

Appel : ANR-PNANO 2006 Durée : 3 ans (2007 – 2009)

Résumé : Le but de ce projet est la simulation multi-échelle des transistors à nanotubes de carbone. Les compétences des partenaires couvrent toutes les échelles de simulation, de l'échelle atomique jusqu'aux circuits électroniques impliquant quelques transistors. Un enjeu important est d'établir des passerelles entre ces techniques complémentaires. Les méthodologies de simulation les plus fines sont utilisées pour étudier les effets quantiques liés aux dimensions nanométriques, le rôle des contacts métalliques, le couplage électron-phonon, ainsi que la modification des caractéristiques des transistors sous l'effet d'impuretés ou de molécules greffées. Les simulations sont confrontées aux résultats expérimentaux disponibles au CEA ou dans la littérature, et elles servent de base à l'élaboration de modèles compacts de dispositifs. Ces modèles permettent alors de simuler des circuits électroniques réalisant des fonctions élémentaires. Cela permettra d'évaluer le potentiel réel des transistors à nanotubes pour diverses applications : circuits logiques et analogiques, capteurs chimiques.

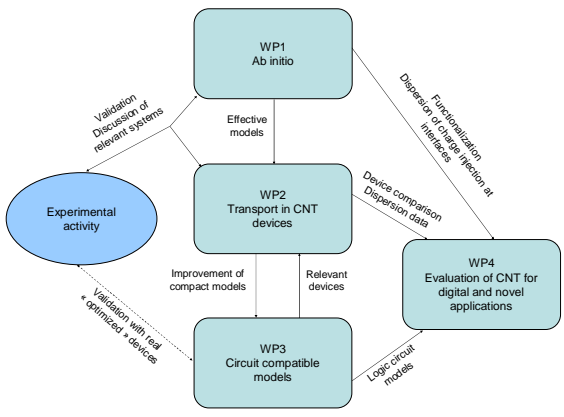


Partenaires et compétences pour le projet :

- LETI-MINATEC → **transport quantique dans les nanodispositifs**
F. Triozon (coordonnateur), S. Roche, G. Lecarval
- LPMCN (UCB Lyon I et CNRS) → **calculs ab initio**
C. Adessi, X. Blase (maintenant à l'Institut Néel)
- IEF (CNRS et Univ. Paris Sud, Orsay) → **simulations Monte Carlo**
S. Retailleau, Ph. Dollfus
- IMS (CNRS Bordeaux) → **modèles analytiques et compacts**
C. Maneux, Th. Zimmer, S. Frégonèse

Liens avec les groupes expérimentaux :

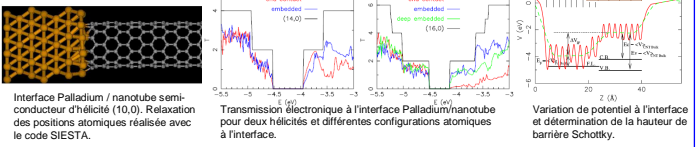
- DRT/LITEN (CEA Grenoble)
- Laboratoire d'Electronique Moléculaire (CEA Saclay)



Calculs ab initio

Les techniques *ab initio* basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) permettent de décrire la structure électronique de petits systèmes. Nous utilisons le code SIESTA, qui représente les fonctions d'ondes sur des bases d'orbitales atomiques localisées. Cela permet de transférer les hamiltoniens obtenus (liaisons fortes) vers des calculs de transport quantique : conductance de Landauer-Büttiker et simulation de dispositifs par la technique NEGF (Non-Equilibrium Green's Functions).

