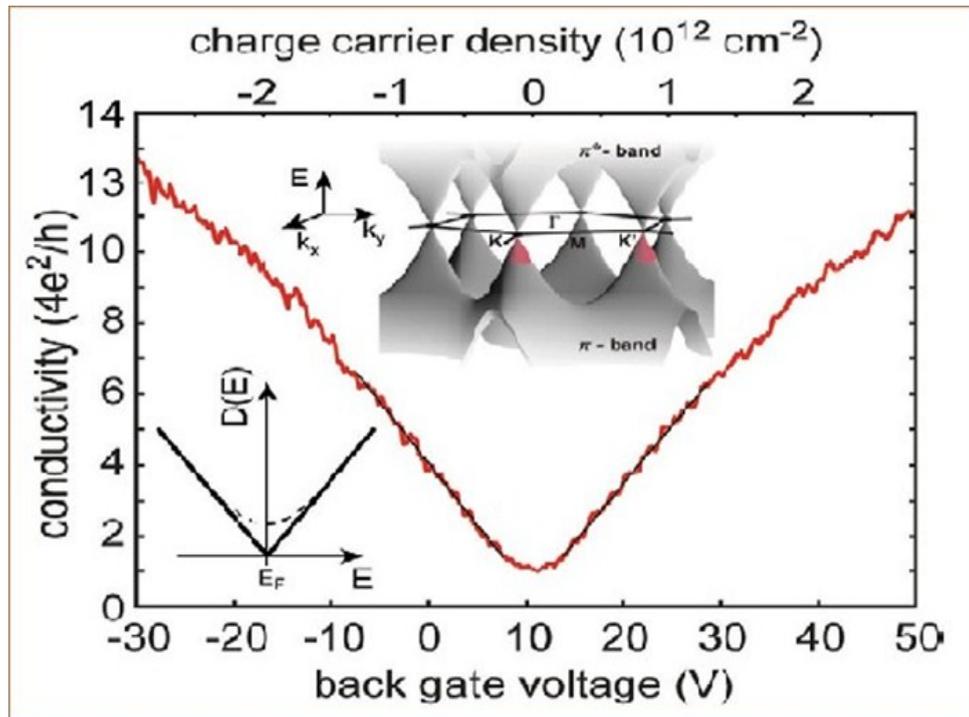
La figure II.7 ci-dessous illustre la structure d'un transistor GSET. Ce transistor est également connu comme un transistor à un électron qui, comme l'indique son nom, permet à un électron de passer à la fois.



**Figure II.7 :** structure de transistor à un électron avec monocouche du graphène à gauche et image microscopie à force de balayage (a et b). [45]

## II.11 Transport électronique dans le graphène

Transport électronique en graphène, comme tous les matériaux conducteurs, le graphène en vrac dérive son électronique propriété de sa structure de bande montrées schématiquement dans la partie supérieure encart de (la Figure II.10) Les états quantiques pertinents pour la conduction électrique sont proches des points K et K' dans l'espace k du réseauréciproque, où l'énergie E et le vecteur d'onde k (la quantité de mouvement de l'électron) ont unerelation linéaire [46]. Les électrons dans le graphène ont été appelés sans masse Fermions de Dirac [02], parce qu'une telle relation linéaire énergie-moment est également trouvé en mécanique quantique relativiste pertinente pour les hautes énergies Physique. La densité des états dérivés de cette dispersion linéaire est également linéaire en énergie [47]. Voir encadré inférieur gauche de (la Figure II.10). Dans la théorie il disparaît à l'énergie des points K et K', où les bandes de conduction et de valence se touchent.



**Figure II.8 :** Conductivité d'un flocon de graphène monocouche en fonction de la tension de la porte arrière. L'encart du haut montre la relation de dispersion du graphène aux énergies où les bandes de conduction et de valence se touchent dans le K et le K'.

### II.12 Mobilité dans le graphène

Comme on le sait, le graphène est un semi-conducteur à bande interdite nulle. Donc un transistor à canal en graphène pose des problèmes, seule une petite tension est nécessaire pour que la charge se déplace entre le drain et la source, c'est pourquoi il est nécessaire d'ouvrir une bande interdite dans le graphène, en théorie, les porteurs dans le graphène ont une mobilité électronique exceptionnelle, c'est pourquoi le graphène semble être un candidat intéressant pour les futurs transistors. [48]

**Tableau II.2** : la mobilité pour les matériaux les plus utilisés en microélectronique. [48]

| Matériaux                  | Mobilité en $\text{cm}^2.\text{v}^{-1}$ à $T=300\text{K}^\circ$ |
|----------------------------|---|
| Silicium                   | 1450  |
| Germanium                  | 3800  |
| Graphène exfolié           | 15 000  |
| InSb                       | 77 000  |
| GaAIAs/GaAs hétérojonction | 100 000   |
| Graphène suspendu          | 200 000   |

Selon ce tableau récapitulatif, le graphène a une bien meilleure mobilité que le silicium et le germanium les matériaux les plus couramment utilisés en microélectronique.

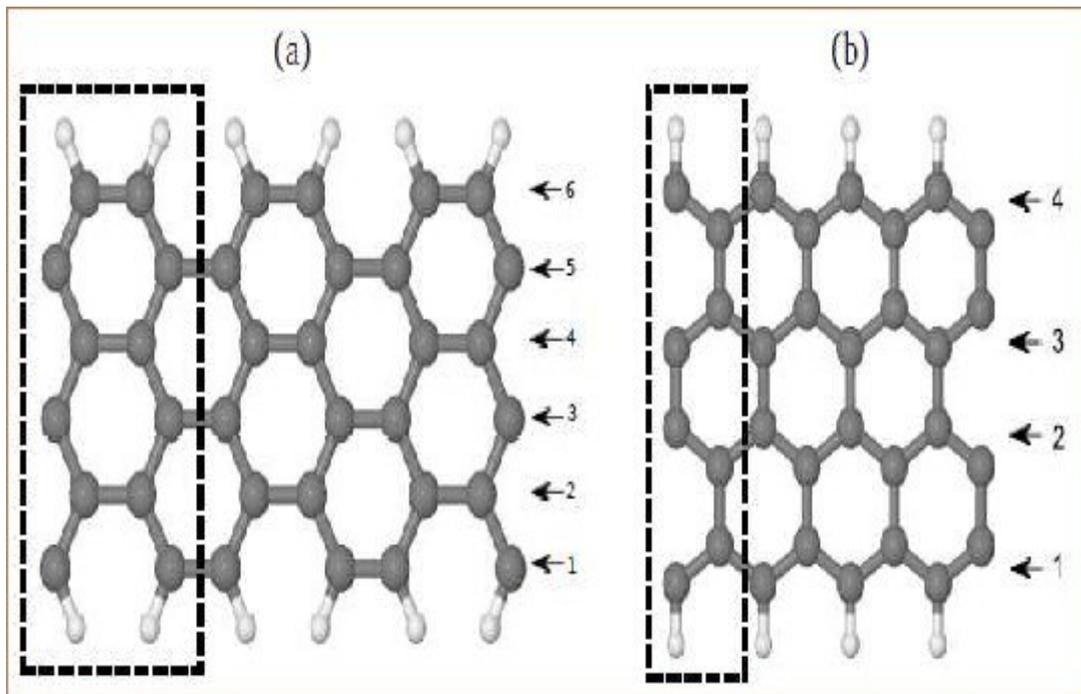
### II.13 Ouverture d'une bande interdite dans le graphène

Il est difficile de concevoir des transistors à canal de graphène sans créer de bande interdite. En effet, la bande interdite des semi-conducteurs permet de séparer l'état bloqué de l'état passant d'un transistor. Les différentes techniques pour obtenir une bande interdite dans le graphène sont listées ci-dessous :

### II.13.1 Nano rubans de graphène

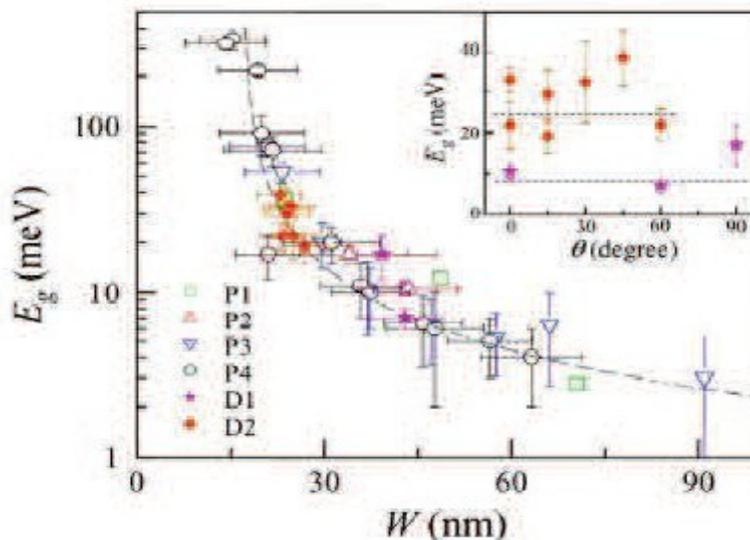
En raison de la difficulté à générer une bande interdite dans le graphène 2D, il y a une technique envisageable est l'ouverture d'un gap d'énergie via un confinement latéral des électrons 2D dans de très fins rubans de graphène (<100nm de large), plus communément appelés nano-rubans (GNR). En effet, le graphène loin d'être un cristal bidimensionnel infini présente inévitablement des bords et en réduisant sa dimensionnalité dans une direction on peut parvenir à modifier la structure de bande du graphène [49].

Du fait de la structure cristalline hexagonale du graphène, les bords du graphène présentent deux configurations particulières électriques aux propriétés électriques très différentes deux types de rubans appelés « armchair » (ou chaise) et « zigzag » résultent d'une rotation de  $30^\circ$  ou  $90^\circ$  dans l'axe de découpe du plan de graphène (figure II.9) [50].



**Figure II.9 :** a) Un nanoruban de graphène armchair hydrogéné en bord. b) Un nanoruban de graphène Zigzag.

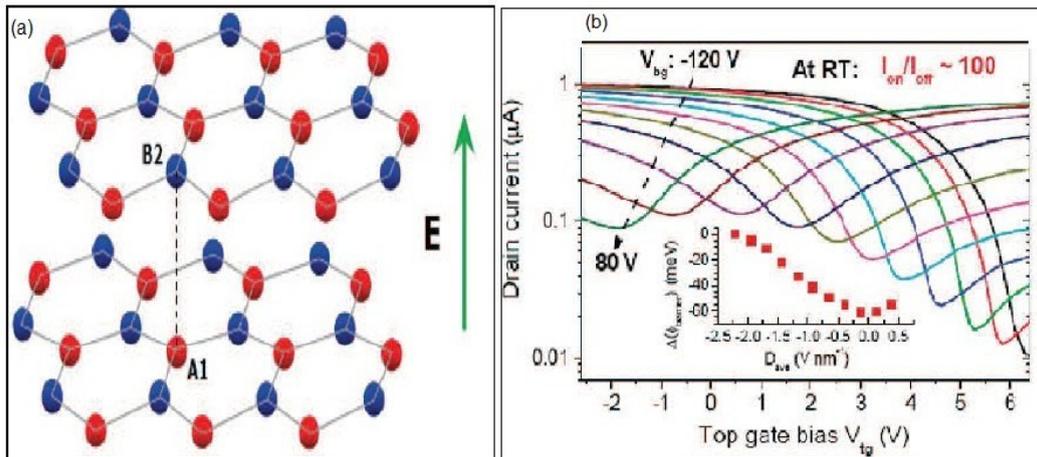
La bande interdite des nanotubes de carbone est fonction du diamètre de celui-ci. De la même manière, la bande interdite d'un ruban de graphène est fonction de la largeur de celui-ci. En fait, par confinement latéral, il se crée une quantification d'énergie dans le ruban de graphène. La difficulté technologique est qu'il faut descendre jusqu'à de très faibles largeurs de rubans pour ouvrir une bande interdite conséquente. La lithographie électronique actuelle permet d'atteindre des largeurs de rubans de 10nm ce qui serait suffisant pour ouvrir une bande interdite raisonnable [51, 52].



**Figure II.10** : Valeur de la bande interdite mesurée sur des dispositifs à effet de champ sur graphène exfolié tracée en fonction de la largeur  $W$  du ruban de graphène. Des valeurs de bande interdite de 300 meV sont atteintes pour des rubans de 15 nm [51].

