

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

École Doctorale des Sciences Physiques et de l'Ingénieur

par Johnny GOGUET

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : ÉLECTRONIQUE

Contribution à la modélisation physique et électrique compacte du transistor à nanotube

Soutenue le 30 septembre 2009

Après avis de :

Mme. S. GALDIN-RETAILLEAU

Professeur à l'Université Paris Sud

M. I. O'CONNOR

Professeur à l'École Centrale de Lyon

Devant la commission d'examen formée de :

M. V. DERYCKE

Chercheur au CEA

M. P. FOUILLAT

Professeur à l'ENSEIRB

M. S. FRÉGONÈSE

Chargé de recherche CNRS laboratoire IMS

Mme. S. GALDIN-RETAILLEAU

Professeur à l'Université Paris Sud

M. H. HAPPY

Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille

Mme. C. MANEUX

Maître de Conférences (HDR) à l'Université Bordeaux 1

M. I. O'CONNOR

Professeur à l'École Centrale de Lyon

M. T. ZIMMER

Professeur à l'Université Bordeaux 1

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier Thomas ZIMMER et Cristell MANEUX pour m'avoir permis de réaliser cette thèse initialement au sein du laboratoire IXL puis du laboratoire IMS.

Je remercie les professeurs Sylvie GALDIN-RETAILLEAU et Ian O'CONNOR d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse, pour leur critique constructive de mon manuscrit.

Je suis reconnaissant des discussions intéressantes et fructueuses avec les membres de l'ACI Nanosys parmi lesquels E. BELHAIRE, V. DERYCKE, J.-O. KLEIN, H. CAZIN d'HONINCTHUN, J. LIU, R. LEVEUGLE, Ph. DOLLFUS, F. PRÉGALDINY, S. GALDIN-RETAILLEAU, I. O'CONNOR et j'en oublie...

Mes recherches n'ont pas été effectuées isolément : les apports, en plus de ceux de mes encadrants, des collègues de l'équipe ou voisins de bureau jusqu'aux chercheurs extra-Bordelais m'ont permis d'appréhender plus rapidement les divers phénomènes en relation avec ma thèse.

Je remercie donc de nouveau Hugues CAZIN de l'IEF pour ses explications, sa réactivité à mes nombreuses questions et ses formules relatives au schéma de bandes du nanotube. Je remercie de manière générale l'équipe de Physique et Architecture des Composants Ultimes de la Micro-électronique de l'IEF qui nous a chaleureusement accueillis lors de nos réunions à l'IEF en plus des réflexions intenses et productives autour du nanotube.

Je suis reconnaissant envers Sébastien FRÉGONÈSE pour les discussions et échanges intéressants (et pour les coups de main mathématiques) qui m'ont permis de me « débloquer » à plusieurs reprises, et Ludo pour ses rappels de barrière Schottky « académique ».

À propos de mathématiques, merci à Patricia GABINSKI, Maître de Conférences au CENBG pour m'avoir dévoilé LE « Gradshteyn », et à Jean LABARSOUQUE, Professeur au CENBG, pour avoir reconnu une de mes intégrales et indiqué une solution partielle.

Je remercie les collègues doctorants qui m'ont aidé à organiser les JNRDM et qui m'ont plus que secondé quelques jours avant la conférence, Sylvain SAÏGHI pour l'organisation financière, Alain CAZARRE pour son soutien de manière générale et les secrétaires Mireille BERNARD, Fanny DAMAS et Valérie CAUHAPÉ pour leur patience et leurs explications sur les formalités administratives.

Pour ce qui est de la convivialité, je suis heureux d'avoir fait la connaissance des collègues de labo avec qui j'ai pu passer de bons moments : Marie-Lise, Lu(d)o, Brice, Pierre-Yvan, Adel, Piero, Charlotte, Montassar, Si-Yu, Domi, Sébastien, Cyril, Nico, Laurianne, Wei, Willy, Jason, Pierre-Marie.

Remerciements

Je remercie mes amis Virginie et Rudy, Sandrine et Alexandre, Aurore et Louis, Marianne et Brice, pour les agréables moments passés et à venir.

Je n'oublie pas Sophie pour sa traduction/réécriture de russe (malheureusement un luxe superflu et donc absente dans la référence) et sa bonne humeur communicative.

Enfin, je remercie ma famille pour son soutien tout au long de ces (longues) années d'étude. Je remercie également ma belle-famille pour les changements d'air par la pratique d'activités diverses telles que la mécanique, la sylviculture, le maraîchage, la maçonnerie (du petit terrassement à l'électricité en passant par la couverture), la menuiserie, entremêlées de surprises culinaires, de calembours et de bons mots.

Le tableau ne serait pas complet sans mon artiste préférée, Virginie, qui m'a supporté et aidé à surmonter les difficultés tout au long de ma thèse et a été présente dans tous les bons moments.

Table des matières

INTRODUCTION.....	4
CHAPITRE 1 : LES NANOTUBES DE CARBONE : PROPRIÉTÉS ET APPLICATIONS.....	7
I. INTRODUCTION.....	8
II. AUTRES UTILISATIONS DES NANOTUBES.....	10
II.a. <i>Applications mécaniques et électromécaniques</i>	10
II.b. <i>Applications optoélectroniques et d'émission de champ</i>	12
II.c. <i>Utilisation des propriétés thermiques</i>	13
III. PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES.....	14
IV. FABRICATION ET TECHNOLOGIE.....	18
IV.a. <i>Évaporation par arcs électriques</i>	18
IV.b. <i>Ablation laser</i>	18
IV.c. <i>Dépôt chimique en phase vapeur</i>	18
IV.d. <i>Autres méthodes de synthèse</i>	19
IV.e. <i>Effet de l'oxygène</i>	19
IV.f. <i>Dopage</i>	20
IV.g. <i>Métal des contacts</i>	21
V. PRÉSENTATION DES DIFFÉRENTS TYPES DE TRANSISTORS.....	22
V.a. <i>Transistor à barrières Schottky (SB-CNFET)</i>	22
V.b. <i>Transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNFET)</i>	25
V.c. <i>Transistor à grille commandée optiquement (OG-CNFET)</i>	26
V.d. <i>Transistor double grille (DG-CNFET)</i>	27
CHAPITRE 2 : MODÈLE DU TRANSISTOR À NANOTUBE À MODULATION DE HAUTEUR DE BARRIÈRE.....	29
I. INTRODUCTION.....	30
II. FONCTIONNEMENT.....	30

III. CALCUL DE LA CHARGE	32
<i>III.a. Solutions analytiques partielles</i>	36
III.a.1 Faible polarisation : $eV < sbbd[p]$	36
III.a.2 Forte polarisation : $eV > sbbd[p]$	37
III.a.2.a Faibles énergies : de $sbbd[p]$ à Δ	38
III.a.2.b Fortes énergies : de Δ à l'infini	38
<i>III.b. Solution complète</i>	39
IV. CALCUL DU COURANT	42
V. SCHÉMA ÉLECTRIQUE ÉQUIVALENT ET INTÉGRATION LOGICIELLE	44
VI. RÉSULTATS NUMÉRIQUES	47
<i>VI.a. Simulation Monte Carlo</i>	47
<i>VI.b. Comparaison des résultats obtenus avec le modèle compact et par simulation Monte Carlo</i>	48
VII. UTILISATION DU MODÈLE COMPACT POUR L'ANALYSE DE L'IMPACT DE LA DISPERSION TECHNOLOGIQUE SUR LA CONCEPTION D'UN CIRCUIT	53
VIII. CONCLUSION	56
CHAPITRE 3 : MODÈLE DU TRANSISTOR À NANOTUBE DOUBLE GRILLE (DG-CNFET)	58
I. INTRODUCTION	59
II. FONCTIONNEMENT	60
III. CALCUL DES CHARGES	61
<i>III.a. Schéma de remplissage des états</i>	62
<i>III.b. Mise en équation</i>	65
<i>III.c. Résolution de l'équation constituante de la charge</i>	71
III.c.1 Cas A : fortes énergies, $eV_0 < sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6 k_B T$	72
III.c.2 Cas A complémentaire : énergies proches du bas de sous-bande, $eV_0 > eV_1 - 1,6 k_B T$	76
III.c.3 Cas B : énergies proches de $eV_1 - eV_{DS}$, $sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6k_B T > eV_0 > sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6k_B T$	79
III.c.4 Cas C : faibles énergies, $eV_0 > sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6 k_B T$	82
III.c.5 Solution complète	84
III.c.5.a Paramètre de limite d'intégration	85
III.c.5.b Fonction de lissage	85
III.c.5.c Comparaison solutions numérique/analytique	86
IV. CALCUL DU COURANT	87
V. SCHÉMA ÉLECTRIQUE ÉQUIVALENT ET IMPLANTATION	88
VI. RÉSULTATS NUMÉRIQUES	90
VII. COMPARAISON AVEC DES MESURES	96
<i>VII.a. Caractéristique de transfert avec grille arrière flottante</i>	97
<i>VII.b. Caractéristiques de transfert</i>	99
VIII. CONCLUSION	103

CHAPITRE 4 : CIRCUITS RECONFIGURABLES À BASE DE DG-CNFET	105
I. INTRODUCTION.....	106
II. INVERSEUR.....	106
II.a. <i>Inverseur avec charge passive</i>	107
II.b. <i>Inverseur</i>	109
III. PORTE LOGIQUE RECONFIGURABLE À 1 ENTRÉE : INVERSEUR OU BUFFER.....	113
III.a. <i>Porte buffer</i>	113
III.b. <i>Porte inverseuse ou buffer</i>	116
IV. CIRCUIT RECONFIGURABLE	117
V. CONCLUSION	124
CONCLUSION.....	125
RÉFÉRENCES	127
ANNEXES.....	139
I. CODE VERILOGA DU MODÈLE DU TRANSISTOR À NANOTUBE À MODULATION DE HAUTEUR DE BARRIÈRE : ACSOM	139
II. CODE VERILOGA DU MODÈLE DU TRANSISTOR À NANOTUBE DOUBLE GRILLE DG-CNFET	148

Introduction

Depuis les années 1970, l'industrie micro/nanoélectronique a exploité de façon intensive la capacité d'intégration des technologies sur substrat Silicium. En particulier, pour le transistor MOS, la poursuite de la réduction des dimensions a permis le maintien du rythme d'intégration au prix de complexités technologiques croissantes. Selon la feuille de route ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductors) [ITRS05_06], la réduction des dimensions des composants conventionnels devient de plus en plus sévère. Par exemple, la longueur de grille effective d'une technologie CMOS devrait atteindre 6 nm en 2020.

Pour conserver la fonctionnalité du transistor et des performances raisonnables, de nombreux efforts sont réalisés pour proposer de nouvelles architectures de composants et explorer les propriétés de nouveaux matériaux. Il peut s'agir des transistors sur SOI ou SON [Rani05]. Des recherches sur de nouveaux matériaux sont également entreprises pour améliorer la mobilité dans le silicium à partir de couches contraintes [Frég07] ou sur les isolants pour obtenir un meilleur compromis entre leur épaisseur et le courant de fuite. Par ailleurs, une voie alternative à la réduction de la taille des composants conventionnels, est proposée grâce au développement de nouveaux dispositifs. Ces dispositifs sont, par exemple, les transistors moléculaires, les transistors à nanotube de carbone, les Single Electron Transistors ou encore les Spin FET [Meng05, Pear05, Tana05]. Dans le cas de ces nanotechnologies issues de la science des matériaux (synthèse chimique) et de l'exploitation de leurs propriétés spécifiques (moléculaires ou atomiques), le caractère nouveau des matériaux, comme les nanotubes, les nanocristaux fluorescents, les matériaux organiques ..., implique des procédés également nouveaux dont beaucoup ne sont pas encore stabilisés.

Pourtant, quel que soit le composant élémentaire, l'ITRS indique que la pénétration croissante des marchés, par ces nanotechnologies, est étroitement liée au développement de modèles compacts, unique passerelle entre l'électronique fondamentale et la réalité industrielle des applications. En effet, s'agissant de leur mise en œuvre dans les systèmes électroniques, l'un des grands verrous est la disponibilité de modèles compacts incluant des règles de conception aux normes des circuits actuels (Table 0.1). Ces modèles compacts visent à donner la possibilité aux concepteurs de circuits d'exploiter les capacités de ces nouveaux composants pour explorer leur champ de possibilité et ainsi développer de nouveaux concepts. Les applications possibles de système peuvent être bio-inspirées, comme les réseaux de neurones, ou, plus simplement, les architectures novatrices basées sur le comportement non-conventionnel de ces nouveaux dispositifs, comme semble pouvoir l'offrir le comportement ambipolaire de certains transistors à base de nanotube.

Year of production	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
DRAM $\frac{1}{2}$ Pitch (nm)	80	70	65	57	50	45	40	36	32
Circuit Component Modeling									
Active devices	Non-classical CMOS compact models / non quasi-static models and series resistance	Circuit models for non-classical CMOS devices including reliability and influences of statistics	Include quasi-ballistic effects and non-stationary transport		Circuit Models for nanoscale devices and interconnects				

-Manufacturable solutions exist, and are being optimized

-Manufacturable solution are known

-Interim solutions are known

-Manufacturable solutions are NOT known

X

Table 0.1 Perspective des besoins en termes de modélisation et de simulation [ITRS05_06].

Le sujet de cette thèse est directement lié à ce contexte technologique et vise à démontrer l'intérêt du développement des transistors à nanotube de carbone. En effet, parmi les technologies prometteuses, les transistors à nanotube de carbone pourraient permettre d'atteindre de hautes performances grâce une possibilité d'intégration accrue et une vitesse de fonctionnement élevée. Il s'agirait d'utiliser un nanotube de carbone (ou plusieurs en parallèle) comme canal d'un transistor type MOSFET, dont les avantages principaux sont une dimension réduite et un transport quasi-balistique à température ambiante sur des longueurs de l'ordre du micromètre.

Ces travaux de thèse ont débutés en 2005 et représentent un nouvel axe au sein du laboratoire IMS.

Le plan de ce mémoire est organisé selon quatre chapitres.

Le premier chapitre rappelle l'historique du nanotube et poursuit avec la large gamme d'applications de cette molécule : de la mécanique à la thermique en passant par l'optique. Il précise ensuite les propriétés électroniques et leurs conséquences sur le transport des charges suivi d'une analyse des différents procédés de fabrication des nanotubes. Enfin, les différents types de transistors à base de nanotubes de carbone sont décrits.

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

Le troisième chapitre aborde la modélisation du transistor double-grille ou DG-CNFET. Le fonctionnement de ce composant reconfigurable en type N ou P grâce à sa seconde grille est décrit. Comme pour le C-CNFET, il est nécessaire de calculer de façon auto-cohérente la charge et le potentiel du canal des 3 régions : accès source, partie interne et accès drain. Les courants de trous et d'électrons sont ensuite calculés à partir des potentiels du canal. Enfin, les résultats de simulations sont analysés et comparés avec des mesures issues de la littérature.

Dans le quatrième et dernier chapitre, le modèle du DG-CNFET est utilisé dans le cadre de simulations de circuits. Il est tout d'abord intégré dans un inverseur puis dans une porte

Introduction

logique reconfigurable à 1 entrée. Il est enfin mis en œuvre dans un circuit logique reconfigurable innovant à 2 entrées, point de départ de l'élaboration de circuits plus complexes à partir de ces blocs reconfigurables.

Chapitre 1 : Les nanotubes de carbone : propriétés et applications

I. Introduction

Les nanotubes de carbone (en anglais Carbon NanoTubes ou CNT) résultent de l'arrangement d'atomes de carbone en longs cylindres creux que l'on se représente en roulant sur elle-même une feuille de graphène : un plan d'atomes de carbone organisés selon un maillage hexagonal (Figure 1.1). Le diamètre de ces cylindres est de l'ordre du nanomètre à quelques nanomètres pour des nanotubes monofeuillets ou monoparois [Dai06] (SWCNT pour Single-Walled Carbon NanoTube), c'est-à-dire constitués d'un seul cylindre par opposition aux nanotubes multifeuillets ou multiparois (MWCNT pour Multi-Walled Carbon NanoTube) constitués de plusieurs cylindres coaxiaux. Les diamètres peuvent alors atteindre plusieurs dizaines de nm [Seid04, Lin08]. La longueur des nanotubes peut varier de 10 nm à quelques cm [Dai06, Esaw07, Huan04, Quei06, Seid04].

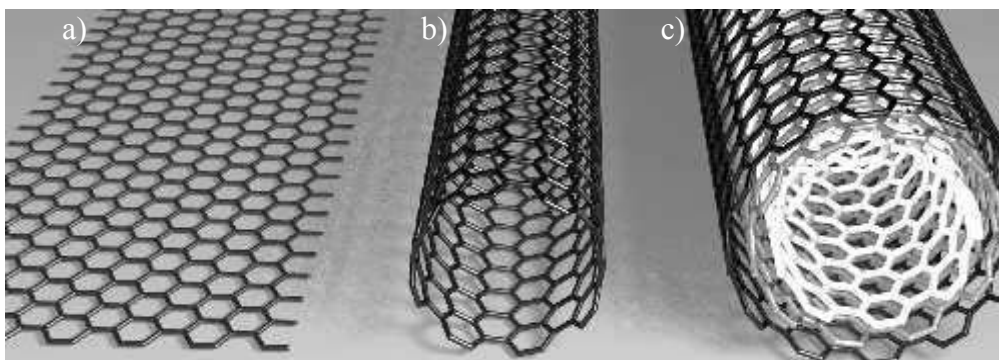


Figure 1.1 a) De la feuille de graphène (atomes de carbone arrangés suivant un maillage hexagonal) aux nanotubes b) monoparois et c) multiparois [Seid04].

Les premiers nanotubes fabriqués par l'Homme sont probablement apparus en même temps que la maîtrise du feu, il y a plusieurs centaines de milliers d'années, en quantités infimes dans les résidus de combustion. La première utilisation des nanotubes date probablement de la fabrication des sabres damasquins, il y a au moins 400 ans [Reib06]. Le début de l'engouement pour l'étude de cette molécule date de l'observation de MWCNT par Iijima en 1991 [Iiji91] parmi des résidus carbonés (molécules C_{60} ou « bucky-ball » et autres fullerènes) puis de l'observation de SWCNT par Iijima [Iiji93] et Bethune [Beth93] en 1993.

Cependant, il ne s'agit pas des premières preuves de l'existence de nanotubes, du moins de multiparois [Boeh97, Mont06]. En effet, un brevet [Hugh1889] sur la fabrication de filaments de carbone est déposé en 1889 : les filaments sont obtenus par décomposition d'un gaz carboné. En 1890, P. et L. Schützenberger [Schü1890] observent un « volumineux dépôt de carbone », obtenu après chauffage, avec « l'apparence d'une masse gris noirâtre, volumineuse et légère, formée par un feutrage assez lâche de longs filaments, très fins ». En 1903, Pélabon [Péla1903] observe au microscope des fils de forme cylindrique. Les plus petits diamètres de fils observés sont de 2 μm . Selon leurs analyses chimiques, cette laine de carbone posséderait à peu près les mêmes propriétés que celle de Schützenberger. Certes dans ces 3 derniers exemples, l'observation au microscope optique ne dévoila que des filaments de carbone de diamètre de l'ordre du μm voire plus gros mais nous savons maintenant qu'ils sont la seconde étape d'un processus dont le premier correspond à la croissance avec catalyseur de nanotubes et la 2^{nde} à un épaississement par dépôt de pyrocarbone sans catalyseur [Endo95, Mont06]. Ce sont ces fils épaissis qui ont été observés dans ces publications.

Avec les progrès des appareils de mesure et d'observation, un article paru en 1952 dans le *Journal of Physical Chemistry* russe met en évidence la nature tubulaire de filaments de carbone de taille nanométrique [Radu52 rapporté par Mont06] sans pouvoir constater la présence de couches de feuilles de carbone. La rédaction en russe et les tensions politiques de l'époque ont limité la diffusion de l'article au monde scientifique occidental. Selon [Mont06], le caractère « multiparoï » est découvert par diffraction électronique en 1958 [Hill58].

Enfin, il est possible que l'observation de nanotubes monoparoï ait été faite pour la première fois en 1976 [Ober76] (Figure 1.2) mais cet aspect ne fut pas revendiqué : une image issue de l'observation au microscope électronique à transmission, MET, montre un tube qui semblerait être monoparoï. L'existence d'un tel tube est peu probable selon les calculs de stabilité énergétique pour un diamètre de l'ordre de 5 nm. Cependant, des nanotubes monoparoï de grand diamètre, obtenus par des procédés de synthèse différents de celui utilisé ici, ont été observés (dépôt chimique en phase vapeur avec catalyseur (voir paragraphe IV.c)) [Mont06].

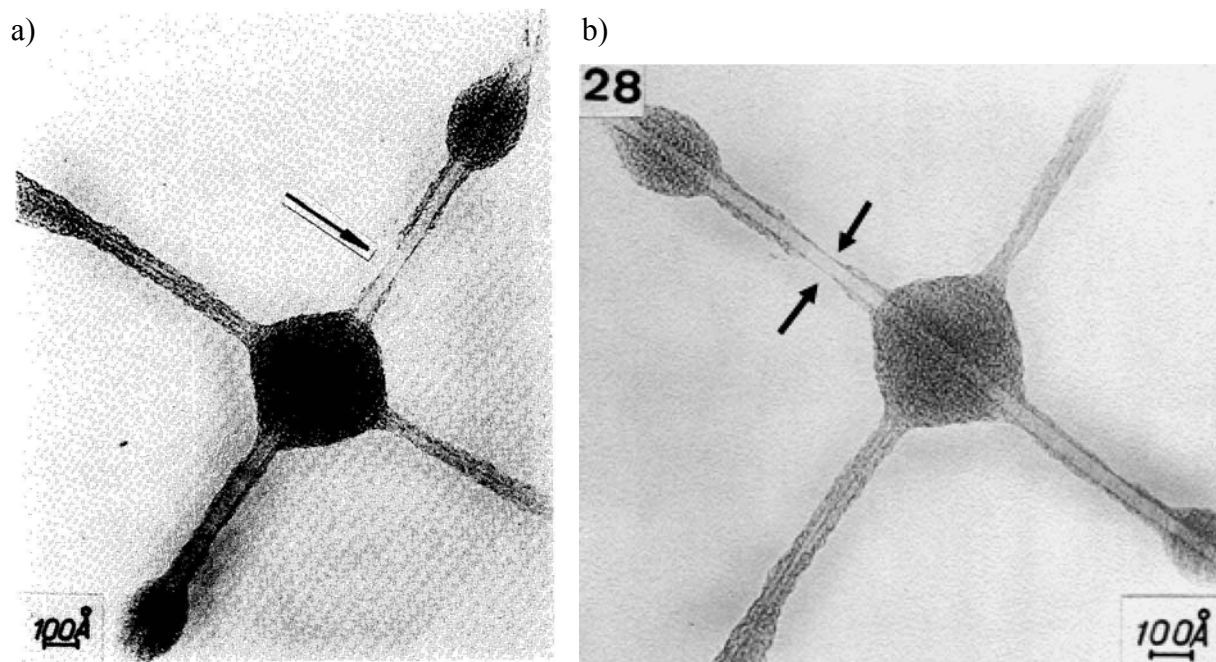


Figure 1.2 Images issues d'observation au microscope électronique à transmission : a) images parue dans [Ober76], b) image de la thèse de ENDO [Endo75] rappelée dans [Mont06].

Les premiers transistors à base de nanotubes de carbone sont fabriqués en 1998 à l'université de Technologie de Delft [Tans98] puis par l'équipe d'IBM [Mart98].

Avant de s'intéresser à l'utilisation des nanotubes en électronique, le paragraphe suivant évoque les autres types d'applications des nanotubes. Le paragraphe III traite des propriétés électroniques et des conséquences sur le transport des charges. Les différents procédés de fabrication des nanotubes seront énoncés dans le paragraphe IV. Le dernier paragraphe de ce chapitre porte sur les différents types de transistors à base de nanotubes de carbone.

II. Autres utilisations des nanotubes

Dans cette section sont présentés quelques exemples d'applications mécaniques, optoélectroniques et chimiques.

II.a. Applications mécaniques et électromécaniques

Le module d'Young axial des nanotubes de carbone monoparois est d'environ 1 TPa (ordre de grandeur du diamant), celui de cisaillement est de 0,5 TPa [Esaw07, Thos05]. La résistance à la traction axiale (limite avant rupture) peut aller de 13 à 52 GPa pour des SWCNT et de 11 à 150 GPa pour des MWCNT selon les méthodes de mesure. Ces valeurs sont à comparer à celles des aciers à haute résistance à la traction qui cassent à environ 2 GPa [Coll00, Esaw07, Thos05].

Ces caractéristiques mécaniques sont intéressantes pour leur utilisation dans les matrices composites. Elles permettent d'obtenir des matériaux composites plus résistants à base :

- de métalpolymères [Freh05],
- de polymères thermodurcissables (époxy, polyimide et phénoplaste) [Thos05],
- de polymères thermoplastiques (polypropylène, polystyrène, polyméthacrylate de méthyle ou PMMA, nylon 12 et polyétheréthercétone ou PEEK) [Thos05],
- d'aluminium ou encore d'époxy hybridé avec des fibres de carbone [Esaw07].

Selon la Figure 1.3, le module d'Young du nanocomposite est fonction de l'organisation des nanotubes pour des fortes concentrations de nanotubes [Luo07]. Des matériaux composites hybrides (polymère + fibres de carbone + nanotubes) sont déjà utilisés dans la fabrication d'équipements de sport tels que des raquettes de tennis ou des crosses de hockey [Esaw07].

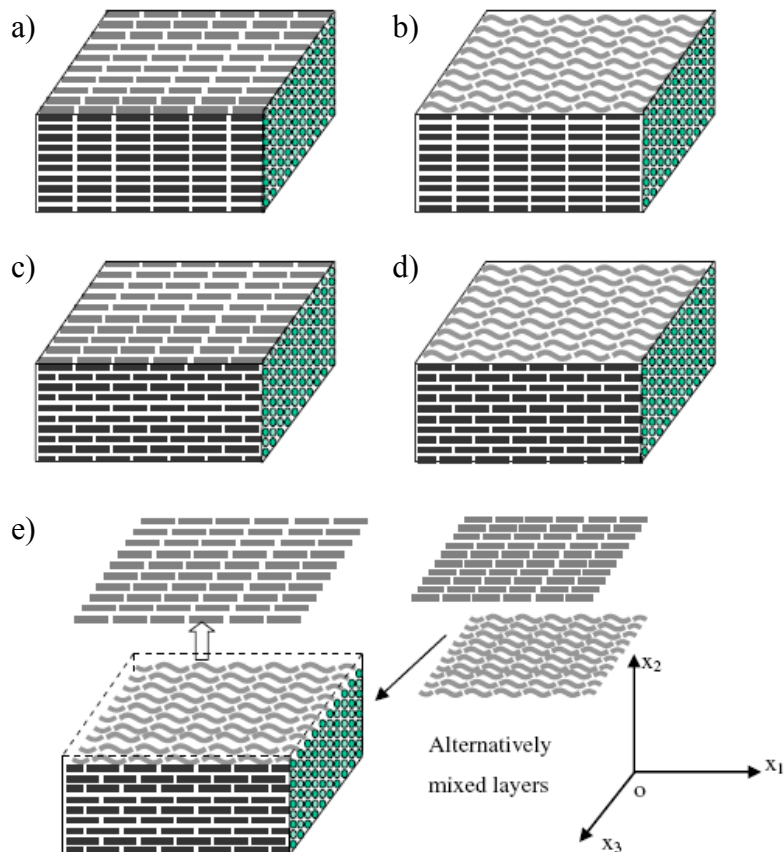


Figure 1.3 Cinq organisations de nanotubes : a) réseau de nanotubes droits et alignés entre les couches, b) réseau de nanotubes courbés et alignés entre les couches, c) réseau de nanotubes droits avec des couches décalées, d) réseau de nanotubes courbés avec des couches décalées et e) réseau de nanotubes alternativement droits et courbés avec des couches décalées [Luo07].

L'élasticité des nanotubes est également utilisée dans des NEMS pour réaliser des interrupteurs. Les nanotubes peuvent être :

- utilisés comme poutres permettant la réalisation d'interrupteur commandé (Figure 1.4.a) [Sang04]),
- un pont, suspendu entre 2 plots (attiré par le champ électrique généré via une électrode en CNT dans la Figure 1.4.b) [Ruec00]),
- verticaux, 2 nanotubes sont en contact par action ou non d'un 3^e nanotube (Figure 1.4.c)) [Jang05],
- déplacés et guidés (bearing-like switch) : le tube interne d'un nanotube double-paroi glisse sous l'effet des forces électrostatiques et est guidé par le tube externe jusqu'à faire un pont au-dessus d'un interstice (Figure 1.4.d)) [Desh06].

Les ponts et poutres réalisés avec des nanotubes permettent aussi de détecter des masses, des tensions, des pressions en utilisant la variation de fréquence d'oscillation du nanotube [Thos05]. Les fréquences d'oscillations de ces dispositifs pourraient atteindre le THz [Li03] ce qui augmenterait la sensibilité des capteurs.

Des actionneurs tels que des pinces [Li08] et des pointes de microscope à force atomique, AFM, [Li08, Umem01] sont fabriqués à partir de nanotubes.

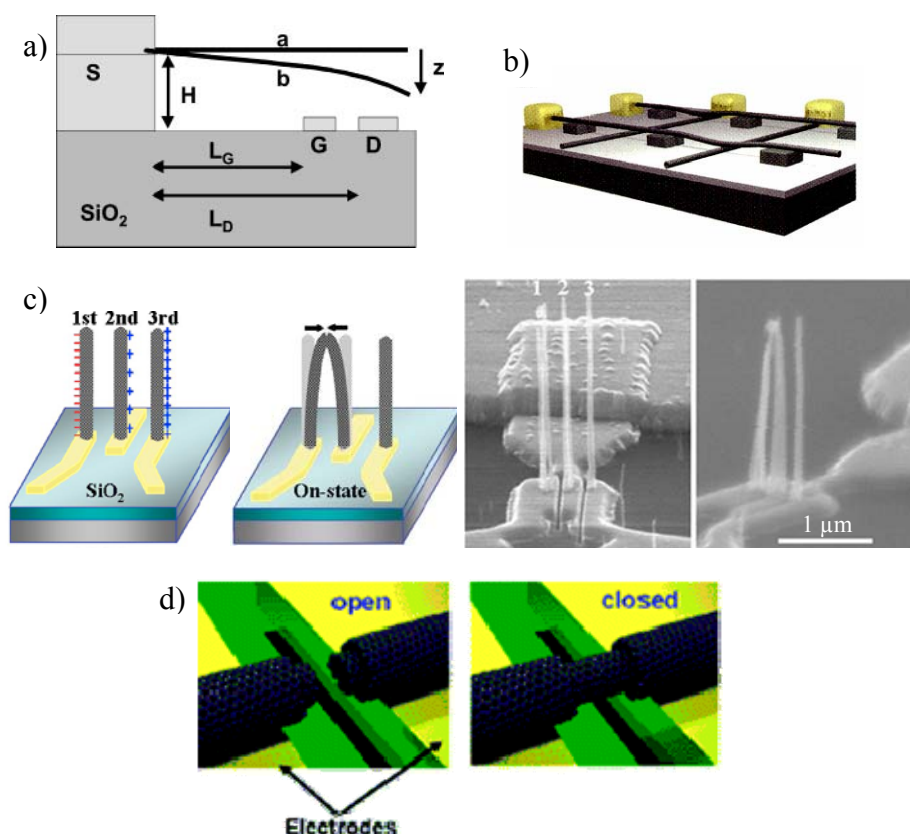


Figure 1.4 Applications des nanotubes exploitant leurs propriétés mécaniques. a) Schéma d'un nanorelais : un MWCNT est maintenu par le contact source et suspendu au-dessus de la grille et du drain, une polarisation de grille de quelques volts fait coller le nanotube au drain (voire à la grille) pour faire passer le courant [Sang04]. b) Vue 3D d'un réseau de « cross-bars » montrant 4 points mémoire à partir de nanotubes suspendus entre les îlots (blocs gris foncés) et de nanotubes déposés sur le substrat : 2 points sont ON (contact entre les nanotubes) et les 2 autres sont OFF (nanotubes séparés) [Ruec00]. c) Schémas et images de microscope électronique à balayage (SEM) montrant l'état OFF à gauche et l'état ON à droite (les nanotubes 1 et 2 sont en contact sous l'effet de la polarisation de la 3^e électrode) [Jang05]. d) Schémas de principe de l'interrupteur à déplacement de nanotube : à gauche, les tubes internes sont séparés, à droite, les tubes internes ont glissé jusqu'à être en contact sous l'effet de la tension appliquée entre les électrodes [Desh06].

