

micro and nanoelectronics
microsystems
ambient intelligence
image chain
biology and health



2008

Simulation multi-échelle pour les dispositifs à nanotubes de carbone : de l'atome au circuit

François Triozon

cea

leti

MINATEC®

INSTITUT
CARNOT
CEA LETI

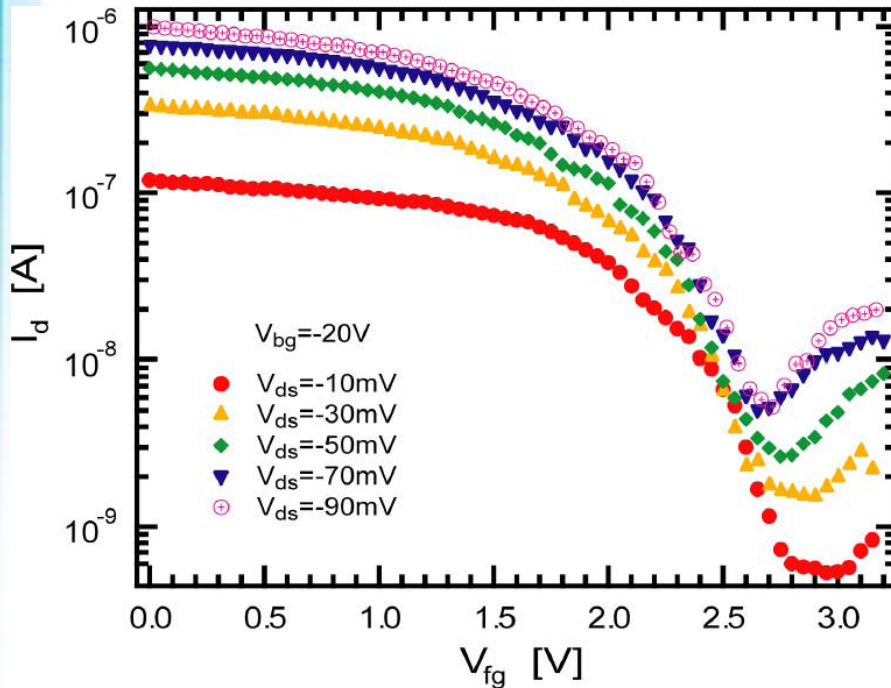
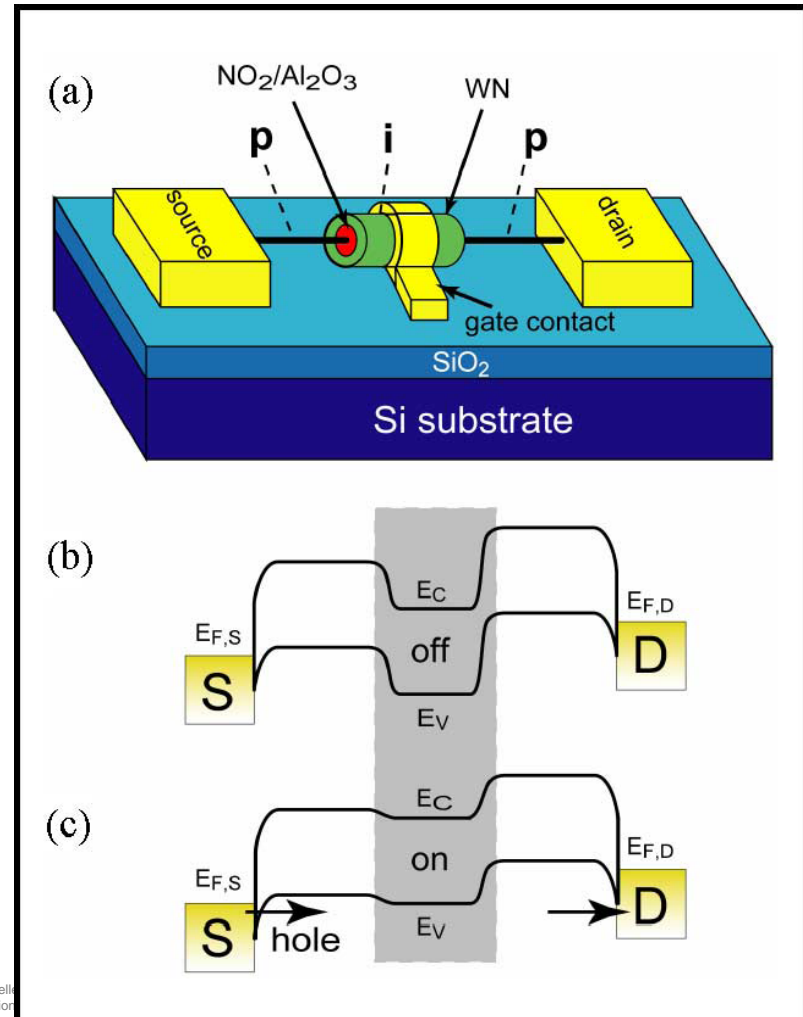
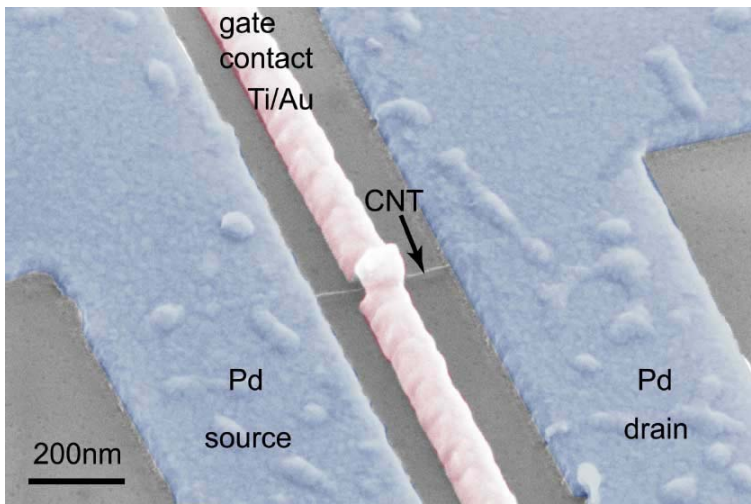


Résumé

- Contexte expérimental : transistors, capteurs
- Le projet ACCENT : de l'atome au circuit
- Modèles « compacts » pour la simulation de circuits
- Apport de simulations plus fines :
 - Monte Carlo
 - Transport quantique
 - Calculs *ab initio*
- Conclusion

Transistors à effet de champ (CNTFET)