### II.13.2 Bicouche de graphène

Une autre voie possible pour observer une bande interdite dans le graphène est d'utiliser un graphène bicouche en empilement Bernal dopé par dopage électrostatique. En appliquant un champ électrique perpendiculairement au film de graphène, les atomes  $A_1$  et  $B_2$  présentés sur le schéma pour (Figure II.11.a) ci-dessous ne sont plus équivalents, la symétrie du biplan est brisée. Une différence de potentiel est alors observée entre les deux feuillets, une bande interdite est créée. Pour réaliser ce dopage électrostatique de la bicouche, il suffit de fabriquer des transistors avec grille avant et grille arrière, la grille arrière créant la bande interdite dans la bicouche de graphène. L'équipe d'IBM (Figure II.11.b) a mesuré une bande interdite autour de 130 meV dans leurs transistors à bicouche de graphène. Cette valeur est un peu juste pour des applications logiques. [48]



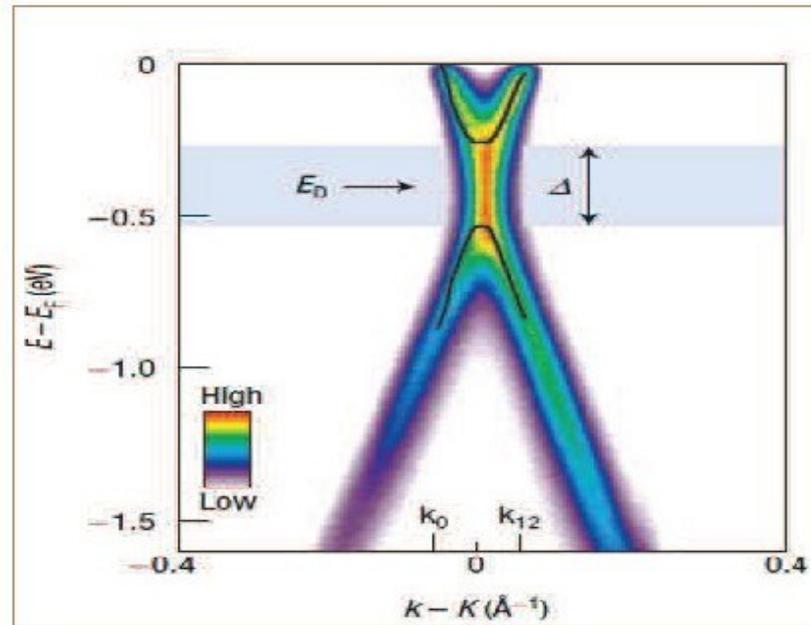
**Figure II.11 :** (a) Schéma d'une bicouche de graphène. Lorsque qu'un champ verticale  $E$  est appliqué, il apparait une différence de potentiel entre les deux couches de graphène et une bande interdite est ainsi créée. (b) L'équipe d'IBM met en évidence l'impact de la valeur de la polarisation face arrière sur le ratio  $I_{on}/I_{off}$  du transistor. Un ratio de 100 est mesuré pour une polarisation arrière de  $-120V$ . [53].

### II.13.3 Fonctionnalisation du graphène

L'ouverture d'une bande interdite semble être possible en fonctionnalisant la couche de graphène c'est à dire en greffant aux atomes de carbone de la couche des atomes d'hydrogène, d'oxygène ou de fluor. Plusieurs études révèlent que l'hydrogénation de graphène permet l'ouverture d'une bande interdite. Par exemple une hydrogénation totale du graphène (formation de graphène) montre un comportement de type semi-conducteur grand gap. Une demi-hydrogénation de graphène ouvre une bande interdite de  $0,43$  eV. [48]

### II.13.4 Graphène sur SiC

Des études montrent que le graphène sur SiC présente naturellement une bande interdite due au substrat SiC. En effet, la rupture de symétrie entre le graphène et le substrat SiC crée une bande interdite observée en ARPES (Figure II.12). Cette bande interdite varie en fonction du nombre de couches de graphène créées. Une bande interdite de  $0,26$  eV est mesurée pour une monocouche, cette bande interdite s'annule lorsque le nombre de couche dépasse quatre. Ce résultat reste tout de même largement débattu. [48]



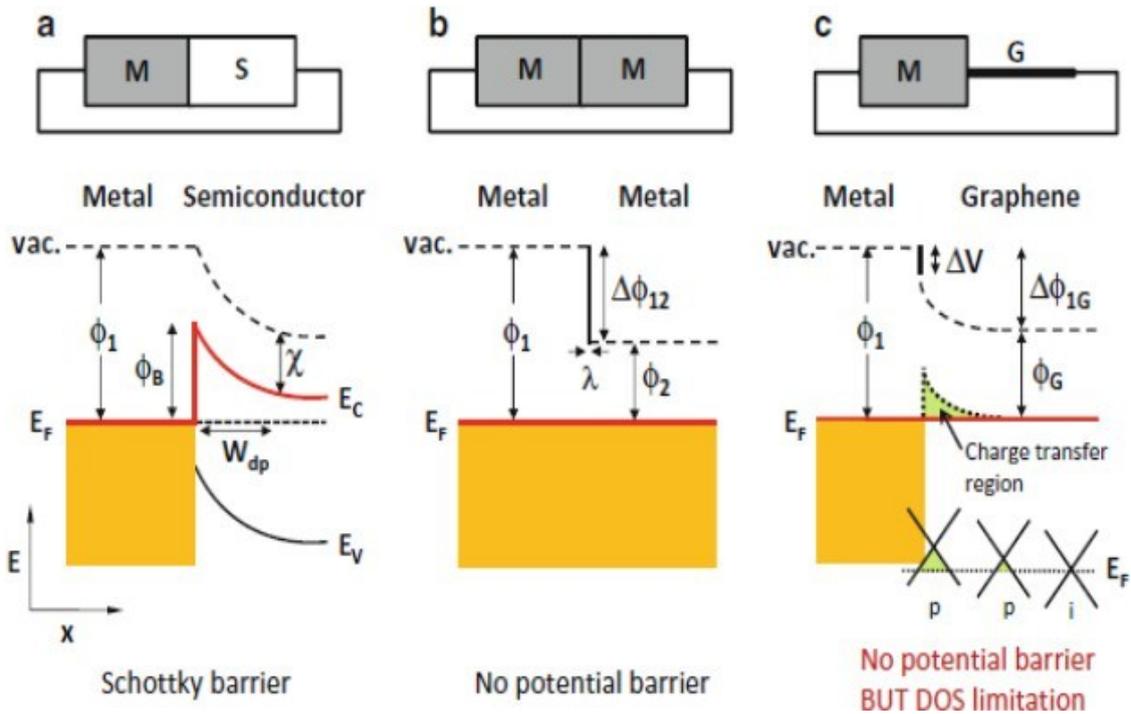
**Figure II.12** : Cliché ARPES pris près du point de Dirac K. Les traits noirs indiquent une relation de dispersion parabolique au point K et une bande interdite ouverte [54].

## II.14 Diagrammes de bandes d'énergie

On considère d'abord le cas idéal sans états de surface (pièges d'interface), (la figure II.13) montre les diagrammes de bande d'énergie pour les contacts (a) métal semi-conducteur, (b) métal-métal et (c) métal-graphène.

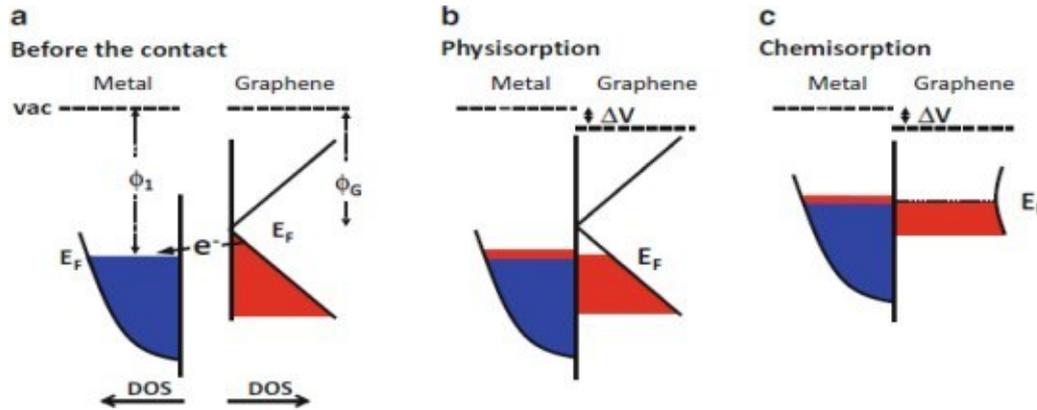
Quand un métal et un semi-conducteur sont mis en contact et connectés par un fil externe, ils sont tous les deux en contact, et sont liés par un fil externe pour former un circuit simple, des charges circulent entre le semi-conducteur et le métal par l'intermédiaire d'un fil externe pour les potentiels électrochimiques, c'est-à-dire les énergies de Fermi, s'alignent des deux côtés à l'équilibre thermique.

Le cas qui nous intéresse dans ce chapitre est le contact métal-graphène, qui est très similaire au contact métal-métal, car le graphène est traité comme un semi-métal en raison de son absence de bande interdite.



**Figure II.13 :** Diagrammes de bande d'énergie pour (a) des contacts métal semi-conducteur, (b) métal-métal et (c) métal-graphène.  $E_C$  et  $E_V$  sont les énergies pour les bandes de conduction et de valence, respectivement. [55]

La figure II.14 : montre la relation entre la DOS et l'énergie, illustrant le processus de transfert de charge qui se produit juste à l'interface métal-graphène pour le cas de la (b) physisorption et le cas de la (c) chimisorption. La direction du transfert de charge ne correspond pas nécessairement à la différence de fonctions de travail en raison de la liaison chimique. La quantité de transfert de charge diminue progressivement à partir de l'interface métal-graphène, comme le montre (la figure II.14.c). Dans ce cas, une très petite quantité de transfert d'électrons déplace le niveau de Fermi  $E_F$  de manière significative. On sait que 0,01 électron par atome de carbone abaisse  $E_F$  de 0,47 eV. [56]. Ce transfert de charge forme la couche dipôle à l'interface la différence de potentiel de la couche dipolaire est exprimée par  $\Delta V$ . De plus, la variation lente de la DOS autour de l'énergie de Fermi pour le graphène augmente la longueur de l'écran. La longue région de transfert de charge qui en résulte est une caractéristique unique du contact métal-graphène.



**Figure II.14.** La relation entre la DOS et l'énergie "juste" à l'interface métal-graphène (a) avant le contact, et pour (b) la physisorption et (c) chimisorption après le contact [55].

À l'interface, la force de l'interaction métal graphène est différente de  $\Delta\phi_{1G} = \phi_1 - \phi_G$  où  $\phi_G$  est la fonction de travail du graphène, les charges transférées du graphène au métal sont tirées en arrière par ce dipôle et puis s'équilibrent avec la différence de travail. [56]

## II.15 Avantages et inconvénients des transistors en graphène

### II.15.1 Avantages

- **Sensibilité**

La structure bidimensionnelle du graphène présente de nombreux avantages par rapport aux semi-conducteurs en volume, tels que le silicium, utilisé dans les MOSFET standard. La plupart des capteurs à semi-conducteurs à transistors étant tridimensionnels, les changements de charge électrique à la surface du canal ne pénètrent pas toujours profondément dans le dispositif. Cela peut limiter considérablement la Sensibilité. [57]

- **Aspect 2D du matériau**

Les semi-conducteurs tels que le silicium sont inefficaces lorsqu'ils sont aussi fins que le graphène. Cela est dû au fait les défauts de surface, ou liaisons pendantes, tendant à dominer à ces épaisseurs, ce que limite la sensibilité globale du dispositif. De telles liaisons créent des défauts supplémentaires dans le canal semi-conducteur du capteur et rendent possibles des liaisons non spécifiques, donnant lieu à de faux positifs. Cela diffère du graphène qui peut être produit en une seule couche avec un degré élevé de précision. En outre, un matériau bidimensionnel tel que le graphène, produit efficacement, aura beaucoup moins de liaisons superficielles [57].

- **Dureté mécanique**

La miniaturisation entraîne une diminution des dimensions de transistor et également des capteurs électrochimiques bien que nous faisons qu'un atome d'épaisseur, le graphène est très solide, cela vient des liaisons  $\sigma$  dites liaisons fortes dans le plan.

### II.15.2 Inconvénients

Comme tous les matériaux le graphène possède aussi des inconvénients que la science n'a pas pu éliminer à l'éviter dont en voici quelques-uns :

- Sensibilité des films de graphène à toute perturbation locale telle que les charges de surface et les molécules de gaz adsorbées.
- Nécessité d'obtenir une couche mince homogène sur tout le substrat lors de fabrication
- Des efforts sur la lithographie électronique sont à faire dans le but de réaliser les canaux à base de ce type de matériaux.
- Il est nécessaire de travailler sur la stabilité du transistor dans le temps.
- Les accès du transistor doivent être également étudiés ; la distance entre grille et source/drain doivent être réduites pour améliorer les performances.