Enfin, l'ajout d'une couche de nanotubes monoparois sur un résonateur à quartz permet presque d'en doubler le facteur de qualité par la suppression des mécanismes de perte [Goya05].

II.b. Applications optoélectroniques et d'émission de champ

Les nanotubes de carbone de type semiconducteur sont à bande interdite directe, condition favorable aux dispositifs optoélectroniques. Pour l'émission de lumière, il est intéressant d'utiliser des transistors à nanotubes ambipolaires étant donné qu'ils permettent la présence de courant de trous et d'électrons simultanément. Typiquement, pour des transistors à nanotubes à barrières Schottky avec le niveau de Fermi des métaux aligné avec le milieu de la bande interdite du nanotube (cf. paragraphe V), pour une polarisation de grille $V_{GS} = V_{DS} / 2$, où V_{DS} est la polarisation drain-source, les courants d'électrons et de trous sont égaux. Pour des canaux (distance que les porteurs de charge doivent parcourir) suffisamment

longs où le taux d'interactions est important, le courant de recombinaison est maximal [Avou06]. L'émission de lumière vient alors d'un point particulier du canal qui peut être déplacé en modifiant l'une des tensions appliquées (Figure 1.5.a)). Les courants de trous et d'électrons sont situés dans les bandes de valence et de conduction respectivement.

Les nanotubes de carbone peuvent être photoluminescents et photoconducteurs : l'absorption d'un photon génère un exciton qui peut réémettre un photon (photoluminescence) ou, en présence d'une polarisation, générer et séparer une paire électron-trou (photoconduction) [Avou06].

L'émission de champ requiert un (ou des) nanotube(s) verticaux. Les électrons sont émis par l'extrémité du nanotube. Une grille, placée au-dessus du nanotube et percée pour laisser passer les électrons, permet de générer le champ électrique nécessaire (Figure 1.5.b)). À partir de ce principe, il est possible de fabriquer des réseaux de dispositifs à émission de champ, des amplificateurs micro-ondes et des canons à électrons [Teo04].

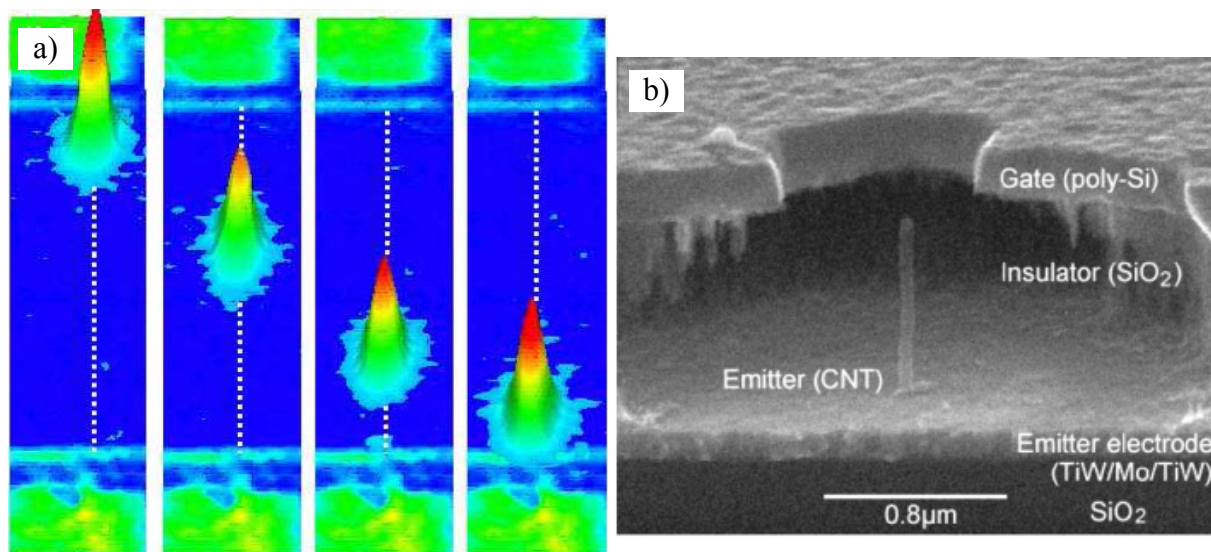


Figure 1.5 a) 4 images montrant le déplacement du lieu d'émission de lumière selon la polarisation pour une longueur de canal de nanotube de $50 \mu\text{m}$ [Hein06]. b) Vue en coupe d'un émetteur avec un seul nanotube et sa grille au-dessus [Teo04].

II.c. Utilisation des propriétés thermiques

La conductivité thermique des nanotubes de carbones isolés est de l'ordre de $3000\text{-}3500 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ à la température ambiante [Hu06, Pop06] (celle du cuivre est de $390 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Berber et al. [Berb00] évaluent théoriquement cette conductivité à $6600 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ à température ambiante soit environ 2 fois celle du diamant ($3320 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [Coll00]).

Les applications utilisant les propriétés thermiques des nanotubes se rapprochent de l'électronique : la dissipation de chaleur des composants électroniques. La principale limitation au refroidissement des composants électroniques devient l'interface entre le composant et son radiateur : le terme majeur de la résistance thermique totale est la résistance thermique de l'interface. L'ajout de nanotube dans le matériau utilisé pour « coller » composant et radiateur permet d'augmenter significativement la conductivité thermique de ce matériau. Cependant, les nanotubes sont dispersés aléatoirement et ne sont donc pas idéalement alignés dans la matrice : le flux de chaleur à travers l'interface n'est alors pas optimal. Ces inconvénients sont résolus si l'on fait croître des nanotubes verticalement à partir du substrat de silicium (Figure 1.6) et que l'on vient « coller » le radiateur sur les extrémités des nanotubes [Hu06].

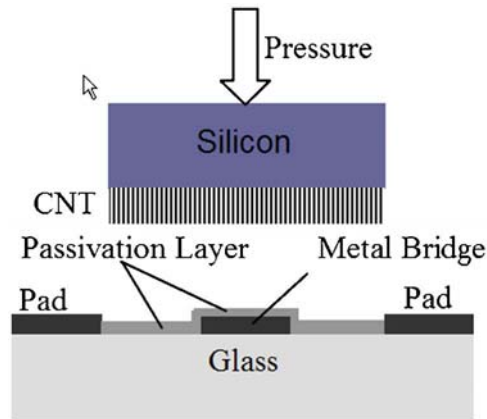


Figure 1.6 Schéma expérimental de la mesure de dissipation de chaleur pour, à terme, utiliser les nanotubes comme interface entre la partie chauffante et le radiateur. Le « metal bridge » permet de chauffer et de mesurer la température [Hu06].

III. Propriétés électroniques

Considérons le nanotube monoparoie constitué d'une seule feuille de graphène enroulée sur elle-même. Pour exprimer l'enroulement de la feuille de graphène, on utilise le vecteur de chiralité \vec{C} (chirality vector) [Avou03]. Il part d'un atome de carbone, « fait le tour » du nanotube pour pointer sur le même atome. Il connecte donc deux sites cristallographiquement équivalents de la feuille de graphène 2-D (Figure 1.7.a)). En notant \vec{a}_1 et \vec{a}_2 les vecteurs unitaires du maillage hexagonal, on obtient $\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$. Le vecteur de chiralité est donc défini par le couple d'entiers (n, m) . En connaissant l'amplitude de \vec{a}_1 et \vec{a}_2 , on peut déduire la circonférence du tube puis son diamètre. Sachant que la distance a_{C-C} entre 2 atomes de carbone voisins est $a_{C-C} \approx 0,142 \text{ nm}$, on a $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| \approx 0,246 \text{ nm}$. La circonférence, en nm, est donc $0,246 * \sqrt{n^2 + n.m + m^2}$ et le diamètre, en nm, s'écrit $0,246 * \sqrt{n^2 + n.m + m^2} / \pi$.

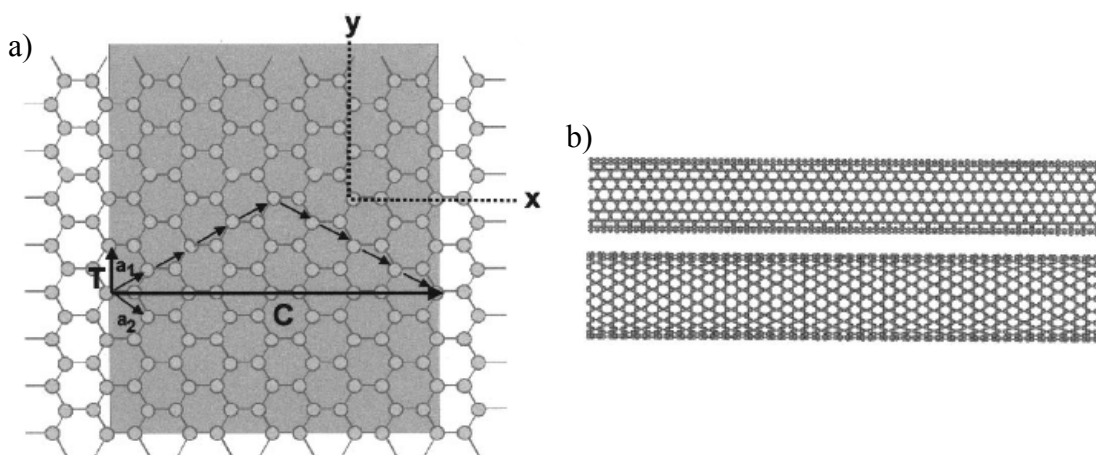


Figure 1.7 a) Description de l'enroulement d'un nanotube en utilisant le vecteur de chiralité \vec{C} . L'exemple montre un tube $(4, 4)$ soit $\vec{C} = 4\vec{a}_1 + 4\vec{a}_2$. b) Structure atomique d'un nanotube Armchair $(10, 10)$ – métallique – (en haut) et d'un nanotube ou Zigzag $(20, 0)$ – semiconducteur – (en bas) [Avou03].

On peut également caractériser la torsion du nanotube à l'aide de l'angle d'hélicité θ [Lois00]. Il s'agit de l'angle entre un côté d'un hexagone et l'axe du tube. Compte tenu de la symétrie du réseau hexagonal, cet angle θ est compris entre 0 et 30° (Figure 1.8). Pour un angle θ nul, le nanotube est dit Zigzag et pour un angle $\theta = 30^\circ$, le nanotube est dit Armchair (Figure 1.7.b)). Ces deux nanotubes particuliers dits non chiraux correspondent à des vecteurs \vec{C} pour lesquels on a respectivement $m = 0$ et $n = m$. Les nanotubes sont chiraux lorsque $0^\circ < \theta < 30^\circ$. Connaissant n et m , on peut calculer θ par la relation

$$\theta = \arcsin \left\{ \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + n.m + m^2}} \right\} \text{ à } 30^\circ \text{ près.}$$

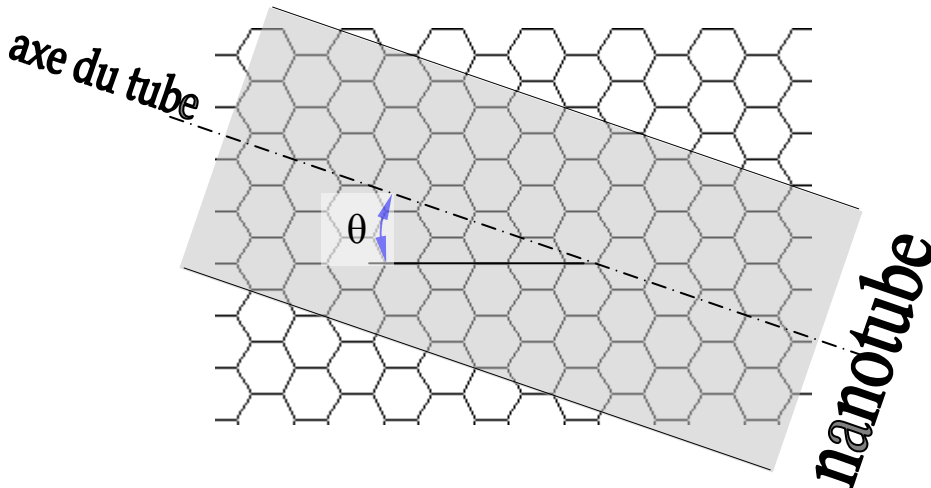


Figure 1.8 L'angle d'hélicité θ permet de donner l'enroulement du nanotube. Ici, un nanotube (4, 2).

Le graphite (résultat de l'empilement de feuilles de graphène) est un mauvais conducteur mais ses propriétés électriques sont fonctions de ses déformations et du dopage qu'il peut présenter. L'enroulement du nanotube provoque des modifications des propriétés électriques. Le schéma de bandes d'une feuille de graphène est représenté sur la Figure 1.9.a). Les bandes de conduction (π^*) et de valence (π) se touchent en six points K au niveau de Fermi. Le graphite est en fait un semiconducteur à gap nul [Seid04, Lois00].

Le confinement des électrons autour de la circonférence du nanotube provoque une quantification des niveaux d'énergies [Avou03]. En effet, la composante circonférentielle du vecteur d'onde \vec{k} ne peut prendre que des valeurs particulières correspondant à la condition $\vec{k} \cdot \vec{C} = 2\pi j$ où \vec{C} est le vecteur de chiralité et j un entier [Cazi08i]. Par conséquent, chaque bande du graphène est discrétisée en niveaux d'énergie paramétrés en j . Si :

- un de ces niveaux d'énergie passe par un point K (point indiqué Figure 1.9.a)), le nanotube aura un comportement métallique (Figure 1.9.b)),
- aucun niveau d'énergie ne passe par un point K, le nanotube est semiconducteur à bande interdite directe (Figure 1.9.c)).

On montre que le type de nanotube se détermine à partir des indices n et m :

- lorsque $n - m = 3i$ (avec i entier), le nanotube est métallique,
- lorsque $n - m \neq 3i$, le nanotube est semiconducteur.

De cette discrétisation résulte un schéma de bandes constitué de multiples sous-bandes. Ainsi, par la suite, on parlera de la 1^{ère}, 2^e, ... sous-bande de conduction (ou de valence) par

rapport à la plus basse (ou plus élevée) énergie que peuvent avoir les porteurs de charge présents dans cette sous-bande : la bande interdite correspond à la différence d'énergie entre le bas de la 1^{ère} sous-bande de conduction et le haut de la 1^{ère} sous-bande de valence.

Pour les nanotubes semiconducteurs, on peut calculer la largeur de la bande interdite E_g qui est inversement proportionnelle au diamètre, d , du tube selon la relation $E_g = 4 \hbar v_F / 3 d$ où v_F est la vitesse de Fermi [Avou03] (calculable à partir de $v_F = 3 V_{pp\pi} a_{C-C} / 2 \hbar$ [Sasa08]) ou encore $E_g = 2 a_{C-C} V_{pp\pi} / d$ avec a_{C-C} la distance entre 2 atomes de carbone et $V_{pp\pi}$ l'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone ou interaction du plus proche voisin [Wild98] (égal à l'opposé du paramètre de recouvrement des orbitales ou énergie de recouvrement ou intégrale de transfert entre 2 orbitales adjacentes). Dans la littérature, ce paramètre est parfois aussi noté t ou γ_0 (avec $t = -\gamma_0$). Les valeurs de ce paramètre trouvées dans la littérature sont très variables (listées dans le Tableau 1.1), qu'elles soient issues de mesures ou de calculs, que ce soit pour les nanotubes ou pour la feuille de graphène puisque, selon [Sait98], une différence est à prendre en compte. Ainsi, ce paramètre varie de 2,4 à 3,14 eV pour un nanotube. L'ensemble de ces publications confirme la large plage de valeur de cette propriété physique qui est un paramètre d'entrée de modèle compact et qui influence largement les résultats de simulation.

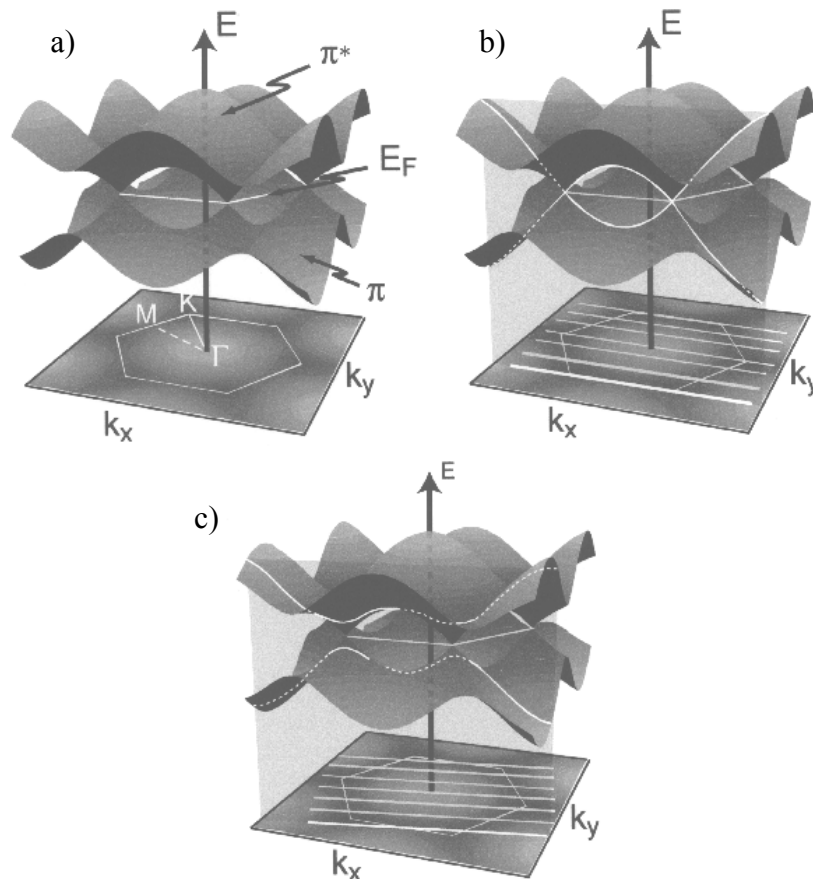


Figure 1.9 a) Schéma de bandes d'une feuille de graphène et la première zone de Brillouin en dessous, b) schéma de bandes d'un nanotube métallique (3,3) et c) schéma de bandes d'un nanotube semiconducteur (4,2) [Avou03]. Les états permis sont les intersections des lignes blanches avec les bandes du graphène. Si une intersection correspond à un point K où les bandes de valence et de conduction se touchent, le nanotube est métallique sinon il est semiconducteur.

Référence	$V_{pp\pi}$ (eV) tube	$V_{pp\pi}$ (eV) graphène
[Reic02]	2,4 à 2,6 : Calculs pour un tube (19, 0)	
	2,5 : Citation	
	2,54 : Valeur prise pour les calculs de schémas de bande « tight binding » comparés à ceux avec $V_{pp\pi} = 2,9$ eV	
	2,7 : Valeur prise pour les calculs de schémas de bande « tight binding »	
[Odom98]	2,45 : Valeur qui correspond le mieux aux mesures E_g en fonction du diamètre	
[Kane98]	2,48 : À partir de $\hbar v_F = 5,3$ eV Å	
[Jori08, Tans97]	2,5 : À partir de $v_F = 8,1 \cdot 10^5$ m/s	
[Sait98]	2,5 : Citation de calculs	3,13
	2,7 : Citation de mesure du groupe de Delft	3,033 : Citation de calculs
[Mint95, Mint98, Whit98, Whit05] (mêmes auteurs)	2,5 : Valeur qui correspond le mieux aux calculs de fonctionnelle de densité locale (LDF)	2,7 à 3
	2,5 : Résultats de simulation « tight binding »	
	2,7 : Valeur qui permet de faire correspondre théorie et mesures pour des diamètres de nanotubes proches de 1,4 nm	
[Roch07]	2,66 : Valeur utilisée pour une étude utilisant les fonctions de Green	
[Sasa08]	2,7	
[Wild98]	$2,7 \pm 0,1$: Valeur qui permet de faire correspondre théorie et mesures	2,5 : Citation
[Rafa00]	2,73 à 3,05 : Valeurs qui correspondent le mieux aux mesures Raman, tubes semiconducteurs ou métalliques de diamètre 1,3 ou 1,45 nm	
[Anan06]	2,77 : Valeur utilisée pour des calculs de bande interdite	
[Pime98]	$2,95 \pm 0,05$: Valeur qui correspond le mieux aux mesures Raman	
[Penn03]		3 : Utilise la valeur du graphène pour les tubes
[Lund06]	3	
[Chen05 ii]	3 : Citation de M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus et P. Avouris, « Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and applications », Springer-Verlag, Berlin, 2001.	
[Jish94]	3,14	3

Tableau 1.1 Liste de valeurs d'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone $V_{pp\pi}$ trouvées dans la littérature.

IV. Fabrication et technologie

Ce paragraphe présente quelques méthodes de fabrication de nanotubes de carbone (parmi lesquelles les plus utilisées sont l'évaporation par arcs électriques, l'ablation laser et le dépôt chimique en phase vapeur) puis traite ensuite des conséquences des procédés de fabrication sur le comportement électronique des nanotubes semiconducteurs (effet de l'oxygène, des dopants et du type de métal utilisé pour prendre contact sur le nanotube).

IV.a. Évaporation par arcs électriques

La production de nanotube de carbone par évaporation par arc électrique (arc discharge evaporation) consiste à créer un plasma via un arc électrique entre 2 électrodes en graphite. C'est la méthode historiquement utilisée par [Iiji91].

L'anode est généralement enrichie en catalyseur (Fe, Ni, Co, Y, Gd) afin d'obtenir des nanotubes monoparois (l'absence de catalyseur induit la synthèse de multiparois sous forme de fagots) [Esaw07, Seid04, Teo04]. Cette électrode se consume alors que la cathode se recouvre de composés carbonés [Lois00] parmi lesquels on retrouve du carbone amorphe, des particules de carbone et des nanotubes (30 à 70 %) [Teo04]. Une étape de purification, de sélection de ces résultats de combustion est donc nécessaire pour extraire les nanotubes. La température du plasma entre les électrodes est au moins supérieure à 3000 °C [Sait98] et peut atteindre 6000 °C (sachant que le graphite se sublime à 3200 °C) [Lois00].

Cette méthode est économique, relativement simple à mettre en œuvre et permet d'obtenir différents types de tubes mais la complexité des processus de synthèse rend délicat l'obtention d'un type unique de nanotube [Lois00].

IV.b. Ablation laser

Ce procédé consiste à ablater avec un laser pulsé ou continu une cible en graphite généralement enrichi de catalyseurs métalliques pour obtenir des nanotubes monoparois [Lois00, Seid04, Teo04]. Dans le cas du laser pulsé, le graphite est expulsé en petits fragments qui ne se recombinent qu'en présence d'une température d'au moins 800 °C (laser et cible placés dans un four). Pour le laser continu, la température du plasma (3000 K) généré par l'impact du laser sur la cible est suffisamment élevée pour vaporiser le graphite (pas besoin de four) [Lois00]. Comme pour la méthode par évaporation par arcs électriques, une étape de sélection chimique est nécessaire pour séparer les différents produits de synthèse.

Cette méthode est plus coûteuse que celle par arcs électriques mais utilise un nombre restreint de paramètres de contrôle ce qui rend possible l'étude des conditions de synthèse [Lois00].

IV.c. Dépôt chimique en phase vapeur

La fabrication de nanotubes de carbone par dépôt chimique en phase vapeur (CVD pour Chemical Vapor Deposition) peut se faire avec ou sans catalyseur et, dans le cas de la CVD avec catalyseur, peut être assisté par plasma (PECVD). Le principe est de faire circuler et décomposer un gaz carboné dans une enceinte chauffée. Les atomes de carbone se recombinent pour former des nanotubes à la surface du wafer.

La méthode CVD avec catalyseur nécessite des températures nettement inférieures aux 2 procédés détaillés précédemment (de 450 à 1100°C selon le gaz utilisé [Huan04, Lois00, Risp08, Teo04]), ce qui lui offre la possibilité d'être compatible avec les procédés de

fabrication standards de la technologie silicium [Lois00, Risp08]. Les larges gammes de gaz et de catalyseurs utilisables pour obtenir des nanotubes permettent d'obtenir des concentrations, des types (mono ou multiparois) et des dimensions (diamètre, longueur) variables [Huan04, Lois00]. La géométrie des catalyseurs, le flux des gaz et la vitesse de variation de température influent également sur la géométrie et l'orientation des tubes [Huan04, Lois00, Merk00, Risp08]. Cette méthode est moins coûteuse et permet une production en grande quantité mais les tubes produits ont plus de défauts : les propriétés électroniques s'en trouvent détériorées.

Cette méthode peut être assistée par plasma (plus coûteux), ce qui permet d'orienter tous les tubes produits dans le sens du champ électrique appliqué [Esaw07, Teo04]. Les nanotubes verticaux obtenus par cette méthode permettent notamment de réaliser des dispositifs à émission de champ (paragraphe II.b). L'obtention de nanotubes horizontaux et fonctionnels en tant que canal de transistor n'a été possible qu'en protégeant les nanotubes du bombardement ionique dû au plasma [Ohna05]. Par ce procédé, on peut espérer que seront maîtrisés le diamètre (par la taille des îlots de catalyseur), la position (par la localisation des catalyseurs) et l'orientation (par l'assistance par plasma) des nanotubes : il ne reste plus que la chiralité à contrôler pour garantir notamment l'obtention de nanotubes semi-conducteurs.

Enfin, la méthode CVD sans catalyseur rapportée par [Schn08] utilise des membranes d'oxyde d'alumine poreux. Dans cette étude, une influence catalytique de l'oxyde d'alumine a été supposée. Les canaux parallèles et alignés de l'oxyde d'alumine poreux forment un réseau hexagonal de pore. Sur les parois de ces pores se déposent les précurseurs de carbone (issus de la décomposition de propylène) suivie de la formation de tubes de carbone. Le diamètre des tubes est fonction du diamètre des pores : 20 et 100 nm. Les tubes obtenus sont donc multiparois et à la limite du « nano-monde ». Bien qu'un effet catalytique soit supposé, contrairement aux méthodes clairement identifiées comme étant « avec catalyseur », ce procédé ne nécessite pas d'étape de dépôt de catalyseur puisque la croissance a lieu directement à partir d'une matrice d'alumine. Il faut également noter que le retrait des tubes de ce système n'est pas aisé. La méthode CVD sans catalyseur rapportée par [Lin08] utilise un substrat de carbone noir poreux pour produire des nanotubes multiparois de diamètre 20-80 nm par la décomposition d'éthylène.

IV.d. Autres méthodes de synthèse

Le recuit sans catalyseur requiert l'utilisation d'un substrat de carbure de silicium hexagonal 6H-SiC [Dery02i]. Un recuit, à 1650°C, pendant 15 min, sous vide très poussé (UltraHigh Vacuum ou UHV), donne des nanotubes orientés selon l'organisation cristallographique des atomes de surface de ce substrat. Le carbone qui forme les nanotubes provient du substrat.

Il est également possible d'utiliser un bombardement d'ion de carbone pour fabriquer des filaments de carbone dans lesquels on peut trouver des nanotubes de carbone [Sait98].

L'énergie solaire focalisée sur un creuset pour atteindre une température de 3000 K permet la synthèse de nanotubes monoparois [Lois00, Sait98].

IV.e. Effet de l'oxygène

L'oxygène, bloqué entre une électrode (source ou drain dans une configuration de transistor à effet de champ) et le nanotube (canal des porteurs de charge) lors de la fabrication ou de l'exposition à l'air, modifie la valeur du travail d'extraction du métal [Dery02ii]. L'alignement du niveau de Fermi du métal avec celui du nanotube est donc modifié : ce

dernier se retrouve proche du haut de la bande de valence, facilitant le passage des trous : ces transistors sont de type P [Avou03, Dery01, Hein06]. Un recuit sous vide permet de dégazer l'oxygène et d'obtenir un transistor de type N [Chen06, Dery02ii]. Cette opération est réversible : une réexposition à l'air ou à l'oxygène retransforme le transistor en type P. Pour éviter cette « recontamination », une passivation au SiO₂ et/ou au polyméthacrylate de méthyle, PMMA, est nécessaire.

L'effet de l'oxygène est limité dans le cas de l'utilisation d'électrodes de source et drain en gadolinium -Gd- [Kim08]. Les mesures effectuées sous vide et après exposition à l'air pendant 2 mois montre une modification des caractéristiques électriques mais celles-ci restent de type N.

IV.f. Dopage

Pour des nanotubes monoparois, le dopage par substitution des atomes de carbone par des atomes de bore donne un dopage de type P, celui par des atomes d'azote donne un dopage de type N ou P selon le niveau de dopage [Jori08]. Il est également possible de doper par substitution avec des atomes de silicium et de phosphore. L'incorporation des dopants dans le tube monoparois se fait lors de la fabrication des tubes (obtenus par arc électrique, ablation laser ou CVD) [Jori08]. La substitution des atomes de carbone par bombardement ionique endommage les nanotubes et modifie leurs propriétés électriques [Chen05i, Appe05].

Les dopants peuvent ne pas être intégrés au maillage hexagonal du tube mais à l'intérieur du tube (dopage endohédral) ou à l'extérieur (dopage exohédral ou intercalation) [Jori08]. De tels dopages non-substitutionnels de type P et de type N sont obtenus par des halogènes, tels que le brome ou l'iode, et par des métaux ou composés alcalins, tels que le lithium, le sodium, le potassium, le rubidium, le césium, le chlorure de potassium ou l'iodure de césium, respectivement [Jori08, Shis06]. Ces dopants, notamment les métaux alcalins, peuvent être sujets à l'électromigration [Hein05]. L'étude *ab initio* pour la perturbation engendrée par un seul dopant (un atome d'hydrogène) a été réalisée puis complétée par une étude plus générale utilisant les fonctions de Green pour connaître les perturbations engendrées par une concentration d'impuretés [Roch07]. Le dopage s'opère par transfert de charge du dopant vers le nanotube [Chen05i].