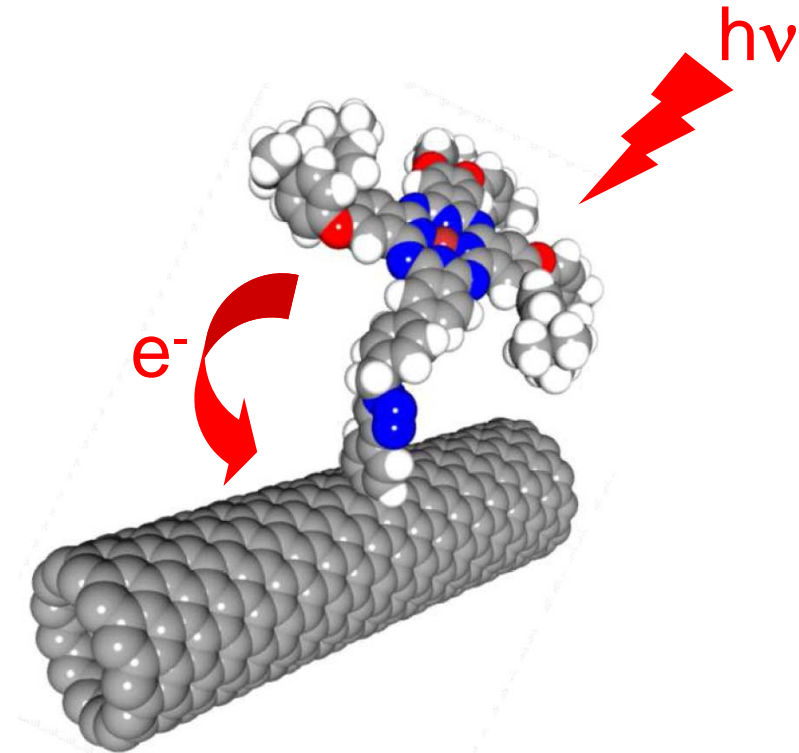
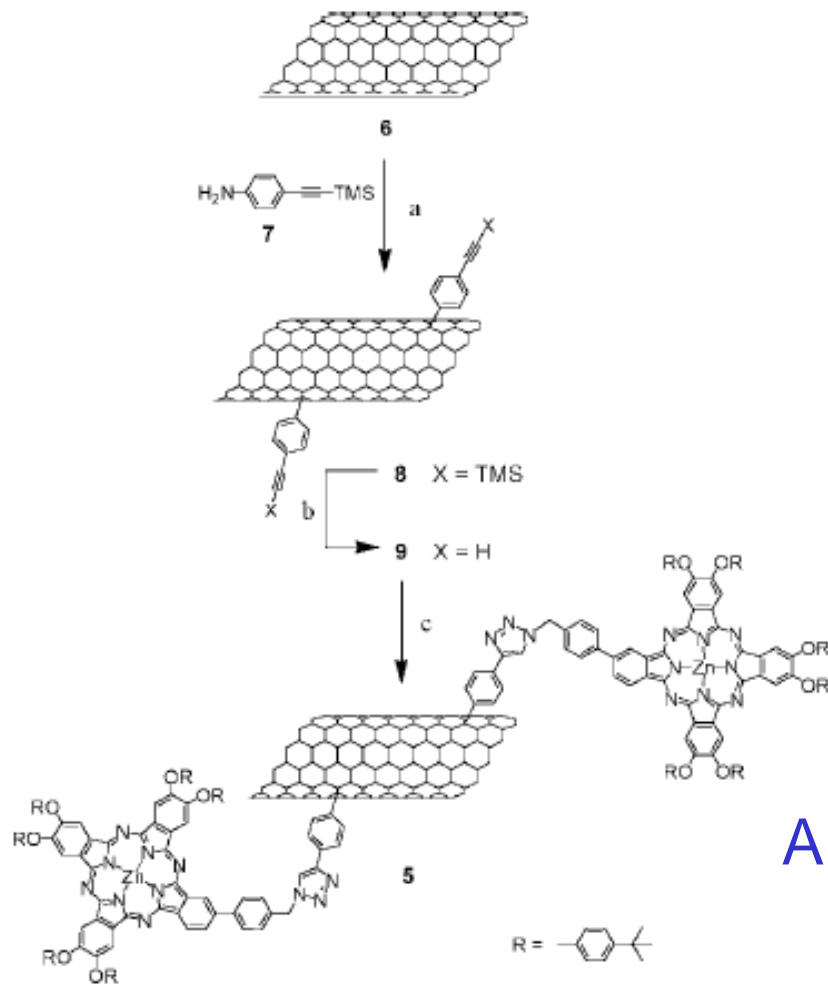
Z. Chen et al.,
IEEE Elec. Dev. Letters 29, 183 (2008)
« Gate-all-around » CNTFET



le ou partielle
reproductio

Nanotubes fonctionnalisés

Greffage covalent sur les nanotubes :



S. Campidelli et al.,
JACS Vol. 130, p. 11503 (2008)

Applications visées : détecteur
optique, photovoltaïque

Le projet ANR ACCENT

« Action Calcul Composants En NanoTubes »