**Chapitre III**

**Simulateur**

**Atlas-Silvaco**

### III. 1 Introduction

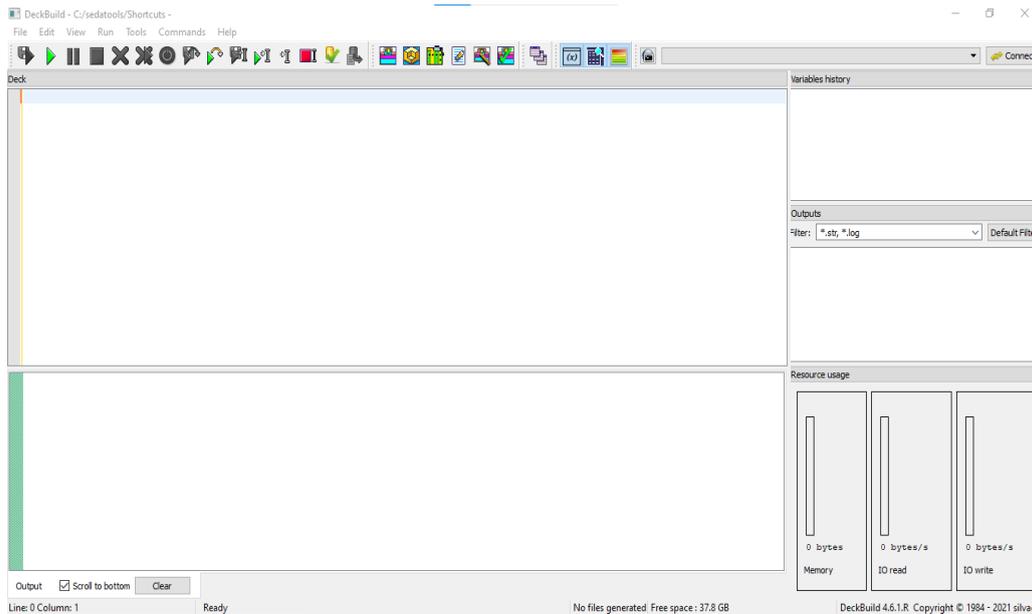
Dans ce chapitre nous allons présenter la méthode et les techniques de simulation par programme Silvaco Atlas pour déterminer les propriétés électroniques de transistor à un électron en graphène.

### III.2 Définitions

"SILVACO International" est une société de logiciels qui offre des programmes pour la modélisation de tous les domaines de l'électronique, y compris les circuits analogiques et numériques. Cette société dispose de logiciel allant de la simple modélisation spic jusqu'aux schémas des circuits intégrés de pointe et des outils d'extraction [58].

Le logiciel SILVACO-ATLAS est un simulateur de dispositifs semi-conducteurs basé sur les principes physiques à deux et à trois dimensions, ce qui signifie qu'il peut prédire les caractéristiques électriques qui sont associés aux structures physiques bien spécifiées et des conditions de polarisation. Ceci est obtenu en rapprochant le fonctionnement d'un dispositif sur une grille à deux ou trois dimensions, comprenant un certain nombre de points de grille appelés noeuds. En appliquant un ensemble d'équations différentielles, dérivées des lois de Maxwell, sur cette grille, vous pouvez simuler le transport des porteurs à travers une structure. Cela signifie que le rendement électrique d'un dispositif peut maintenant être modélisé en courant continu, alternatif ou en modes de fonctionnement transitoires [59].

SILVACO TCAD comprend de nombreux modules pour la simulation de dispositifs semi-conducteurs tels que comme ATHENA et ATLAS. ATHENA est utilisé pour simuler le processus de fabrication tandis qu'ATLAS est pour les performances des appareils électriques. ATHENA et ATLAS travaillent sous une plateforme appelée DECKBUILD. DECKBUILD est un environnement d'exécution graphique interactif pour le développement platine d'entrée de simulation de processus et de dispositif. La figure 1 montre la fenêtre DECKBUILD. Il est considéré comme la fenêtre principale de SILVACO où tous les simulateurs peuvent être contrôlés [60].



**Figure III.1 : Fenêtre DECKBUILD**

### III.3 Travailler avec Atlas

Le développement de la structure souhaitée dans Atlas se fait en utilisant un langage de programmation déclaratif. Dans ce qui suit, on donne un bref aperçu sur la construction et la simulation d'une structure dans Atlas [61].

Le fichier d'entrée d'atlas contient un ordre de lignes de commande. Chaque ligne consiste en un nombre de déclarations qui identifie la commande et un jeu de paramètres. Les groupes de commandes sont présentés dans (la FigureIII.2) [62].

| <i>Group</i>                            |       | <i>Statements</i>                          |
|---|-------|--|
| <b>1. Structure Specification</b>       | ————— | MESH<br>REGION<br>ELECTRODE<br>DOPING      |
| <b>2. Material Models Specification</b> | ————— | MATERIAL<br>MODELS<br>CONTACT<br>INTERFACE |
| <b>3. Numerical Method Selection</b>    | ————— | METHOD                                     |
| <b>4. Solution Specification</b>        | ————— | LOG<br>SOLVE<br>LOAD<br>SAVE               |
| <b>5. Results Analysis</b>              | ————— | EXTRACT<br>TONY PLOT                       |

**Figure III.2 : Groupes de commande d'atlas et déclarations primaires [63].**

Atlas suit le format suivant pour les déclarations et paramètres :

<Déclaration><Paramètres>=<Valeur> Par exemple : Doping Uniform N.Type Concentration=1.0 Région=1 La déclaration est Doping, les paramètres sont Uniform N.Type Concentration, etRégion.

### III.4 Spécification de la structure

#### III.4.1. Maille (Mesh)

La première étape dans la construction d'un dispositif après la déclaration go atlas, est de définir le maillage. Le maillage est une grille qui recouvre la zone physique dans lequel le dispositif est construit et simulé. Le maillage est simplement réalisé par une série de lignes horizontales et verticales définies par l'utilisateur avec un espacement entre eux [64]. Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations. Celui-ci doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats [65].

Dans un maillage 2D, nous définissons des lignes (x et y). Réseau ce sont une série de lignes horizontales et verticales espacées l'une de l'autre. Comme nous le notons ( la figure III.3)

Le format général pour définir la maille est :

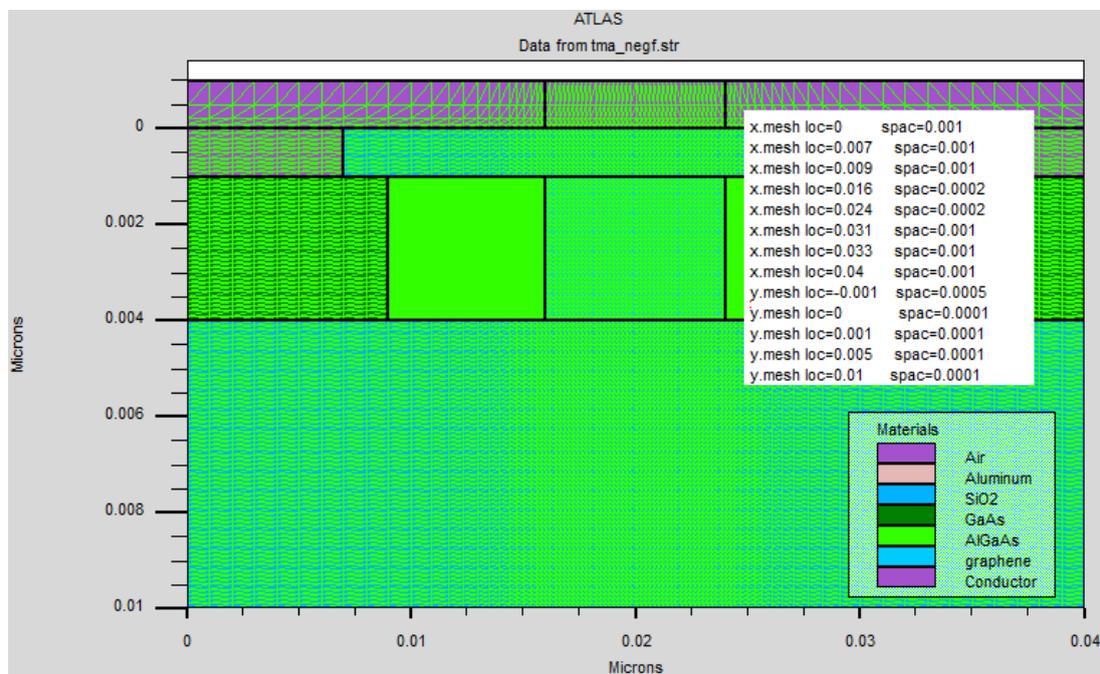


Figure III.3 : exemple de maillage.

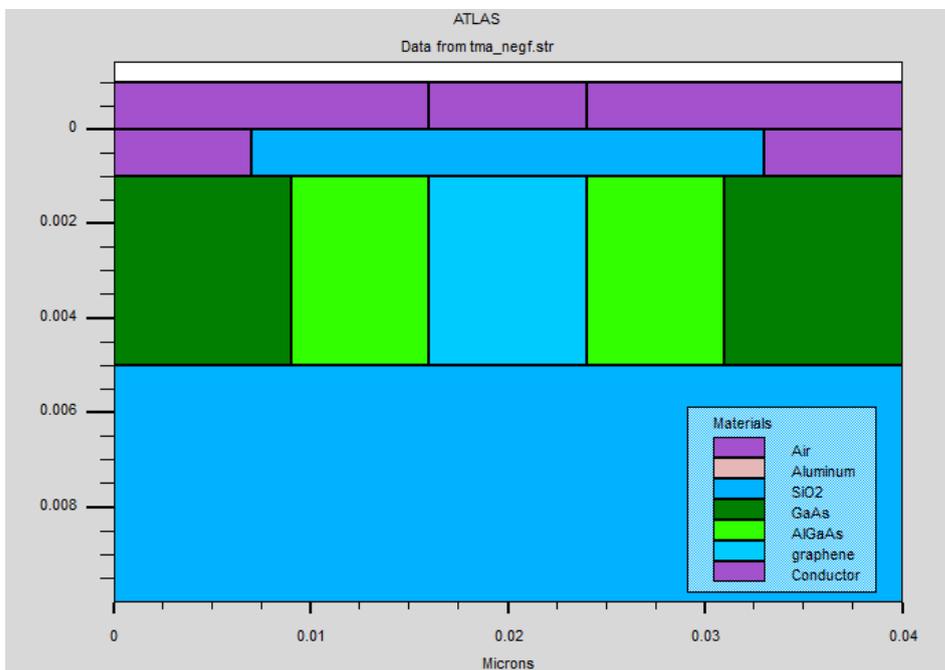
Le format général pour définir la maille est :

```
X.MESH LOCATION=<VALUE> SPACING=<VALUE>
```

```
Y.MESH LOCATION=<VALUE> SPACING=<VALUE>
```

### III.4.2 Région

La déclaration de la région est utilisée dans la (figure III.4), pour séparer l'instruction du maillage initial en blocs distincts et définit les paramètres matériels initiaux qui peuvent être désignés plus tard par des numéros de région. Tous les domaines maillés d'une structure doivent être assignés à une région et les régions doivent être ordonnées de la plus basse vers la plus élevée. Par exemple, la région 5 ne peut pas être définie avant la région 4 [66].



**Figure III.4** : Exemple de régions.

Format pour définir les régions est comme suit Par exemple :

```
REGION number = <integer>< material_type><position des paramètres>
```

```
region number=1 material=Air x.min=0 x.max=0.016 y.min=-0.001 y.max=0
```

Le graphène, en tant que matériau, n'est pas inclus dans la bibliothèque de matériaux ATLAS, donc pour le définir, nous avons utilisé l'instruction "user.material", qui est utilisée pour définir des matériaux inconnus d'ATLAS, et nous les avons assignés à sa région et position respectives paramètres.

### III.4.3 Electrodes

ATLAS a une limite de 50 électrodes qui peuvent être définies. Le format de définition d'électrodes est comme suit : Electrode nombre = <integer> name = < nom de l'électrode >< position des paramètres > La Figure 6 montre la position de l'anode et la cathode par des valeurs de x et de y [67].