Cette méthode de dopage non-substitutionnel a pour avantage de ne pas modifier profondément les propriétés électriques et surtout offre une possibilité de dopage partiel par masquage. Pour les transistors à nanotubes de type P par défaut (généralement dû à la présence d'oxygène entre les contacts et le tube), un dopage de type N fait apparaître la branche N du transistor, i.e. le courant d'électrons, sur les caractéristiques mais ne fait pas systématiquement disparaître la branche P, i.e. le courant de trous : le transistor à nanotube est ambipolaire [Chen06].

Il est également possible de doper les nanotubes en les fonctionnalisant avec des molécules [Plan05, Cast07].

De plus amples explications et calculs sur la jonction p-n obtenue par dopage de nanotube sont fournis dans [Léon99] : la longueur de déplétion varie exponentiellement avec l'inverse du dopage mais, au-delà de la zone déplétée, la charge diminue logarithmiquement en s'éloignant de la jonction (Figure 1.10.b)). Le potentiel varie plus rapidement autour de la jonction pour des forts dopages (Figure 1.10.a)) : des dopages supérieurs à $2 \cdot 10^{-4}$ (nombre de dopants par atome de carbone soit dans ce cas 1 dopant pour 5000 atomes de carbone) sont conseillés pour une diode de taille nanométrique. Mais un trop fort dopage ($> 2 \cdot 10^{-3}$) augmente la probabilité de courant tunnel et limite le fonctionnement du dispositif.

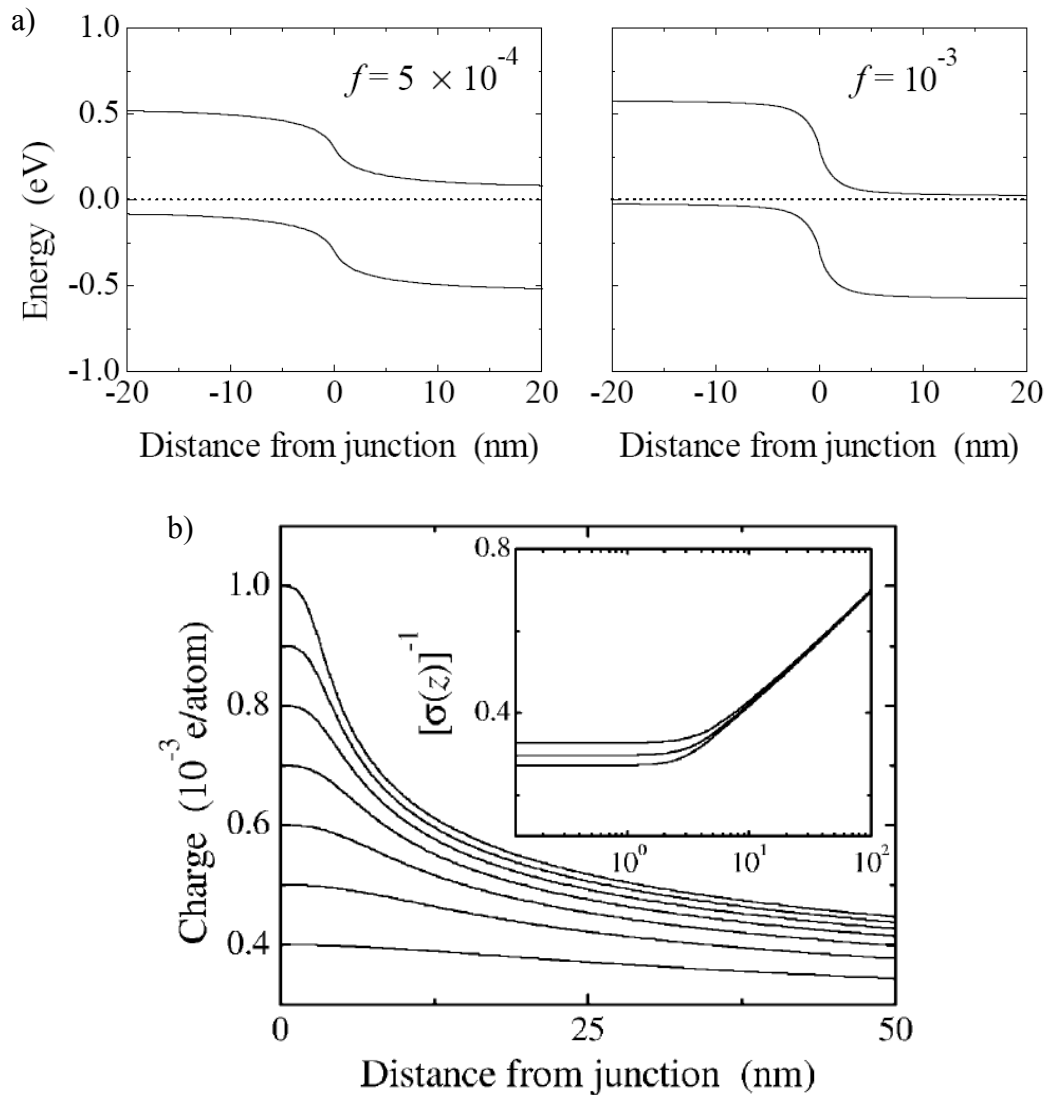


Figure 1.10 Résultats de calcul de jonction PN avec le même dopage côtés N et P mais de nature opposée [Léon99] : a) Schéma de bandes d'énergie (traits pleins) et niveau de Fermi (pointillés) pour 2 dopages $5 \cdot 10^{-4}$ et $1 \cdot 10^{-3}$, b) Charge par atome de carbone côté N pour des dopages de $4 \cdot 10^{-4}$ à $1 \cdot 10^{-3}$ (par pas de $1 \cdot 10^{-4}$ de bas en haut), l'encart présente la charge normalisée à 1 à $1 \mu\text{m}$ de la jonction pour les dopages $8 \cdot 10^{-4}$, $9 \cdot 10^{-4}$ et $1 \cdot 10^{-3}$.

Enfin, un dopage électrostatique, plutôt que chimique, permet de moduler le dopage en modifiant la tension appliquée aux bornes de la structure MOS (où le semiconducteur est le nanotube) [Chen06, Lin05].

IV.g. Métal des contacts

Le type de métal des contacts de source et de drain détermine la nature du contact (Schottky ou ohmique) ainsi que les paramètres associés (hauteur de barrière Schottky voire dopage selon la nature des liaisons non-satisfaites du métal).

Pour des géométries planaires, par exemple pour des technologies MOS Silicium, les états localisés dans la bande interdite, à proximité de l'interface métal-semiconducteur (MIGS pour Metal-Induced Gap States), modifient la hauteur de la barrière Schottky et rendent cette hauteur de barrière quasi-indépendante du travail d'extraction du métal [Dai06].

En revanche, pour le cas du nanotube, où le semi-conducteur est monodimensionnel, ces MIGS créent des dipôles à l'interface [Léon00]. Ainsi, la courbure du niveau de Fermi (Fermi-level pinning) n'influence pas la hauteur de la barrière Schottky. Celle-ci dépend du travail d'extraction du métal [Léon00]. Il est nécessaire d'avoir un travail d'extraction élevé (faible) pour diminuer la hauteur de barrière Schottky vue par les trous (électrons) et obtenir des transistors de type P (N) [Tsen04]. Le travail d'extraction des nanotubes est de 4,5-4,8 eV [Anan06, Kim08, Robe08, Tans98] et est certainement, selon [Wild98], proche de celle du graphène (4,5 eV).

Ainsi, pour les trous, les meilleurs métaux trouvés sont le palladium [Chen05ii] (travail d'extraction égal à environ 5,1 eV [Anan06, Cast07, Jave03i, Tsen06]), le rhodium [Dai06], le nickel [Maki06]. Il faut noter que la barrière Schottky est quasi-nulle pour les grands diamètres de tube (>1,6 nm) alors qu'elle est toujours présente et non-négligeable pour de plus petits diamètres (la bande interdite est plus grande) [Chen05ii, Dai06, Tsen06]. Le palladium a en plus l'avantage de présenter une bonne mouillabilité avec les nanotubes [Jave03ii].

Des contacts en aluminium (travail d'extraction d'environ 4,1 eV) [Chen05ii, Jave03i] ou en magnésium [Maki06] permettent d'obtenir une hauteur de barrière Schottky faible pour les électrons. Le gadolinium (travail d'extraction égal à environ 3,1 eV [Kim08]) permet en plus de limiter l'effet de l'oxygène (alors que, pour tous les autres métaux utilisés, le travail d'extraction peut être modifié par l'exposition à l'oxygène notamment [Hein06]) et montre une meilleure affinité avec le nanotube que l'aluminium [Kim08].

V. Présentation des différents types de transistors

Ce paragraphe présente les différents types de transistors à base de nanotubes de carbone (ou CNFET pour Carbon Nanotube Field Effect transistor). Grossièrement, ces transistors fonctionnent sur le même principe : faire circuler un courant entre les électrodes de source et de drain à travers le nanotube semiconducteur (qui joue le rôle de canal) selon la polarisation de l'électrode de grille, isolée du canal par un diélectrique. La principale différence entre les transistors décrits ci-après réside dans la nature du contact entre le nanotube semiconducteur et les électrodes métalliques de source et de drain. Nous verrons qu'il est également possible d'avoir des phototransistors à base de nanotubes de carbone. Ainsi, les transistors à barrières Schottky, à modulation de hauteur de barrière, à grille commandée optiquement et à double grille sont présentés.

V.a. *Transistor à barrières Schottky (SB-CNFET)*

Les électrodes de source et drain du transistor à barrières Schottky (SB-CNFET) sont déposées directement sur le nanotube. Historiquement, les premiers transistors fabriqués étaient de ce type bien que le travail d'extraction des métaux alors utilisés (Pt pour le premier, Au pour le 2^e) soit supérieur à 5 eV. Des barrières Schottky au niveau des contacts métal-nanotube apparaissent [Anan06, Appe02]. Le nanotube n'est pas dopé (du moins pas volontairement), de l'oxygène peut être présent à l'interface et modifier le travail d'extraction des électrodes et donc la hauteur de la barrière (voir paragraphe IV.e).

Ces barrières sont rendues plus ou moins passantes aux porteurs selon la polarisation de grille. Ainsi, la polarisation de grille agit plus sur la variation de la résistance de contact que sur la conductance du canal [Hein02]. Lorsque la grille n'est pas polarisée $V_{GS} = 0$ V, les électrons ou les trous doivent franchir une barrière de potentiel pour passer bien que les

bandes d'énergie soient courbées par la présence d'une tension de drain V_{DS} non nulle (Figure 1.11.a) : les deux barrières Schottky côté drain et source sont bloquées (parties i et iii de la Figure 1.11.a)). Lorsque $V_{GS} < 0$ V, les bandes de conduction et de valence du « corps » du nanotube (partie ii de la Figure 1.11.a)) sont alors suffisamment remontées, les trous peuvent alors passer à travers la barrière Schottky affinée : un courant par effet tunnel apparaît (Figure 1.11.b)). De la même manière avec $V_{GS} > 0$ V, le schéma de bandes d'énergie de la partie interne du canal est abaissé et affine les barrières Schottky qui laissent alors passer les électrons par effet tunnel (Figure 1.11.c)) [Lin04, Lin05].

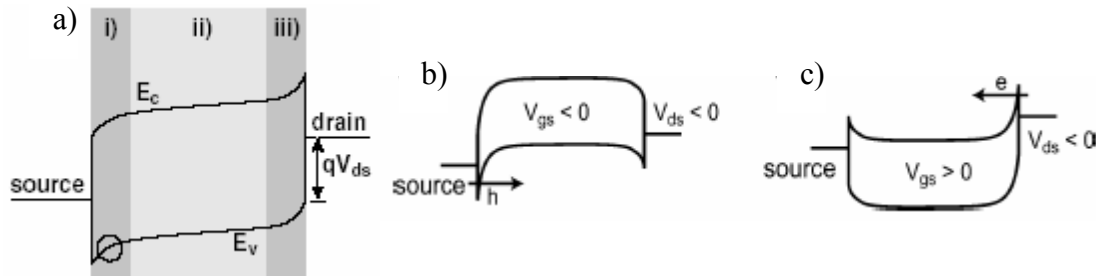


Figure 1.11 Schéma de bandes d'énergie avec $V_{DS} < 0$ et a) sans polarisation de grille, b) avec polarisation de grille négative et c) positive [App02, Lin04, Lin05].

Il est possible de faire circuler les 2 types de porteurs en même temps : il faut que la barrière côté source soit suffisamment affinée pour les trous, i.e. $V_{GS} < 0$ V, et idem pour la barrière côté drain pour le passage des électrons, i.e. $V_{GD} > 0$ V. Dans le cas où le niveau de Fermi des métaux est aligné avec le milieu de la bande interdite du nanotube, pour $V_{GS} = V_{DS} / 2$, les courants d'électrons et de trous sont égaux [Avou06]. Cette ambipolarité peut être intéressante pour des applications optoélectroniques [Avou06].

Ce type de transistor a une pente inverse sous le seuil $S = dV_{GS}/d(\log I_{DS})$ élevée (le passage de l'état OFF à l'état ON nécessite une large excursion de V_{GS}) [Chen05i] de l'ordre de 200 mV/décade. Selon la position du niveau de Fermi du métal par rapport au schéma de bandes d'énergie du nanotube, le transistor est plus ou moins ambipolaire : les branches N et P sont plus ou moins marquées [Chen05ii, Lin05]. Le courant à l'état OFF est dépendant de V_{DS} [Lin05] (Figure 1.12). Les barrières Schottky, lorsqu'elles sont passantes par effet tunnel, ne laissent pas passer autant de porteurs qu'un contact sans barrière Schottky : le courant à l'état ON est limité [Chen05i]. Ainsi, une des possibilités d'amélioration des figures de mérite du transistor à nanotube consiste à optimiser le contact métal/semiconducteur : c'est le but notamment du transistor à modulation de hauteur de barrière décrit dans le prochain paragraphe.

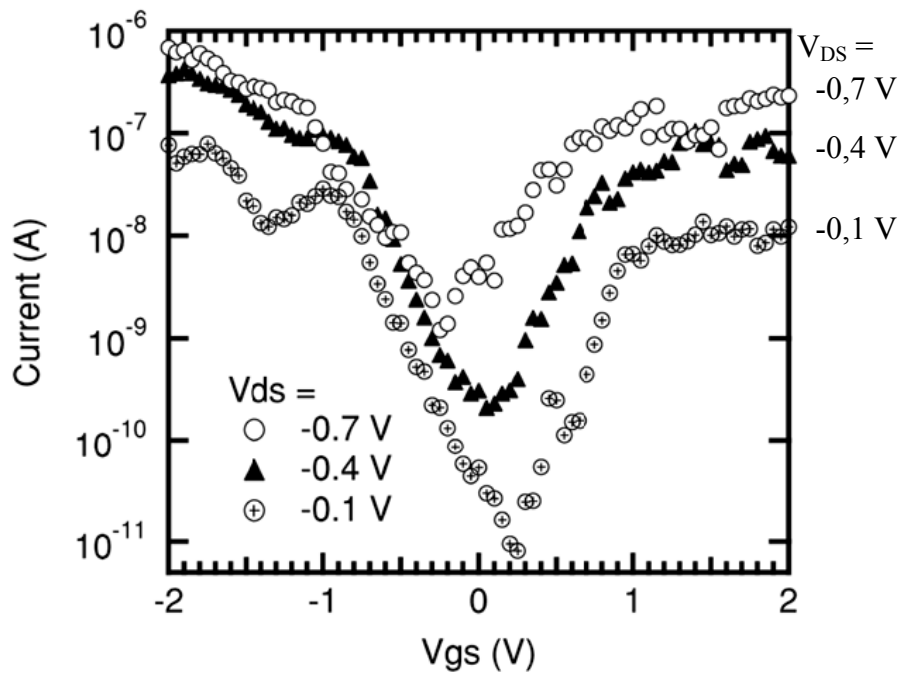


Figure 1.12 Caractéristiques de transfert mesurées pour différents V_{DS} d'un transistor à barrières Schottky [Lin05].

Sur la caractéristique de transfert de la Figure 1.12, la branche N est décalée vers la gauche (vers les V_{GS} plus faibles) pour les V_{DS} plus négatifs. Le courant d'électron est limité, pour des $V_{DS} < 0$ V, par la barrière côté drain (voir Figure 1.11.c)). Celle-ci est fonction de la tension V_{GD} : plus V_{GD} est positif, plus la barrière est affinée. Le décalage de la branche N selon V_{DS} correspond grossièrement à la modification de V_{DS} . Le courant OFF correspond à la polarisation de grille pour laquelle les courants de trous et d'électrons sont égaux : le décalage (vers les V_{GS} plus faibles) et l'augmentation du courant OFF est une conséquence du décalage de la branche N [Lin05].

Nous pouvons remarquer la saturation du courant sur la caractéristique de sortie de la Figure 1.13. Dans le cas de la branche P, la diminution de V_{DS} fait remonter le niveau de Fermi de l'électrode de drain et diminue la hauteur de barrière côté drain vue par les trous jusqu'à la rendre négative mais ne modifie pas la position du schéma de bande de la partie interne du canal (commandée par la grille) ni la barrière Schottky côté source (Figure 1.11.c)). Le courant de trous est alors limité par la barrière Schottky côté source et le haut de la bande de valence de la partie interne. Il n'y a plus d'évolution du courant de drain. Ce même phénomène apparaît pour les électrons avec une tension de drain de plus en plus positive.

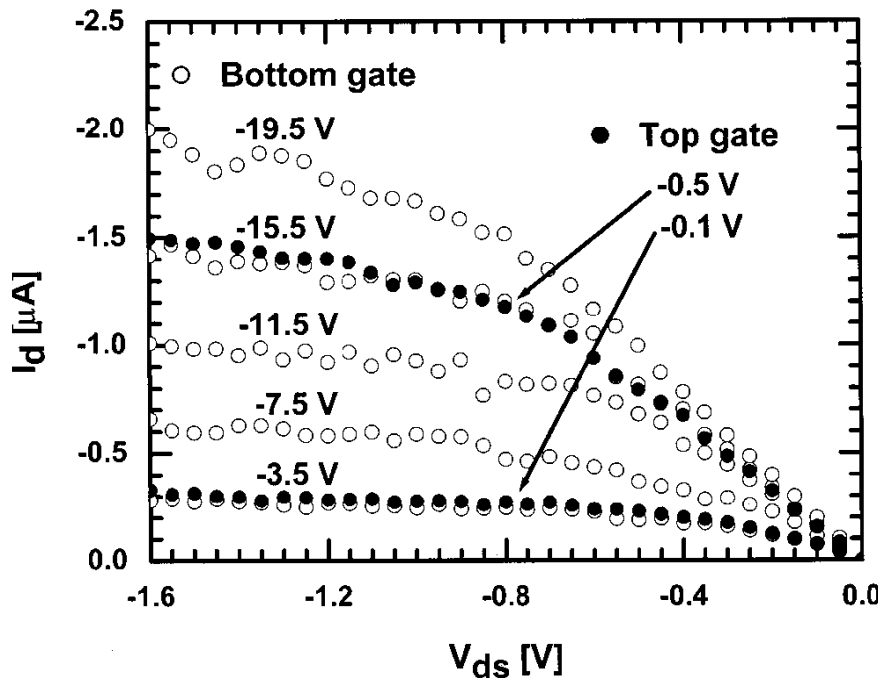


Figure 1.13 Caractéristiques de sortie mesurées pour différentes tensions de grille et pour 2 géométries de grille (une par-dessus en cercles pleins, l'autre par-dessous en cercles vides) sur la même portion de nanotube [Wind02].

V.b. Transistor à modulation de hauteur de barrière (C-CNFET)

De part son mode de fonctionnement et son mode de fabrication, ce transistor est aussi appelé CNFET de type MOS (MOS-like CNFET) ou C-CNFET pour CNFET Conventionnel. En effet, le contact entre le métal de source ou de drain et le nanotube est supposé ohmique ou avec une hauteur de barrière faible [Appe05, Chen05ii, Dai06, Jave05], améliorée par rapport au transistor à nanotube à barrière Schottky. Les extrémités du nanotube, à proximité des contacts de source et de drain, servent d'accès aux porteurs tandis que la partie interne, dont la position des bandes d'énergies est modulée par la polarisation de grille, bloquera ou non le passage des porteurs (les électrons dans le cas de la Figure 1.14).

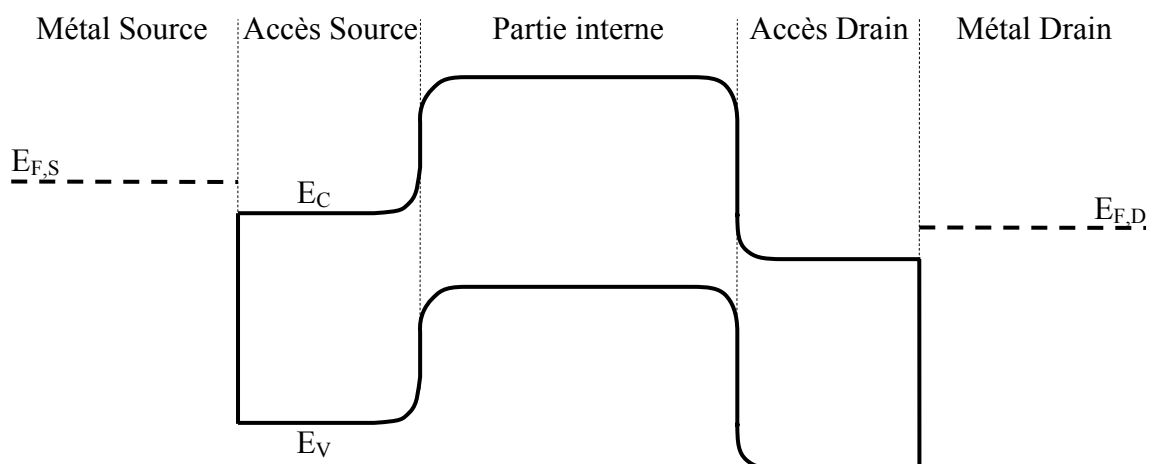


Figure 1.14 Représentation schématique des bandes d'énergie (pas de barrières Schottky) du transistor C-CNFET selon l'axe source-drain pour $V_{GS} = 0 V$ et $V_{DS} > 0 V$. $E_{F,S}$ et $E_{F,D}$ sont les niveaux de Fermi des métaux de source et drain respectivement.

De tels transistors peuvent être obtenus par dopage des accès source et drain [Chen05i, Jave05] ou en utilisant un métal approprié [Dai06, Jave03i, Jave03ii, Yais04]. L'utilisation de palladium ou de rhodium pour des nanotubes de grand diamètre ($> 1,6$ nm) [Dai06] ou d'or [Yais04] permet d'obtenir un contact Schottky avec une hauteur de barrière proche de zéro pour les trous (alignement du niveau de Fermi du métal avec la bande de valence du nanotube). Pour les électrons, le métal qui rapproche le plus niveau de Fermi du métal et bande de conduction est, pour le moment, l'aluminium : la hauteur de barrière obtenue est quasi-nulle [Jave03i].

Les performances de ce type de transistor sont améliorées par rapport au SB-CNFET : une pente inverse sous le seuil plus faible ($S = 85$ mV/décade) [Chen05i], un courant à l'état passant plus élevé [Appe05, Chen05i, Jave05], une ambipolarité souvent supprimée [Appe05, Chen05i] (la branche N ou P est au moins largement atténuée [Chen05ii, Jave05]). Le courant OFF est parfois augmenté : la cause supposée est l'apparition d'un courant tunnel bande-à-bande [Appe05, Jave05].

Ce transistor est l'objet de la modélisation compacte du Chapitre 2.

D'autres configurations de transistors que celle présentée Figure 1.14 permettent d'améliorer les performances du transistor à barrières Schottky :

- le transistor double grille de Pourfath et al. [Pour05] où une grille contrôle le contact côté source, l'autre côté drain,
- le transistor à grille arrière de Lin et al. [Lin04] où le contrôle de la grille est supprimé à proximité du contact drain par une tranchée profonde,
- le transistor à 4 grilles de Wind et al. [Wind03] où les grilles proches des contacts source et drain dopent électrostatiquement les accès source et drain et rendent passantes les barrières Schottky, tandis que les grilles centrales modulent la hauteur de barrière comme pour le C-CNFET (ce transistor fonctionne comme le DG-CNFET),
- le transistor double grille DG-CNFET de Lin et al. [Lin05] décrit dans le paragraphe V.d.

V.c. Transistor à grille commandée optiquement (OG-CNFET)

Le principe de fonctionnement de ce transistor est proche de celui des précédents : faire passer un courant entre les électrodes de source et de drain à travers un nanotube selon la quantité de lumière éclairant le nanotube (sans grille ni isolant par-dessus) et y générant des paires électrons-trous [Frei03, Qiu05]. L'insolation du dispositif va modifier l'effet de la polarisation de grille. Le stockage des charges générées et donc la sensibilité aux photons peut être améliorée par l'ajout d'un polymère photoconducteur, situé autour du nanotube entre les électrodes de source et de drain (voir Figure 1.15) [Borg06]. Dans ce cas, l'insolation du dispositif peut dominer l'effet de la polarisation de grille et le dispositif peut être dit « commandé optiquement » (Optically Gated CNFET : OG-CNFET) [Borg06, Liao08]. Il est possible de choisir la longueur d'onde à laquelle le dispositif sera sensible en choisissant le polymère.

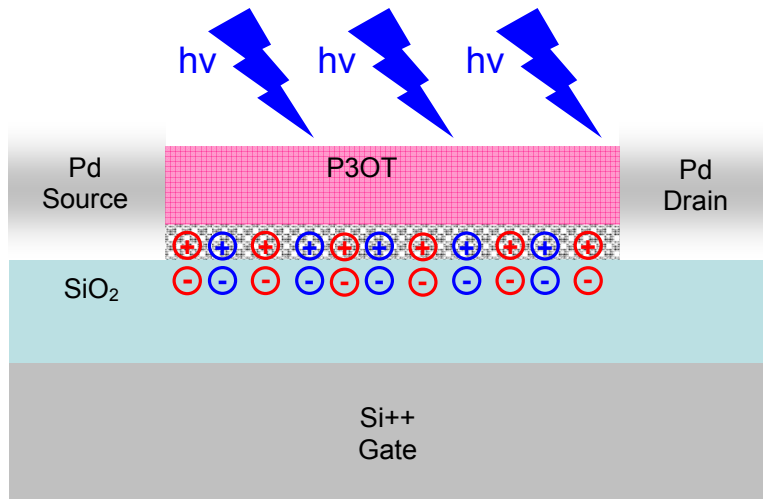


Figure 1.15 OG-CNFET sous insolation. Les charges en rouge représentent le dopage de type P induit par le dépôt du polymère P3OT (poly3-octylthiophene-2,5-diyl) celles en bleu les charges photogénérées [Liao08].

V.d. Transistor double grille (DG-CNFET)

Il existe plusieurs configurations de transistor double grille (DG-CNFET). Celle décrite ci-après est une amélioration du transistor à modulation de hauteur de barrière : au lieu d'avoir un dopant chimique et/ou un choix de métal spécifiques pour obtenir des zones d'accès source et drain de type N ou P, ces zones d'accès sont dopées électrostatiquement en polarisant une grille supplémentaire (aussi appelée grille arrière ou Back Gate -BG-) [Gogu08, Lin05]. La grille avant, Front Gate -FG-, (ou grille centrale ou interne) permet alors de moduler la position du schéma de bandes d'énergie de la partie interne et donc la hauteur de barrière comme pour le transistor C-CNFET. Comme indiqué sur la Figure 1.16, la grille avant, située entre le nanotube et la grille arrière, écran l'effet de la grille arrière. Ainsi, la partie interne ne subit l'effet que de la grille avant. Dans une autre configuration, le nanotube serait entre les 2 grilles (les nanotubes sont déposés avant la grille avant), la partie interne subirait l'effet des polarisations des 2 grilles [Jave04].

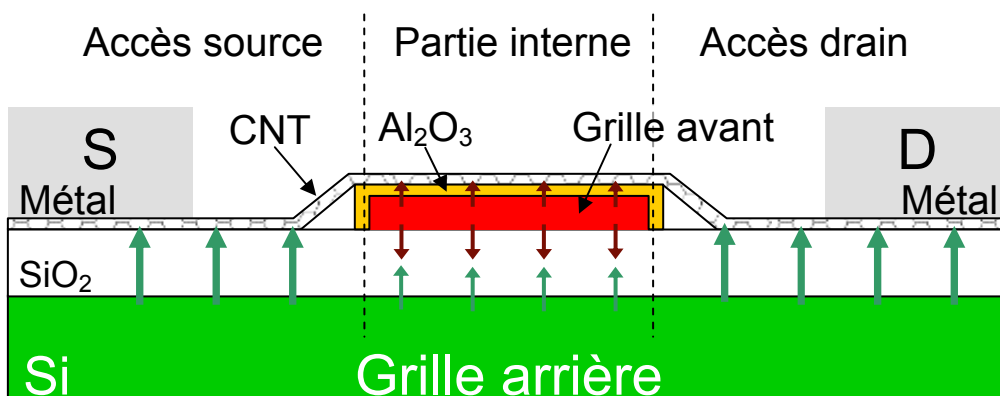


Figure 1.16 Vue en coupe du DG-CNFET. Les flèches rouges et vertes représentent l'effet de la grille avant et de la grille arrière respectivement.

Ainsi, ce transistor est reconfigurable : il sera de type N (Figure 1.17.b)) ou P (Figure 1.17.c)) pour une polarisation de la grille arrière V_{BG} positive ou négative qui abaisse ou remonte les bandes d'énergie des zones d'accès, respectivement. Pour une tension de grille

arrière V_{BG} nulle (Figure 1.17.a)), le transistor est bloqué : on suppose par simplicité dans un premier temps que le niveau de Fermi du métal s'aligne avec le milieu de la bande interdite du nanotube, des tensions de bandes plates sont ajoutées ensuite dans le modèle [Gogu08]. Il est à noter que la zone d'accès drain est également affectée par la tension drain-source V_{DS} via la charge.