Partenaires

CEA LETI

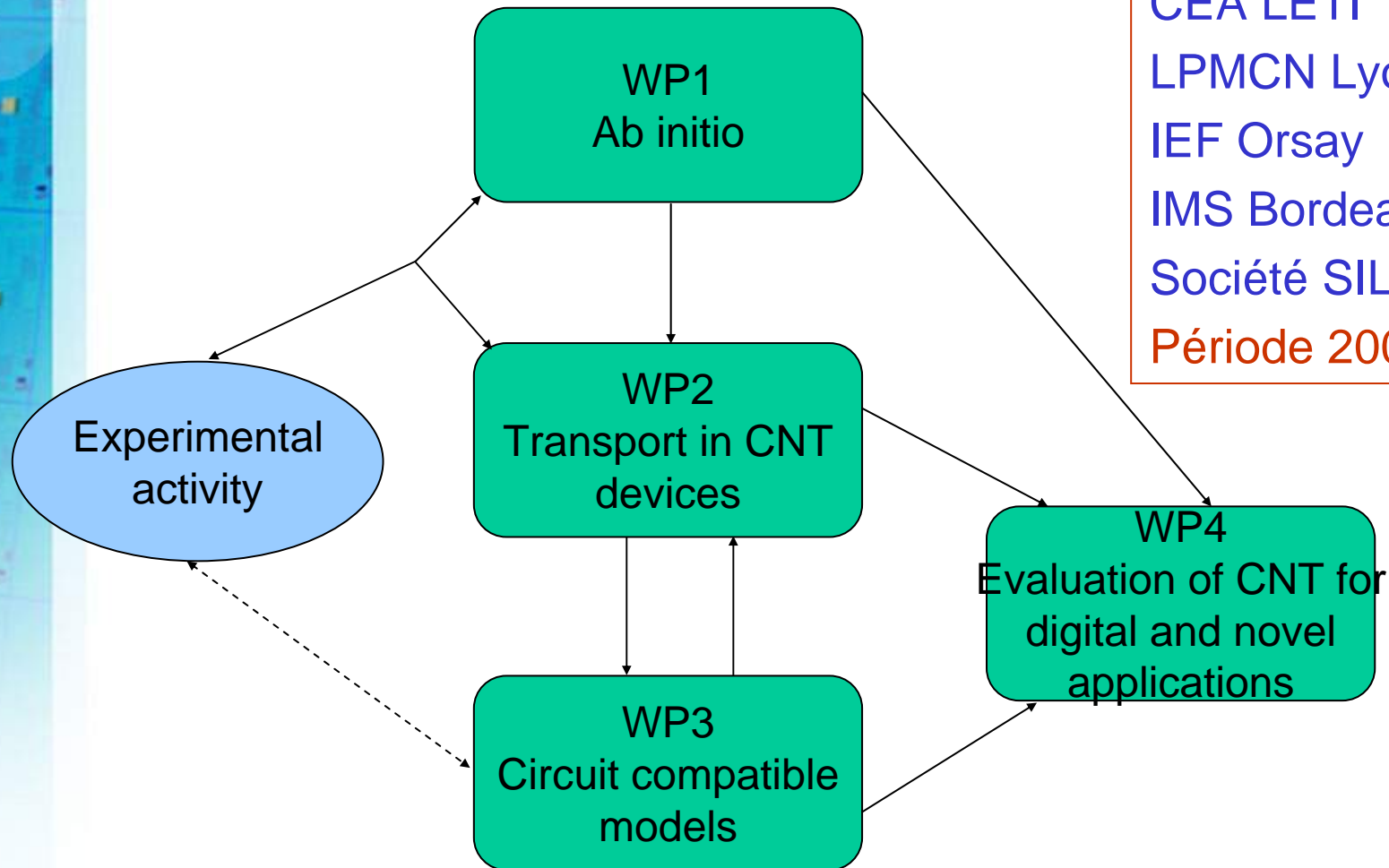
LPMCN Lyon

IEF Orsay

IMS Bordeaux

Société SILVACO

Période 2007-2009

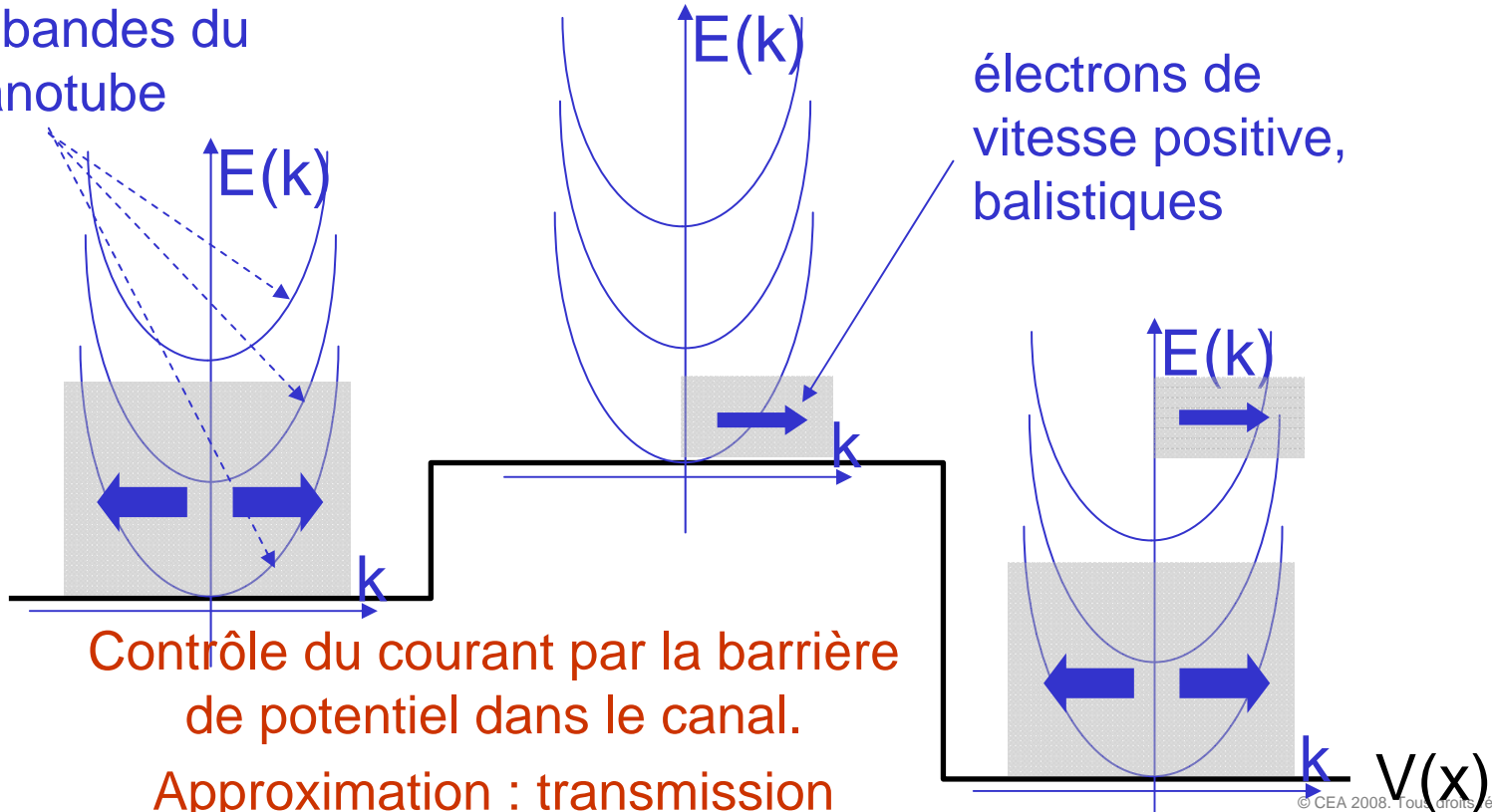


Modèle compact du CNTFET ohmique

nanotube semi-conducteur
accès dopés N



Sous-bandes du nanotube

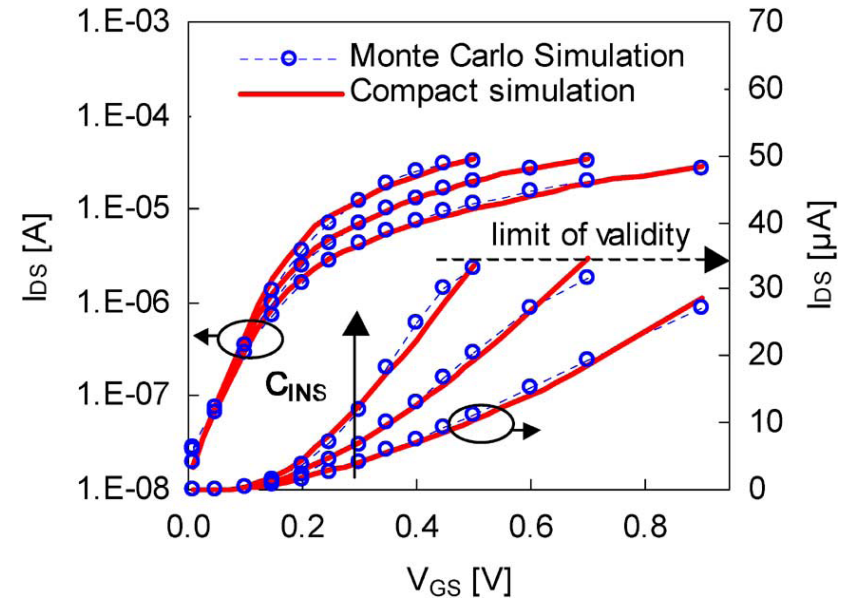
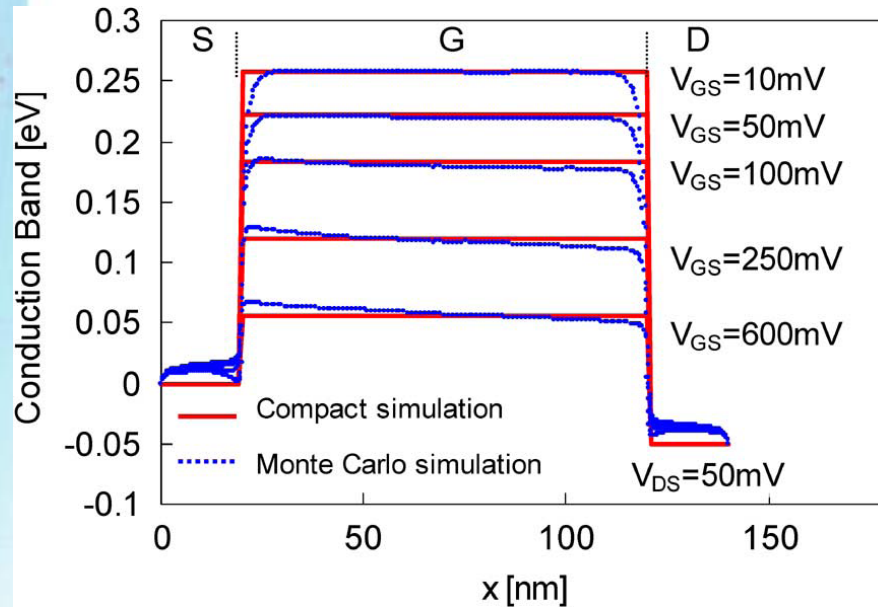


Contrôle du courant par la barrière de potentiel dans le canal.

Approximation : transmission parfaite au-dessus de la barrière.

Toute reproduction totale ou partielle sur quelque support que ce soit ou utilisation du contenu de ce document est interdite sans l'autorisation écrite préalable du CEA. All rights reserved. Any reproduction