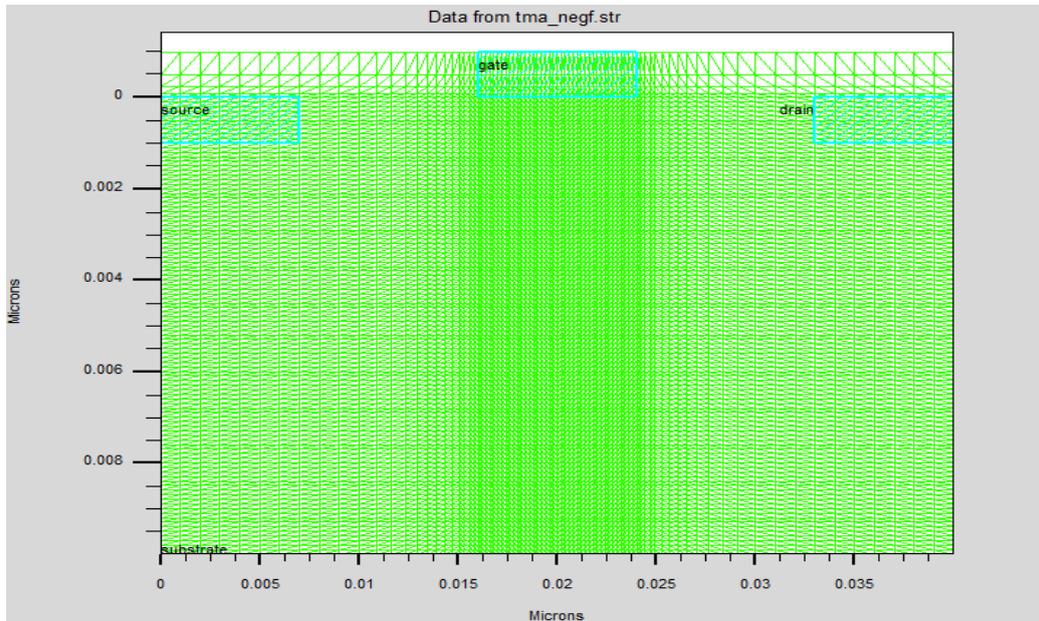
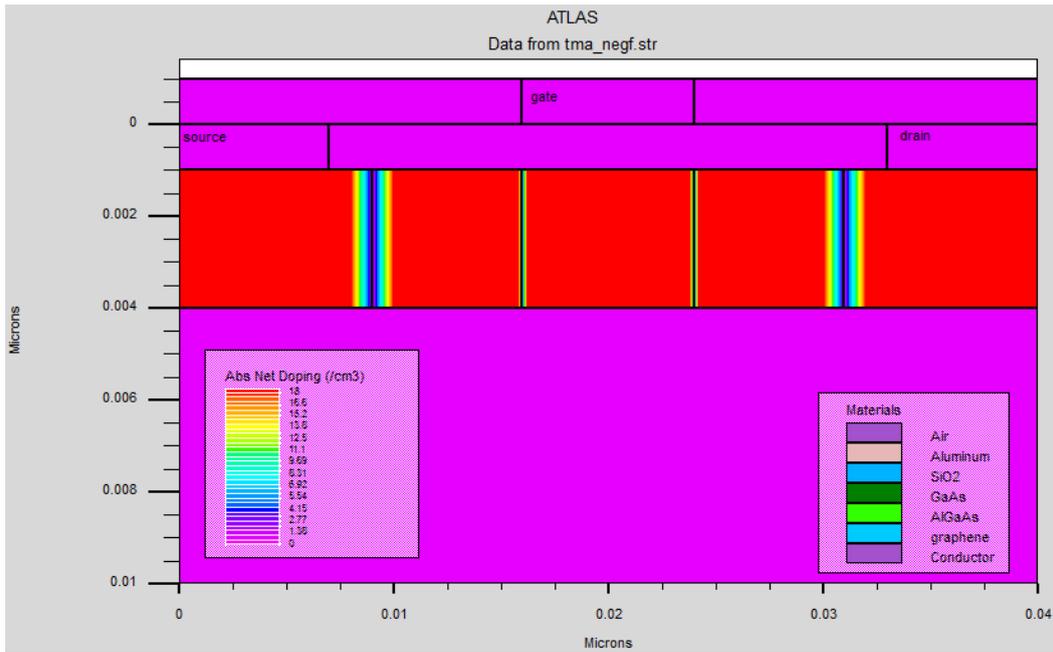


Figure III.5 : Exemple des électrodes

### III.4.4 Dopage

Le dernier aspect de la spécification de la structure qui doit être défini est le dopage (figure III.6). Le format de la déclaration de dopage dans « Atlas » se présente comme suit :

DOPING < type de distribution > < type de dopant > / < position des paramètres > Le dopage peut être de type N ou P et le type de distribution peut être uniforme ou gaussienne [68].



**Figure III.6 : Dopage.**

## II.5 Les matériaux et modèles utilisés

### III.5.1 Contact

Si une électrode est en contact avec un semi-conducteur, par défaut, ATLAS le reconnaît comme un contact ohmique. Si l'instruction « Work function » est ajoutée, le contact est considéré comme un contact Schottky spécifiant le travail de sortie en eV, parfois on introduit le nom du métal comme tungstène pour le tungstène [69].

La syntaxe du contact est la suivante : Contact <name><property\_ spécification>

### III.5.2 matériau

Les matériaux utilisés pour construire le dispositif doivent eux-mêmes être définis. La déclaration matérielle permet la spécification de certains paramètres de base. Ces valeurs peuvent s'appliquer à un matériau ou à une région [70].

La syntaxe de la déclaration des matériels est suivante :

Matériel<localisation><Matériel \_définition>

Un exemple spécifique utilisé est :

```
material material=graphene EG300=0.026 MUN=16983.69 MUP=16983.69 NC300=1.9e16  
NV300=1.9e16 affinity=4.9 PERMITTIVITY=6 user.group=semiconductor user.default=4H-  
SIC out.index=graphene [71]
```

### III.5.3 Modèles physiques

Les modèles physiques sont classés en cinq catégories : Mobilités des porteurs de charges, mécanismes de génération-recombinaison, les statistiques de transport, l'ionisation par impact et l'effet tunnel [67].

La syntaxe de la déclaration de modèle est la suivante : MODELS<model flag><general parameter><model dependent parameters>

Le choix des modèles dépend des matériaux choisis pour la simulation et leurs environnement et dimensions. L'exemple ci-dessous cite quelques modèles.

SCHRO : Active le solveur de Poisson-Schrodinger

TEMPERATURE : Spécifie la température en Kelvin.

### III.5.4 Interface

Les limites du semi-conducteur ou de l'isolant sont déterminées par l'instruction d'interface [62].

La syntaxe d'interface est la suivante : INTERFACE [ <parameters> ]

### III.6 Spécification de la solution

Après avoir effectué la sélection de la méthode numérique, la spécification de la solution est la suivante. La spécification de la solution est décomposée en Log,Solve, Load,Save.

#### - Solve

L'instruction SOLVE suit l'instruction LOG. Elle effectue une solution pour un ou plusieurs points de polarisation [72].

La syntaxe de solve est suivante : SOLVE INITIA

### - LOG

Log enregistre toutes les caractéristiques terminales dans un fichier de données [73]. L'exemple suivant montre un exemple d'utilisation de l'instruction LOG.

LOG OUTFILE = myoutputfile.log

### - SAVE

L'instruction Save introduit toutes les informations attribuées à un point noeud dans un fichier output (fichier de sortie) [74].

La syntaxe de Save est suivante : Save outfile=<filename>

### - LOAD

La commande Load introduit les solutions précédentes à partir de fichiers comme valeurs initiales à d'autres points de polarisation [74].

La syntaxe de LOAD est suivante : Loadinfile=<filename>

### - Extraction des données et traçage

Une fois qu'une solution est trouvée pour le problème du dispositif, l'information peut être visualisée graphiquement avec TONYPLOT. En plus, les paramètres des dispositifs peuvent être extraits par la déclaration EXTRACT [62].

### - Tonyplot

TONYPLOT est L'environnement où sont tracés les résultats des simulations. Il donne des possibilités complètes pour la visualisation et l'analyse des caractéristiques de sortie (structure du composant électronique, profil de dopage, et caractéristiques électriques).

Selon le programme de simulation utilisé, TONYPLOT peut donner des caractéristiques de sortie en une, deux ou trois dimensions [65].

**CHAPITRE IV**  
**RESULTATS ET**  
**DISCUSSION**

## IV.1 Introduction

Ce chapitre est divisé en deux sections, La première est consacrée à la modélisation bidimensionnelle de la structure d'un transistor à électron représenté sur la figure IV.1 avec des paramètres regroupés dans le tableau IV.I. L'étude de cette structure est basée sur les propriétés structurales ainsi que l'influence de la tension de la grille qui constitue l'électrode de commande affectant le canal et donc le courant collecté, la couche prise comme canal est le graphène semiconducteur dopé ( $N_d=1e18 \text{ cm}^{-3}$ ) entre deux barrières, où il devient un puits quantique.

Dans la deuxième partie le transistor à un électron plusieurs grille (nanotransistor à multi grille) va être explore. C'est un modèle expérimental [75] incluant aussi le graphène mais autant qu'un canal. Les résultats de simulation numérique sont fur à mesuré expose dans cette partie de travail.

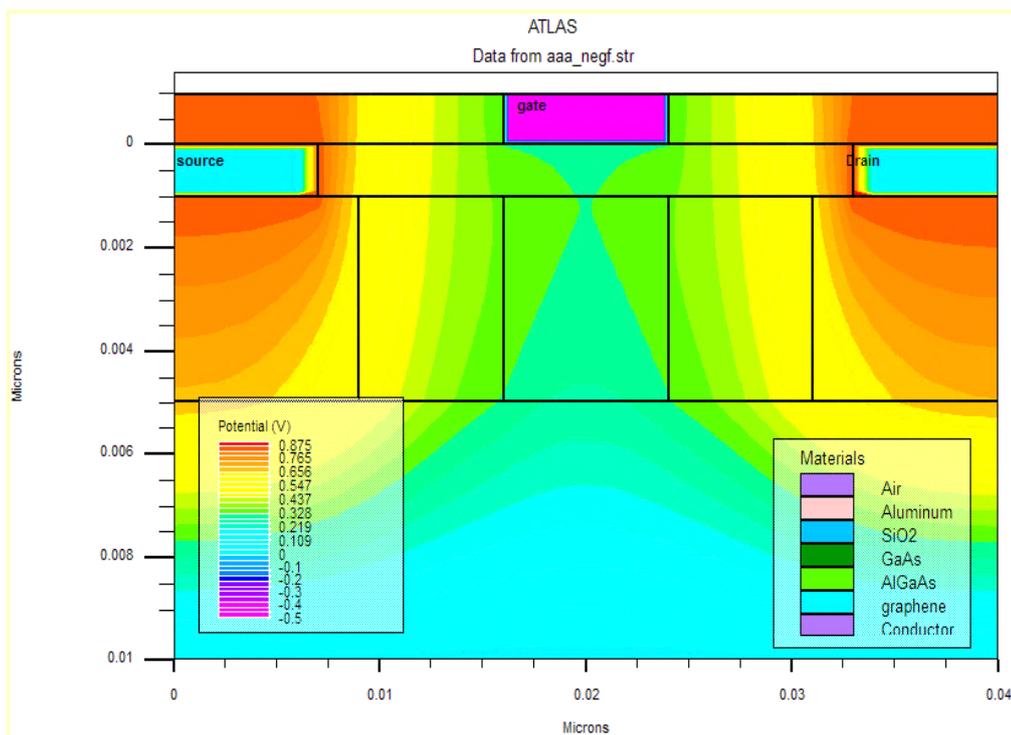


Figure IV.1 : Structure du transistor SET sous tension grille  $V_g = -0.5V$  et  $V_{ds} = 0.01V$ . ainsi que la distribution potentiel dans le plan (x, y)

Tableau IV.1 : Paramètres du transistor à un électron a une seule grille.

| Les paramètres  | Valeur                |
|---|-----------------------|
| Épaisseur de dispositif   | 10 nm                 |
| Épaisseur de l'oxyde de Silicium (SiO <sub>2</sub> )                  | 5 nm                  |
| Largeur du puits (Graphène)   | 8 nm                  |
| L'épaisseur du Graphène   | 4 nm                  |
| Largeur de la barrière tunnel ((Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As) | 6-10 nm               |
| Barrières dopants (Na)  | 1E18 cm <sup>-3</sup> |
| Dopage du Puits et la région (GaAs) (Nd)                              | 1E18 cm <sup>-3</sup> |
| Fonction de travail de la grille                                      | 4.1eV                 |
| V <sub>d</sub>  | [-0.6, 0.6] V         |
| V <sub>g</sub>  | [-0.7, 1.5] V         |
| (Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As)                                | X = 0.22              |

## IV.2 Modèles physiques utilisés

Pour une étude numérique de nanotransistor à un électron (SET) a base de graphène, on a utilisé le model rectangulaire [76], ou la structure d'un transistor à effet Tunnel Résonnant à Puits (Well) Quantique (QWRT) basé sur deux barrières et un puits au milieu. Les barrières étant formées de semi-conducteurs avec une bande interdite plus élevée et le puits séparant les barrières comprenne un matériau de type semi-métal avec une très petite bande interdite, avec ses paramètres donnés dans le Tableau (IV.1). Pour la simulation de cette structure, la modélisation physique bidimensionnelle sous Atlas Silvaco est adoptée [77]

### IV.2.1 Approche de la Fonction de Green Hors Equilibre (NEGF)

Pour les dimensions d'un transistor nanométriques (nm), le transport des porteurs est cependant quantique qui exige une étude quantique en utilisant une approche dite de fonction de Green hors (Non) équilibre (NEGF). Cette méthode entièrement quantique traite l'effet tunnel source-drain, le transport balistique, le confinement quantique. L'approche NEGF pour la structure planaire, où le plan transverse est supposé infini. Cette approche est plus applicable aux structures à barrières multiples [76].