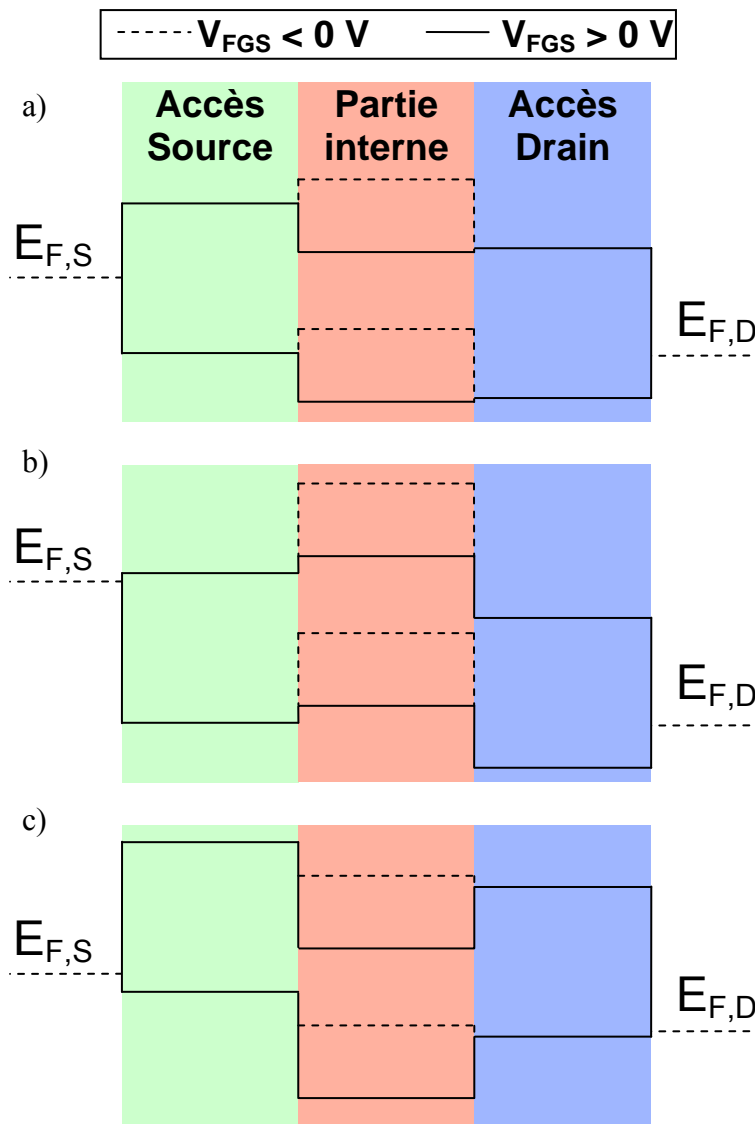


Figure 1.17 Schémas de bandes d'énergie de l'accès source, de la partie interne et de l'accès drain de gauche à droite avec $V_{DS} > 0 V$, a) $V_{BGS} = 0 V$, b) $V_{BGS} > 0 V$ et c) $V_{BGS} < 0 V$ pour 2 valeurs de la tension de la grille avant V_{FGS} . $E_{F,S}$ et $E_{F,D}$ sont les niveaux de Fermi des métaux de source et drain respectivement. Ce schéma de bandes d'énergie est simplifié, il devrait y avoir des barrières Schottky aux interfaces métal/zone d'accès [Gogu08].

Ce transistor est l'objet de la modélisation compacte du Chapitre 3.

Chapitre 2 : Modèle du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière

I. Introduction

Dans ce chapitre est décrite la modélisation compacte physique et électrique du transistor à nanotube de carbone à modulation de hauteur de barrière aussi appelé CNFET de type MOS (MOS-like CNFET) ou C-CNFET pour CNFET Conventionnel. La modélisation décrite ci-après est compacte, i.e. dans l'objectif de simuler des circuits utilisant de nombreux transistors (jusqu'à plusieurs centaines) en un temps « raisonnable » (10-20 minutes pour de gros circuits). Afin de pouvoir s'adapter aux dispersions technologiques de ce transistor, la modélisation est basée sur la physique. Enfin, un schéma électrique équivalent du modèle est donné.

Avant de décrire les équations de la charge et du courant, le fonctionnement global de ce transistor est présenté.

II. Fonctionnement

Nous décrivons ici le cas du transistor C-CNFET de type N, i.e. les accès source et drain du nanotube sont dopés N (Figure 2.1). Les calculs pour le transistor de type P sont similaires.

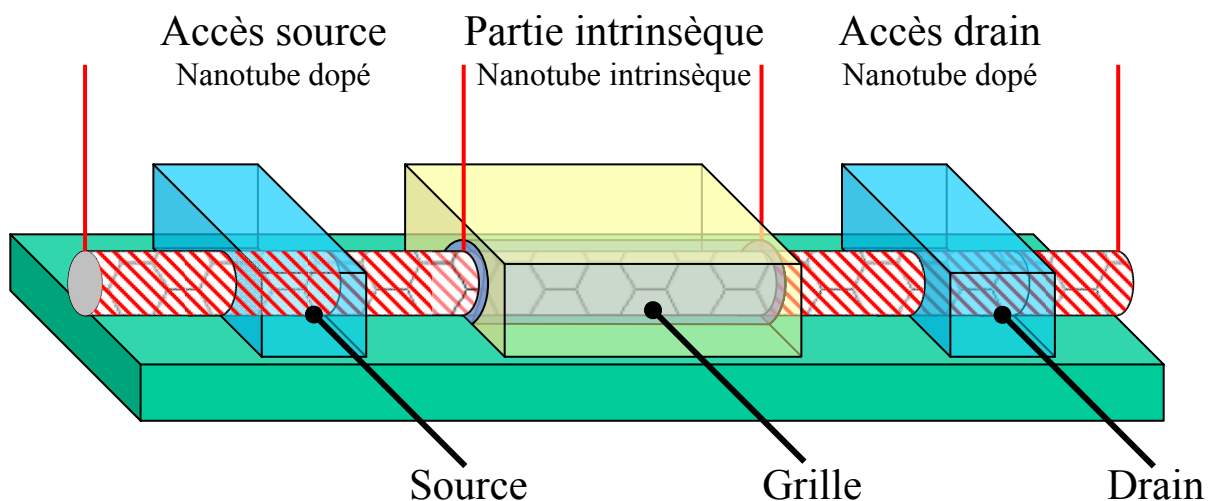


Figure 2.1 Schéma du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière ou C-CNFET.

La Figure 2.2.a) montre le schéma de bandes d'énergie selon l'axe source-drain. Le dopage des accès source et drain remonte leur niveau de Fermi. À polarisation nulle, c'est-à-dire à l'équilibre, les niveaux de Fermi de chaque zone sont alignés. Ainsi, les niveaux de Fermi des métaux (ou des accès) sont alignés avec le milieu de la bande interdite du nanotube intrinsèque.

Les hypothèses suivantes sont posées :

- le canal est suffisamment court (50-100 nm) pour que le transport y soit balistique (pas de dispersion des porteurs),
- les électrons issus de la source remplissent les états $+k$ de la partie intrinsèque du canal (Figure 2.2.b)) et ceux issus du drain remplissent les états $-k$ à condition

que les contacts soient « sans réflexion ». C'est-à-dire qu'il faut que la probabilité de réflexion d'un électron qui sort du conducteur (i.e. le canal) pour entrer dans la zone d'accès soit négligeable. Ceci est vrai quand le niveau de Fermi de la zone dopée n'est pas trop près du bas de la bande de conduction du nanotube intrinsèque [Datt97].

Ces hypothèses nous permettent de calculer la charge de manière « simple » (i.e. sans se préoccuper de la réflexion des porteurs aux interfaces) dans le paragraphe III et d'utiliser le formalisme de Landauer dans le calcul du courant paragraphe IV.

Les états sont alors remplis selon la distribution de Fermi correspondante (Figure 2.2.b)).

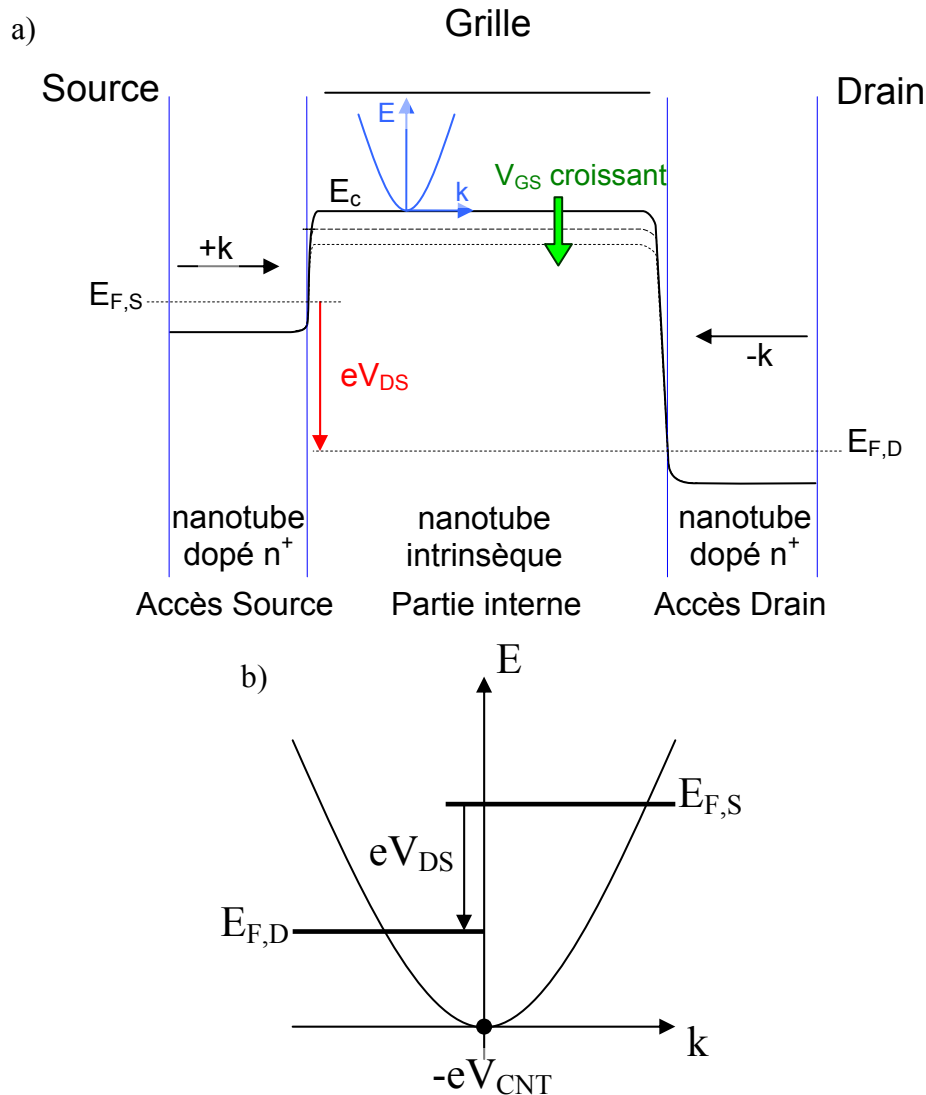


Figure 2.2 a) Représentation schématique simplifiée du bas de la bande de conduction selon l'axe source-drain pour $V_{DS} > 0$ V. b) Niveau d'énergie des électrons dans la bande de conduction selon le vecteur d'onde dans la partie interne dont le bas de bande est modulé par le potentiel de canal V_{CNT} . Les états $+k$ sont remplis par le niveau de Fermi de la source et les états $-k$ par le niveau de Fermi du drain. Remarque : à des fins de représentation, les niveaux de Fermi de source et de drain sont bien au-dessus du bas de bande de conduction.

Lorsque la tension V_{GS} augmente, elle augmente le potentiel du canal V_{CNT} , qui abaisse la bande de conduction de la partie interne, et permet le passage des électrons (un courant non

nul existe alors si V_{DS} est non nul). Une augmentation de V_{GS} implique également une augmentation du nombre d'électrons dans la bande de conduction de la partie interne. Cette charge provoque une différence de potentiel entre V_{GS} et V_{CNT} à travers la capacité d'oxyde de grille C_{INS} (lorsque V_{GS} augmente, V_{CNT} n'est pas augmenté de la même quantité).

Le paragraphe suivant décrit le calcul de la charge dont l'influence s'avère importante dans le calcul du courant.

III. Calcul de la charge

Dans la littérature, deux manières de prendre en compte la charge accumulée dans le canal du transistor à nanotube sont décrites : soit cette charge est calculée de manière numérique (par résolution des fonctions de Green non-équilibrées [Rahm03] ou de l'équation de Boltzmann [Frég08]), soit en considérant que la capacité équivalente à cette charge est de 400 pF/m par sous-bande conductrice [Jave02].

Rappelons que nous souhaitons construire un modèle compact et physique (simulation de circuits, qui s'adapte aux aléas technologiques, en un temps raisonnable). Le problème de la première approche est la lourdeur de calcul et celui de la deuxième est le manque de considération physique : quand peut-on dire (pour quelle valeur de V_{CNT} ou de V_{GS}) qu'une sous-bande est conductrice ?

Notons également que, dans le 2^e cas, il convient de séparer le régime quantique du régime « classique » ou de considérer que la capacité quantique C_Q est constante (pour une sous-bande et s'incrémentera au fur et à mesure que les sous-bandes deviennent conductrices). L'expression de la capacité quantique est donnée par [John04] :

$$C_Q = \frac{dQ_{CNT}}{dV_{CNT-S}} \quad 2.1$$

avec Q_{CNT} la charge stockée dans le canal. Le régime « classique » correspond au cas du transistor MOS Silicium, où C_Q est très supérieur à C_{INS} , la capacité de l'oxyde de grille. Dans ce cas, V_{GS} est supérieur à V_{CNT-S} , le régime de fonctionnement dépend de la charge accumulée dans le canal. À l'inverse, le régime quantique correspond à $C_Q \ll C_{INS}$, on a alors $V_{GS} \approx V_{CNT-S}$. La capacité grille-source C_{GS} est, selon le régime, plus ou moins dépendante de la capacité d'oxyde ou de la capacité quantique. La capacité grille-source est définie par :

$$C_{GS} = \frac{dQ_{CNT}}{dV_{GS}} \quad 2.2$$

Définissons également le potentiel du canal :

$$V_{CNT-S} = V_{GS} + \frac{Q_{CNT}}{C_{INS}} \quad 2.3$$

Des équations 2.1, 2.2 et 2.3, on en déduit l'égalité suivante :

$$\frac{1}{C_{GS}} = \frac{1}{C_{INS}} + \frac{1}{C_Q} \quad 2.4$$

Ainsi, selon le régime de fonctionnement, c'est la plus faible des capacités quantique ou d'oxyde qui domine.

Chapitre 2 : Modèle du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière

Lorsque le transistor est bloqué, C_Q est nul : on est en régime quantique. Quand le transistor devient passant, C_Q augmente et le transistor rentre progressivement en régime de fonctionnement « classique ». Entre les 2 régimes, il conviendrait de considérer les 2 capacités.

Pour définir notre modèle, les 2 régimes ne sont pas différenciés : la charge Q_{CNT} est calculée en fonction du potentiel du canal V_{CNT} .

Selon l'équation 2.3, il est nécessaire de connaître la charge Q_{CNT} pour évaluer le potentiel du canal. Elle est calculée à partir de la densité de charge linéique n_{CNT} , i.e. la charge par unité de longueur du canal, qui résulte de l'intégration sur l'énergie du produit de la densité d'états effectifs $g(E)$ par la distribution de Fermi $f(E)$:

$$n_{CNT} = -e \int_{E_0}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} [f(E - E_{F,S}) + f(E - E_{F,D})] dE \quad 2.5$$

avec :

- E_0 l'énergie du milieu de bande interdite,
- e la charge électronique,
- $E_{F,S(D)}$ le niveau de Fermi de la source (drain).

Notons qu'il s'agit là de la densité de charge linéique des électrons dans la bande de conduction (la charge électronique e est positive), l'intégrale est faite sur les énergies positives. Pour les trous dans la bande de valence, la densité de charge se calcule de manière similaire. Le facteur $\frac{1}{2}$ rappelle que la moitié des états ($+k$ ou $-k$) sont remplis selon la distribution de Fermi de la source ou du drain, respectivement. La distribution de Fermi de source (ou de drain) s'écrit :

$$f(E - E_{F,S(D)}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F,S(D)}}{k_B T}\right)} \quad 2.6$$

L'expression de la densité d'états est donnée par :

$$g(E) = \frac{8}{3\pi a_{C-C} V_{pp\pi}} \sum_{p=1}^{nb_bands} \frac{|E - E_0|}{\sqrt{(E - E_0)^2 - sbbd[p]^2}} h(|E - E_0| - sbbd[p]) \quad 2.7$$

avec :

- a_{C-C} , la distance entre 2 atomes de carbone soit environ 0,142 nm,
- $V_{pp\pi}$, l'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone comprise entre 2,4 et 3,14 eV (voir détails du Tableau 1.1 du Chapitre 1 : paragraphe III),
- $sbbd[p]$, le bas de la $p^{ième}$ sous-bande de conduction (ou le haut de la $p^{ième}$ sous-bande de valence pour les trous) [Mane06],
- nb_bands est le nombre de sous-bandes du nanotube (dépendant de la chiralité),
- $h(x)$, la fonction de Heaviside décrite par $h(-|x|) = 0$ et $h(|x|) = 1$

La somme sur p représente la discrétisation du schéma de bande d'énergies en sous-bandes. Comme indiqué sur la Figure 2.3, pour les énergies égales aux bas de sous-bande, la densité d'états tend vers l'infini : ceci est la manifestation mathématique des singularités de Van Hove. La fonction de Heaviside, qui impose une densité d'états nulle pour les énergies inférieures au bas de sous-bande (bande interdite), permet d'ajuster la borne inférieure de

l'intégrale sur l'énergie au bas de la $p^{\text{ième}}$ sous-bande de conduction (équation 2.5 de la densité de charge). La double-dégénérescence des sous-bandes est déjà prise en compte dans la constante $8/(3\pi a_{c-c} V_{pp\pi})$ (nombre de modes transverses par sous-bande M_{sbbd} , discuté paragraphe IV de ce chapitre).

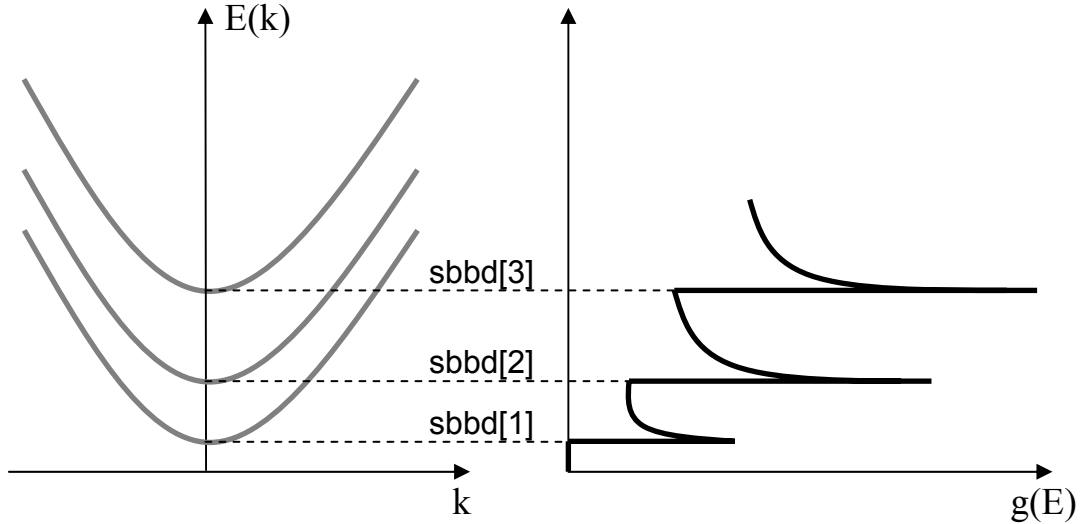


Figure 2.3 À gauche, représentation du schéma de bandes des 3 premières sous-bandes de conduction d'un nanotube semi-conducteur en fonction du vecteur d'onde avec, à droite, la densité d'états effectifs associée selon l'énergie montrant les singularités de Van Hove pour les énergies égales aux bas de sous-bande.

La densité de charge linéique est composée de 2 contributions : celle de source et celle du drain. Chaque contribution est exprimée comme étant une somme des contributions de chaque sous-bande :

$$\begin{aligned}
 n_{CNT} &= n_{CNT}^+ + n_{CNT}^- \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{nb_bands} n(V_{CNT} - V_S, sbbd[p]) + \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{nb_bands} n(V_{CNT} - V_D, sbbd[p])
 \end{aligned}
 \tag{2.8}$$

En prenant pour référence des énergies le milieu de la bande interdite E_0 , l'équation de la densité d'états se simplifie : $E_0 = 0$ eV. Ce choix implique également une modification de la vision du fonctionnement : jusqu'ici, nous considérons que c'était le niveau de Fermi de la source qui était « fixe » et que, selon la polarisation, la partie interne et le niveau de Fermi du drain variaient (une augmentation de V_{GS} abaissait le bas de la bande de conduction). Maintenant, c'est la partie interne qui est fixe et les niveaux de Fermi de source et de drain vont, selon la polarisation, varier. Rappelons que le milieu de la bande interdite du nanotube intrinsèque, E_0 , et les niveaux de Fermi des accès, $E_{F,S}$ et $E_{F,D}$, sont alignés à polarisation nulle.

En considérant le potentiel $V = V_{CNT} - V_S$ pour la contribution de source ou $V = V_{CNT} - V_D$ pour celle du drain, les densités de charge associées n_{CNT}^+ et n_{CNT}^- , respectivement, s'écrivent pour une sous-bande donnée (à un facteur $1/2$ près) :

$$n(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\pi}} \int_{sbbd[p]}^{+\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{k_B T}\right)} dE \quad 2.9$$

Ainsi, la densité d'états ne comporte pas de terme lié à la polarisation alors que la distribution de Fermi en est dépendante.

Étant donné que l'intégrale de l'équation 2.9 n'a pas de solution analytique pour toute la gamme des potentiels V et pour toutes les énergies, des solutions partielles doivent être considérées :

- selon la différence entre le bas de la $p^{\text{ième}}$ sous-bande $sbbd[p]$ et le potentiel V ,
- selon la variation de la distribution de Fermi (i.e. la position du niveau de Fermi) par rapport à celle de la densité d'états en considérant différentes plages d'énergies.

La Figure 2.4 présente les différents cas à considérer qui mènent aux calculs des solutions partielles et sont discutés en détails dans les paragraphes suivants.

De plus, il convient de noter que, dans notre modèle, pour des questions de temps de simulation et de convergence, l'addition sur les sous-bandes est limitée aux contributions supérieures à 1 % de la somme des contributions déjà calculées.

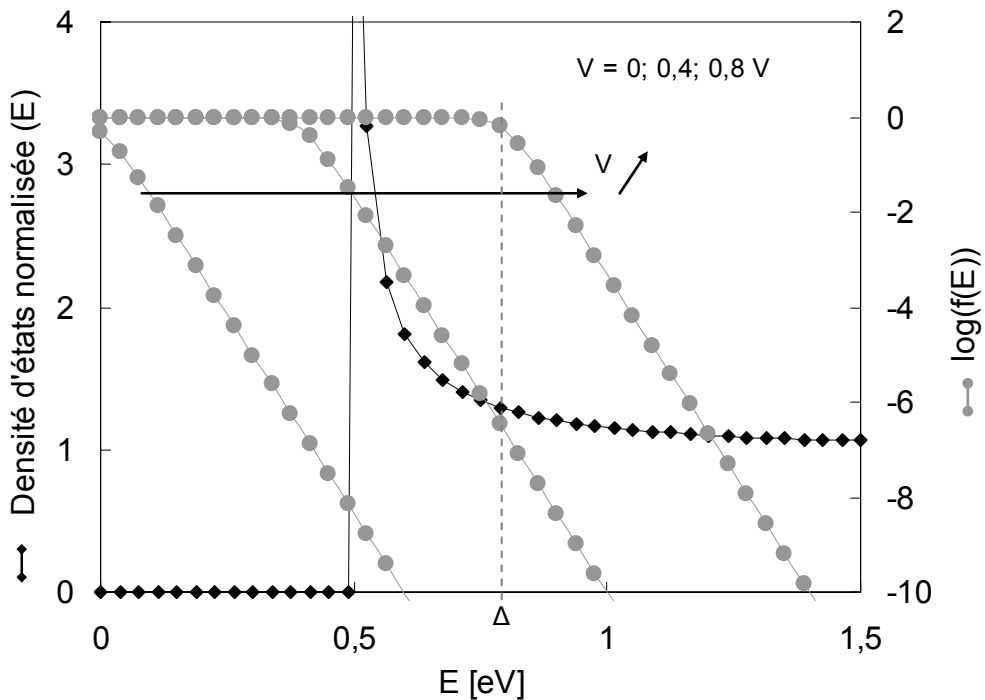


Figure 2.4 Axe de gauche, en losange noir, la densité d'états normalisée par $8/(3\pi a_{C-C} V_{pp\pi})$ pour une seule sous-bande, dont le minimum vaut 0,5 eV, en fonction de l'énergie. Axe de droite, en rond gris, la distribution de Fermi en fonction de l'énergie pour 3 valeurs de V .

III.a. Solutions analytiques partielles

III.a.1 Faible polarisation : $eV < sbbd[p]$

À faible polarisation, pour un potentiel V inférieur au bas de sous-bande considéré (voir la Figure 2.4 pour $V = 0$ et $0,4$ V avec $sbbd[p] = 0,5$ eV), l'intégration de l'équation 2.9 se fait sur une gamme d'énergies supérieures au potentiel V , la distribution de Fermi est alors considérée comme une exponentielle décroissante, i.e. :

$$f(E - eV) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{k_B T}\right)} = \exp\left(-\frac{(E - eV)}{k_B T}\right) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \exp\left(-\frac{n(E - eV)}{k_B T}\right)$$

$$\approx \exp\left(-\frac{E - eV}{k_B T}\right)$$
2.10

L'équation 2.9 s'écrit alors :

$$n(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Gamma}} \int_{sbbd[p]}^{+\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \exp\left(-\frac{E - eV}{k_B T}\right) dE$$

$$= \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Gamma}} \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) \int_{sbbd[p]}^{+\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE$$
2.11

L'équation 2.11 a une solution analytique, puisque les conditions $sbbd[p] > 0$ et $\text{Re}(1/k_B T) > 0$ sont satisfaites sans ambiguïté (notons que, dans le cas du transistor type P, pour le calcul de la charge associée aux trous, il est nécessaire de faire un changement de variable pour travailler avec des énergies positives et un haut de sous-bande de valence positif) [Grad94] :

$$n(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Gamma}} \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) sbbd[p] K_1\left(\frac{sbbd[p]}{k_B T}\right)$$
2.12

où K_1 est la fonction de Bessel modifiée du premier ordre. Un développement asymptotique, pour des valeurs d'argument $z = \frac{sbbd[p]}{k_B T}$ élevées (évalué, dans le pire cas, à 5,8 pour un diamètre de tube de 2,15 nm, soit $sbbd[p] \approx 0,2$ eV, à 400 K), est proposé par [Abra70i] :

$$K_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left(1 + \frac{4\nu^2 - 1}{8z} + \frac{(4\nu^2 - 1)(4\nu^2 - 9)}{2!(8z)^2} + \dots \right)$$
2.13

avec $\nu = 1$ dans notre cas. Le premier terme de cette série est suffisant pour décrire la densité de charge avec précision : dans le même pire cas que ci-dessus, le deuxième terme de cette série, $\frac{4\nu^2 - 1}{8z}$, vaut 0,065 (soit une erreur de 6,5 % en ne tenant compte que du 1^{er} terme égal à 1). La densité de charge pour les faibles polarisations s'écrit finalement :

$$n_1(V, sbbd[p]) = -\frac{8e sbbd[p]}{3\pi\alpha_{C-C}V_{pp\pi}} \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2 sbbd[p]}} \exp\left(-\frac{sbbd[p] - eV}{k_B T}\right) \quad 2.14$$

La Figure 2.5 montre le bon accord entre l'intégration numérique de l'équation 2.9 et la solution analytique (équation 2.14) pour la gamme des faibles polarisations.

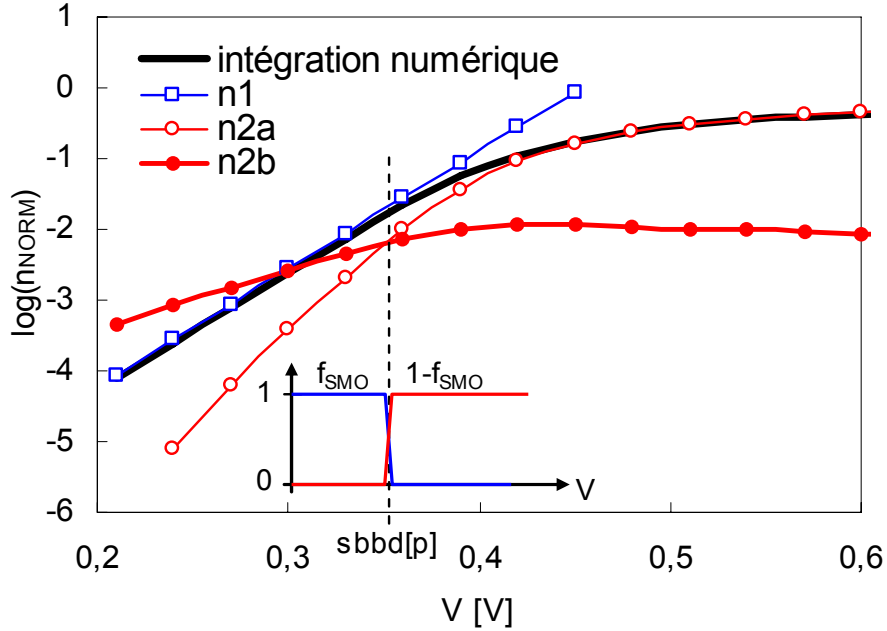


Figure 2.5 Densité de charge linéique (normalisée par $-8e/(3\pi\alpha_{C-C}V_{pp\pi})$) en échelle logarithmique en fonction de l'énergie. Ces simulations ont été effectuées à 300 K avec une seule sous-bande, dont le minimum vaut 0,35 eV. La ligne verticale représente la limite entre les 2 domaines de validité. La solution n1 (carrés) correspond à la densité de charge calculée numériquement pour les faibles polarisations, et la solution n2a + n2b (cercles vides et pleins respectivement) est en accord avec le calcul numérique pour les fortes polarisations. En encart, la fonction de lissage f_{SMO} qui lie les solutions partielles.