in whole or in part on any medium or use of the information contained herein is prohibited without the prior written consent of CEA.

Comparaison avec simulation Monte Carlo



S. Frégonèse et al., *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2008, 55, 1317-1327

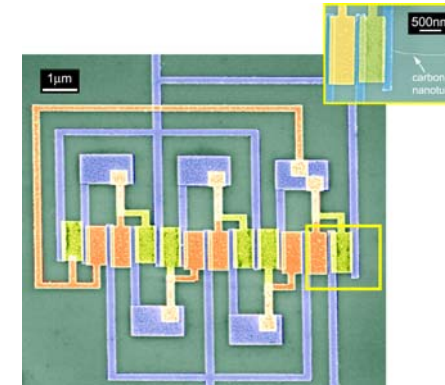
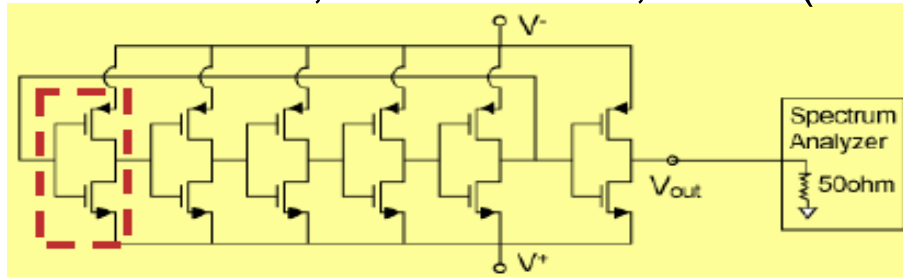
- Bons paramètres : énergies des sous-bandes, masses effectives
- Faible importance de l'interaction électron-phonon dans le canal

➔ **Modèle valide**

Simulation d'un oscillateur en anneau

Oscillateur à nanotube d'IBM.

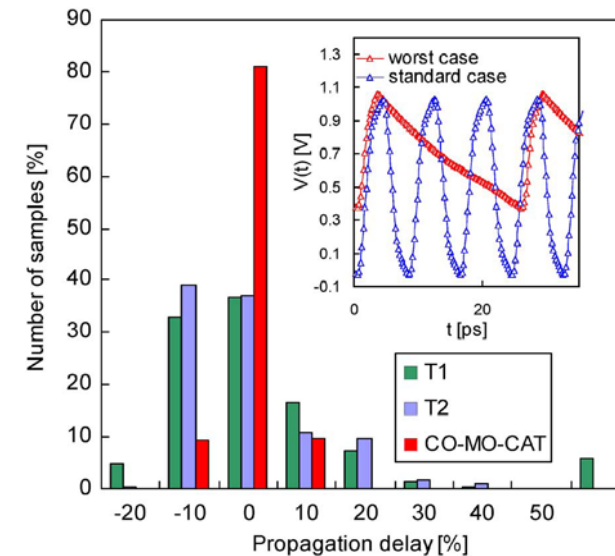
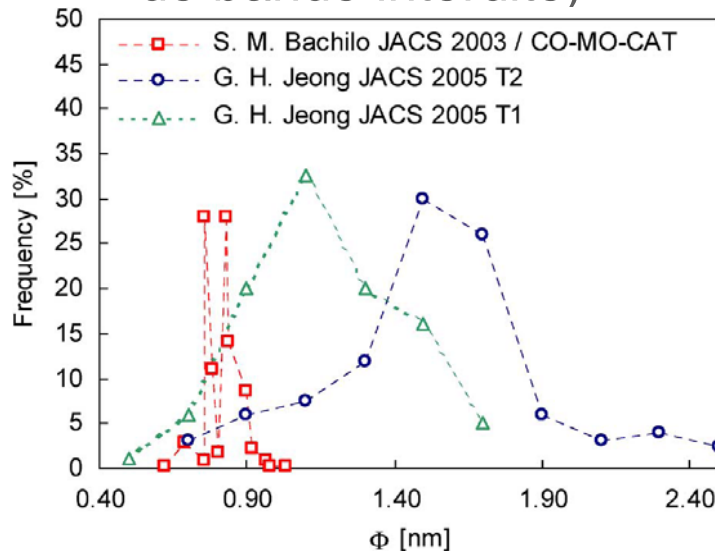
Z. Chen et al., Science 311, 1735 (2006).