Pour spécifier les fonctions Negf (Negf\_MS ) et Schrodinger, on introduit ses deux options dans l'instruction Models en Atlas, donc celui-ci lance un solveur NEGF pour modéliser le

transport quantique balistique dans le dispositif à une seule grille puis à cinq grilles. Les paramètres en modèle de Poisson de Schrödinger couplé ont la même signification dans le contexte de NEGF [3]. Un hamiltonien de masse effective  $H_0$  d'un dispositif bidimensionnel est exprimé par la relation IV.1 [3]

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{m_x^v(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{1}{m_y^v(x,y)} \frac{\partial}{\partial y} \right\} \right] \quad \text{IV.1}$$

$m_x^v$  et  $m_y^v$  sont les masses effectives spatialement dépendantes dans la direction  $x$  et  $y$  en  $v$  vallée. Alors, au lieu de résoudre un problème 2D ou 3D, qui peut prendre trop de temps de calcul, une approche Mode Space (MS) est utilisée. Une équation de Schrödinger est d'abord résolue dans chaque tranche du dispositif pour trouver les énergies propres et les fonctions propres.

Ensuite, une équation de transport des électrons se déplaçant dans les sous-bandes est résolue. Étant donné que seules quelques sous-bandes propres les plus basses sont occupées et que les sous-bandes supérieures peuvent être négligées en toute sécurité, la taille du problème est réduite. De plus, dans les dispositifs où la section transversale ne change pas, les sous-bandes ne sont pas couplées mécaniquement quantique les unes aux autres et les équations de transport deviennent essentiellement 1D pour chaque sous-bande.

Donc, quand le confinement quantique a 1D. Le calcul de la densité électronique quantique repose sur une solution d'une équation de Schrödinger 1D donnée par l'équation IV.2 résolue pour les énergies d'état propre  $E_i^v(x)$  et les fonctions d'onde  $\psi_{iv}(x, y)$  à chaque coupe perpendiculaire à l'axe  $x$  et pour chaque vallée électronique (ou bande de trous)  $v$  [76]

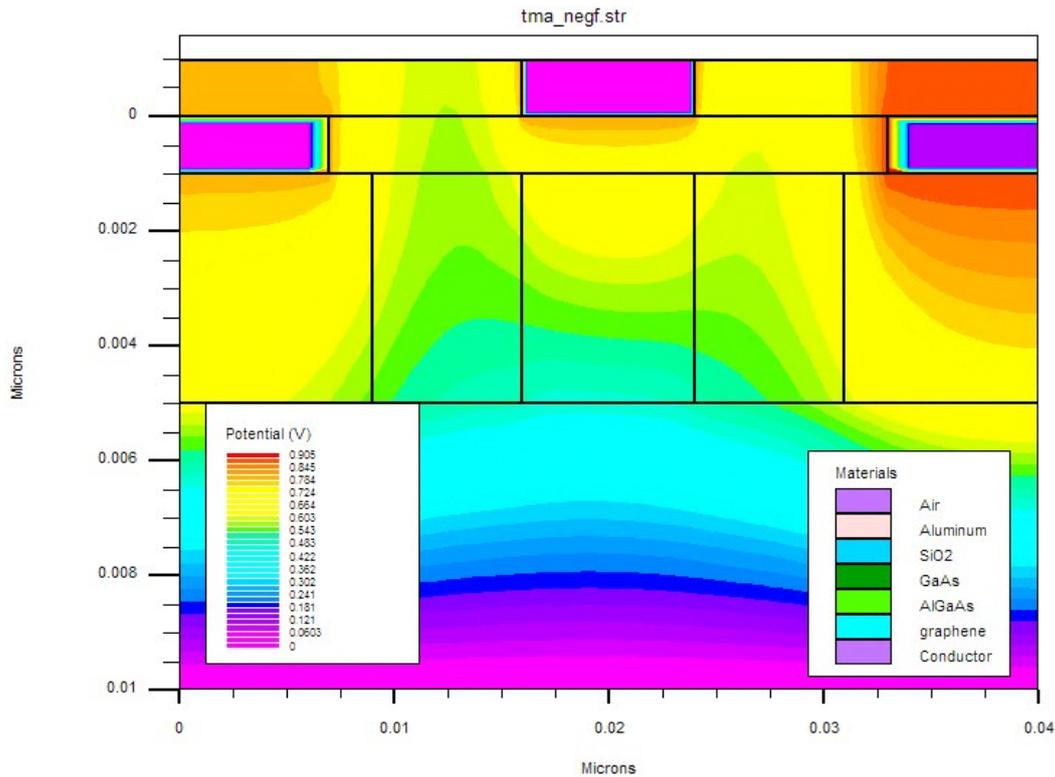
$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{1}{m_y^v} \frac{\partial \psi_{iv}}{\partial y} \right) + E_c(x, y) \psi_{iv} = E_{iv}(x, y) \psi_{iv} \quad \text{IV.2}$$

$E_c(x, y)$  est le minimum de la bande de conduction. L'équation des trous est obtenue en remplaçant les masses effectives des trous par celles des électrons et le maximum de la bande de valence -  $E_v(x, y)$  au lieu de  $E_c(x, y)$ .

### IV.3 Etude électrostatique de la structure a une grille

#### IV.3.1 Distributions du potentiel

La distribution des lignes du potentiel sur la longueur du transistor à un électron à base de Graphene est représentée par la figure IV.2 pour les tensions appliquées  $V_d = 0.1$  V et  $V_g$  variant de  $-0.7$  à  $1.5$  V.



**Figure IV.2 : La distribution du potentiel dans la structure SET a une seule grille à base de Graphene.**

Les deux barrières sont des couches en AlGaAs et le point quantique est de Graphène. Sur cette figure, on peut distinguer que la distribution du potentiel est non symétrique due à la contribution des points quantiques (puits quantiques), la ligne du potentiel a une forme parabolique, et le potentiel est très élevé près de l'électrode (source-drain) certainement du côté de drain ou la tension appliquée et accumulation des électrons sont importantes comme le présente la figure IV.3.

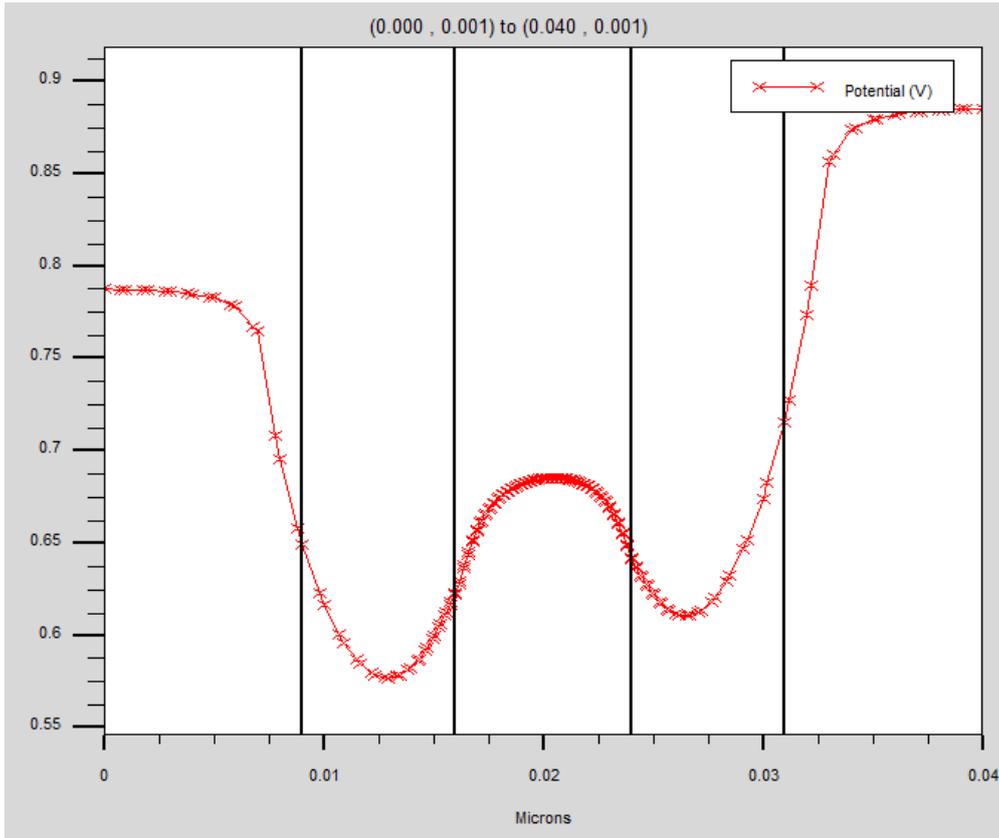


Figure IV.3 : La ligne de potentiel le long de la structure (ox).

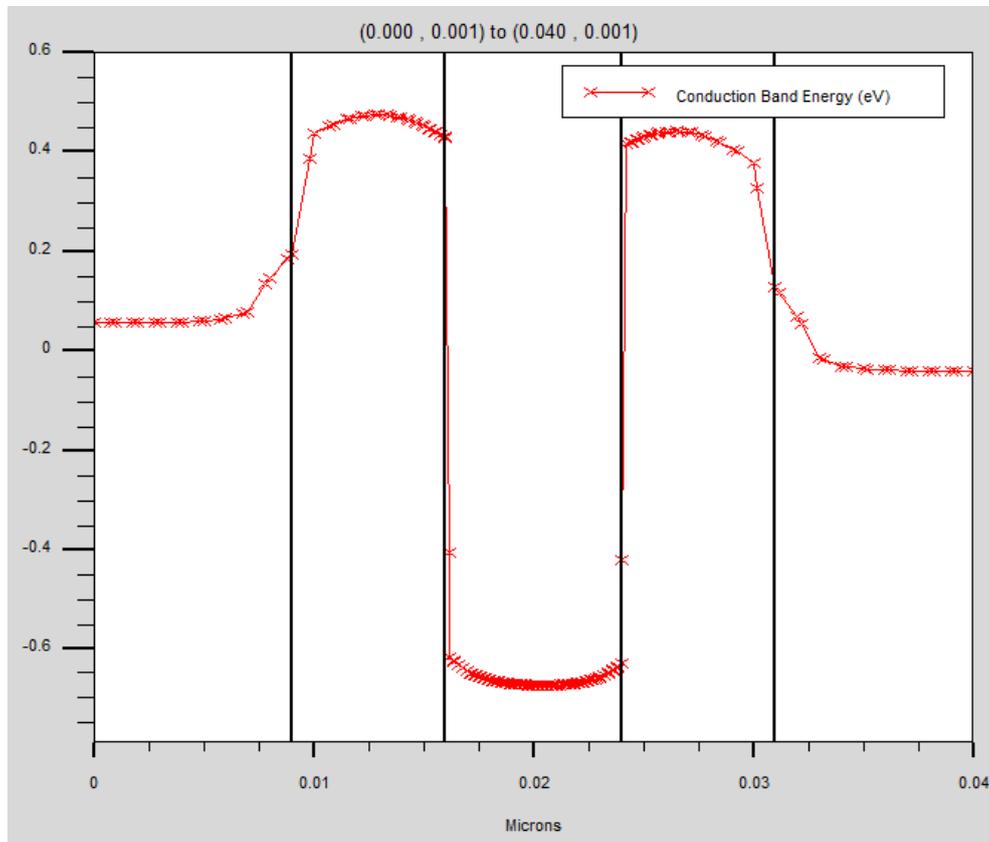


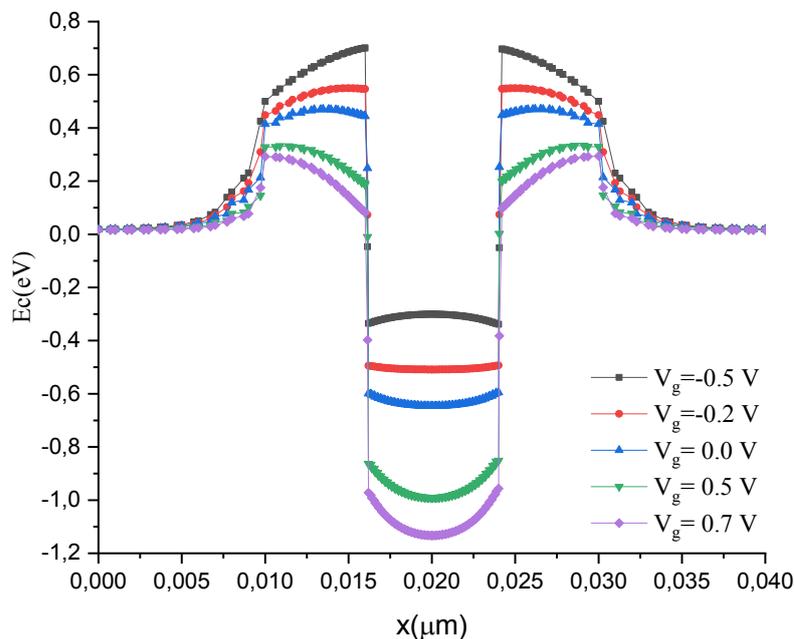
Figure IV.4 : le diagramme d'énergie de la hétérostructure à double barrière.