III.a.2 Forte polarisation : $eV > sbbd[p]$

Pour un minimum de sous-bande inférieur au potentiel V (Figure 2.4 pour $V = 0,8$ V avec $sbbd[p] = 0,5$ eV), une borne supplémentaire, Δ , est nécessaire pour résoudre l'équation 2.9 en dissociant l'intégrale selon l'énergie :

$$n_2(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi\alpha_{C-C}V_{pp\pi}} \left[\int_{sbbd[p]}^{\Delta} g(E)f(E)dE + \int_{\Delta}^{+\infty} g(E)f(E)dE \right] \quad 2.15$$

Δ est définie comme étant l'énergie qui sépare la partie quasi-constante de la partie exponentielle de la distribution de Fermi et vaut donc :

$$\Delta = eV + k_B T \ln\left(1 + \exp\left(\frac{sbbd[p] - eV}{k_B T}\right)\right) \quad 2.16$$

III.a.2.a Faibles énergies : de $sbbd[p]$ à Δ

Pour les énergies de $sbbd[p]$ à Δ , la distribution de Fermi présente une faible variation par rapport à celle de la densité d'états. La distribution de Fermi est approximée par son développement limité au premier ordre autour de $E = sbbd[p]$:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{k_B T}\right)} \approx a_0 + a_1(E - sbbd[p]) \quad 2.17$$

$$\text{où } a_0 = \frac{1}{1 + \exp\frac{sbbd[p] - eV}{k_B T}} \text{ et } a_1 = \frac{-\exp\frac{sbbd[p] - eV}{k_B T}}{k_B T \left(1 + \exp\frac{sbbd[p] - eV}{k_B T}\right)^2}.$$

Grâce à cette approximation, la densité de charge linéique s'écrit :

$$n_{2a}(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Gamma}} \int_{sbbd[p]}^{\Delta} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} [a_0 + a_1(E - sbbd[p])] dE \quad 2.18$$

Cette équation est intégrable selon les formules [Grad00i] :

$$\begin{aligned} - \int \frac{EdE}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} &= \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}, \\ - \int \frac{E^2 dE}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} &= \frac{E}{2} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} + \frac{sbbd[p]^2}{2} \ln\left(E + \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}\right) \end{aligned} \quad 2.19$$

Finalement, on obtient :

$$n_{2a}(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Gamma}} \left[\left(\frac{a_1}{2} \Delta + a_0 - a_1 sbbd[p] \right) \sqrt{\Delta^2 - sbbd[p]^2} + \frac{a_1}{2} sbbd[p]^2 \ln \frac{\Delta + \sqrt{\Delta^2 - sbbd[p]^2}}{sbbd[p]} \right] \quad 2.20$$

La Figure 2.5 montre le bon accord entre l'intégration numérique de l'équation 2.9 et la solution analytique (équation 2.20) uniquement pour les potentiels V nettement supérieur à $sbbd[p]$. Ceci s'explique en analysant l'équation de Δ (équation 2.16), où on remarque que plus V est proche de $sbbd[p]$, plus Δ tends vers $sbbd[p] + k_B T \ln(2)$. À l'inverse, plus V est supérieur à $sbbd[p]$, plus Δ tends vers V . Pour les fortes valeurs de V (par exemple $V = 0,8$ V sur la Figure 2.4), la borne supérieure de l'intégrale qui concerne les faibles énergies est plus grande, l'intégrale a donc une valeur plus élevée (la densité d'états et la distribution de Fermi sont des fonctions toutes deux positives). La part de l'intégrale pour les faibles énergies augmente relativement à celle des fortes énergies (densité d'états et distribution de Fermi sont toutes deux décroissantes et la distribution de Fermi tend vers 0 pour les fortes énergies).

III.a.2.b Fortes énergies : de Δ à l'infini

Pour les énergies de Δ à l'infini, la densité d'état varie peu par rapport à la distribution de Fermi (Figure 2.4 pour $V = 0,8$ V avec $sbbd[p] = 0,5$ eV). La densité d'état est considérée comme constante et égale à sa valeur en Δ : $g(E) = g(\Delta)$. La quantité $\Delta - eV$ est toujours positive (voir équation 2.16), l'argument de la distribution de Fermi $E - eV$ l'est donc

également : la distribution de Fermi est approchée par une exponentielle. De ces 2 considérations résulte l'équation :

$$n_{2b}(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}} \int_{\Delta}^{+\infty} \underbrace{\alpha g(E = \Delta)}_{g(E)} \exp\left(-\frac{E - eV}{k_B T}\right) dE \quad 2.21$$

où α est un facteur correctif qui représente la valeur moyenne de la densité d'états effectifs. Le but de cette correction est de simplifier le 2^{ème} terme de l'équation 2.15 sans trop de perte de précision. Ce facteur est principalement influencé par la forme de la densité d'états. Ainsi, α est indépendant de la température, de la chiralité (la forme de la densité d'états est la même pour toutes les sous-bandes) et de la polarisation. Sa valeur est fixée à 0,33.

L'intégration de l'expression analytique de la densité de charge linéique est alors directe :

$$n_{2b}(V, sbbd[p]) = \frac{-8e}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}} \frac{\alpha \Delta}{\sqrt{\Delta^2 - sbbd[p]^2}} k_B T \exp\left(-\frac{\Delta - eV}{k_B T}\right) \quad 2.22$$

La Figure 2.5 montre que cette solution est du 2^e ordre par rapport à celle des faibles énergies. Sa contribution à la solution complète est maximale pour les valeurs de V proches de sbbd[p], c'est-à-dire lorsque Δ , la borne inférieure de l'intégrale de l'équation 2.21, est la plus faible.

III.b. Solution complète

Une fonction de lissage, f_{SMO} , permet de lier les solutions partielles : elle vaut 1 pour V inférieur à sbbd (quand la solution partielle n_1 , équation 2.14, correspond à l'intégration numérique de l'équation 2.9) et 0 à l'extérieur de la plage de validité de la solution. Cette fonction est utilisée afin d'obtenir à la fois une bonne précision et une bonne convergence numérique du modèle, technique usuelle en modélisation compacte. Son expression mathématique est proche de celle de la distribution de Fermi :

$$f_{SMO}(V) = \frac{1}{1 + \exp\left(1,3 \frac{eV - sbbd[p]}{k_B T}\right)} \quad 2.23$$

et est appliquée à n_1 , n_{2a} et n_{2b} ainsi, pour obtenir la solution analytique approchée de l'équation 2.9 :

$$n(V, sbbd[p]) = n_1 f_{SMO} + (n_{2a} + n_{2b})(1 - f_{SMO}) \quad 2.24$$

La Figure 2.6 montre f_{SMO} et son complément, $1 - f_{SMO}$, en fonction de V qui pondèrent la solution partielle n_1 (équation 2.14) et les solutions partielles n_{2a} et n_{2b} (équations 2.20 et 2.22) respectivement.

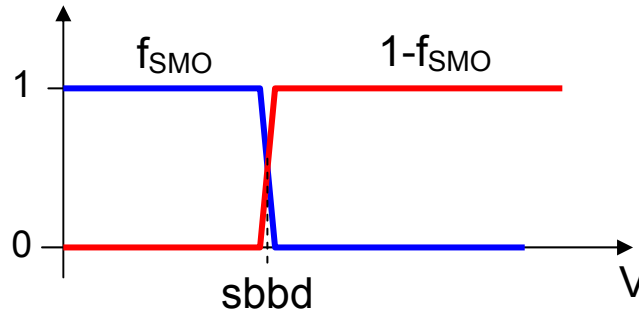


Figure 2.6 Fonction de lissage F_{SMO} et son complément $(1 - F_{SMO})$ en fonction de V .

Il faut souligner que cette solution est dépendante de la température. Elle est en très bon accord avec la solution numérique sur la plage de température de 250 à 350 K (Figure 2.7) et pour des minima de sous-bande de 0,2 à 0,8 eV (Figure 2.8). On peut remarquer que la solution analytique correspond bien à la solution numérique, notamment autour de la tension de seuil qui est une polarisation critique [Paul06].

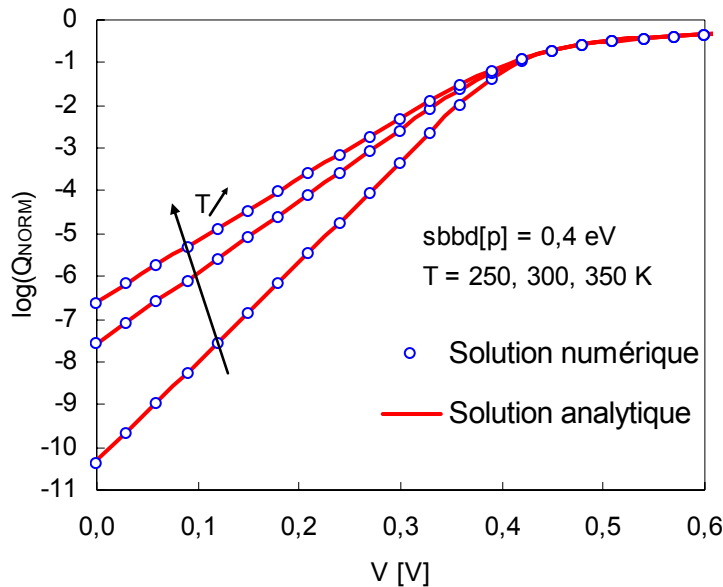


Figure 2.7 Densité de charge linéique (normalisée par $-8e/(3\pi\alpha_{c-c}V_{ppn})$) en échelle logarithmique en fonction du potentiel V pour différentes températures et pour une seule valeur de bas de sous-bande. La solution numérique (cercles) est l'intégration numérique de l'équation 2.9, la solution analytique (traits) est la somme des équations 2.14, 2.20 et 2.22 pondérées par la fonction de lissage $f_{SMO}(V)$ (équation 2.23).

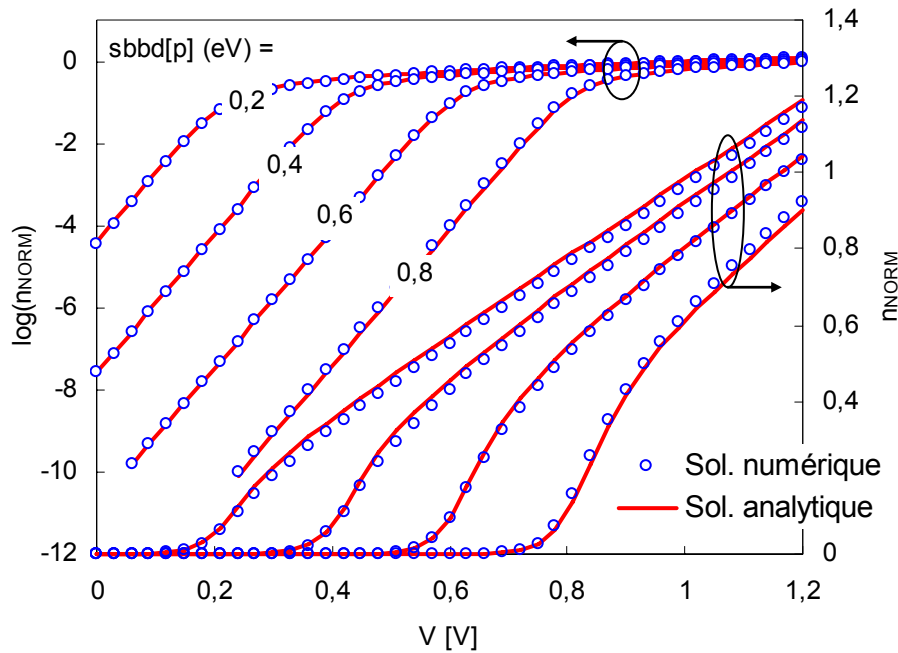


Figure 2.8 Densité de charge linéique (normalisée par $-8e/(3\pi a_{C-C} V_{pp\pi})$) en fonction du potentiel V , à 300 K, pour différentes valeurs de bas de sous-bande, $sbbd[p]$, en échelle logarithmique et en échelle linéaire. La solution numérique est représentée par des cercles, la résolution analytique par des traits.

Bien que les équations 2.14, 2.20 et 2.22 liées par la fonction de lissage décrivent avec précision la densité de charge linéique selon le potentiel V ($V_{CNT} - V_S$ ou $V_{CNT} - V_D$), il est également nécessaire de s'assurer que le modèle converge correctement en analysant notamment la dérivée de la solution analytique de la charge par rapport à V , c'est-à-dire la capacité quantique C_Q . La Figure 2.9 compare les dérivées, par rapport à V , analytique de la solution analytique et numérique de l'équation 2.9 en fonction du potentiel V et pour plusieurs bas de sous-bandes. Cette comparaison montre :

- la concordance des valeurs des capacités quantiques avec la littérature [Jave02],
- l'absence de discontinuité, ce qui permet de s'assurer de la robustesse de convergence.

On remarque également que la capacité quantique est maximale lorsque la sous-bande commence à conduire : la charge augmente rapidement lorsque les hautes valeurs de la densité d'états (proches du bas de sous-bande) commencent à être remplies par la partie proche de 1 de la distribution de Fermi.

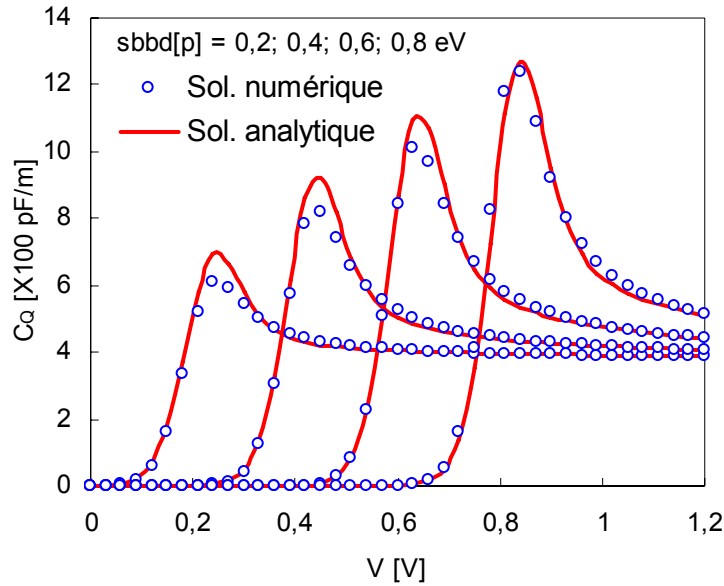


Figure 2.9 Capacitance quantique en fonction du potentiel V pour différentes sous-bandes. La dérivée analytique de la densité de charge linéique (traits), soit la capacitance quantique par unité de longueur du canal, est comparée à la dérivée numérique de l'équation 2.9 (cercles).

IV. Calcul du courant

Le calcul du courant s'appuie sur l'une des équations du formalisme de Landauer [Ferr97], appliquée ici aux électrons (charge électronique négative), en prenant comme convention un courant entrant par le drain :

$$I_{DS} = \frac{2e}{2\pi} M \left[\int_0^{\infty} v(k) f_S(k) T_S(E) dk - \int_0^{\infty} v(k') f_D(k') T_D(E) dk' \right] \quad 2.25$$

avec :

- $\frac{2}{2\pi}$ la densité d'états en 1D dans l'espace réciproque (2 pour le spin et 2π pour le « volume » de la case quantique en 1D),
- M le nombre de modes transverses occupés (générés par la présence d'un potentiel transverse au déplacement des électrons [Datta97]),
- $v(k)$ la vitesse des porteurs,
- f_S et f_D les fonctions de distribution côté source et côté drain respectivement,
- $T_S(E)$ la probabilité de transmission d'un porteur de la source au « corps » du nanotube.
- $T_D(E)$ la probabilité de transmission d'un porteur du drain au « corps » du nanotube.

La première intégrale exprime le courant créé par les électrons provenant de la source et remplissant les états $+k$ tandis que la seconde correspond aux électrons provenant du drain et remplissant les états $-k$ (la variable utilisé est noté k' pour indiquer qu'un changement de variable a permis de modifier les bornes d'intégration de $]-\infty; 0]$ en $[0; +\infty[$). Les intégrations se font uniquement sur les k et k' positifs relativement à la direction des porteurs injectés. Nous effectuons le changement de variable permettant de passer du vecteur d'onde k

à l'énergie E par la relation $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$, pour remplacer $v(k)dk$ par $\frac{1}{\hbar} dE$ (avec $\hbar = \frac{2\pi}{h}$, h la constante de Planck). Les fonctions de distribution $f_S(k)$ et $f_D(k')$ deviennent les fonctions de Fermi $f_S(E)$ et $f_D(E)$ correspondantes. Le courant de drain s'écrit alors :

$$I_{DS} = \frac{2e}{h} M \left[\int_0^\infty f_S(E) T_S(E) dE - \int_0^\infty f_D(E) T_D(E) dE \right] \quad 2.26$$

Notons que la référence des énergies est faite par rapport au nanotube intrinsèque : comme pour le calcul de la charge, la partie interne est fixe et les schémas de bandes des zones d'accès et les niveaux de Fermi des métaux varient selon les conditions de polarisation.

Les barrières de potentiel aux interfaces accès source/partie intrinsèque d'une part et accès drain/partie intrinsèque d'autre part (voir Figure 2.2.a)) impliquent des probabilités de transmission, respectivement $T_S(E)$ et $T_D(E)$, variables selon l'énergie. En supposant que tous les électrons ayant une énergie supérieure au bas de sous-bande, $sbbd[p]$, franchissent le canal, la probabilité de transmission vaut 1 pour les porteurs dont l'énergie $E > sbbd[p]$ et est nul pour $E < sbbd[p]$. La variable M prend en compte le nombre de modes transverses conducteurs (ou occupés) et s'écrit :

$$M = M_{sbbd} \times \text{nombre_de_sous_bandes_conductrices} \quad 2.27$$

avec M_{sbbd} le nombre de modes transverse par sous-bande, qui vaut 2 pour les nanotubes de carbone : les sous-bandes sont doublement dégénérées [Guo02]. Nous contournerons l'évaluation de la conduction des sous-bandes par la prise en compte de toutes les sous-bandes, qu'elles soient conductrices, faiblement conductrices ou non : les contributions de toutes les sous-bandes sont additionnées pour obtenir la contribution totale. L'intégrale du courant devient :

$$\begin{aligned} I_{DS} &= \frac{2e}{h} M_{sbbd} \sum_{p=1}^{nb \text{ bands}} \left[\int_{sbbd[p]}^\infty f_S(E) dE - \int_{sbbd[p]}^\infty f_D(E) dE \right] \\ &= \frac{4e}{h} \sum_{p=1}^{nb \text{ bands}} \left[\int_{sbbd[p]}^\infty \frac{1}{1 + \exp \frac{E - e(V_{CNT} - V_S)}{k_B T}} dE - \int_{sbbd[p]}^\infty \frac{1}{1 + \exp \frac{E - e(V_{CNT} - V_D)}{k_B T}} dE \right] \end{aligned} \quad 2.28$$

L'équation 2.28 du courant est intégrable via la formule simplifiée [Grad00ii] :

$$\begin{aligned} \int \frac{dE}{1 + b \exp \frac{E}{k_B T}} &= k_B T \left[\frac{E}{k_B T} - \ln \left(1 + b \exp \frac{E}{k_B T} \right) \right] \\ &= k_B T \left[-\ln \left(\exp \frac{-E}{k_B T} + b \right) \right] \end{aligned} \quad 2.29$$

Finalement, l'équation du courant de drain vaut, après simplifications :

$$I_{DS} = \frac{4ek_B T}{h} \sum_{p=1}^{nb_bands} \left[\ln \left(1 + \exp \frac{-sbbd[p] + e(V_{CNT} - V_S)}{k_B T} \right) - \ln \left(1 + \exp \frac{-sbbd[p] + e(V_{CNT} - V_D)}{k_B T} \right) \right] \quad 2.30$$

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

Comme pour la charge, toutes les contributions ne sont pas calculées. En effet, pour satisfaire aux critères de temps de simulation et de convergence, l'addition sur les sous-bandes est limitée aux contributions supérieures à 1 % de la somme des contributions déjà calculées.

V. Schéma électrique équivalent et intégration logicielle

Le schéma électrique équivalent du modèle est décrit Figure 2.10. À l'équation du courant, I_{DS} , et à celle des charges issues de la source, Q_{QS} , et du drain, Q_{QD} , il convient d'ajouter les éléments suivants :

- la capacité de l'oxyde de grille C_{INS} , dépendante de la géométrie et de la constante diélectrique de l'isolant,
- la tension de bandes plates V_{FB} qui prend en compte la différence entre le travail d'extraction du métal et l'affinité électronique du nanotube,
- la résistance d'accès de grille R_G ,
- les résistances d'accès de source et drain R_S et R_D respectivement, qui prennent en compte la différence de potentiel entre l'électrode de source ou de drain et le nanotube dopé due à la qualité du contact,
- les capacités électrostatiques C_{SE} et C_{DE} pour représenter la variation de charge aux interfaces nanotubes dopé/nanotube intrinsèque.

Ce schéma électrique équivalent permet de calculer de manière auto-cohérente la charge (fonction du potentiel du canal selon l'expression 2.8) et le potentiel du canal (fonction de la charge selon l'expression 2.3) tous deux liés à la polarisation.

Le régime de fonctionnement dynamique est gouverné par ce circuit équivalent [Hasa06].

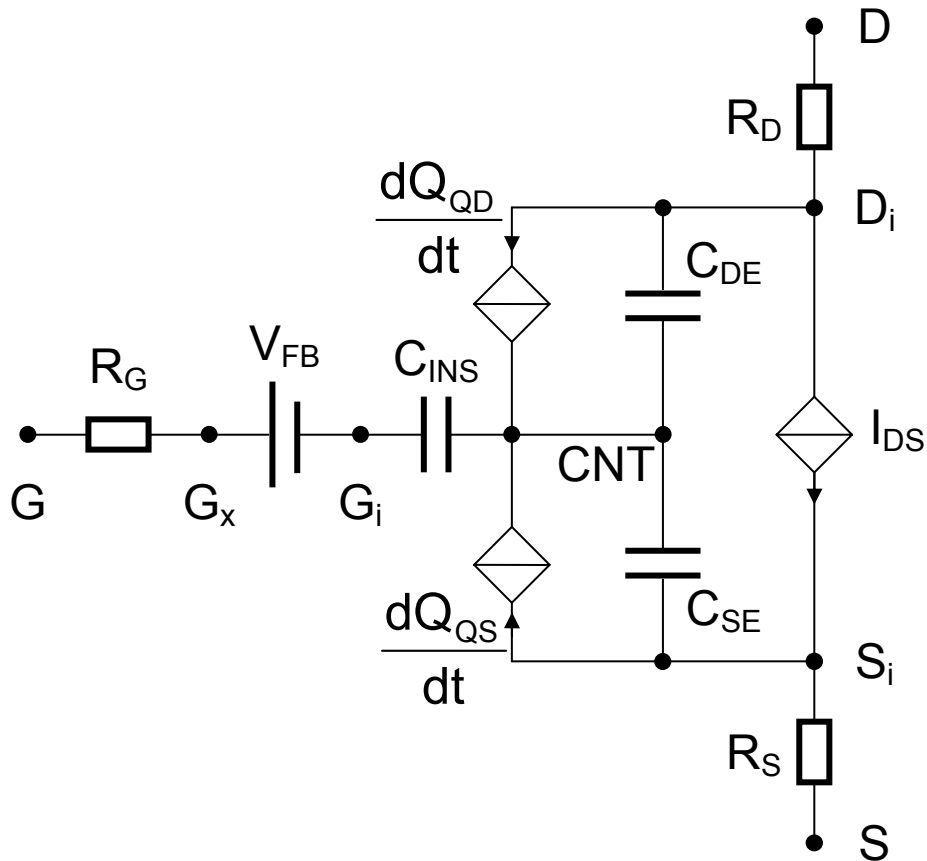


Figure 2.10 Schéma équivalent grand signal du modèle du transistor C-CNFET.

Le schéma équivalent et les équations décrites au paragraphe précédent ont été implantés dans le simulateur ADS 2004 A en langage VerilogA. Ce programme calcule le courant de drain, pour des potentiels V_{GS} et V_{DS} donnés, d'un transistor de type N ou P. Il permet la simulation d'un composant dont le nanotube a un diamètre compris entre 0,8 et 3 nm. Pour décrire le nanotube, 2 possibilités sont offertes au concepteur, il peut :

- choisir le diamètre du tube ou
- entrer les paramètres n et m du vecteur de chiralité.

Dans le premier cas, l'énergie du bas de la première sous-bande de conduction, par rapport au milieu de la bande interdite, est calculée par une relation semblable à celle donnée dans le Chapitre 1 : paragraphe III :

$$sbbd[1] = \frac{a_{c-c} V_{pp\pi}}{d} \approx \frac{0,38 (eV \cdot nm)}{d (nm)} \quad 2.31$$

Ensuite, le calcul des bas de sous-bandes de conduction est réalisé selon l'équation [Rayc04] :

$$sbbd[p] = sbbd[1] \frac{6p - 3 - (-1)^p}{4} \quad 2.32$$

Chapitre 2 : Modèle du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière

Dans le 2^e cas, on utilise le même calcul que [O'Con07] : on considère que le schéma de bandes du nanotube est issu de la discrétisation de celui de la feuille de graphène. La cellule unité du réseau est définie par le vecteur de chiralité \vec{C} (défini par le couple d'entiers (n, m), voir le 0 paragraphe III) et le vecteur de translation \vec{T} . La zone de Brillouin 2-D de la cellule unité est un rectangle dans l'espace réciproque et les valeurs du vecteur d'onde \vec{K} sont limitées par la condition aux limites périodique $\vec{k} \cdot \vec{C} = 2\pi j$ avec $j = 0, 1, \dots, N-1$ et N le nombre de paires d'atomes dans la cellule unité donné par :

$$N = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_R} \quad 2.33$$

avec $d_R = \text{pgcd}(2m + n, 2n + m)$ où $\text{pgcd}(x, y)$ est le plus grand commun diviseur entre x et y. La structure de bandes du nanotube « enroulé » peut être obtenue par discrétisation (méthode « zone-folding ») de la structure de bandes de la feuille de graphène [Cazi05, Popo04]. Une approximation analytique décrivant l'énergie des bas de sous-bandes est donnée par :

$$E(k_1, k_2) = V_{pp\pi} \sqrt{1 + 2 \cos(2\pi k_1) + 2 \cos(2\pi k_2) + 2 \cos(2\pi(k_1 - k_2))} \quad 2.34$$

où k_1 et k_2 dépendent des paramètres n et m selon les relations :

$$k_1 = \frac{j}{N} \frac{2n + m}{d_R}, \quad k_2 = \frac{j}{N} \frac{2m + n}{d_R} \quad 2.35$$

Les valeurs de $E(k_1, k_2)$ sont successivement calculées en utilisant l'équation 2.34. Les valeurs obtenues sont ensuite ordonnées pour ne garder que les plus faibles valeurs qui correspondent à la 1^{ère}, la 2^{ème}, ..., p^{ième} sous-bande soit $\text{sbbd}[1], \text{sbbd}[2], \dots, \text{sbbd}[p]$.

Dans les 2 cas, les sous-bandes de valence sont considérées symétriques aux sous-bandes de conduction : les énergies des hauts de sous-bandes de valence sont l'opposé de celles des bas de sous-bandes de conduction. Ces calculs de bas de sous-bande sont effectués en début de programme (précalcul en dehors du calcul des courants et potentiels du schéma électrique) et ne nécessitent pas d'itérations pour converger (contrairement aux courants et potentiels) : ils sont donc rapidement exécutés. De part l'ensemble des équations mises en œuvre dans le second cas, celui-ci nécessite plus de calculs, le temps de calcul doit donc être plus long : la différence de temps lors de la simulation du modèle complet n'est pas perceptible. Au regard de l'exactitude des calculs, le premier cas manque de précision par rapport au second, il est relativement juste pour le bas de la première sous-bande pour de petits tubes (inférieur à 2 nm) et est souvent faux pour le calcul des sous-bandes suivantes : il s'agit d'un modèle simplifié qui ne nécessite que le diamètre. Ceci peut être un avantage (n'impose pas à l'utilisateur de choisir une chiralité précise) lorsque l'on sait que l'accès à la chiralité des nanotubes mis en jeu dans des dispositifs nécessite des investigations plus poussées que l'obtention du diamètre.

Le code a été fait de telle manière qu'il est possible d'intégrer d'autres méthodes de calculs de bas de sous-bande dans le modèle, il faut tout de même respecter la contrainte du temps de simulation.

À partir de l'expression de la densité de charge linéique du canal en fonction du potentiel V ($V_{\text{CNT}} - V_{\text{Si}}$ ou $V_{\text{CNT}} - V_{\text{Di}}$ en considérant l'ajout des résistances série) donnée par les équations 2.14, 2.20 et 2.22 et la fonction de lissage, le circuit de la Figure 2.10 montre que les capacités électrostatiques C_{INS} , C_{ES} et C_{ED} et les charges Q_{QS} et Q_{QD} apportent une relation

supplémentaire entre le potentiel du canal V_{CNT} et la densité de charge linéique n_{CNT} . Ainsi, les lois de Kirchhoff impliquent :

$$Q_{QS} + Q_{QD} - Q_{CNT}^0 = C_{INS}(V_{CNT} - V_{Gi}) + C_{ED}(V_{CNT} - V_{Di}) + C_{ES}(V_{CNT} - V_{Si}) \quad 2.36$$

avec $Q_{QS} = L n_{CNT}^+$, $Q_{QD} = L n_{CNT}^-$, $Q_{QS}^0 = Q_{QS} + Q_{QD}$ pour $V_{GS} = V_{DS} = 0$ V et L la longueur du canal.

Le calcul auto-cohérent des potentiels, notamment celui du canal V_{CNT} , et de la densité de charge n_{CNT} est traité par le simulateur de type SPICE « ADS » capable de simuler des modèles en VerilogA.

Le paragraphe suivant explique la modélisation et la simulation de transistor par la méthode Monte Carlo (MC), effectuées par le département CMO de l'IEF (Université Paris XI, Orsay), notamment Hugues CAZIN d'HONINCTHUN [Cazi08i], en vue de comparaisons entre les résultats de notre modèle compact et ceux des simulations MC.

VI. Résultats numériques

Ce paragraphe décrit tout d'abord la méthode de simulation Monte Carlo. Les résultats de simulation de cette méthode sont ensuite comparés à ceux issus de la modélisation compacte.

VI.a. Simulation Monte Carlo

Pour étudier les propriétés de transport des semiconducteurs et dispositifs associés, des techniques de simulation, basées sur la résolution de l'équation de Boltzmann, ont été largement appliquées avec succès et notamment en utilisant la méthode Monte Carlo (MC) [Jaco89].

L'énergie de dispersion des nanotubes est obtenue par des calculs de liaisons fortes (σ -and- π -tight-binding) en prenant en compte les effets de courbure. En considérant la double-dégénérescence des sous-bandes ($M=2$, voir paragraphe IV de ce chapitre), une approximation analytique est utilisée pour décrire l'énergie des 3 premières sous-bandes de chaque vallée pour des nanotubes semiconducteurs zigzag [Penn03, Cazi05]. Toute sorte de nanotube peut alors être simulée en introduisant les paramètres de matériau appropriés.

Les simulations MC dont il est question ici prennent en compte les dispersions des phonons des modes optique, acoustique longitudinal et de vibration radiale (Radial Breathing Mode, RBM). La dispersion des phonons acoustiques selon le champ électrique est également considérée mais les effets de transport quantiques observés dans des dispositifs ultra-courts ne sont pas pris en compte. Les simulations effectuées restent valables pour des canaux suffisamment longs ($L > 50$ nm) [Cazi05].

Pour simuler le transistor, l'algorithme de transport est couplé à la résolution de l'équation de Poisson 3D.

Le dispositif simulé est un CNFET avec une grille tout autour du nanotube (gate-all-around) et dont les accès source et drain mesurent 20 nm de longueur et sont dopés N uniformément à $N_D = 5.10^6$ cm⁻¹. Les extensions dopées apportent des porteurs de charge et permettent de reproduire la situation expérimentale où la densité de porteurs dans ces régions est contrôlée soit électrostatiquement, soit par transfert de charges dû aux molécules dopantes. Les contacts métal/nanotube dopés sont supposés ohmiques.