Dispersion des diamètres des nanotubes (donc des largeurs de bande interdite)



Dispersion des performances de l'oscillateur :

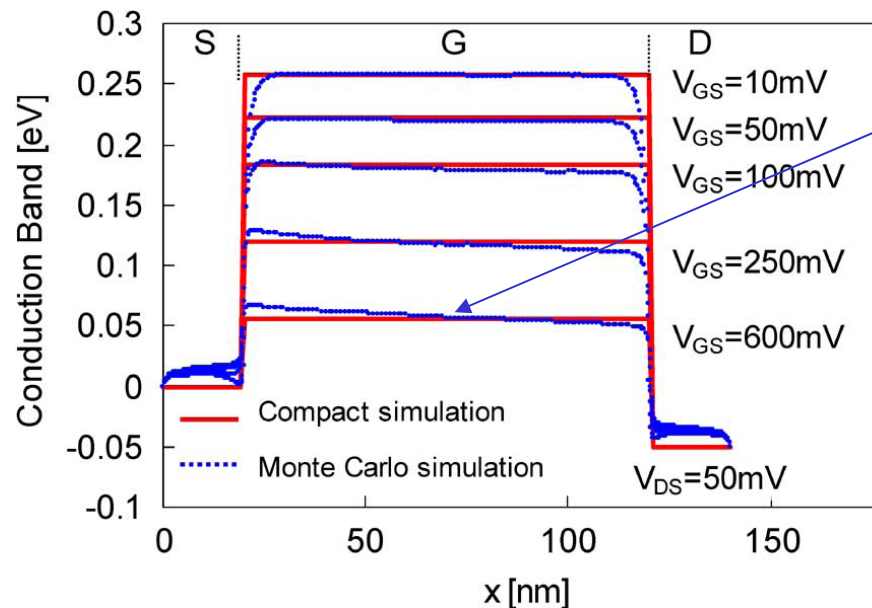


S. Frégonèse et al., IEEE Transactions on Electron Devices, 2008, 55, 1317-1327

Simulation Monte Carlo des transistors

- Résolution de l'équation de Boltzmann du transport semi-classique par mouvements aléatoires de porteurs.
- Facilité pour **inclure tous types d'interactions** : impuretés, couplage électron-phonon.
- Possibilité de faire du transport quantique (formalisme de Wigner)

Exemple :



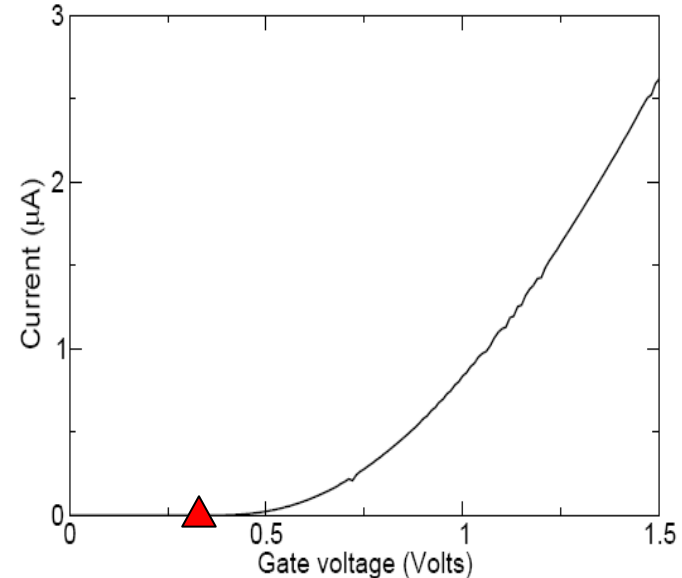
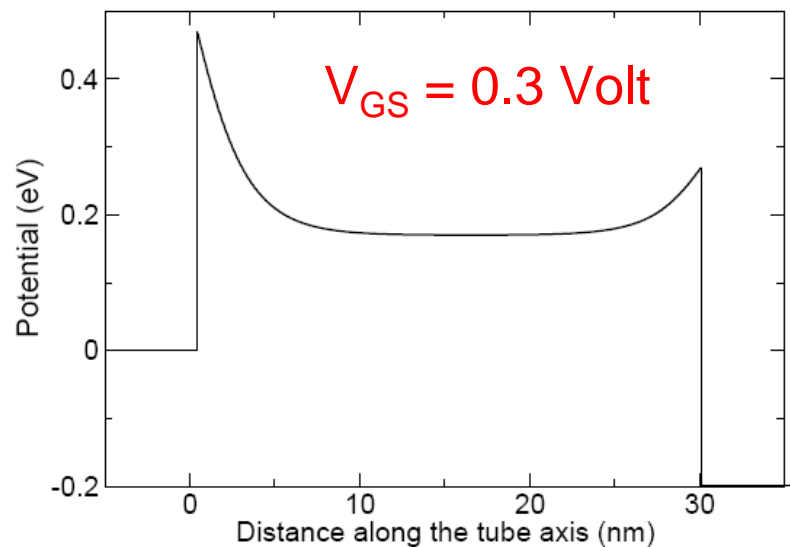
chute de potentiel
 dans le canal,
 due à l'interaction
 électron-phonon

Simulation quantique des transistors

- Formalisme des **fonctions de Green hors-équilibre**. Résolution de Schrödinger/Poisson couplées.
- Hamiltoniens de **liaisons fortes** + ou – précis (selon le nombre d'orbitales atomiques considéré)
- Prise en compte de l'effet tunnel, du confinement des fonctions d'ondes.