En conséquent, la représentation du diagramme d'énergie (bande de conduction) de l'hétérostructure du transistor à double barrière est nécessaire pour mieux distinguer cet effet, comme le montre la figure IV.4. Donc, comme le diagramme le montre, les électrons sont effectivement accumulés dans la région cote drain.

### IV.3.2 Effet de la tension de grille $V_g$

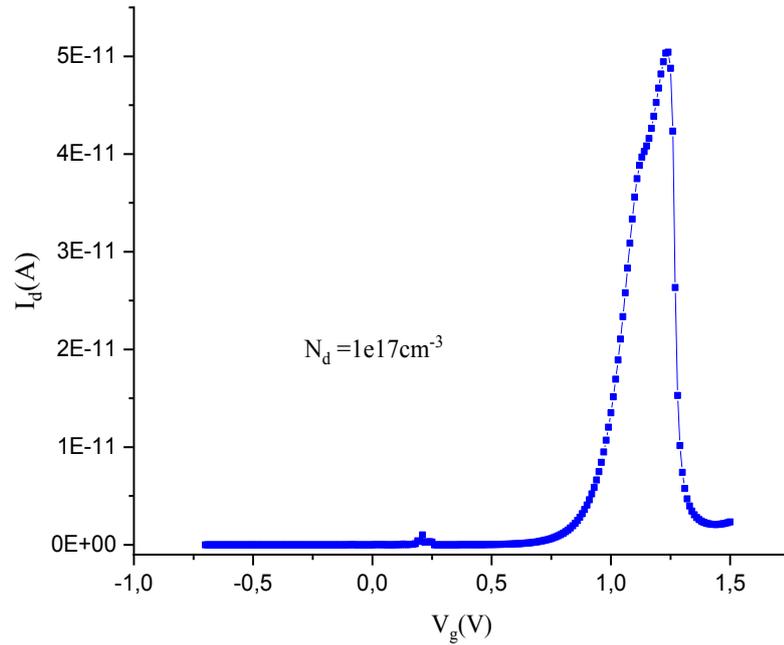
L'influence de la tension  $V_g$  sur la bande de conduction est prise en compte dans cette section. Le but d'introduire le Graphene comme canal entre deux barrières est supposée améliorée le courant produit du nanotransistor. Donc la figure IV.5 suivante exprime la variation de  $E_c$  en fonction de la tension  $V_g$ . Quand  $V_d=0V$  et  $V_g$  augmente, donc une accumulation importante est réalisée cependant, les niveaux d'énergie du puits quantique sont très faibles aux cotés source et drain, donc les électrons du côté drain et ceux de côté source peuvent traverser la barrière tunnel vers le point (puits) quantique.

On peut aussi observer que plus la tension grille augmente, plus le puit quantique est profond et donc plus de concentration électronique devient.



**Figure IV.5: Schéma de la bande de conduction et les états liés aux électrons le long de ox sous  $V_{ds}= 0 V$  et différentes  $v_g$ .**

En polarisons le nanotransistor (SET) avec une tension  $V_d=0.1 V$ , la figure IV.6 exprime l'influence de tension de  $V_g$  sur le courant  $I_d (A)$ .



**Figure IV.6 : Variation du courant en fonction  $V_g$  à  $T=300$  k et  $V_{ds}=0.1$ V.**

Comme il est distingué depuis cette dernière figure IV.6, la tension du drain commence à influencer le courant que quand la tension grille atteint la valeur  $V_g=0.8$  V.

Les figures IV.7.8 ci-dessous présentent les effets de la largeur et de l'épaisseur de la couche du graphène respectivement sur le courant qu'il est en fonction de la tension de la grille, on observe bien que le courant est influencé par la variation de ces paramètres. Lorsque la largeur du puits quantique augment, en même temps, la largeur des barrières diminués donc les électrons peut déplacer de la source vers à du drain. D'autre part, lorsque l'épaisseur de la couche du graphène croit c'est -à- dire bicouche, la densité des électrons augment donc le courant est élevé aussi.

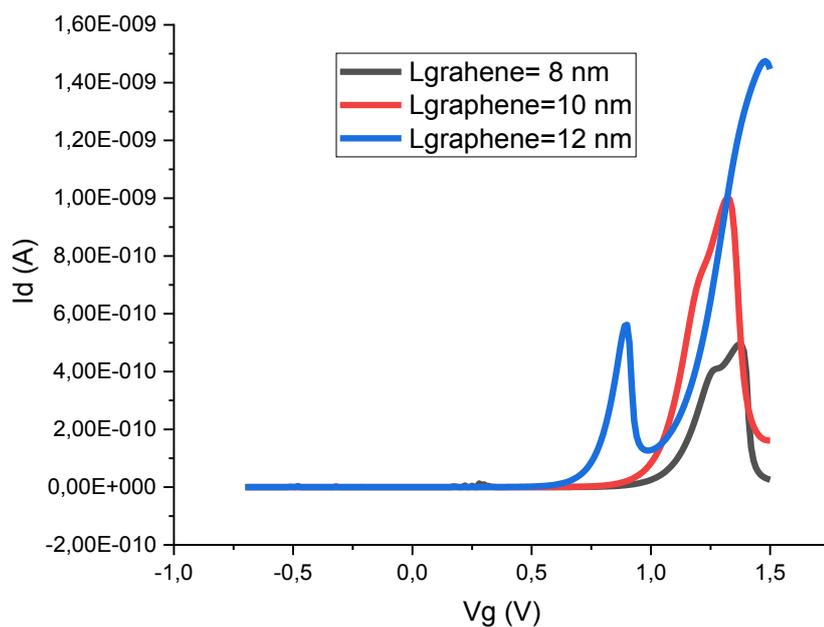


Figure IV.7 : les effets de la largeur de graphène sur la valeur du courant  $I_d$  en fonction de  $V_g$  à  $T=300$  k et  $V_d=0,1$ V

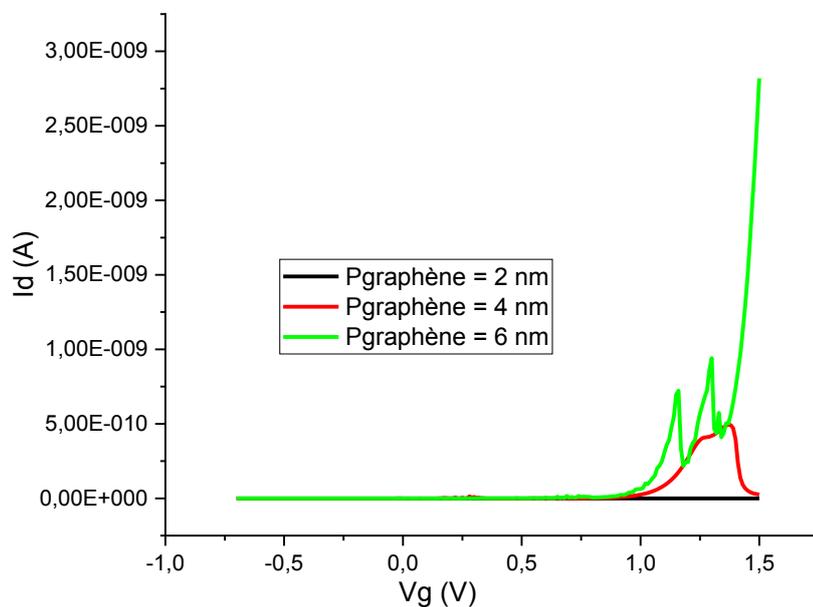
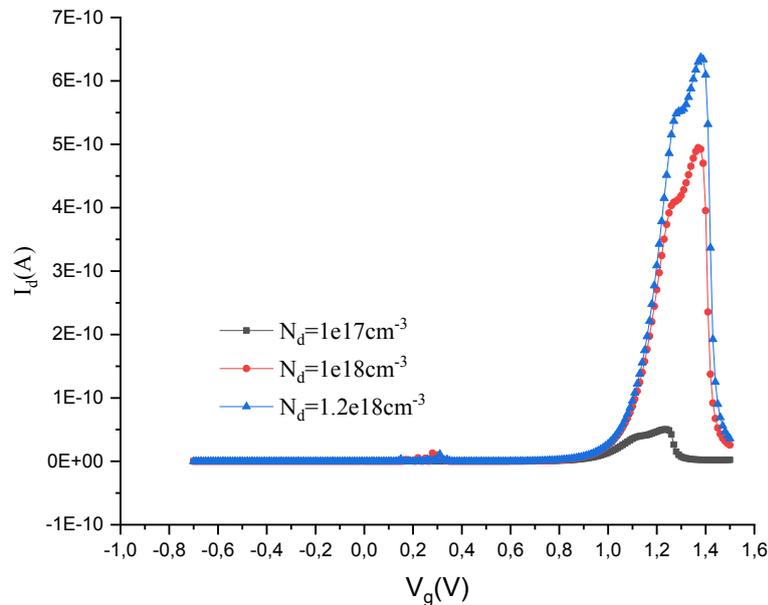


Figure IV.8 : les effets de l'épaisseur de graphène sur la valeur du courant  $I_d$  en fonction de  $V_g$  à  $T=300$  k et  $V_d=0,1$ V

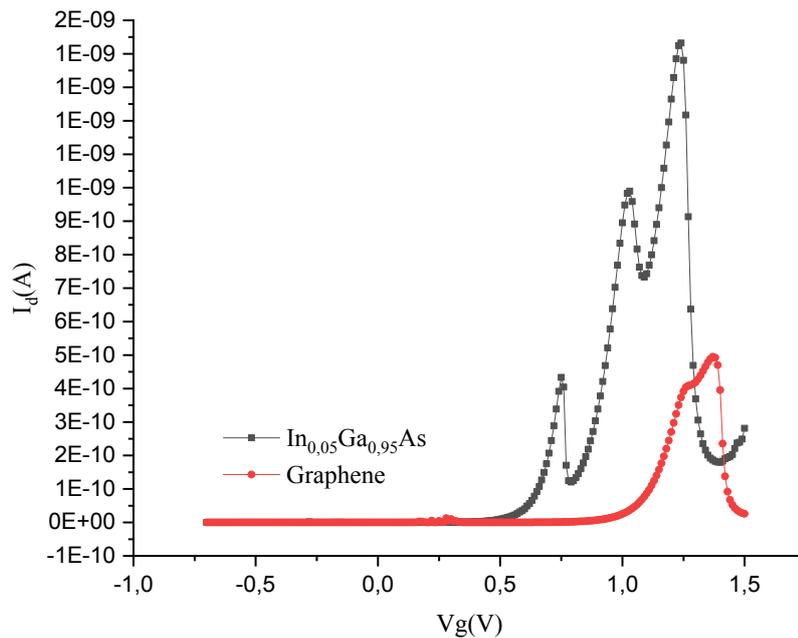
L'effet du dopage est aussi interpellé afin de voir son effet sur le courant  $I_d$  représenté sur la figure IV.9. Par variation du dopage  $N_d$ , on observe que le courant varie, nous constatons une augmentation du courant avec l'augmentation du dopage, parce que la résistivité des semiconducteurs diminue avec l'augmentation de la concentration des porteurs.



**Figure IV.9 : L'effet de l'augmentation du dopage des couche de nanotransistor sur la valeur du courant  $I_d$  en fonction de  $V_g$  à  $T=300$  k et  $V_d=0.1$ V.**

On remarque que l'augmentation du dopage influence positivement le courant et cela est correcte car il permet une densité électronique à améliorer les caractéristiques du SET.

Comme déjà annoncée, le e but d'utiliser le graphène est d'améliorer les performances du nanotransistor SET, alors qu'en comparant son effet vis-à-vis la structure étudiée dans le cadre d'un master 2022[43] comme le représente la figure IV.10, on remarque que l'opposé est arrivé. Alors dans ce cas le graphène n'est pas le matériau le plus situable dans la structure SET base essentiellement sur le matériau GaAs et ses alliages, bien sûr dans les conditions prises dans ce travail.