Contacts métal/nanotube :



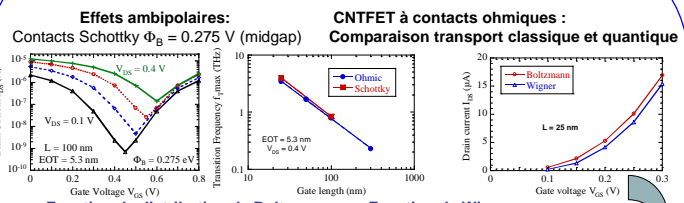
La transmission dans la bande de valence (trous) dépend peu du diamètre du tube et de la configuration atomique de l'interface (contact enrobant ou non). Mais ces spectres de transmission concernent l'injection au-dessus de la barrière Schottky et ne sont pas pertinents si la barrière est haute. L'analyse du profil de potentiel montre que la hauteur de barrière pour les trous décroît puis devient nulle quand le diamètre augmente. C. Adessi et al., Comptes-rendus de l'Académie des Sciences 10, 305 (2009).

Dopage et fonctionnalisation des nanotubes :

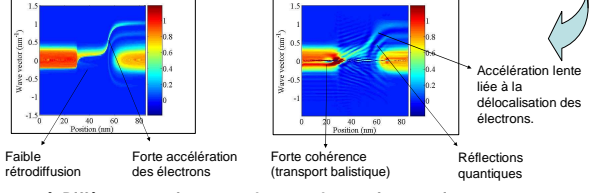
Etudes *ab initio* de dopants ou de molécules greffées sur un nanotube. Les positions atomiques sont relaxées de manière à trouver la configuration la plus stable. Les hamiltoniens de liaisons fortes obtenus sont transférés vers des études de transport (voir encadré « transport quantique »).

3D models showing the covalent grafting of a bi-phenyl group and a carbon atom onto a helical metallic nanotube.

Simulation Monte Carlo des transistors à contacts Schottky ou ohmiques

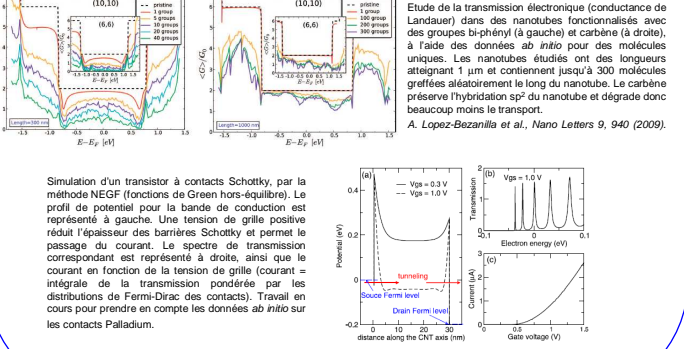


Fonction de distribution de Boltzmann / Fonction de Wigner



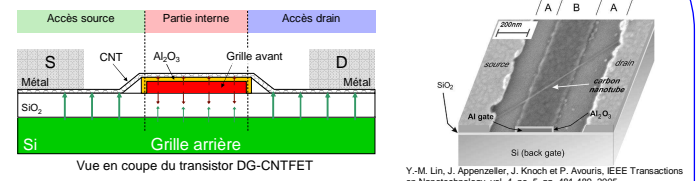
→ Différences majeures sur les grandeurs microscopiques

Simulation du transport quantique (fonctions de Green)

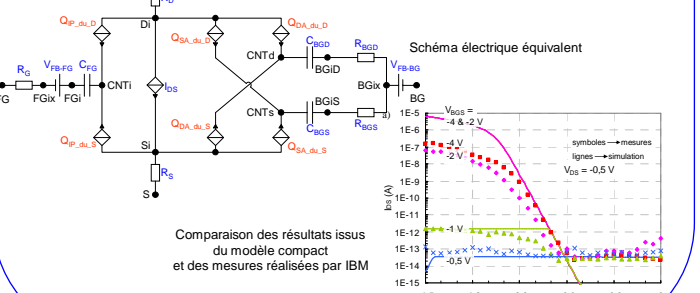


Modèles compacts / Simulation de circuits

Développement du modèle du transistor à nanotube de carbone à double grille DG-CNTFET



Reconfiguration $V_{BG} > 0 \text{ V} \Rightarrow \text{N type}$
 $V_{BG} < 0 \text{ V} \Rightarrow \text{P type}$



Résultats issus de la thèse de Johnny Goguet (financement MENR) soutenue le 24/09/2009