Exemple :

Simulation d'un CNTFET à contacts Schottky :

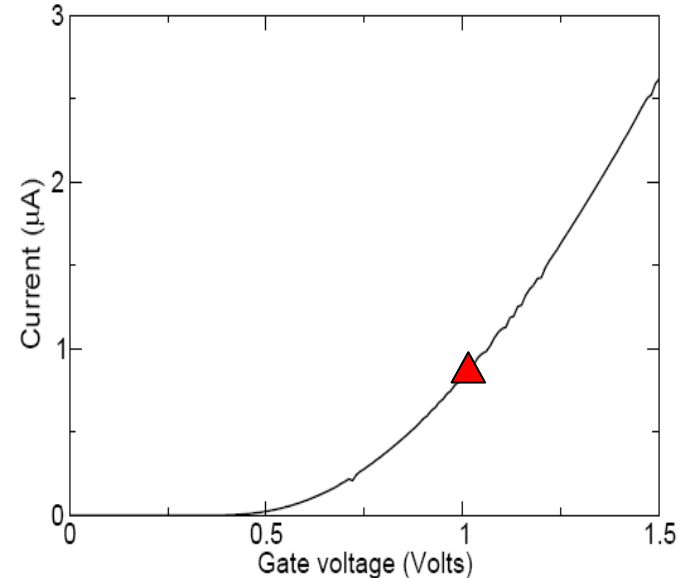
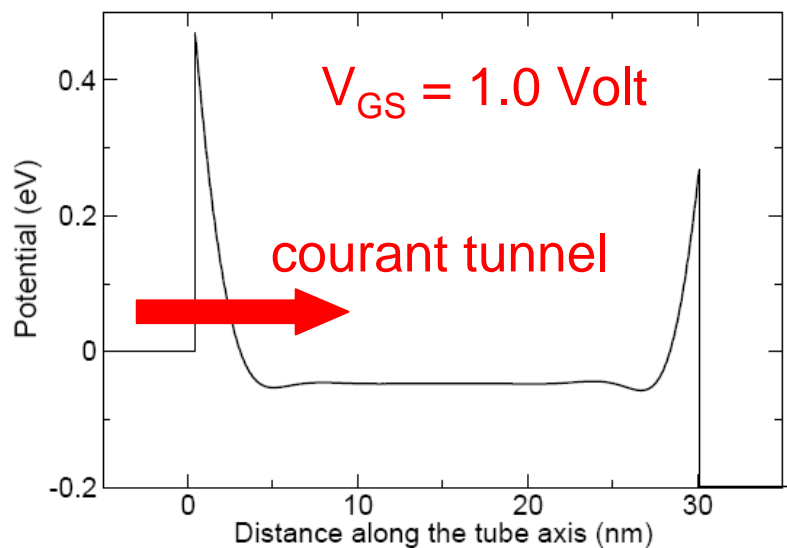


Simulation quantique des transistors

- Formalisme des **fonctions de Green hors-équilibre**. Résolution de Schrödinger/Poisson couplées.
- Hamiltoniens de **liaisons fortes** + ou – précis (selon le nombre d'orbitales atomiques considéré)
- Prise en compte de l'effet tunnel, du confinement des fonctions d'ondes.

Exemple :

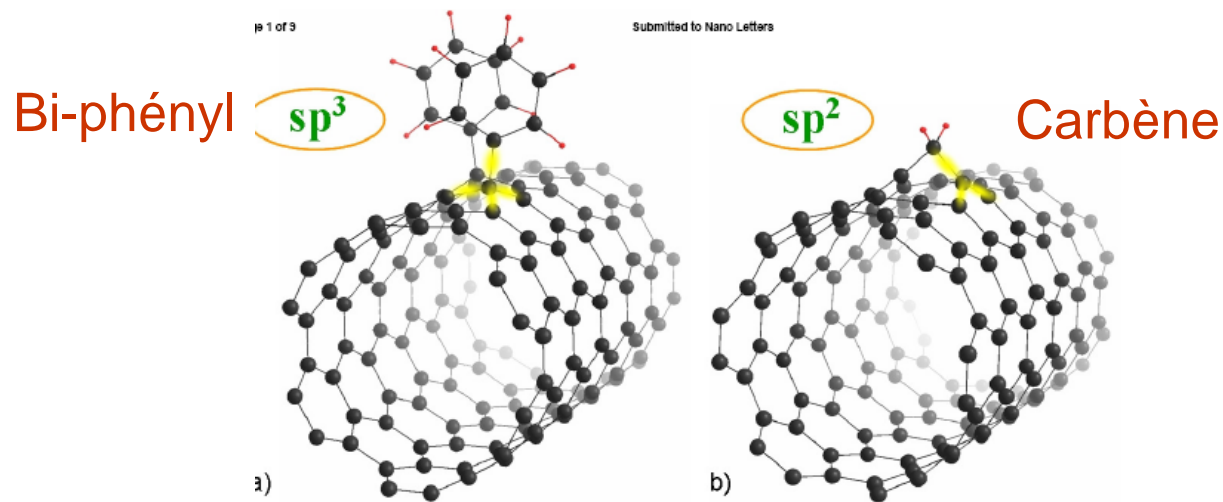
Simulation d'un CNTFET à contacts Schottky :



Apport des simulation *ab initio*

- Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).
- Calcule l'état fondamental (positions atomiques relaxées, densité électronique).
- Limité à des molécules ou mailles cristallines de quelques centaines d'atomes.

Exemple : nanotube fonctionnalisé



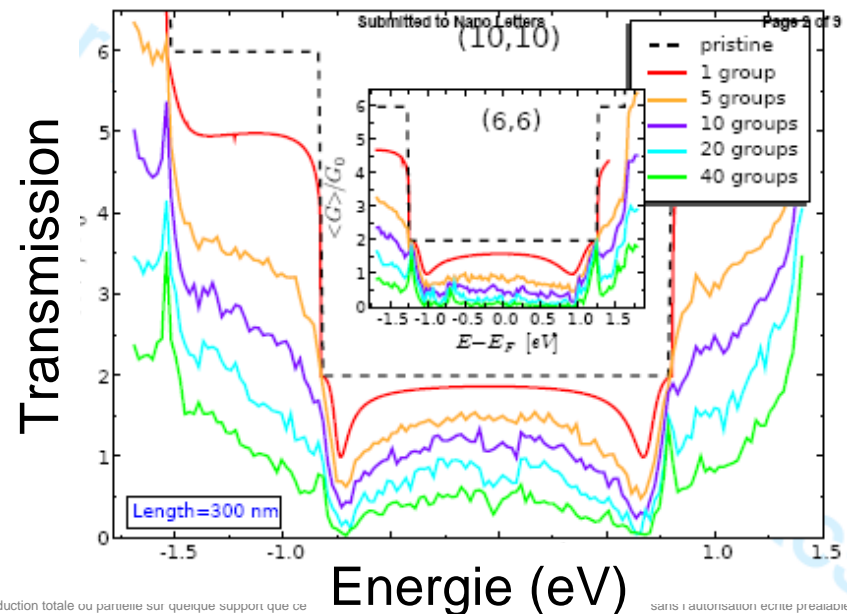
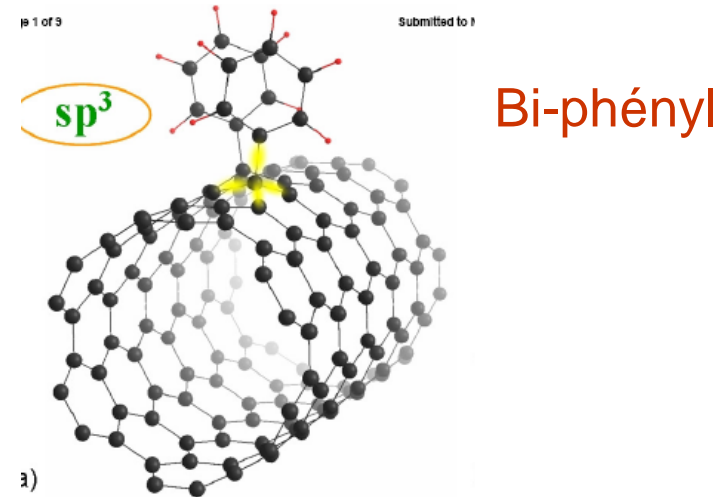
Lien *ab initio* → transport électronique