**Figure IV.10 : Comparaison de l'effet du Graphène sur la caractéristique  $I_d$ - $V_g$  vis à vis la structure incluant l' $In_{0,05}Ga_{0,95}As$ .**

Pour mieux explorer son effet (graphène), on a introduit des nouvelles propriétés intrinsèques à ce matériau. Ces propriétés sont le gap d'énergie qui est égale  $0.67$  eV et les mobilités d'électrons et des trous sont respectivement  $5.27e4$  et  $4.82 e4$   $cm^2/Vs$  [78] pour le graphène évolué. Ainsi représenté sur la figure IV.11 même dans ces conditions le courant dans la structure à la présence de graphène ne semble pas varier que faiblement après une tension de grille de  $1.18$  V ce qui prouve que le Graphène dans ces conditions n'a pas un effet considérable.

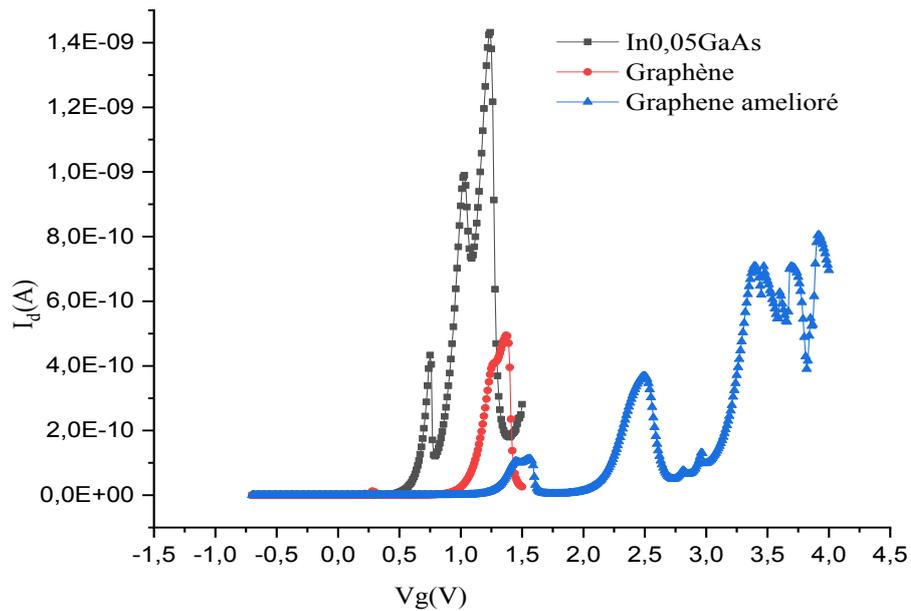


Figure IV.11 : Comparaison de l'effet du Graphène et Graphène évoluée sur la caractéristique  $I_d$ - $V_g$  vis-à-vis la structure incluant l' $\text{In}_{0,05}\text{Ga}_{0,95}\text{As}$ .

#### IV.4 Etude électrostatique de la structure à plusieurs grilles

Le nanotransistor SET dans cette partie est basé de plusieurs grilles selon le modèle expérimentale [75]. Ici, le Graphène est un tube (nano couche) et les grilles sont en Aluminium, comme présenté sur la figure IV.12.

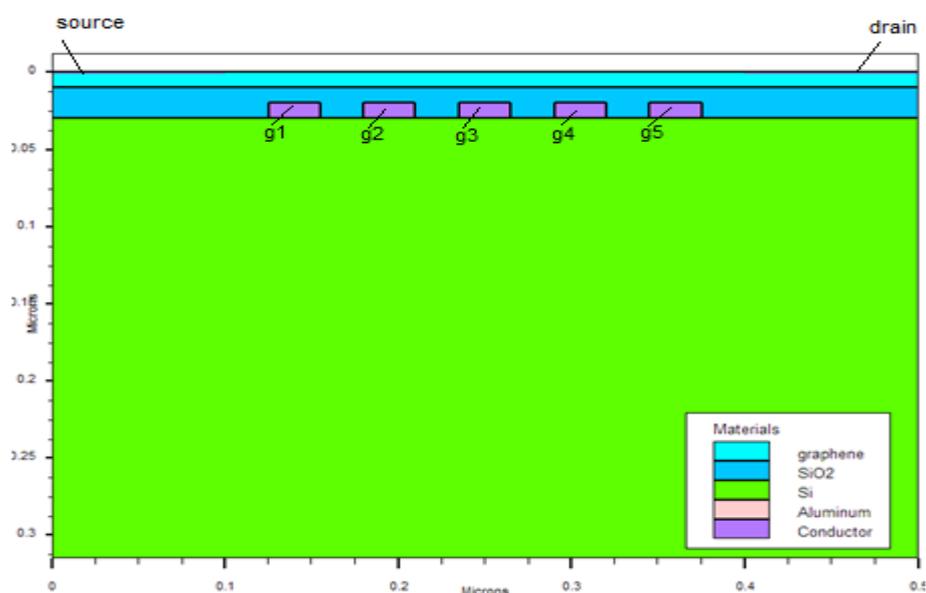


Figure IV.12 : Structure sous étude de SET en Graphène comme couche canal.

La variation de la bande de conduction est illustrée sur la figure IV.13 indiquant l'effet des deux grilles numéro 2 et 4 ainsi produisant le puits quantique qu'il est vide et très élevé, parce que les électrons confinés à côté de la source et du drain, donc ils ne sont pas des énergies suffisantes pour traverser les barrières.

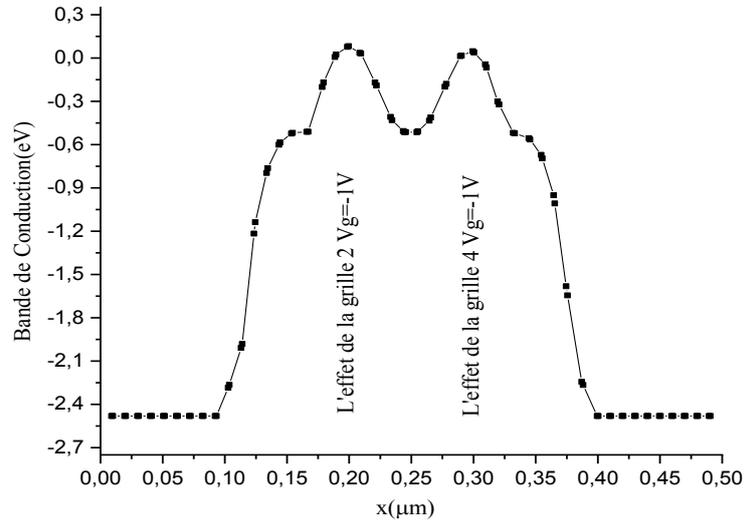


Figure IV.13 : bande de conduction sur le long de la structure du graphène.

Les fonctions d'ondes des trois premiers états d'énergie qui démontré que des électrons sont confiné dans la côté de la source et du drain comme voir sur la figure IV.14. Donc, on observe que les électrons accumulent où se trouve l'énergie minimale.

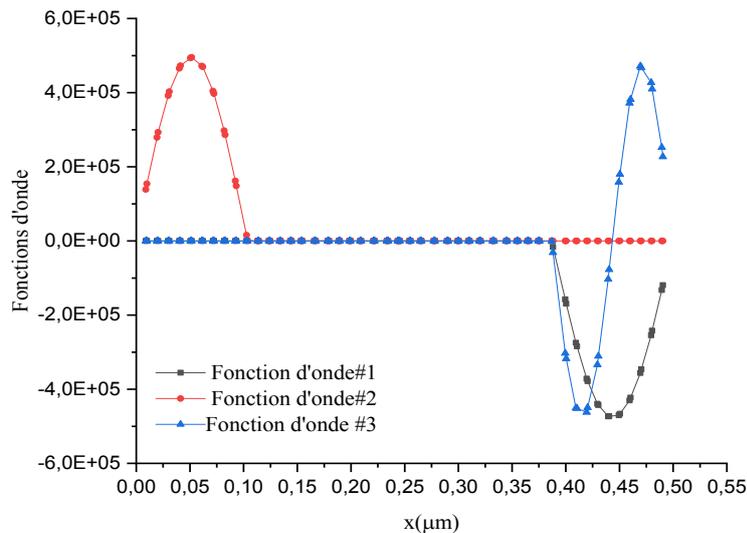


Figure IV 14 : Les fonctions d'ondes pour les trois premiers états énergétiques.

# Conclusion générale

## Conclusion générale

Les transistors à l'échelle nanométrique à un électron (SET single Electron transistor) sont des composants électroniques à un point quantique avec une ou plusieurs grilles. Dans cette étude la structure de nanotransistor d'une seule grille a été premièrement étudiée et l'influence de Graphène a été explorée sur plusieurs propriétés (dopage et  $E_g$ , mobilités) et paramètres ( $V_d$ ,  $V_g$ ). L'application de la tension de grille produit un puit quantique entre deux barrières pour le mouvement des électrons ou ces derniers préfèrent vers les côtes drain et source où l'énergie  $E_c$  est minimale. La tension de grille approfondit le puit quantique en allure croissante qui introduit la concentration élevée des électrons dans les niveaux profonds.

Le dopage des couches a grandement influencé la sensibilité du courant  $I_d$  à la tension grille, où il a été constaté que le courant drain ne commence de changer qu'à  $v_g$  égale à 1.18V quand le canal à électron est ouvert. Ce phénomène est de plus en plus remarquable en augmentant le dopage des couches ainsi que de la couche Graphène. Nous avons changé la taille de la couche du graphène, (largeur et épaisseur) à basse tension du drain, nous avons constaté qu'il existe une relation directe entre l'augmentation de la taille et l'augmentation du courant.

L'effet de Graphène comme matériau de canal en cette filière (GaAs et ses alliages AlGaAs et InGaAs) sur la variation du courant de drain ( $I_d$ ), par rapport à la tension de grille a été comparé à celui de In<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>As pour la structure nanotransistor à un électron (une seule grille) et la surprise était que l'influence de Graphène est très inférieure à celui de In<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>As même en introduisant des propriétés intrinsèques récentes au Graphène comme l'énergie de gap de 0.67eV et les hautes mobilités des électrons et des trous de  $5.27 \times 10^4$  et  $4.82 \times 10^4$  cm<sup>2</sup>/Vs respectivement.

Comme deuxième partie, la structure du transistor SET à cinq grilles a été explorée. Cette structure a comme canal le graphène et les grilles sont tous en Aluminium. La tension de la grille numéro 02 et 04 a construit deux barrières dans la structure où les électrons sont confinés entre eux. Cela était vu en termes de la bande de conduction

Enfin, les fonctions d'ondes des états énergétiques étaient illustrées afin de donner une quantification des états énergétiques du système et nous avons constaté que les électrons sont accumulés où se trouvent l'énergie minimum.

# **BIBLIOGRAPHIE**

## Bibliographie

- [1] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... & Firsov, A. A. (2004). *Electric field effect in atomically thin carbon films*. *science*, 306(5696), 666-669.
- [2] Djoudi, S. (2021). *Etude des propriétés physiques du graphène; Calcul ab initio (Doctoral dissertation, Faculté des Sciences et Technologies)*.
- [3] [www.materialconnexion.com](http://www.materialconnexion.com).
- [4] Brisebois, P. (2017). *Synthèse et fonctionnalisation chimique de l'oxyde de graphène: préparation de matériaux hybrides à base d'oxyde de graphène et de nanoparticules métalliques*.
- [5] Ouazar, R. Lahoum, S.(2017/2018). *Le graphène et ses applications en électronique, universite mouloud mammeri detizi-ouzou*
- [6] Baghdadi farida.( 2015/2016). *Master Académique, Etude de graphène et de GrFET , Université MouloudMammeri de Tizi-Ouzou*.
- [7] Garaj, S., Hubbard, W., & Golovchenko, J. A. (2010). *Graphene synthesis by ion implantation*. *Applied physics letters*, 97(18).
- [8] N. Boudra, H. Hachech. (2018). « *Caractérisation de l'oxyde du graphène, » Université de Bejaïa*
- [9] Priyadarsini, S., Mohanty, S., Mukherjee, S., Basu, S., & Mishra, M. (2018). *Graphene and graphene oxide as nanomaterials for medicine and biology application*. *Journal of Nanostructure in Chemistry*, 8, 123-137.
- [10] Meza, J. A. M. (2013). *Propriétés structurales et électroniques du graphène sur SiC (0001) étudiées par microscopie combinée STM/AFM (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI; Université nationale d'ingénierie (Lima))*.
- [11] Wallace, P. R. (1947). *The band theory of graphite*. *Physical review*, 71(9), 622.
- [12] Varchon, F. (2008). *Propriétés électroniques et structurales du graphène sur carbure de silicium (Doctoral dissertation, Université Joseph-Fourier-Grenoble I)*.
- [13] Allard, A. (2011). *Etude ab initio des phonons du graphene sur substrats métalliques (Doctoral dissertation, Lille I)*.
- [14] Varchon, F. (2008). *Propriétés électroniques et structurales du graphène sur carbure de silicium (Doctoral dissertation, Université Joseph-Fourier-Grenoble I)*.