Les simulations portent sur un transistor dont le nanotube (19, 0) a pour :

- diamètre $d \approx 1,5$ nm,
- énergies de bas de sous-bandes 0,275, 0,61 et 1,06 eV (soit une bande interdite de 0,55 eV),
- masses effectives 0,047, 0,129 et 0,132 pour les 3 premières sous-bandes respectivement.

Le canal du transistor mesure $L = 100$ nm de longueur et est recouvert par l'isolant de grille de constante diélectrique relative $\epsilon = 16$ (HfO_2). Quatre épaisseurs d'oxyde équivalent silicium sont considérées 5,3, 1,4, 0,4 et 0,17 nm, qui correspondent aux valeurs de capacités par unités de longueur $C_{\text{INS}} = 112, 225, 560$ et 1120 pF/m respectivement.

VI.b. Comparaison des résultats obtenus avec le modèle compact et par simulation Monte Carlo

Ici sont présentés et comparés les résultats des simulations du modèle compact et ceux issus des simulations MC. Les valeurs des paramètres utilisés dans le modèle compact correspondent à celles des simulations MC :

- longueur du canal $L = 100$ nm,
- chiralité $(n, m) = (19, 0)$,
- résistance d'accès Source/Drain, $R_{\text{S/D}} \approx 0 \Omega$,
- capacité de grille $C_{\text{INS}} = 112, 225, 560$ et 1120 pF/m,
- tension de bandes plates $V_{\text{FB}} = 0$ V,
- décalage du niveau de Fermi dans les accès source et drain $\Delta E_{\text{F}} = 115$ meV,
- capacité électrostatique de drain $C_{\text{DE}} = 0,1$ aF,
- capacité électrostatique de source $C_{\text{SE}} = 0,7$ aF,
- résistance de grille $R_{\text{G}} = 10 \Omega$,
- température $T = 300$ K,

À partir du potentiel du canal V_{CNT} et du courant de drain I_{DS} , calculés en utilisant le modèle compact, le profil de la première sous-bande dans le canal et dans les régions d'accès source et drain est présenté Figure 2.11, avec $C_{\text{INS}} = 112$ pF/m, et comparé avec celui extrait des simulations MC. Le profil est présenté pour 5 tensions de grille différentes, de 10 à 600 mV, et pour une faible tension de drain $V_{\text{DS}} = 50$ mV. Les profils issus des 2 méthodes sont en accord.

Pour les plus fortes polarisations, on constate que le dispositif ne fonctionne plus en régime quantique : l'abaissement du schéma de bande ne correspond plus à l'augmentation de V_{GS} , V_{CNT} ne peut plus être considéré comme proche de V_{GS} , la capacité de grille n'est plus supérieure à la capacité quantique (qui vaut, grossièrement, 400 pF/m par sous-bande conductrice). Pour ces fortes polarisations, on remarque également l'apparition d'un champ électrique dans le canal, prompt à générer des interactions électron-phonon [Mach05, Cazi08ii], ce qui n'est pas pris en compte dans cette version du modèle compact.

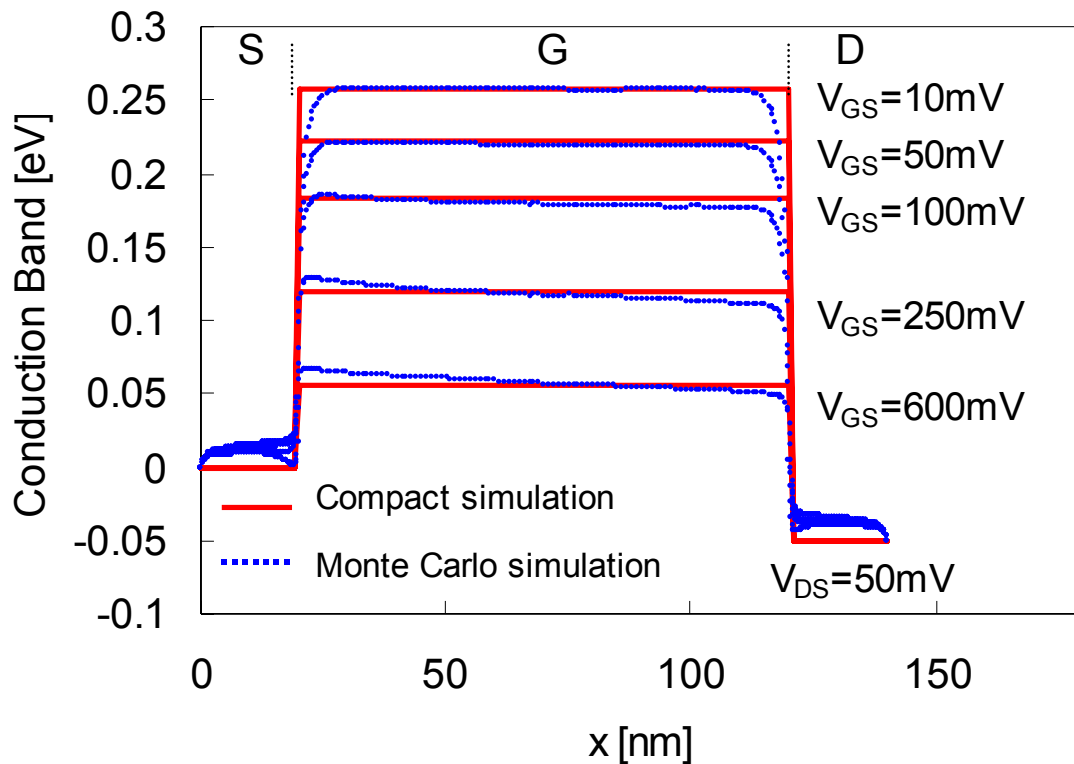


Figure 2.11 Profile du bas de la première sous-bande de conduction selon l'axe source-drain en fonction de la position dans le canal et les accès source et drain pour 5 valeurs de tension de grille avec $V_{DS} = 50 \text{ mV}$, issu des résultats du modèle compact (lignes rouges) et de ceux des simulations Monte Carlo (points bleus), $C_{INS} = 112 \text{ pF/m}$.

La charge totale du canal Q_{CNT} et la capacité grille-source C_{GS} , calculées soit avec le modèle compact, soit avec les calculs MC, en fonction de la tension de grille V_{GS} , sont présentées Figure 2.12 à $V_{DS} = 50 \text{ mV}$ et pour les 4 valeurs de capacités de grille $C_{INS} = 112, 225, 560$ et 1120 pF/m . Cette figure met en évidence les deux régimes de fonctionnement expliqués au début du paragraphe III de ce chapitre.

- Pour les plus faibles valeurs de capacités, 112 et 225 pF/m, qui correspondent à 11,2 et 22,5 aF avec la longueur de grille simulée, la valeur de la capacité grille-source C_{GS} est proche de celle de la capacité d'oxyde C_{INS} . C_{GS} est alors faiblement dépendante de la polarisation de grille, V_{GS} module principalement la charge dans le canal et faiblement le potentiel du canal V_{CNT} , le transistor fonctionne en régime « classique ».
- Pour les plus fortes valeurs de capacités, 560 et 1120 pF/m, qui correspondent à 56 et 112 aF avec la longueur de grille simulée, la valeur de C_{GS} est proche de celle de la capacité quantique C_Q caractérisée par la présence de maxima locaux qui correspondent au remplissage successif des sous-bandes. Le transistor fonctionne en régime « quantique ».

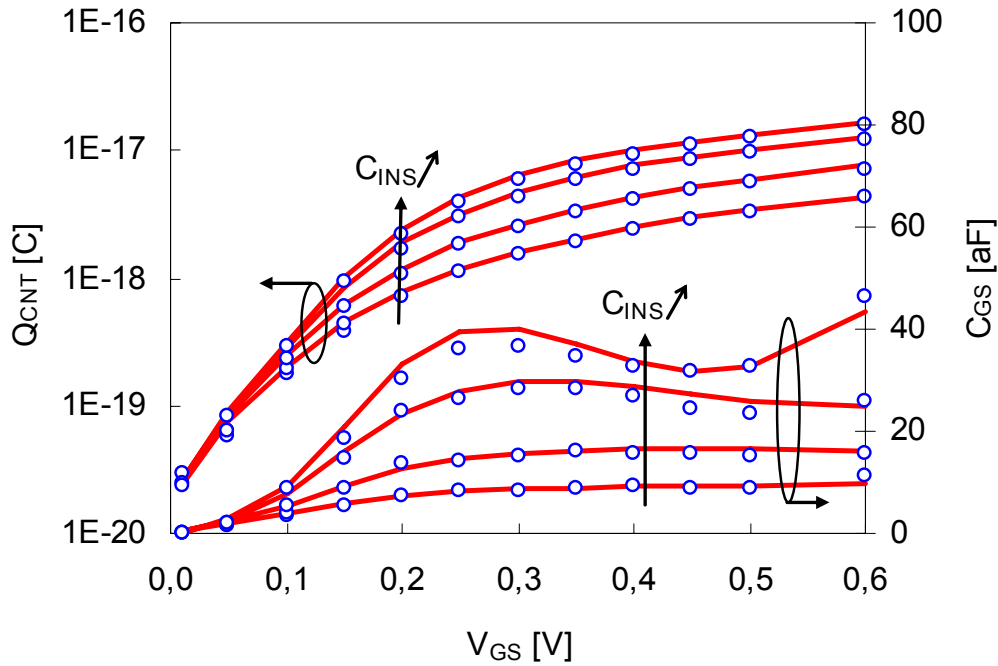


Figure 2.12 Charge dans le canal Q_{CNT} (axe de gauche en échelle logarithmique) et la capacité associée C_{GS} (axe de droite) en fonction de la polarisation de grille à $V_{DS} = 50$ mV pour 4 valeurs de capacités $C_{INS} = 112, 225, 560$ et 1120 pF/m.

La Figure 2.13 montre le courant de drain I_{DS} en fonction de la tension grille-source V_{GS} à $V_{DS} = 400$ mV. Les courants de drain évalués selon les simulations MC et selon la modélisation compacte sont encore une fois très proches. La Figure 2.13 montre également la nécessité d'évaluer avec précision la charge du canal en fonction de la polarisation en comparant les courants calculés avec et sans l'influence de la charge sur le potentiel du canal V_{CNT} . Ainsi, l'intégration de la charge dans le modèle est un élément important.

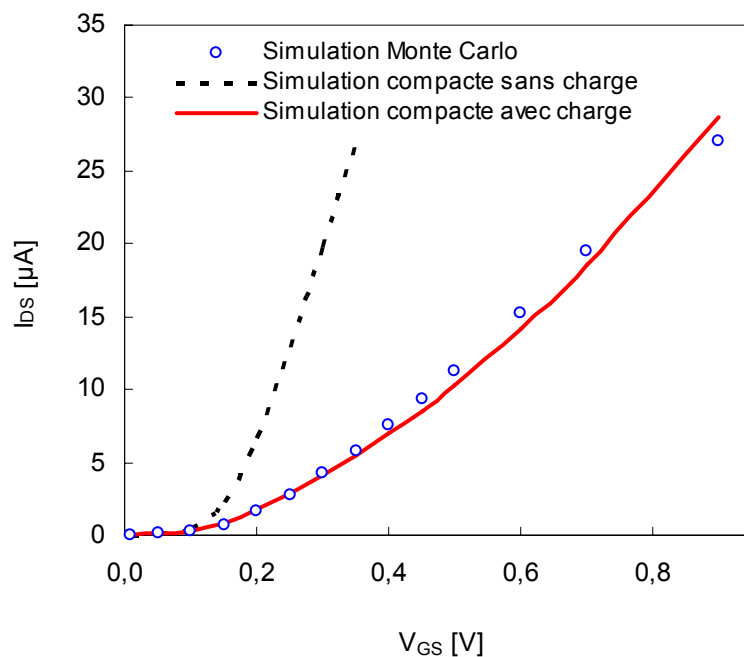


Figure 2.13 Courant de drain I_{DS} en fonction de la tension grille-source V_{GS} à $V_{DS} = 0,4 V$, pour une capacité de grille $C_{INS} = 112 pF/m$.

La Figure 2.14 montre le courant de drain simulé avec le modèle compact et avec la méthode MC pour trois valeurs de capacité de grille $C_{INS} = 112, 225$ et $560 pF/m$ à $V_{DS} = 0,4 mV$: une bonne concordance des résultats est observée. Cette tendance est confirmée sur la Figure 2.15, qui montre le courant de drain I_{DS} en fonction de la tension de drain V_{DS} pour 5 valeurs de la tension de grille de $0,2$ à $0,7 V$. Notons que pour une forte polarisation de grille, le courant obtenu à partir des simulations MC est légèrement supérieur à celui issu du modèle compact. Ceci est dû au champ électrique présent dans l'accès source et qui génère du transport nonstationnaire et augmente légèrement la vitesse d'injection des porteurs dans le canal par rapport à l'équilibre. Par ailleurs, la présence d'un champ électrique dans le canal (Figure 2.11) a un faible impact direct sur le courant à l'état passant en DC [Yoon06]. Ces effets sont pris en compte dans les simulations MC mais ne sont pas inclus dans cette version du modèle compact.

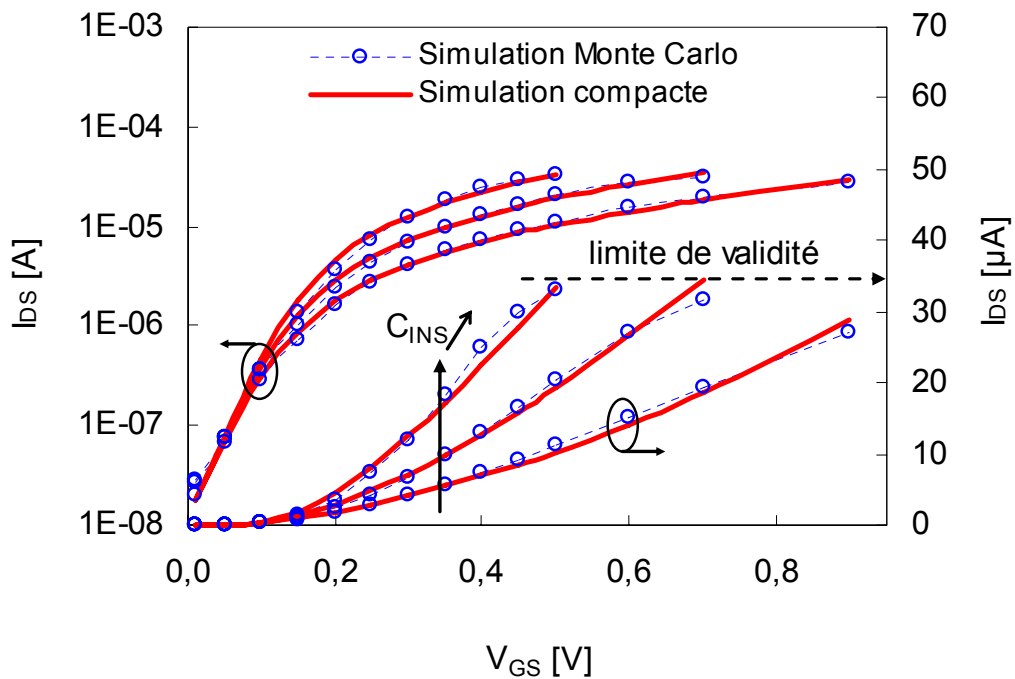


Figure 2.14 Courant de drain I_{DS} en fonction de la tension grille-source V_{GS} à $V_{DS} = 0,4 V$, pour trois valeurs de capacité de grille $C_{INS} = 112, 225$ et $560 pF/m$.

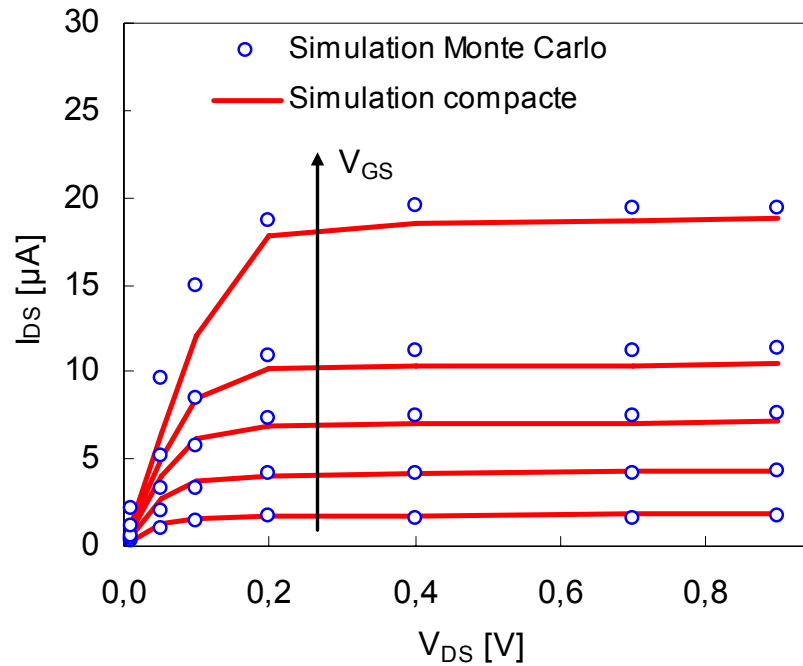


Figure 2.15 Courant de drain I_{DS} en fonction de la tension de drain V_{DS} pour 5 valeurs de la tension grille-source $V_{GS} = 200, 300, 400, 500$ et 700 mV, pour $C_{INS} = 112$ pF/m.

Dans sa forme actuelle, le modèle compact est valide dans la plage de courant de drain où les hypothèses suivantes sont respectées :

- L'énergie de la bande de conduction dans la partie interne est constante,
- Le bas de la bande de conduction de la partie interne est au-dessus des niveaux de Fermi de source et de drain.

Cette validité implique des conditions soit sur la tension de grille, soit sur la valeur de la capacité d'oxyde. Par exemple, la Figure 2.14 montre que :

- Pour $C_{INS} = 560$ pF/m, une tension de grille de 0,3 V induit une différence de 7 %,
- Pour $C_{INS} = 112$ pF/m, une tension de grille de 0,9 V induit une différence de 6 % entre les résultats de simulation MC et ceux du modèle compact.

Les valeurs limites de tensions de grille et de capacités d'oxyde sont liées pour en déduire un unique critère sur le courant de drain qui définit l'aire de validité du modèle compact. À cette étape de maturité de la technologie, un modèle compact précis à 10 % près est raisonnable compte tenu de la dispersion technologique (voir paragraphe suivant). Ce critère a été appliqué au courant de drain issu de la modélisation compacte comparé à celui issu des simulations MC. Ainsi, l'erreur relative sur le courant de drain entre le modèle compact et MC a été estimé pour les 3 valeurs de capacité de grille en fonction de la tension de grille, cela a conduit à la valeur limite de 35 μA (voir Figure 2.14).

Finalement, l'accord entre les simulations MC et le modèle compact est bon dans la limite d'un courant de drain inférieur à 35 μA . Vu que cette condition est le résultat d'un compromis entre la valeur de la capacité de grille C_{INS} et celle de la tension de grille, ce peut être une règle de conception pour les concepteurs de circuits.

VII. Utilisation du modèle compact pour l'analyse de l'impact de la dispersion technologique sur la conception d'un circuit

Un des enjeux majeurs de la prochaine décennie est le contrôle des fluctuations technologiques dues à la réduction des dimensions ou à l'augmentation du rapport surface/volume.

En ce qui concerne les transistors à base de nanotube, les dispersions technologiques, telles que le dopage des nanotubes, le contact entre le métal et le nanotube et la chiralité, limitent les performances des composants voire les rendent non-fonctionnels. Des recherches sont entreprises pour contrôler le diamètre ou la chiralité [Bach03], la position du nanotube et la chiralité par croissance sélective [Jeon05] et l'alignement des nanotubes [Lee06], ou pour sélectionner les nanotubes intéressants en supprimant des nanotubes métalliques et en sélectionnant leur chiralité [Arno06].

Dans cette partie, nous examinons l'impact de la dispersion technologique de 3 procédés de fabrication [Bach03, Jeon05]. Deux méthodes de fabrication sont examinées :

- La méthode CO-MO-CAT [Bach03], qui permet un bon contrôle de la distribution du diamètre du nanotube (D_0) autour de 0,8 nm sans contrôle de la position du nanotube,
- Le procédé CVD avec catalyseur Co-ferritine [Jeon05], qui révèle une plus large distribution du diamètre mais qui permet de contrôler la position du nanotube via une croissance sélective (qui est un problème important pour les circuits à grande échelle).

Cette 2nde méthode est appliquée avec 2 températures de croissance des nanotubes différentes, menant à 2 distributions du diamètre du nanotube : la température de la distribution T_1 est égale à 900 °C, celle de la distribution T_2 est égale à 1000 °C.

En supposant que la position du nanotube peut être contrôlée pour chaque procédé, l'impact de la distribution du diamètre du nanotube (Figure 2.16) sur la figure de mérite des transistors et circuits démonstrateur, tel qu'un oscillateur en anneau, peut être étudié. La Figure 2.16 présente la distribution du diamètre de nanotubes obtenus par les procédés décrits ci-dessus qui a un impact direct sur la largeur de la bande interdite et donc sur la tension de seuil.

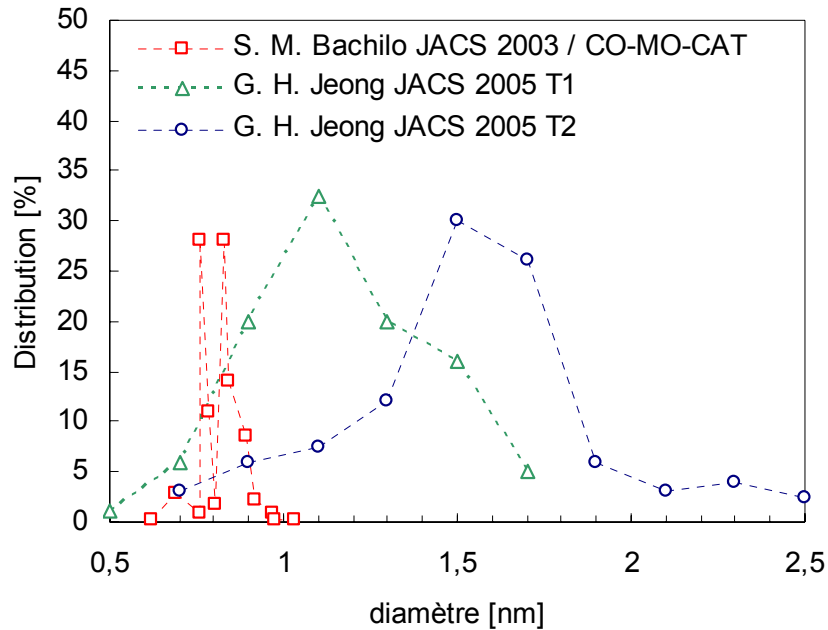


Figure 2.16 Distribution du diamètre de nanotubes obtenus à partir de 3 procédés technologiques [Bach03, Jeon05].

La Figure 2.17 présente la dispersion du temps de propagation obtenue en effectuant 750 simulations d'un oscillateur en anneau à 3 étages sur les 3 procédés de fabrication. Ces résultats ne prennent pas en compte l'influence de pertes liées aux interconnexions [Burk03].

Le jeu de paramètres pour chaque transistor est sélectionné aléatoirement en respectant la distribution du diamètre de chaque procédé. La méthode de croissance Co-ferritine donne la plus large distribution pour les 2 procédés T₁ et T₂. Environ 35 % des échantillons ont un temps de propagation 5 % autour de la valeur centrale. Un 2^e pic avec presque 35 % de circuits, plus rapides, est observé dans la plage [-5 %, -15 %]. La plupart des autres circuits sont plus lents. Un autre pic avec 6 % des échantillons T₁ est observé pour des dispositifs 55 % plus lents que la moyenne. Ce pic est lié à la présence d'un composant dont le diamètre du nanotube est de 0,5 nm : ces circuits sont non-fonctionnels comme le montre la Figure 2.18. Par ailleurs, le procédé CO-MO-CAT donne une meilleure répartition du temps de propagation : 80 % des circuits fonctionnent à ± 5 % de la valeur moyenne.

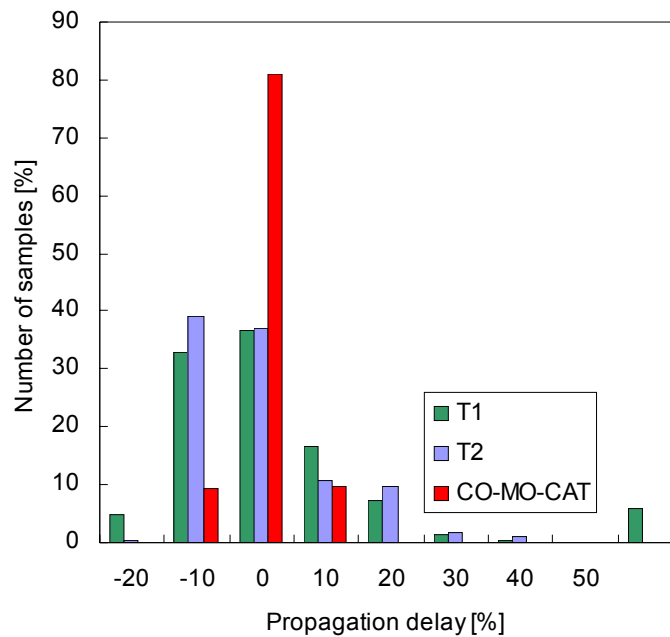


Figure 2.17 Distribution du temps de propagation autour de la valeur centrale d'un oscillateur en anneau selon 3 procédés technologiques. Les diamètres des nanotubes sont choisis aléatoirement en respectant la distribution du diamètre. Les simulations (750) ont utilisé des jeux de paramètres différents pour chaque nanotube.

Ainsi, pour la Figure 2.18 qui montre 2 simulations transitoires de transistors dont les nanotubes sont obtenus par le procédé Co-ferritine à la température T_1 , 2 types de jeu de paramètres ont été utilisés :

- Un avec les jeux de paramètres nominal,
- Un avec un jeu de paramètres pire-cas pour un transistor de type P, qui correspond à un diamètre de 0,5 nm.

Ce petit diamètre conduit à une forte tension de seuil de 0,9 V, qui diminue d'un facteur 3 la fréquence de fonctionnement du circuit. De plus, ce circuit n'atteint jamais son niveau logique bas.

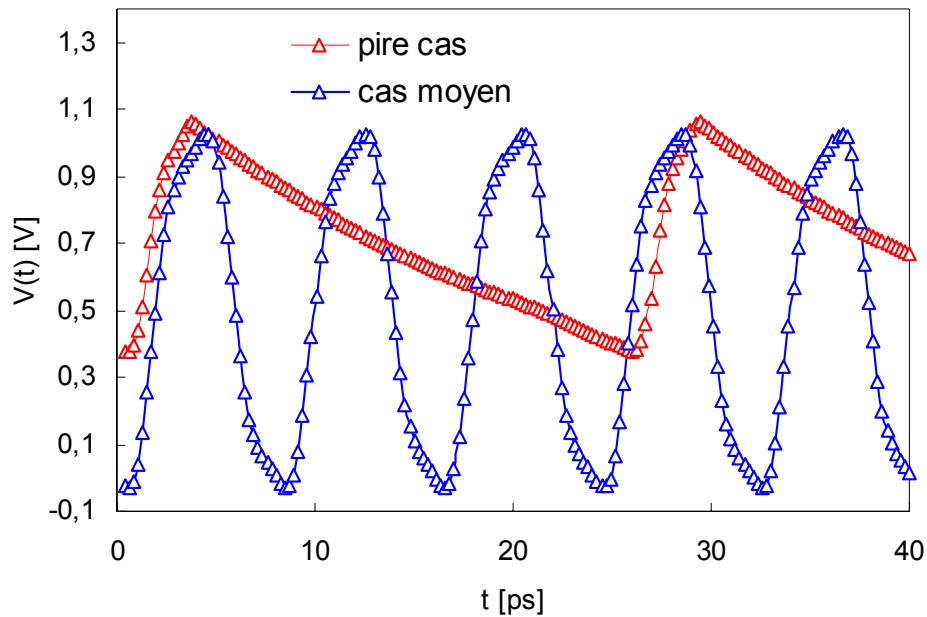


Figure 2.18 Simulation transitoire d'un oscillateur en anneau à 3 étages avec 2 jeux de paramètres à partir du procédé technologique CVD Co-ferritine à $T_1 = 900\text{ °C}$ [Jeon05] (cas standard : les diamètres des 6 transistors valent 1,1 nm ; pire cas : mêmes paramètres que le cas standard sauf que le diamètre d'un des P-CNFET vaut 0,5 nm).

Le modèle compact met ainsi en évidence la nécessité de contrôler les caractéristiques des nanotubes lors de leur fabrication. Les valeurs des paramètres technologiques sont des entrées du modèle dont la simulation permet l'estimation des performances de circuits.

VIII. Conclusion

Ce deuxième présente la modélisation compacte du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière ou C-CNFET. La description du fonctionnement de ce transistor à accès source et drain dopés met en évidence la nécessité de calculer la charge et le potentiel du canal de façon auto-cohérente afin d'évaluer finalement le courant de drain. Le potentiel est également fonction de la polarisation de grille.

Tout d'abord, l'évaluation de la charge fait appel à l'intégrale du produit de la densité d'états effectifs par la distribution de Fermi de source (de drain) pour les états $+k$ ($-k$). Cette intégrale est considérée selon différentes plages de polarisation et d'énergie afin de simplifier l'expression de la charge par des développements limités. Ces simplifications mènent aux solutions partielles analytiques de la charge. Ce modèle de transistor à modulation de hauteur de barrière est donc appelé ACSOM pour « Analytical Charge Solution Model ».

Ensuite, le courant de drain, calculé en utilisant le formalisme de Landauer, est fonction du potentiel du canal.

Les résultats de simulation, comparés à ceux issus de la méthode Monte Carlo, permettent de valider le modèle compact.

Enfin, la simulation d'un circuit avec ce modèle permet d'estimer l'impact de la dispersion technologique sur ces caractéristiques électriques : le contrôle des paramètres

Chapitre 2 : Modèle du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière

technologiques est un élément clé pour améliorer les performances de transistors à base de nanotubes.

Chapitre 3 : Modèle du transistor à nanotube double grille (DG- CNFET)

I. Introduction

Dans ce chapitre est décrite la modélisation compacte, physique et électrique, du transistor à nanotube de carbone double grille (DG-CNFET). Comme vu à la fin du Chapitre 1 : paragraphe V.d, ce transistor, muni d'une grille supplémentaire qui agit sur le nanotube de part et d'autre de la grille « classique », est reconfigurable : il peut être de type N ou P selon la polarisation. L'approche de modélisation est la même que celle du transistor C-CNFET (calcul du courant de drain via le formalisme de Landauer et calcul de la charge via l'intégration du produit *densité d'états X distribution de Fermi*) mais avec une difficulté supplémentaire : la nécessité de prendre en compte 3 régions (accès source, partie interne et accès drain) au lieu d'une seule (partie interne) pour le transistor C-CNFET.