Calculs *ab initio*
avec le code SIESTA
(base d'orbitales atomiques)

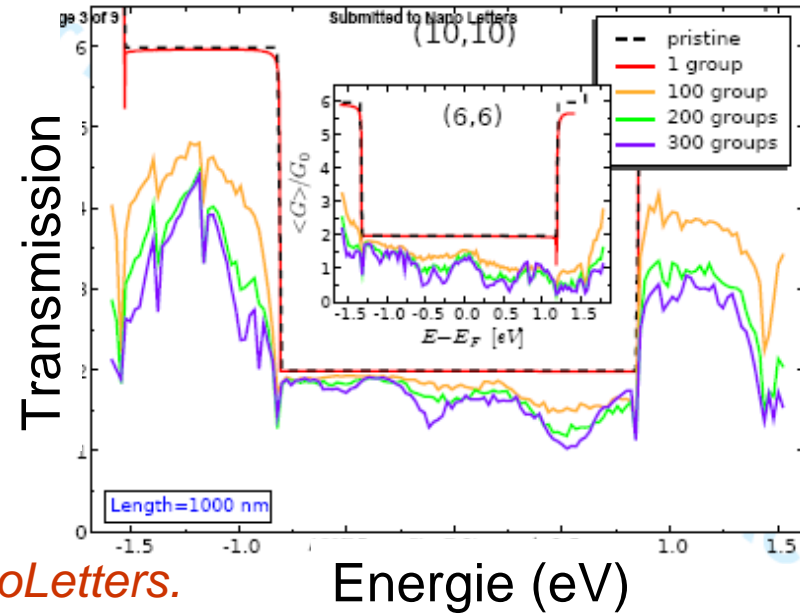
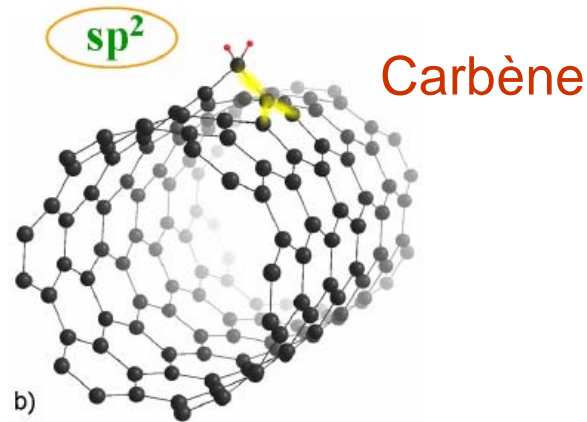


Transport quantique dans un
nanotube long avec plusieurs
groupes fonctionnels

A. Lopez-Bezanilla et al.,
soumis à NanoLetters.



Lien *ab initio* → transport électronique



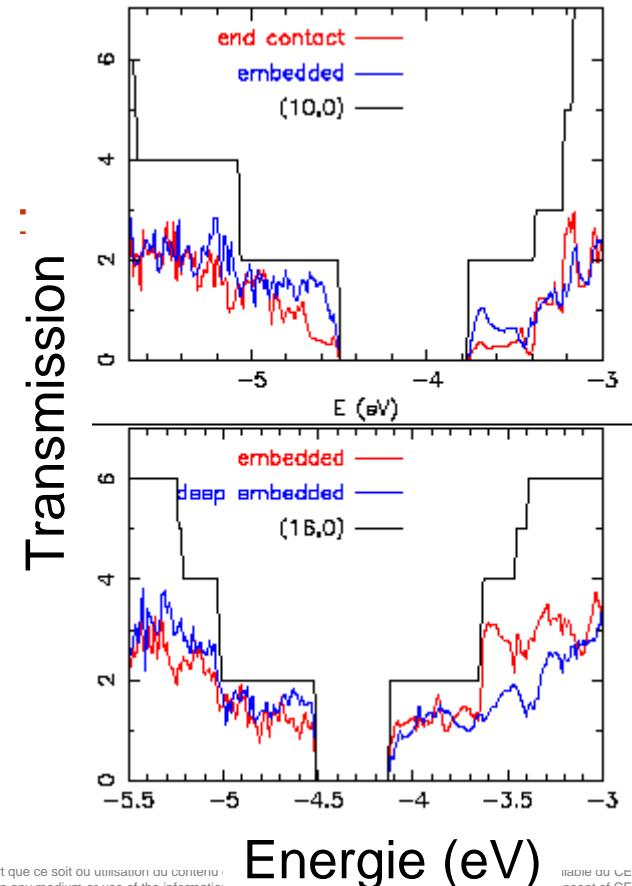
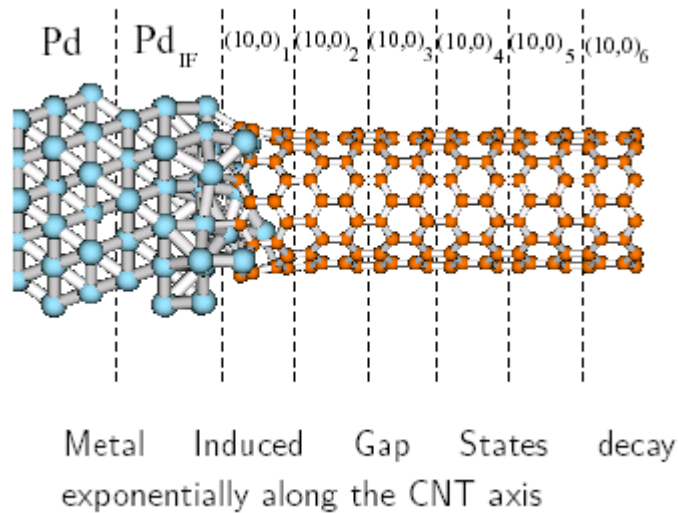
A. Lopez-Bezanilla et al., soumis à NanoLetters.

Symétrie sp^2 préservée → moindre dégradation de la conductance qu'avec les groupements phényles → meilleur pont moléculaire pour le greffage de molécules fonctionnelles ?