- [15] *Messaoudene, I., Hammadou, L., Fates, R. E., & Remmouche, R. (2019). Modélisation analytique du GFET (Doctoral dissertation, Université de Jijel).*
- [16] *Zidi, M. (2014). Étude électrochimique et fonctionnalisation du graphène: inhibition contre la corrosion.*
- [17] *Kahina, H. (2017). mémoire, Etude du graphène et du Gr FET, Universités mouloud mammeri de tizi-ouzou*
- [18] *Bharech, S., & Kumar, R. (2015). A review on the properties and applications of graphene. J. Mater. Sci. Mech. Eng, 2(2025), 70-73.*
- [19] *Tung, V. C., Allen, M. J., Yang, Y., & Kaner, R. B. (2009). High-throughput solution processing of large-scale graphene. Nature nanotechnology, 4(1), 25-29.*
- [20] *Hmam, O. (2017). L'effet de la polycristallinité du cuivre sur la croissance du graphène en présence des molécules azotées et fabrication des transistors à base de graphène N-dopé.*
- [21] *Meng, N. (2011). Fabrication et caractérisation de transistors à base de Graphène Nano Ruban en vue d'application haute fréquence (Doctoral dissertation, Lille 1).*
- [22] *Hass, J., De Heer, W. A., & Conrad, E. H. (2008). The growth and morphology of epitaxial multilayer graphene. Journal of Physics: Condensed Matter, 20(32), 323202.*
- [23] *Clavel, M. (2011). Etude de l'intégration de transistors à canal en graphène épitaxié par une technologie compatible CMOS (Doctoral dissertation, Université de Grenoble).*
- [24] *HMILI, A., & HARIZI, M. (2020). Étude numérique des propriétés électroniques des nanostructures de graphène (Doctoral dissertation, Université laarbi tebessi tebessa)*
- [25] *Milovanović, S. (2017). Electronic transport properties in nano-and micro-engineered graphene structures (Doctoral dissertation, University of Antwerp).*
- [26] *Hug, H., Bader, M., Mair, P., & Glatzel, T. (2014). Biophotovoltaics: natural pigments in dye-sensitized solar cells. Applied Energy, 115, 216-225.*
- [27] *Chorro, M. (2008). Systemes unidimensionnels de fullerenes C60 et C70 confinés dans les nanotubes de carbone: transformations structurales et dynamique (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI).*
- [28] *Averin, D. V., & Likharev, K. K. (1986). Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions. Journal of low temperature physics, 62, 345-373.*
- [29] *Drexler, K. E. (1992). Nanosystems: molecular machinery, manufacturing, and computation. John Wiley & Sons, Inc..*

- [30] Kumar, A., & Dubey, D. (2013). *Single electron transistor: Applications and limitations. Advance in Electronic and Electric Engineering*, 3(1), 57-62.
- [31] Boudib, O. (2021). *Etude des propriétés électroniques dans le point quantique sous l'effet du champ magnétique (Doctoral dissertation, Université de mohamed kheider biskra)*.
- [32] Amiza, R., & Uda, H. (2005). *Single-electron transistors (SET): literature review. Journal of Engineering*.
- [33] Talbo, V. (2012). *Étude théorique du transport électronique dans les nanodispositifs à boîtes quantiques semiconductrices (Doctoral dissertation, Paris 11)*.
- [34] Trinh, F., Maelhot, F., & Calmon, F. (2013). *Simulation d'un réseau de neurones à l'aide de transistors set*.
- [35] *Physique quantique : [http://www.physiquequantique.wikibis.com/blocage\\_de\\_coulomb.php](http://www.physiquequantique.wikibis.com/blocage_de_coulomb.php)*
- [36] Bounouar, M. A. (2013). *Double-Gate Single Electron Transistors: Modeling, Design & Evaluation of Logic Architectures Transistors Mono-Électroniques Double-Grille: Modélisation, Conception & Évaluation d'Architectures Logiques*.
- [37] Averin, D. V., & Likharev, K. K. (1986). *Coulomb blockade of single-electron tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions. Journal of low temperature physics*, 62, 345-373.
- [38] El Hajjam, K. (2015). *Ingénierie de jonctions tunnel pour améliorer les performances du transistor mono-électronique métallique (Doctoral dissertation, INSA de Lyon; Université de Sherbrooke (Québec, Canada))*.
- [39] B.Oumaima, B. Yousra .(2022).*Caractérisation le courant (I-V) de transistor à un électron (SET), mémoire de master, Université Med Khider-Biskra*
- [40] Trinh, F., Maelhot, F., & Calmon, F. (2013). *Simulation d'un réseau de neurones à l'aide de transistors set*.
- [41] Bennabi, M. (2009). *Etude et simulation d'un nano-mosfet double grille (Doctoral dissertation, ali benamara Abdelkader)*.
- [42] Venugopal, R., Paulsson, M., Goasguen, S., Datta, S., & Lundstrom, M. S. (2003). *A simple quantum mechanical treatment of scattering in nanoscale transistors. Journal of Applied Physics*, 93(9), 5613-5625.
- [43] Venugopal, R., Ren, Z., Datta, S., Lundstrom, M. S., & Jovanovic, D. (2002). *Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches. Journal of Applied physics*, 92(7), 3730-3739.

- [44] *Blakemore, J. S. (1982). Approximations for Fermi-Dirac integrals, especially the function  $F_{12}(\eta)$  used to describe electron density in a semiconductor. Solid-State Electronics, 25(11), 1067-1076.*
- [45] *Ihn, T., Güttinger, J., Molitor, F., Schnez, S., Schurtenberger, E., Jacobsen, A., ... & Ensslin, K. (2010). Graphene single-electron transistors. Materials today, 13(3), 44-50.*
- [46] *Wallace, P. R. (1947). The band theory of graphite. Physical review, 71(9), 622.*
- [47] *Ando, T. (2005). Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes. Journal of the Physical Society of Japan, 74(3), 777-817.*
- [48] *Tarmoul Mohamed. (2014). Etude théorique d'un transistor à canal en graphène, mémoire de fin d'Etude , universite mouloud mammeri detizi-ouzou*
- [49] *Han, M. Y., Özyilmaz, B., Zhang, Y., & Kim, P. (2007). Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. Physical review letters, 98(20), 206805.*
- [50] *Nakada, K., Fujita, M., Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M. S. (1996). Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. Physical Review B, 54(24), 17954.*
- [51] *Han, M. Y., Özyilmaz, B., Zhang, Y., & Kim, P. (2007). Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. Physical review letters, 98(20), 206805.*
- [52] *Chen, Z., Lin, Y. M., Rooks, M. J., & Avouris, P. (2007). Graphene nano-ribbon electronics. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 40(2), 228-232.*
- [53] *Xia, F., Farmer, D. B., Lin, Y. M., & Avouris, P. (2010). Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature. Nano letters, 10(2), 715-718.*
- [54] *Zhou, S. Y., Gweon, G. H., Fedorov, A. V., First, P. D., De Heer, W. A., Lee, D. H., ... & Lanzara, A. (2007). Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. Nature materials, 6(10), 770-775.*
- [55] *Lamia, M. (2018). Simulations d'une diode Schottky à base d'AlGaAs (Doctoral dissertation, Université Mouloud Mammeri).*
- [56] *Nouicer, Y., Harrouche, N., Fates, R. E., & Remmouche, R. (2022). Etude de contact métal: graphène dans les dispositifs électroniques à base de graphène (Doctoral dissertation, Université de Jijel).*
- [57] <https://www.graphenea.com/pages/what-are-graphene-field-effect-transistors-gfets>
- [58] *Davenport, B., & Michael, S. (2004, June). Advanced thermophotovoltaic cells modeling, optimized for use in radioisotope thermoelectric generators (RTGs) for Mars and deep space missions. In 22nd AIAA International Communications Satellite Systems Conference & Exhibit 2004 (ICSSC) (p. 3271).*

- [59] *ATLAS User's Manuel.*(2011). *Device simulation software, SILVACO International, California.*
- [60] *Atlas User's Manual.*(2005). *Device Simulation Software, Santa Clara.*
- [61] *Panayiotis Michalopoulos, .*( 2002). *A novel approach for the development and optimization of state-of-the-art photovomtique devices using silvaco, these de master, Monterey California*
- [62] *B.Garcia, Jr. (2007). Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using silvaco atlas, California*
- [63] *Manual, A.U.s.*(2012). *Silvaco International, Santa Clara, CA, USA.*
- [64] *S. Daniel .*(2012). *Modeling radiation effect on a triple junction solar cell using silvaco atlas, Thesis Naval postgraduate school Monterey California*
- [65] *J. Lavery.*(2008).*Quantum tunneling model of a P-N junction in silvaco, Thesis Naval postgraduate school Monterey California*
- [66] *Beddlafi, Y.*( 2013). *Modélisation d'un transistor MESFET en GaAs en utilisant le simulateur atlas-silvaco*
- [67] *Mordi, N.*(2018). *Simulation, modélisation et caractérisations électriques des transistors HEMT's à base de composés III-V nitrurés , Doctoral dissertation*
- [68] *Rahal, M, Simulation des effets de radiation sur le détecteur des particules à base de silicium par le logiciel «TcadSilvaco», these de mémoire ,Université Med Khider*
- [69] *Atlas user's manuel, device simulation software, Silvaco international, california*
- [70] *Chenaf,K , mémoire de master .*(2021). *Study of graphene -based solar cells by simulation, mémoire de master ,2021, Université Med Khider*
- [71] *Mansour, H.*(2015).*Simulation numérique d'une cellule solaire à hétérojonction HIT en silicium par le logiciel TCAD-Silvaco , these de master*
- [72] *Bezziou, F.*(2013). *Etude par simulation numérique d'une cellule solaire à homojonction (GaAs) et à hétérojonction (Ga0. 3Al0. 7As/GaAs) par le logiciel TCAD-Silvaco , thèse de master*
- [73] *Atlas user's manuel, device simulation software, Silvaco Internationa*
- [74] *Kim, S.*(2018) .*Effet de la fraction molaire sur la cellule solaire en InGaN.*
- [75] *Nadj-Perge, S. (2010). Single spins in semiconductor nanowires.*
- [76] *Dideban, D., & Karbalaei, M. (2019). Comparison of the I–V characteristics of a topological insulator quantum well resonant tunneling transistor and its conventional counterpart: A TCAD simulation study. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 128, 374-377.*
- [77] *Atlac silvaco, 2019*
- [78] *Wang, C., Liu, X., Wang, Z., Zhao, M., He, H., & Zou, J. (2018). Electronic, optical property*

*and carrier mobility of graphene, black phosphorus, and molybdenum disulfide based on the first principles. Chinese Physics B, 27(11), 118106.*

## ملخص

الترانزستور أحادي الإلكترون الذي يحتوي على مادة الغرافين هو أحد العناصر الجديدة حالياً، والذي يستعمل في العديد من المجالات مثل الإلكترونيات، أجهزة الاعلام الالي .... الخ. هدفنا في هذه العمل هو الدراسة العددية للخصائص الالكترونية لترانزستور احادي الإلكترون من الغرافين. بالإضافة الي دراسة الوسائط الفيزيائية والهندسية التي تؤثر على التيار باستخدام برنامج المحاكاة أطلس – سيلفاكو.

قمنا بحل معادلتنا شرودنجر- بواسون بمساعدة دوال Green غير المتوازنة (NEGF). حيث قمنا بحساب دوال الموجة، توزيع الكمون، مخطط الطاقة تحت تأثير جهد البوابة والمصرف، ثم حساب خصائص التيار للترانزستور (GSET) حيث دالة جهد البوابة تحت تأثير العوامل الفيزيائية والهندسية. فوجدنا ان التيار يزداد بزيادة جهد المصرف والتطعيم وكذلك بزيادة سمك وعرض طبقة الغرافين.

الكلمات المفتاحية:

الترانزستور أحادي الإلكترون , شرودنجر- بواسون , النقطة الكمومية, NEGF, GSET ,

## Résumé

Le transistor à un électron en graphène (GSET) est un nouveau dispositif actuel, il est utilisé dans plusieurs domaines comme électronique, informatique, ...etc. Le but de ce travail est de faire une étude numérique des propriétés électroniques de ce transistor en graphène. De plus, on a étudié les paramètres qui ont influencés sur le courant par le simulateur Atlas-Silvaco TCAD (Technical Computer Aided Design) . On a résolu les équations Schrödinger-Poisson, à l'aide du formalisme des fonctions de Green hors équilibre (NEGF). On a calculé les fonctions d'ondes, distribution de potentiel, diagramme d'énergie sous l'effet de la polarisation la tension de la grille et la tension drain-source. De plus, les caractéristiques du courant de transistor (GSET) en fonction de la tension du drain ou de la grille sous l'effet des paramètres physiques ou géométriques. On a obtenu que le courant augmente avec l'augmentation de la tension du drain, le dopage, la largeur et l'épaisseur de la couche du graphène.

## Mot clés :

Transistor à un électron en graphène, GSET, point quantique, Schrödinger-Poisson, NEGF.