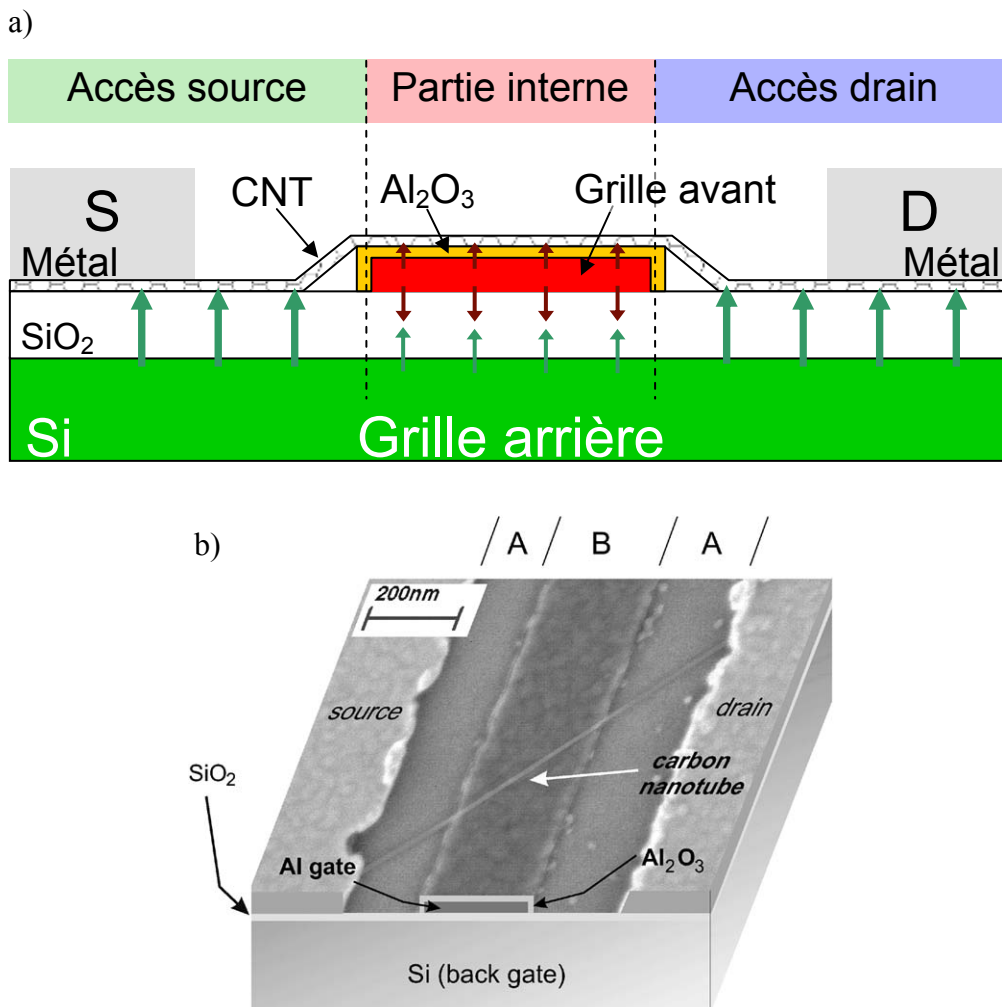


Figure 3.1 a) Vue en coupe du DG-CNFET. Les flèches rouges et vertes représentent l'effet de la grille avant et de la grille arrière respectivement et b) image de microscope électronique à balayage (SEM) mise en 3D [Lin05] : les régions A correspondent aux accès source et drain, la région B à la partie interne.

II. Fonctionnement

Comme pour la partie interne du transistor C-CNFET, le schéma de bande de chaque région du transistor à double grille est déplacé selon la polarisation de la grille qui lui est associée (voir Figure 1.17 du chapitre 1). La grille arrière, qui module le schéma de bandes des zones d'accès, laisse entrer, selon sa polarisation V_{BG} , les porteurs dans le composant. Ensuite, les porteurs pourront circuler si la polarisation de la grille avant, V_{FG} , est du même signe que celle de la grille arrière (Figure 1.17.b) et c)). La Figure 3.2 montre que schéma de bandes de la partie interne est « abaissé » de V_{CNTi} (potentiel du canal de la partie interne), celui de l'accès source est « abaissé » de V_{CNTs} (le potentiel du canal de l'accès source), et celui de l'accès drain est « abaissé » de V_{CNTd} (le potentiel du canal de l'accès drain). La différence entre les potentiels du canal et la tension de grille associée est due à l'accumulation de charges dans la zone considérée. Ainsi, la charge d'une région diminue l'effet électrostatique du potentiel de grille local selon les relations (analogues à l'équation 2.3 du transistor C-CNFET) :

$$\begin{aligned}
 - \quad V_{CNTs-S} &= V_{BGS} + Q_S/C_{BG} \\
 - \quad V_{CNTi-S} &= V_{FGS} + Q_I/C_I \\
 - \quad V_{CNTd-S} &= V_{BGS} + Q_D/C_{BG}
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

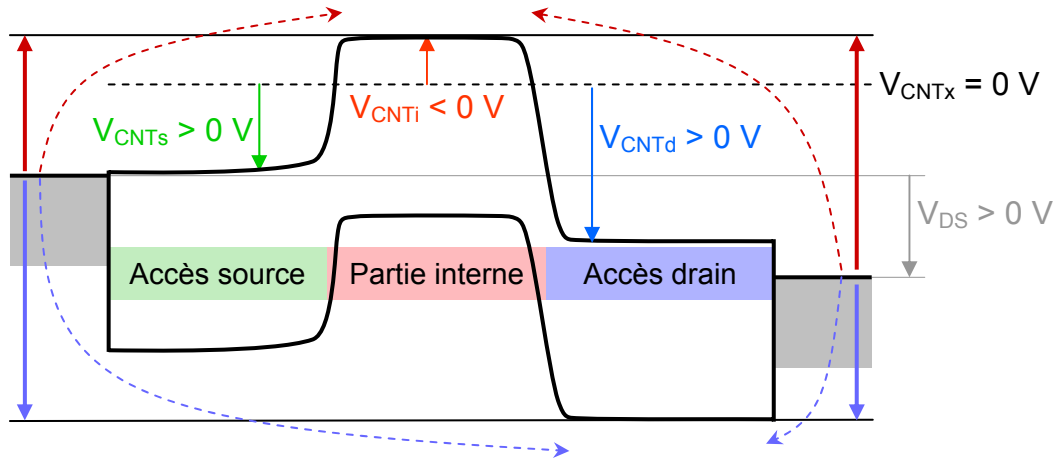
où V_{CNTs-S} , V_{CNTi-S} et V_{CNTd-S} sont les potentiels de l'accès source, de la partie interne et de l'accès drain, respectivement, par rapport à la source, V_{BGS} et V_{FGS} sont les tensions des grilles arrière et avant, respectivement, par rapport à la source, V_{DS} est la tension drain-source, Q_S , Q_I et Q_D sont les charges relatives à l'accès source, la partie interne et l'accès drain, respectivement, et C_{BG} et C_I sont les capacités de grille arrière et de grille avant respectivement.

Il est donc nécessaire de calculer de manière auto-cohérente la charge et le potentiel du canal de chaque région puisque i) les potentiels du canal dépendent de la charge associée et ii) la charge de chaque région dépend de la position du schéma de bande, i.e. du potentiel du canal (détaillé ci-après).

L'évaluation des potentiels du canal permet le calcul du courant de drain. En effet, son expression est issue du formalisme de Landauer (avec les mêmes hypothèses que le transistor C-CNFET) en considérant que le passage des électrons est limité par la plus haute barrière et celui trous par la plus faible barrière (Figure 3.2). La plus haute (plus basse) barrière est définie comme la plus haute bande de conduction (plus basse bande de valence).

Barrière s'opposant au passage des électrons venant de la source

Barrière s'opposant au passage des électrons venant du drain



Barrière s'opposant au passage des trous venant de la source

Barrière s'opposant au passage des trous venant du drain

Figure 3.2 Schéma de bandes d'énergie montrant la limitation du courant (flèches en tirets) par les potentiels du canal pour $V_{BG} > 0 V$ (implique V_{CNTs} et V_{CNTd} positifs), $V_{FG} < 0 V$ (implique V_{CNTi} négatif) et $V_{DS} > 0 V$. Le niveau en pointillé $V_{CNTx} = 0 V$ correspond à la position du bas de la bande de conduction lorsque le potentiel du canal est nul.

III. Calcul des charges

Comme pour le C-CNFET, la charge dans une région est l'intégrale sur l'énergie du produit de la densité d'états effectifs par la distribution de Fermi. Pour chacune des 3 régions, le calcul de la charge tient compte de la distribution de Fermi de la source ou de celle du drain selon la polarisation. Ainsi, le calcul de la charge dans une région nécessite de considérer différents cas selon les valeurs des potentiels locaux.

Nous considérons qu'un porteur de charge avec une énergie supérieure à la hauteur de barrière a une probabilité de transmission de 1. Sinon, le porteur a une probabilité de transmission nulle et est rétrodiffusé par la barrière de potentiel sans modification de son énergie. Comme indiqué Figure 3.3 pour les électrons issus de la source, nous considérons également que les porteurs ne changent pas d'énergie lorsqu'ils passent d'une région à une autre : la distribution des porteurs issu de la source ou du drain reste la même quels que soient les évènements.

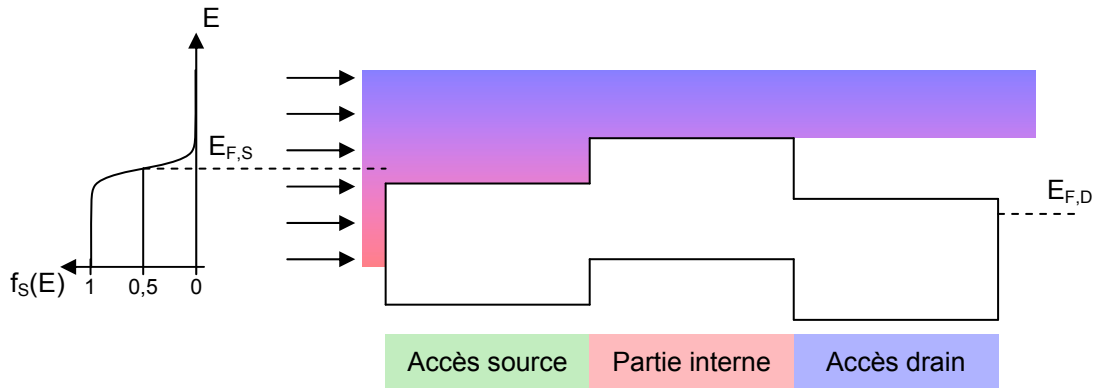


Figure 3.3 Représentation schématique du remplissage des états $+k$ des bandes de conduction des 3 régions par les électrons venant de la source selon la distribution de Fermi de la source $f_s(E)$. Le dégradé de couleur correspond à distribution de Fermi de la source : rouge pour une probabilité de présence égale à 1, bleu pour une probabilité de présence nulle.

III.a. Schéma de remplissage des états

La Figure 3.4 montre le remplissage de la bande de conduction des différentes régions pour toutes les configurations de potentiels du canal possible lorsque $V_{DS} < 0$ V (implique $V_{CNTd} > V_{CNTs}$). Les lignes verticales noires (grises) représentent le remplissage des états $+k$ ($-k$). Les flèches horizontales en trait plein (pointillés) représentent les électrons issus de la source (drain).

Lorsque le potentiel du canal de la région dont on veut connaître la charge est le plus faible, les états $+k$ et $-k$ sont remplis selon le niveau de Fermi de source et le niveau de Fermi du drain respectivement : c'est le cas par exemple dans la Figure 3.4.a) pour la partie interne et dans les Figure 3.4.b) et c) pour l'accès drain.

D'après la Figure 3.4.a), i.e. lorsque V_{CNTi} est le plus faible potentiel de canal parmi les 3 régions, pour l'accès source, l'intégralité des états $+k$ sont remplis selon la distribution de source alors que seuls les états $-k$ de haute énergie (supérieure au bas de bande de conduction de la partie interne) sont remplis selon la distribution de drain (cas -i-). Les états $-k$ d'énergie inférieure au bas de bande de conduction de la partie interne sont remplis selon la distribution de la source (cas -ii-) : une partie des électrons venant de la source (ceux d'énergie inférieure au bas de bande de conduction de la partie interne) est rétrodiffusée par la barrière de potentiel présente à l'interface accès source/partie interne.

La partie interne de la Figure 3.4.b) présente la même configuration avec la rétrodiffusion d'une partie des électrons issus de la source à l'interface partie interne/accès drain. Le remplissage de l'accès drain de la Figure 3.4.a) est effectué de manière similaire en inversant les distributions de source et de drain : la totalité des états $-k$ et les états $+k$ de faible énergie sont remplis selon la distribution de drain et les états $+k$ de haute énergie selon celle de la source.

Hypothèse réaliste : les porteurs rétrodiffusés ne changent pas d'énergie en passant d'une région à une autre (cas -iii- des Figure 3.4.b) et c)). Ainsi, pour l'accès source de la Figure 3.4.b), il convient de distinguer 3 cas pour les états $-k$:

- ceux de faible énergie (celle inférieure au bas de bande de conduction de la partie interne, cas -ii-) sont remplis par les électrons issus de la source qui sont rétrodiffusés à l'interface accès source/partie interne,

Chapitre 3 : Modèle du transistor à nanotube double grille (DG-CNFET)

- ceux d'énergie « intermédiaire » (énergie comprise entre les bas de bande de conduction de la partie interne et de l'accès drain, cas -iii-) sont remplis par les électrons issus de la source qui sont rétrodiffusés à l'interface partie interne/accès drain,
- ceux de haute énergie sont remplis par les électrons issus du drain.

Pour l'accès source de la Figure 3.4.c), les états $-k$ de faible énergie (inférieure au bas de bande de conduction de l'accès drain) sont remplis par les électrons rétrodiffusés à l'interface partie interne/accès drain. Remarquons que dans cette Figure 3.4.c), une partie des états $+k$ et $-k$ de la partie interne ne sont pas remplis.

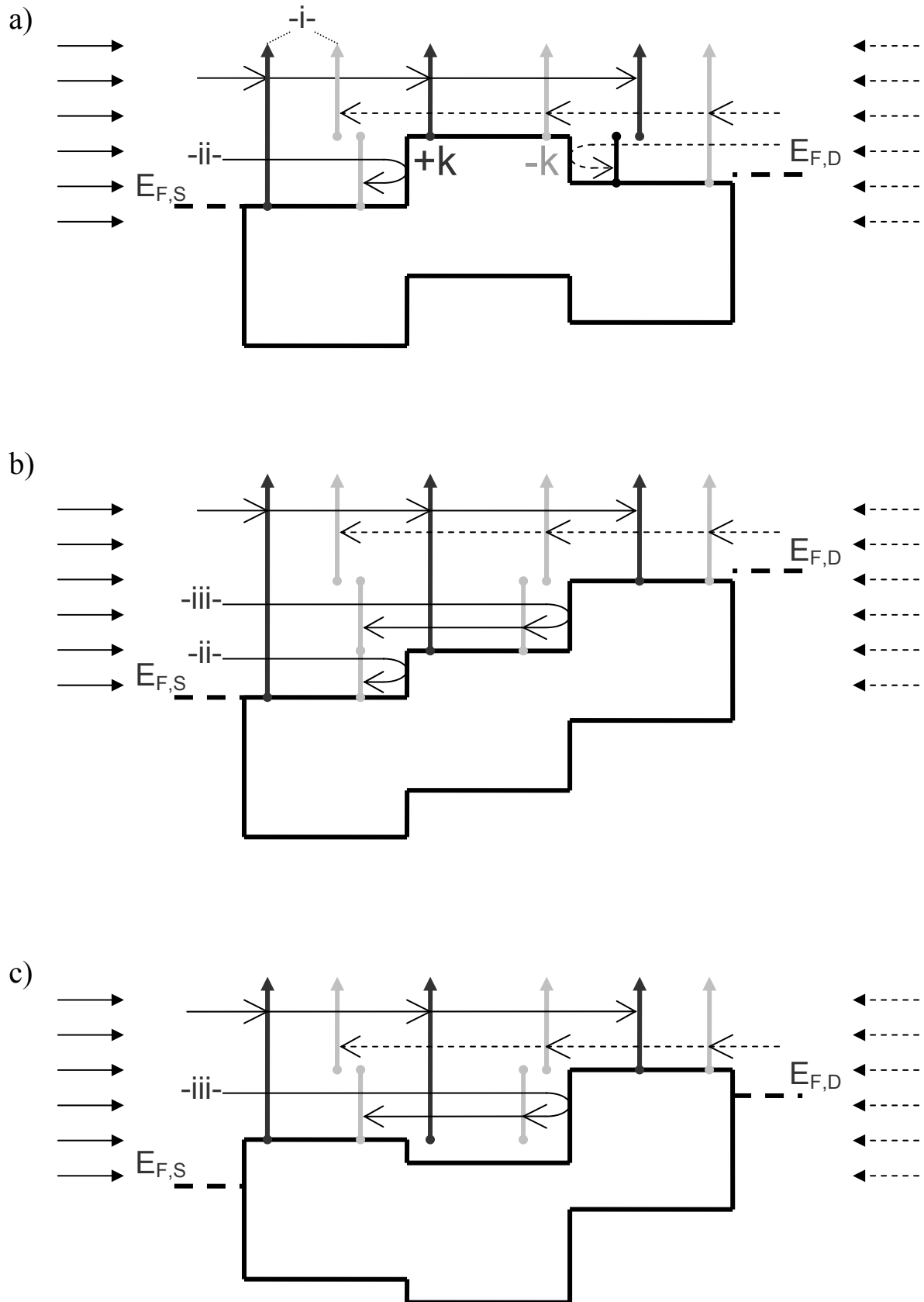


Figure 3.4 Schémas de bandes d'énergie montrant le remplissage des états selon la distribution de Fermi de source ou de drain et selon la position des bandes d'énergie, i.e. selon les valeurs relatives des potentiels du canal de chaque région, pour $V_{DS} < 0$ V. a) $V_{CNTi} < V_{CNTd} < V_{CNTs}$, b) $V_{CNTd} < V_{CNTi} < V_{CNTs}$ et c) $V_{CNTd} < V_{CNTs} < V_{CNTi}$.

De façon générale, pour l'accès source, les états +k sont systématiquement remplis selon la distribution de source, les états -k de haute énergie et de faible énergie sont remplis respectivement par la distribution de drain et de source. La limite entre ces 2 domaines correspond au bas de bande de conduction le plus haut, c'est-à-dire le minimum entre les 3 potentiels du canal. Notons que si V_{CNTs} est le plus petit, la limite correspond au bas de bande de conduction de l'accès source, il n'y a pas de remplissage des états -k selon la distribution de source. Pour l'accès drain, c'est le même fonctionnement en inversant i) les distributions de source et de drain et les potentiels du canal des accès source et drain et ii) les états +k et -k.

Pour la partie interne et pour $V_{DS} < 0$ V, i.e. pour $V_{CNTd} < V_{CNTs}$, les états +k de haute énergie sont remplis selon la distribution de source et ceux de faible énergie ne sont pas remplis. La limite correspond au minimum entre V_{CNTs} et V_{CNTi} . Les états -k de haute énergie (supérieure au plus faible des 3 potentiels du canal) sont remplis selon la distribution de drain. Les états -k de faible énergie (inférieure au minimum entre V_{CNTs} et V_{CNTi}) ne sont pas remplis. Les états -k d'énergie intermédiaire sont remplis selon la distribution de source.

Pour la partie interne et pour $V_{DS} > 0$ V, la même analyse a été faite. La charge se calcule de la même manière en échangeant i) les termes source et drain que ce soit pour la distribution de Fermi ou pour la limitation par les bas de sous-bande (ou potentiels du canal) et ii) les états +k et -k.

Pour les trous, la même analyse a aboutie à considérer l'opposé des potentiels du canal et du potentiel du drain par rapport au potentiel de source.

III.b. Mise en équation

L'équation complète de la densité de charge linéique (i.e. par unité de longueur du canal considéré) de l'accès source pour les électrons n_{SA_e} s'écrit :

$$n_{SA_e} = -e \left[\int_{CB_S}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} f_S(E) dE + \int_{CB_S}^{MAX(CB_S, CB_I, CB_D)} \frac{g(E)}{2} f_S(E) dE + \int_{MAX(CB_S, CB_I, CB_D)}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} f_D(E) dE \right] \quad 3.2$$

avec :

- e, la charge de l'électron (positive),
- CB_S , CB_I et CB_D , les bas de bande de conduction de l'accès source, de la partie interne et de l'accès drain respectivement,
- $g(E)$, la densité d'états effectifs du nanotube,
- $f_S(E)$ et $f_D(E)$, les distributions de Fermi de la source et du drain respectivement.

Le premier terme de cette équation intègre le produit *densité d'états X distribution de Fermi de source* du bas de bande de conduction de l'accès source à l'infini : il s'agit de la charge des états +k entièrement remplis selon la distribution de Fermi de la source.

Le deuxième terme de cette équation intègre le produit *densité d'états X distribution de Fermi de source* du bas de bande de conduction de l'accès source au plus haut bas de bande de conduction des 3 régions : il s'agit de la charge des états -k de faible énergie remplis selon la distribution de Fermi de la source par des électrons rétrodiffusés. Ce terme est nul lorsque le bas de bande de conduction de l'accès source est le plus élevé des 3 régions.

Le troisième et dernier terme de cette équation intègre le produit *densité d'états X distribution de Fermi de source* du plus haut bas de bande de conduction des 3 régions à l'infini : il s'agit de la charge des états -k de haute énergie remplis selon la distribution de Fermi du drain.

La division par 2 de la densité d'états rappelle que le remplissage est considéré selon les états +k ou -k. Comme indiqué Figure 3.5, les bas de bande de conduction (en noir sur la figure) sont référencés par rapport au milieu de la bande interdite (il en est de même pour les hauts de bande de valence, en gris sur la figure). Selon la région considérée, leur expression s'écrit donc :

$$CB_x = E_{0,x} + sbbdC[1] \quad 3.3$$

avec :

- X = S, I ou D,
- CB_x et $E_{0,x}$ sont respectivement l'énergie du bas de bande de conduction et l'énergie du milieu de la bande interdite du nanotube de l'accès source, de la partie interne ou de l'accès drain,
- $sbbdC[1]$, l'énergie de la première sous-bande de conduction (qui devient $sbbdC[p]$ pour le calcul de toutes les autres contributions).

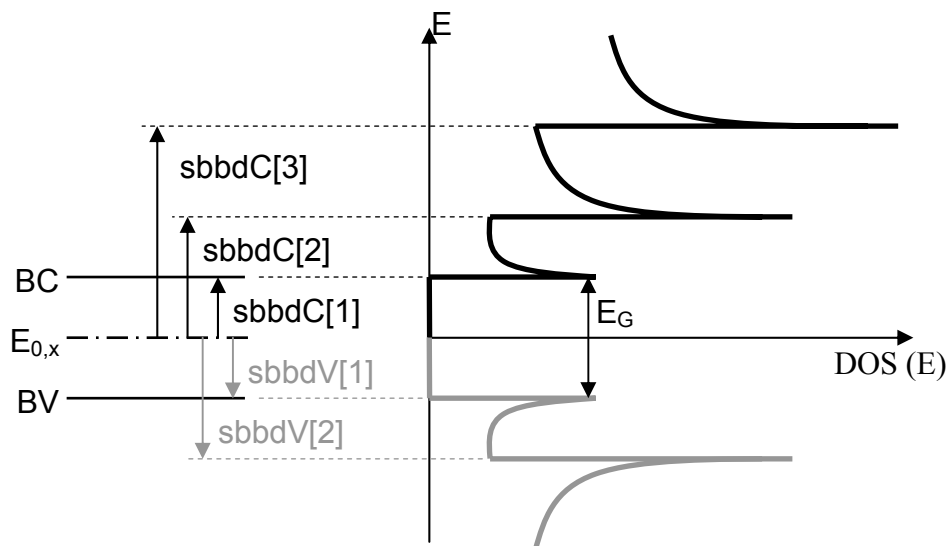


Figure 3.5 Schéma de bandes d'énergie avec la densité d'états effective associée montrant les premières sous-bandes de conduction en noir et les premières sous-bandes de valence ($sbbdV[1]$ et $sbbdV[2]$) en gris. La largeur de bande interdite E_G vaut $sbbdC[1]-sbbdV[1]$.

L'équation 3.2 devient alors, en développant la densité d'états d'après l'équation 2.7 et les distributions de Fermi d'après l'équation 2.6 :

$$n_{SA_e} = \frac{-8e}{6\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}} \sum_{p=1}^{nb \text{ bands}} \left[\int_{E_{0,s} + sbbdC[p]}^{+\infty} \frac{|E - E_{0,s}|}{\sqrt{(E - E_{0,s})^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F,S}}{k_B T}\right)} dE \right. \\ \left. + \int_{E_{0,s} + sbbdC[p]}^{\text{MAX}(CB_S, CB_I, CB_D)} \frac{|E - E_{0,s}|}{\sqrt{(E - E_{0,s})^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F,S}}{k_B T}\right)} dE \right. \\ \left. + \int_{\text{MAX}(CB_S, CB_I, CB_D)}^{+\infty} \frac{|E - E_{0,s}|}{\sqrt{(E - E_{0,s})^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F,D}}{k_B T}\right)} dE \right] \quad 3.4$$

avec :

- $\frac{8}{3\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}}$, la constante liée à la densité d'états,
- $E_{F,S(D)}$, le niveau de Fermi de la source (drain).

La fonction de Heaviside présente dans l'équation 2.7 n'apparaît pas dans l'équation ci-dessus (elle pourrait apparaître sous la forme $h(|E - E_{0,s}| - sbbdC[p])$). Cette fonction a pour but de garantir une densité d'états nulle pour les énergies inférieures au bas de sous-bande considéré. Ce point est en fait déjà pris en compte dans l'équation 3.2. Les bornes d'intégration $\text{MAX}(CB_S, CB_I, CB_D)$ n'ont pas été développées pour des raisons de lisibilité mais cette borne ne peut être inférieure à l'énergie $E_{0,s} + sbbdC[p] = CB_S$ imposée par la fonction d'Heaviside.

Les niveaux $E_{0,x}$ sont supposés alignés avec le niveau de Fermi de la source $E_{F,S}$ à polarisation nulle (pas de charge piégée ou de dopage au niveau du tube). Selon la polarisation, la valeur des V_{CNTx} va « abaisser » (pour $V_{CNTx} > 0$ V) ou « remonter » (pour $V_{CNTx} < 0$ V) le schéma de bande associé :

$$E_{0,x} = E_{F,S} - eV_{CNTx} \quad 3.5$$

Les bornes d'intégration $\text{MAX}(CB_S, CB_I, CB_D)$ de l'équation 3.2 deviennent alors, selon l'équation 3.3 :

$$\text{MAX}(CB_S, CB_I, CB_D) = sbbdC[1] + E_{F,S} - e \min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) \quad 3.6$$

Considérant que la source est la référence des potentiels, on a alors :

$$E_{F,S} = 0$$

$$E_{F,D} = -eV_{DS}$$

$$E_{0,x} = -eV_{CNTx}$$

$$\text{MAX}(CB_S, CB_I, CB_D) = sbbdC[1] - e \min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd})$$

L'équation 3.4 devient :

$$n_{SA_e} = \frac{-8e}{6\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}} \left[\int_{sbbdC[p]-eV_{CNTs}}^{+\infty} \frac{|E + eV_{CNTs}|}{\sqrt{(E + eV_{CNTs})^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E}{k_B T}} dE \right. \\ \left. + \sum_{p=1}^{nb_bands} \int_{sbbdC[p]-eV_{CNTs}}^{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd})} \frac{|E + eV_{CNTs}|}{\sqrt{(E + eV_{CNTs})^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E}{k_B T}} dE \right. \\ \left. + \int_{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd})}^{+\infty} \frac{|E + eV_{CNTs}|}{\sqrt{(E + eV_{CNTs})^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS}}{k_B T}} dE \right] \quad 3.8$$

Le potentiel du canal de l'accès source qui apparaît dans l'expression de la densité d'états effectifs correspond au décalage du schéma de bande de l'accès source alors que les potentiels qui apparaissent dans les bornes d'intégration limitent le remplissage.

Afin d'obtenir des intégrales dont la forme se rapproche un peu plus de l'équation 2.9 résolue dans le Chapitre 2 : paragraphe III, nous effectuons le changement de variable $E + eV_{CNTs}$ devient E' :

$$n_{SA_e} = \frac{-8e}{6\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}} \left[\int_{sbbdC[p]}^{+\infty} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E - eV_{CNTs}}{k_B T}} dE \right. \\ \left. + \sum_{p=1}^{nb_bands} \int_{sbbdC[p]}^{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) + eV_{CNTs}} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E - eV_{CNTs}}{k_B T}} dE \right. \\ \left. + \int_{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) + eV_{CNTs}}^{+\infty} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_{CNTs}}{k_B T}} dE \right] \quad 3.9$$

Les intégrales de la densité linéique d'électrons de l'accès source sont identiques à celle présente dans l'équation 2.9 à l'exception des bornes d'intégration. Par conséquent, les simplifications et solutions qui ont été trouvées dans le Chapitre 2 : paragraphe III ne peuvent s'appliquer. La densité linéique d'électrons de l'accès drain est similaire à l'équation 3.9 moyennant d'y inverser V_{CNTs} et V_{CNTd} et, quand le terme eV_{DS} apparaît dans les distributions de Fermi, le supprimer, sinon le rajouter.

En revanche, de part sa position entre les 2 autres régions, la densité linéique d'électrons de la partie interne, n_{IP_e} , est plus complexe. Ainsi, pour $V_{DS} > 0$ V (i.e. $CB_S > CB_D$), son expression à partir de laquelle nous réitérons le même raisonnement que pour l'accès source est :

$$n_{IP_e} = -e \left[\begin{aligned} & \int_{\text{MAX}(CB_S, CB_I)}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} f_S(E) dE \\ & + \int_{\text{MAX}(CB_I, CB_D)}^{+\infty} \frac{g(E)}{2} f_D(E) dE \\ & + \int_{\text{MAX}(CB_I, CB_D)}^{\text{MAX}(CB_S, CB_I)} \frac{g(E)}{2} f_D(E) dE \end{aligned} \right] \quad 3.10$$

La première intégrale correspond au remplissage des états +k, par les électrons issus de la source, limitée par le bas de bande de conduction de l'accès source si celui-ci est au-dessus du bas de bande de conduction de la partie interne.

La deuxième intégrale est analogue à la première pour les électrons venant du drain : le remplissage des états -k est limité par le bas de bande de conduction de l'accès drain si celui-ci est au-dessus du bas de bande de conduction de la partie interne.

La troisième et dernière intégrale correspond aux électrons issus du drain qui sont rétrodiffusés à l'interface accès source/partie interne. Cet évènement a lieu si une barrière s'opposant au déplacement de ces porteurs existe, i.e. si le bas de bande de conduction de l'accès source est au-dessus de celui de la partie interne.