Contacts métal/nanotube

Expérimentalement, les contacts sont le plus souvent de type **Schottky**, sauf pour les nanotubes de grand diamètre (2 à 3 nm) contactés à du Palladium. Mal compris théoriquement.

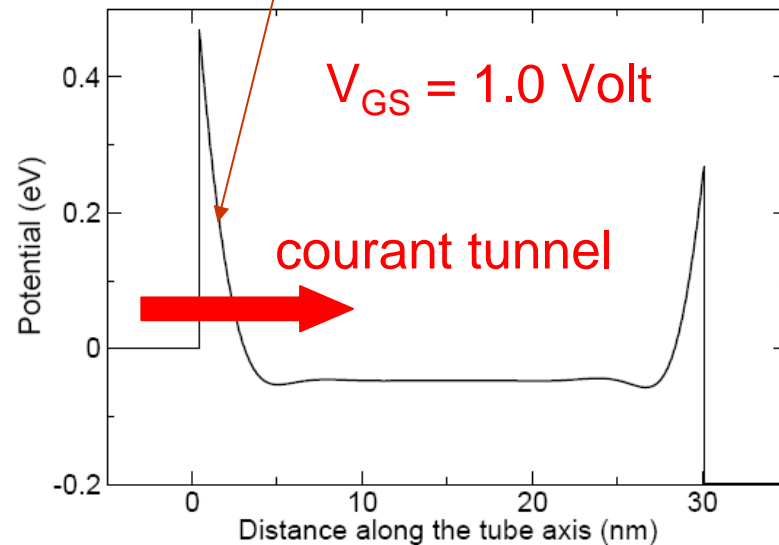
Etude *ab initio* des contacts palladium/nanotube (C. Adessi, X. Blase) :



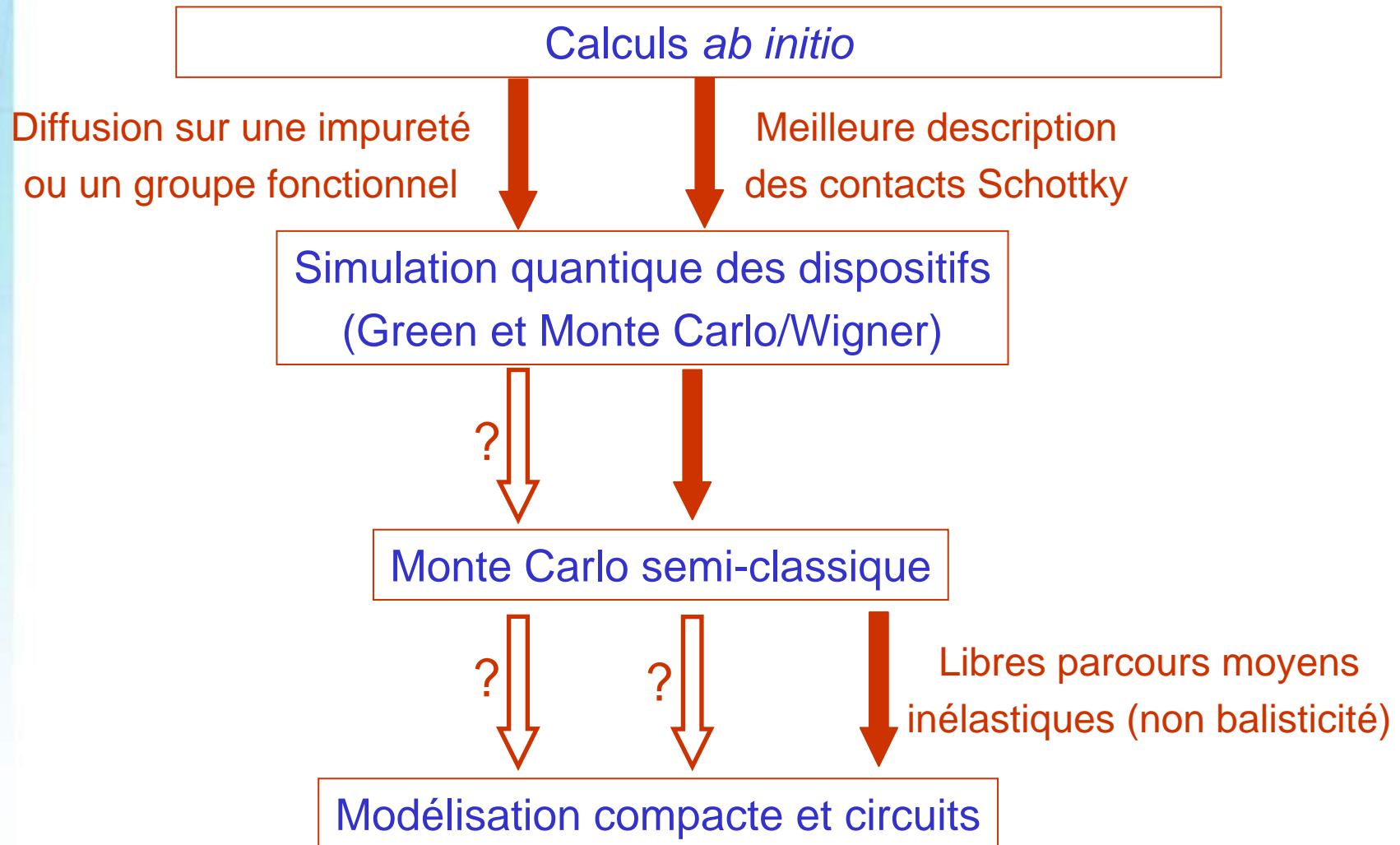
Contacts métal/nanotube

Travail en cours pour inclure les données *ab initio* des contacts dans la simulation du transistor.

Difficulté : **champ électrique fort** imposé par la grille près des contacts.
Les données *ab initio* (obtenues à champ extérieur nul) restent-elles utilisables ?



Fait-on du « Multi-échelle » ?



Collaborateurs

IEF Orsay

Philippe Dollfus
Sylvie Retailleau
Nguyen Huu Nha
Damien Querlioz

CEA Grenoble

Stephan Roche
Yann Michel Niquet
Alejandro Lopez-Bezanilla
Martin Persson
Gilles Le Carval

IMS Bordeaux

Cristell Maneux
Sébastien Frégonèse
Thomas Zimmer

Institut Néel Grenoble

Xavier Blase
LPMCN Lyon
Christophe Adessi

SILVACO DATA SYSTEMS Montbonnot

Eric Guichard
Bertrand Achard

micro and nanoelectronics
microsystems
ambient intelligence
biology and health
image chain



Innovation for industry

Loyalty
Entrepreneurship
Team work
Loyalty Innovation
Entrepreneurship
Team work
Innovation