Finalement, on obtient (toujours pour $V_{DS} > 0$ V) :

$$n_{IP_e} = \frac{-8e}{6\pi a_{C-C} V_{pp\Pi}} \left[\begin{aligned} & \int_{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTs}, V_{CNTi})+eV_{CNTi}}^{+\infty} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV_{CNTi}}{k_B T}\right)} dE \\ & + \sum_{p=1}^{nb_bands} \int_{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTi}, V_{CNTd})+eV_{CNTi}}^{+\infty} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_{CNTi}}{k_B T}\right)} dE \\ & + \int_{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTs}, V_{CNTi})+eV_{CNTi}}^{sbbdC[p]-e\min(V_{CNTi}, V_{CNTd})+eV_{CNTi}} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbdC[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_{CNTi}}{k_B T}\right)} dE \end{aligned} \right] \quad 3.11$$

Les intégrales de l'équation 3.11 sont identiques à celle de l'équation 2.9 aux bornes d'intégration près. La densité linéique d'électrons de la partie interne pour $V_{DS} < 0$ V est similaire à l'équation 3.11 moyennant d'y inverser V_{CNTs} et V_{CNTd} et, quand le terme eV_{DS} apparaît dans les distributions de Fermi, le supprimer, sinon le rajouter.

Pour le calcul des densités de trous, la même approche a été menée, il faut remplacer dans les équations précédentes (3.9, 3.11 et celles indiquées pour l'accès drain et la partie interne à $V_{DS} < 0$ V) :

- $sbbdC[p]$ par $-sbbdV[p]$ (le haut de la $p^{ième}$ sous-bande de valence, négatif) (si les sous-bandes de valence sont calculées selon la relation $sbbdV[p] = -sbbdC[p]$, les valeurs ne sont pas changées),
- V_{CNTx} par $-V_{CNTx}$,
- V_{DS} par $-V_{DS}$,
- changer le signe de la charge.

L'ensemble des équations des densités de charge (électrons et trous) linéiques pour chaque région sont des combinaisons linéaires de la fonction suivante, en adaptant les variables :

$$n_{norm}(V_I, V_O, V_{DS}, sbbd[p]) = \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{+\infty} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}\right)} dE \quad 3.12$$

avec :

- V_I , le potentiel du canal à l'intérieur de la région considérée (par rapport à la source),
- V_O , le potentiel du canal à l'extérieur de la région considérée (par rapport à la source), celui qui bloque le déplacement des porteurs depuis la source ou le drain vers la région considérée,
- V_{DS} , la tension drain-source, qui vaut 0 lorsque l'on considère les porteurs venant de la source.
- $sbbd[p]$, le bas de la $p^{ième}$ sous-bande de conduction ou le haut de la $p^{ième}$ sous-bande de valence référencé par rapport au milieu de la bande interdite.

Ainsi, il faut s'assurer que, quelle que soit la polarisation, V_O est inférieur ou égal à V_I . En effet, la borne inférieure de l'intégrale, $sbbd[p] - eV_O + eV_I$, doit toujours être supérieure ou égale à $sbbd[p]$ (pas d'intégration dans la bande interdite). L'énergie sur laquelle on intègre est donc toujours positive : la valeur absolue de l'énergie, présente au numérateur (issue de la densité d'états) ne nécessite donc pas de traiter 2 cas : énergies positives et énergies négatives. L'équation 3.12 devient :

$$n_{norm}(V_I, V_O, V_{DS}, sbbd[p]) = \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{+\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}\right)} dE \quad 3.13$$

Remarquons que le potentiel drain-source pourrait être intégré dans le potentiel V_I , décaler alors de la même quantité le potentiel V_O de V_{DS} n'aurait aucun effet sur le résultat numérique de l'équation 3.13. Du point de vue électrique, ces modifications reviennent à changer la référence des potentiels. Ceci est mis en évidence sur la Figure 3.7 avec la correspondance potentiel V_O -énergie E avec notamment pour $eV_O = sbbd[p] + eV_{DS}$, on a $E = eV_I - eV_{DS}$.

La Figure 3.6 montre le résultat de l'intégration numérique de l'équation élémentaire 3.13 en fonction de V_I pour différents potentiels V_O .

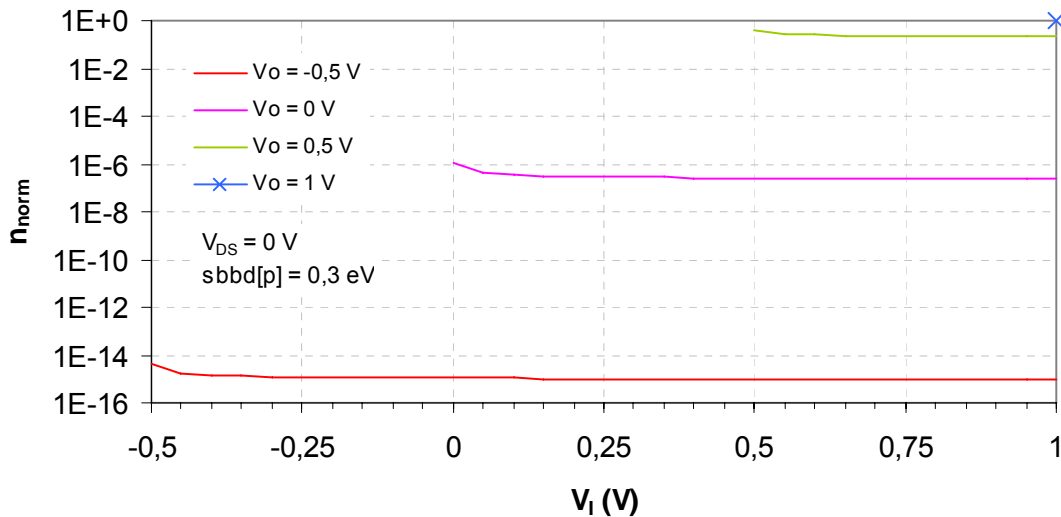


Figure 3.6 Équation constituante de la charge en fonction de V_I , résolue numériquement, pour différentes valeurs de V_O , à $V_{DS} = 0$ V, pour $sbbd[p] = 0,3$ eV, à $k_B T = 0,0259$ eV ($T \approx 300$ K).

Ainsi, cette fonction, équation 3.13, qui est l'équation constituante de la charge, est utilisée de manière systématique pour calculer les densités de charge de trous et d'électrons de chaque région.

III.c. Résolution de l'équation constituante de la charge

L'intégrale de l'équation 3.13 n'a pas de solution analytique. Pour la résoudre, des solutions partielles doivent être considérées :

- selon l'énergie ou le potentiel du canal extérieur V_O ,
- selon le potentiel du canal interne V_I .

La méthode de résolution, analogue à celle de la charge du transistor C-CNFET, consiste à considérer dans un premier temps 2 domaines : eV_O très supérieur à $sbbd[p] + eV_{DS}$ et eV_O très inférieur à $sbbd[p] + eV_{DS}$ qui correspondent aux solutions A et C respectivement. Seules, ces solutions induisent une erreur trop importante (nettement supérieure à 10 %) pour certaines polarisations. Ainsi, afin d'améliorer la précision de la solution analytique de l'équation 3.13, les solutions B et A complémentaire (quand V_O est autour de $sbbd[p] + eV_{DS}$ et quand, pour $eV_I < sbbd[p] + eV_{DS}$, V_I et V_O sont proches, respectivement), sont jointes aux précédentes.

La Figure 3.7 représente le lieu des solutions selon les valeurs des potentiels V_I et V_O . Le choix de la limite, à $1,6 k_B T$ dans tous les cas, correspond environ à la limite où les erreurs relatives de chaque solution sont acceptables. À 300 K, cette limite est d'environ 40 meV. La valeur 1,6 est dite paramètre de limite d'intégration et fait l'objet du paragraphe III.c.5.a.

Le lien entre l'énergie et V_O vient de l'expression de la borne inférieure d'intégration : quand V_O augmente (diminue), on intègre à partir d'énergies plus faibles (élevées) mais toujours dans la limite $V_O \leq V_I$.

Ainsi, les différentes solutions correspondent également à une certaine plage d'énergies :

- la solution partielle A correspond aux fortes énergies,
- la solution partielle A complémentaire (notée A comp) aux fortes énergies et pour des énergies proches du bas de sous-bande,
- la solution partielle B aux énergies autour de V_I ,
- la solution partielle C aux énergies faibles.

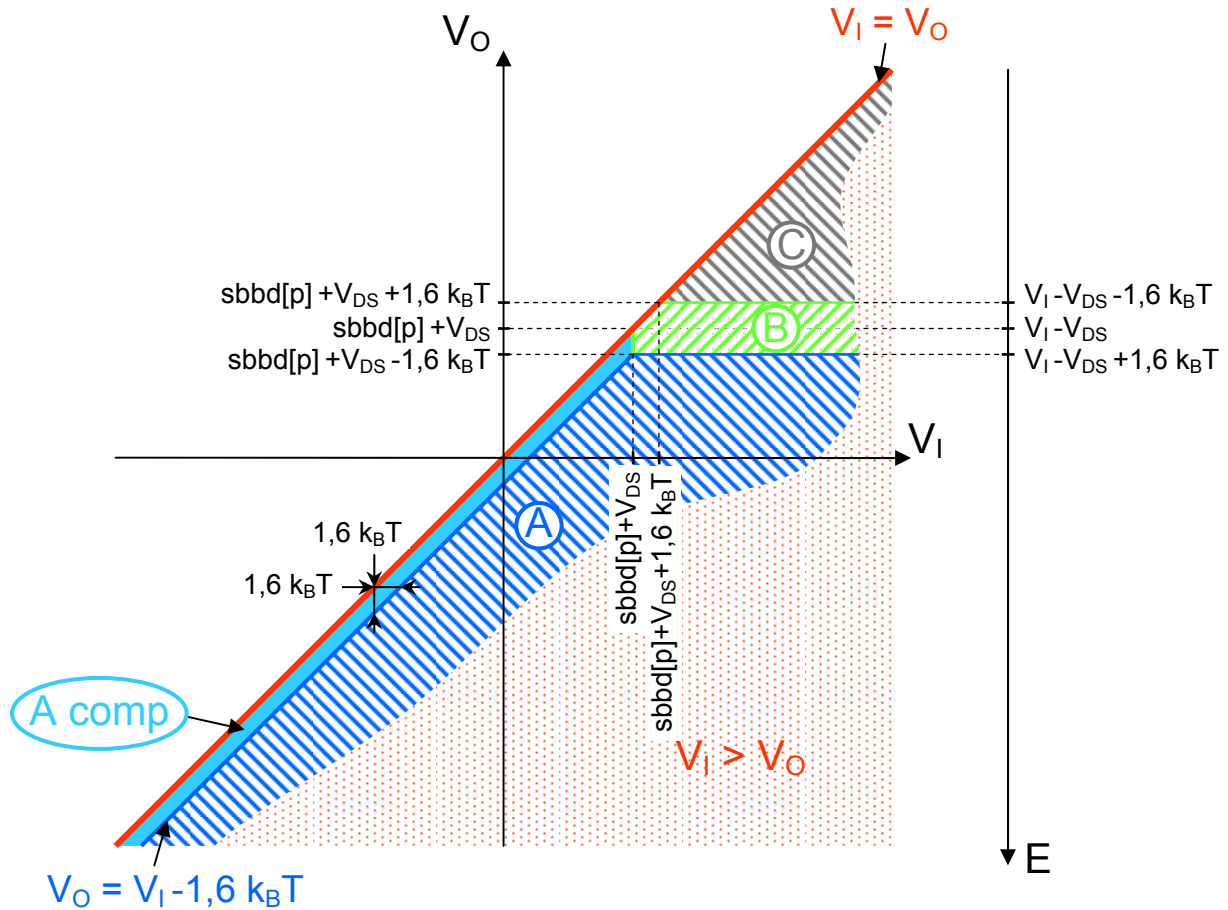


Figure 3.7 Lieux des solutions partielles de l'équation 3.13 en fonction de V_I et de V_O (ou $-E$) (toutes les énergies sont en eV). Le lieu $V_I < V_O$ ne fait pas partie des valeurs permises pour V_O . La droite $V_I = V_O$ correspond à l'équation 2.9 (à la constante près) c'est-à-dire au remplissage des états d'une région à partir de son bas de sous-bande de conduction.

III.c.1 Cas A : fortes énergies, $eV_O < sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6 k_B T$

Dans cette partie, la solution analytique partielle de l'équation 3.13 pour les fortes énergies ou lorsque eV_O est inférieur à $sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6 k_B T$. Par exemple, ce cas correspond à $V_O = -0,5$ V et 0 V sur la Figure 3.6 où $V_{DS} = 0$ V et $sbbd[p] = 0,3$ eV à $k_B T = 0,0259$ eV.

La borne inférieure de l'intégrale, i.e. $sbbd[p] - eV_O + eV_I$, est l'énergie la plus faible à partir de laquelle on intègre. Dans ce cas, la valeur de la borne inférieure est minimale lorsque V_O est maximal (i.e. égal à $sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6 k_B T$) et vaut $E = eV_I - eV_{DS} + 1,6 k_B T$. L'argument de l'exponentielle de la distribution de Fermi $\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}$ vaut au moins 1,6.

La distribution de Fermi est développée de la même manière que l'équation 2.10 en gardant les 2 premiers termes de la série :

$$f(E + eV_{DS} - eV_I) = \exp\left(-\frac{(E + eV_{DS} - eV_I)}{k_B T}\right) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \exp\left(-\frac{n(E + eV_{DS} - eV_I)}{k_B T}\right) \quad 3.14$$

$$\approx \exp\left(-\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{2(E + eV_{DS} - eV_I)}{k_B T}\right)$$

Nous allons donc résoudre l'équation de la densité de charge partielle correspondant uniquement au premier terme de la distribution de Fermi :

$$n_{norm_Egrd_part}(k_B T) = \exp\left(-\frac{eV_{DS} + eV_I}{k_B T}\right) \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{+\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE \quad 3.15$$

Entre le 1^{er} et le 2^e terme de la distribution de Fermi, la seule différence consiste à considérer une tension thermique divisée par 2. Ainsi, la solution correspondant aux 2 premiers termes de la distribution de Fermi développée s'écrit :

$$n_{norm_Egrd}(k_B T) = n_{norm_Egrd_part}(k_B T) - n_{norm_Egrd_part}\left(\frac{k_B T}{2}\right) \quad 3.16$$

L'équation 3.15 est intégrée par partie pour transformer $\frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}}$ en

$\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}$:

$$\frac{n_{norm_Egrd_part}(k_B T)}{\exp\left(-\frac{eV_{DS} + eV_I}{k_B T}\right)} = \sqrt{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2 + sbbd[p]^2} \exp\left(-\frac{sbbd[p] - eV_O + eV_I}{k_B T}\right) \quad 3.17$$

$$+ \frac{1}{k_B T} \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{+\infty} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE$$

Pour résoudre l'intégrale du 2^e terme, nous effectuons le développement limité de $\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}$ autour de $E = sbbd[p] + eV_I - eV_O$:

$$\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} \approx \sqrt{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2 + sbbd[p]^2} \quad 3.18$$

$$+ (E - (sbbd[p] + eV_I - eV_O)) \frac{sbbd[p] + eV_I - eV_O}{\sqrt{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2 + sbbd[p]^2}}$$

$$+ \frac{(E - (sbbd[p] + eV_I - eV_O))^2}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2 + sbbd[p]^2}} - \frac{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2}{((sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2 + sbbd[p]^2)^{\frac{3}{2}}} \right]$$

Ce qui donne, en polynôme fonction de E :

$$\begin{aligned} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} &\approx A - \frac{1}{2}(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2(B + C) \\ &+ E(sbbd[p] + eV_I - eV_O)C \\ &+ E^2 \frac{(B - C)}{2} \end{aligned} \quad 3.19$$

avec $A = \sqrt{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2 + sbbd[p]^2}$, $B = A^{-1}$ et $C = \frac{(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2}{A^3}$

Ainsi, l'intégrale du 2^e terme de l'équation 3.17 s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_{sbbd[p]-eV_O+eV_I}^{+\infty} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} \exp \frac{-E}{k_B T} dE &\approx \\ &\left[A - \frac{1}{2}(sbbd[p] + eV_I - eV_O)^2(B + C) \right] \int_{sbbd[p]-eV_O+eV_I}^{+\infty} \exp \frac{-E}{k_B T} dE \\ &+ (sbbd[p] + eV_I - eV_O)C \int_{sbbd[p]-eV_O+eV_I}^{+\infty} E \exp \frac{-E}{k_B T} dE \\ &+ \frac{(B - C)}{2} \int_{sbbd[p]-eV_O+eV_I}^{+\infty} E^2 \exp \frac{-E}{k_B T} dE \end{aligned} \quad 3.20$$

Dont la solution est [Grad00iii] (ou par intégration par parties) :

$$\begin{aligned} \int_{sbbd[p]-eV_O+eV_I}^{+\infty} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} \exp \frac{-E}{k_B T} dE &\approx \\ k_B T \exp \frac{-(sbbd[p] + eV_I - eV_O)}{k_B T} &\left[A + k_B T B (sbbd[p] + eV_I - eV_O) + (B - C)(k_B T)^2 \right] \end{aligned} \quad 3.21$$

Réinsérons ce résultat dans l'équation 3.17 :

$$n_{norm_Egrd_part}(k_B T) = k_B T \exp \frac{-sbbd[p] + eV_O - eV_{DS}}{k_B T} \left[\frac{B(sbbd[p] + eV_I - eV_O)}{+ (B - C)k_B T} \right] \quad 3.22$$

La Figure 3.8 présente le résultat de l'intégration numérique de l'équation 3.13 et le résultat de l'équation 3.22 utilisée selon l'équation 3.16 en fonction de V_I pour différentes valeurs de V_O de -0,5 V à $sbbd[p] - 1,6 k_B T$ soit 0,25856 V et avec $V_I > V_O + 1,6 k_B T$, à $V_{DS} = 0$ V, pour $sbbd[p] = 0,3$ eV, à $k_B T = 0,0259$ eV.

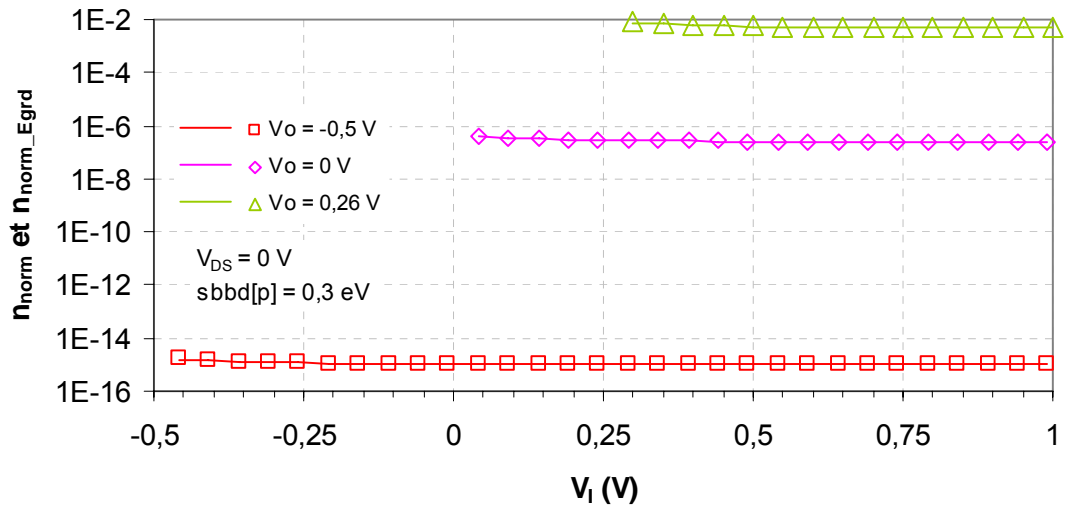


Figure 3.8 Équation constituante de la charge pour les fortes énergies en fonction de V_g , résolue numériquement (symbole) et analytiquement (ligne) via les équations 3.16 et 3.22, pour différentes valeurs de V_0 à $T \approx 300$ K.

La Figure 3.9 présente l'erreur relative entre le résultat numérique de l'intégration de l'équation constituante de la charge (équation 3.13) et le résultat analytique de ce cas (équation 3.22 utilisée selon l'équation 3.16). L'erreur relative est calculée selon l'expression :

$$\text{erreur_relative} = \frac{|\text{résultat_numérique} - \text{résultat_analytique}|}{|\text{résultat_numérique}|} \quad 3.23$$

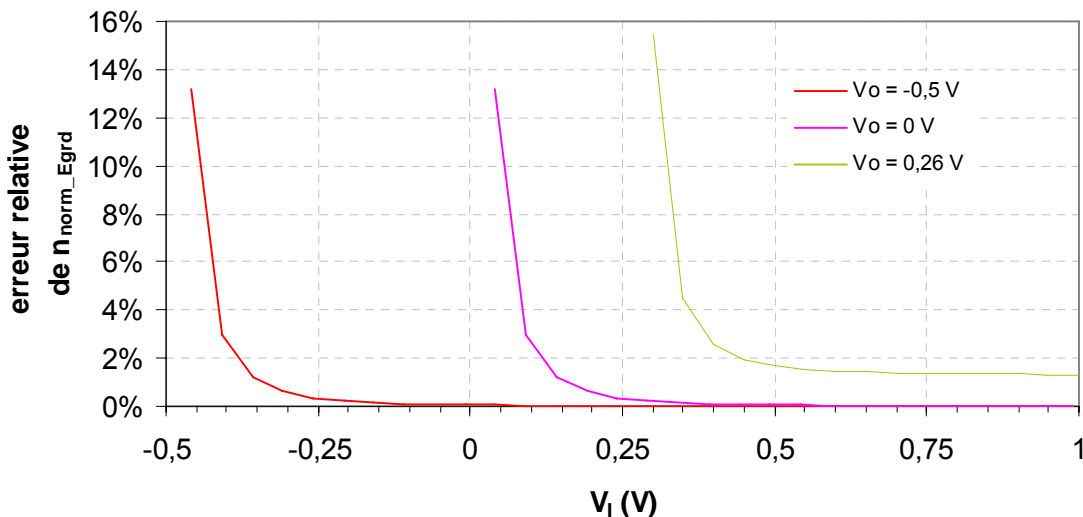


Figure 3.9 Erreur relative de l'équation constituante de la charge en fonction de V_g , entre le résultat du calcul numérique (considéré comme étant la valeur « vraie ») et le résultat analytique (considéré comme approché) présentés sur la Figure 3.8.

La solution analytique est satisfaisante par rapport à l'intégration numérique de l'équation constituante de la charge : la solution partielle proposée est en bon accord avec la solution numérique sur la Figure 3.8. L'erreur relative confirme cette comparaison pour V_I nettement supérieur à V_O (de $3-4 k_B T$). Cependant, elle dépasse les 10 % pour les valeurs de V_I plus proches de V_O : il s'agit d'un compromis entre précision du résultat et complexité du calcul. Pour gagner en précision, il faudrait augmenter l'ordre du développement limité de $\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}$, déjà à l'ordre 2 : la densité d'états (ou son intégrale) varie fortement pour des énergies proches du bas de sous-bande (Figure 2.3). Pour les valeurs de V_I très proches de V_O , l'équation constituante de la charge est résolue par une autre approche détaillée dans la partie qui suit : le cas A complémentaire.

III.c.2 Cas A complémentaire : énergies proches du bas de sous-bande, $eV_O > eV_I - 1,6 k_B T$

La solution partielle du cas A montre ses limites pour V_I proche de V_O (quelques $k_B T$). Ce cas tient compte de cette polarisation particulière, $eV_I > eV_O > eV_I - 1,6 k_B T$, afin de résoudre l'équation constituante de la charge analytiquement.

Dans ce cas, la valeur minimale de eV_O est égale à $eV_I - 1,6 k_B T$ et correspond à l'énergie maximale :

$$E = sbbd[p] - eV_O + eV_I = sbbd[p] + 1,6k_B T \quad 3.24$$

Cette énergie est la borne supérieure de l'équation de la densité de charge linéique à résoudre soit :

$$n_{norm_Eproche_sbbd} = \int_{sbbd[p]-eV_O+eV_I}^{sbbd[p]+1,6k_B T} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}} dE \quad 3.25$$

On a vu dans le paragraphe précédent que lorsque, pour $V_O < sbbd[p] + eV_{DS}$, V_O est proche de V_I , l'erreur de la solution analytique présentée dans la Figure 3.9 est trop importante. Au lieu d'effectuer un développement limité sur la dérivée de la densité d'états, nous développons la distribution de Fermi autour de $E = sbbd[p] + eV_I - eV_O$:

$$f(E + eV_{DS} - eV_I) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}} \quad 3.26$$

$$\approx a_0 + a_1(E - (sbbd[p] - eV_O + eV_I)) + \frac{a_2}{2}(E - (sbbd[p] - eV_O + eV_I))^2$$

avec :

$$- a_0 = \frac{1}{1 + \exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T}}$$

$$- a_1 = - \frac{\exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T}}{k_B T \left(1 + \exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T} \right)^2}$$

$$- a_2 = \frac{1}{(k_B T)^2} \left[\frac{2 \left(\exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T} \right)^2}{\left(1 + \exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T} \right)^3} - \frac{\exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T}}{\left(1 + \exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T} \right)^2} \right]$$

Ce qui donne, en polynôme de E :

$$\begin{aligned} f(E + eV_{DS} - eV_I) &\approx a_0 - a_1(sbbd[p] - eV_O + eV_I) + \frac{a_2}{2}(sbbd[p] - eV_O + eV_I)^2 \\ &\quad + E(a_1 - a_2(sbbd[p] - eV_O + eV_I)) \\ &\quad + E^2 \frac{a_2}{2} \end{aligned} \quad 3.27$$

Ainsi l'intégrale à résoudre est :

$$n_{norm_Eproche_sbbd} = \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{sbbd[p] + 1,6k_B T} \frac{EdE}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \left[\begin{aligned} &a_0 - a_1(sbbd[p] - eV_O + eV_I) + \frac{a_2}{2}(sbbd[p] - eV_O + eV_I)^2 \\ &+ E(a_1 - a_2(sbbd[p] - eV_O + eV_I)) \\ &+ E^2 \frac{a_2}{2} \end{aligned} \right] \quad 3.28$$

Cette équation est intégrable selon les formules [Grad00i] :

$$\begin{aligned} - \int \frac{EdE}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} &= \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}, \\ - \int \frac{E^2 dE}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} &= \frac{E}{2} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} + \frac{sbbd[p]^2}{2} \ln(E + \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}), \\ - \int \frac{E^3 dE}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} &= \frac{E^2}{3} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} + \frac{2sbbd[p]^2}{3} \sqrt{E^2 - sbbd[p]^2} \end{aligned} \quad 3.29$$

Finalement, on obtient :

$$n_{norm_Eproche_sbbd} =$$

$$\left(a_0 - a_1 X + \frac{a_2}{2} X^2 + \frac{a_2}{3} sbbd[p]^2 \right) \left(\frac{\sqrt{(sbbd[p] + 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2}}{-\sqrt{X^2 - sbbd[p]^2}} \right) + \frac{1}{2} (a_1 - a_2 X) \left[\frac{(sbbd[p] + 1,6k_B T) \sqrt{(sbbd[p] + 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2}}{-X \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2}} + sbbd[p]^2 \ln \frac{sbbd[p] + 1,6k_B T + \sqrt{(sbbd[p] + 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2}}{X + \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2}} \right] + \frac{a_2}{6} \left[(sbbd[p] + 1,6k_B T)^2 \sqrt{(sbbd[p] + 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2} - X^2 \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2} \right] \quad 3.30$$

avec $X = sbbd[p] + eV_1 - eV_0$.

La Figure 3.10 présente le résultat de l'intégration numérique de l'équation 3.25 et le résultat de l'équation 3.30 en fonction de $V_1 - V_0$ pour différentes valeurs de V_0 de -0,5 V à $sbbd[p]$ et avec $V_1 < V_0 + 1,6 k_B T$, à $V_{DS} = 0$ V, pour $sbbd[p] = 0,3$ eV, à $T \approx 300$ K.

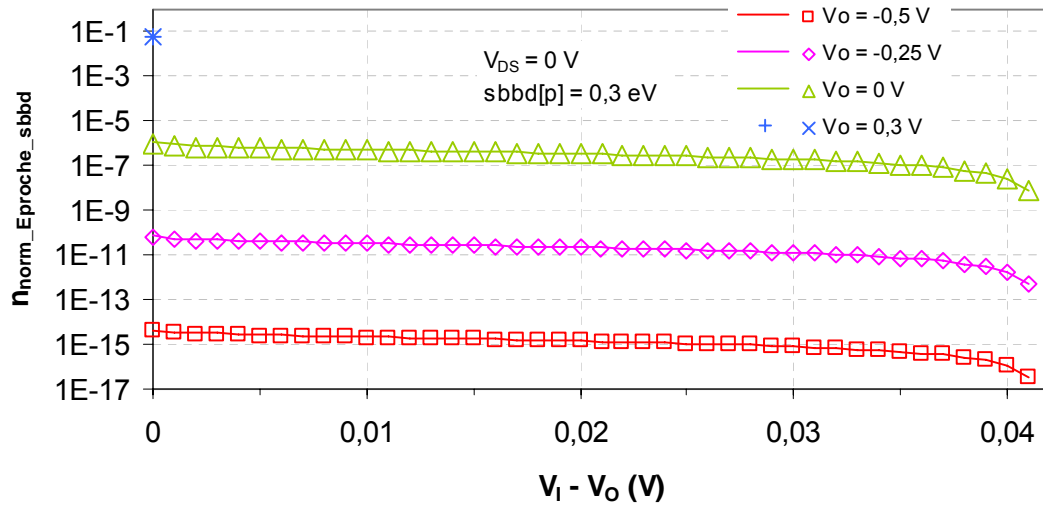


Figure 3.10 Équation constituante de la charge pour les énergies proches du bas de sous-bande en fonction de $V_1 - V_0$, résolue numériquement (symbole) et analytiquement (ligne) via les équations 3.25 et 3.30 respectivement, pour différentes valeurs de V_0 .

On constate le bon accord entre la solution analytique et l'intégration numérique de l'équation correspondante.

Sur la Figure 3.11, l'erreur relative tend vers zéro lorsque $V_1 - V_0$ est de plus en plus grand. Pour $V_1 = V_0$, l'erreur relative est limitée à 13 % environ pour les valeurs de V_1 très proches de V_0 et pour V_0 inférieur à $sbbd[p]$ de $2 k_B T$ environ. Cette polarisation correspond notamment au bas de sous-bande de conduction de la région considérée situé au-dessus des autres : l'intégrale est limitée par le potentiel du canal local, ce qui revient à avoir dans les équations $V_0 = V_1$. Le courant est alors limité par le bas de sous-bande de la région considérée. Ainsi, cette erreur sur la charge se propage au potentiel du canal puis au courant.

Cependant, cette erreur n'est pas satisfaisante lorsque V_O est négatif, ce qui correspond à un courant Off : l'erreur diminue jusqu'à 3 % (tout à fait acceptable) pour V_O égal à $sbbd[p]$.

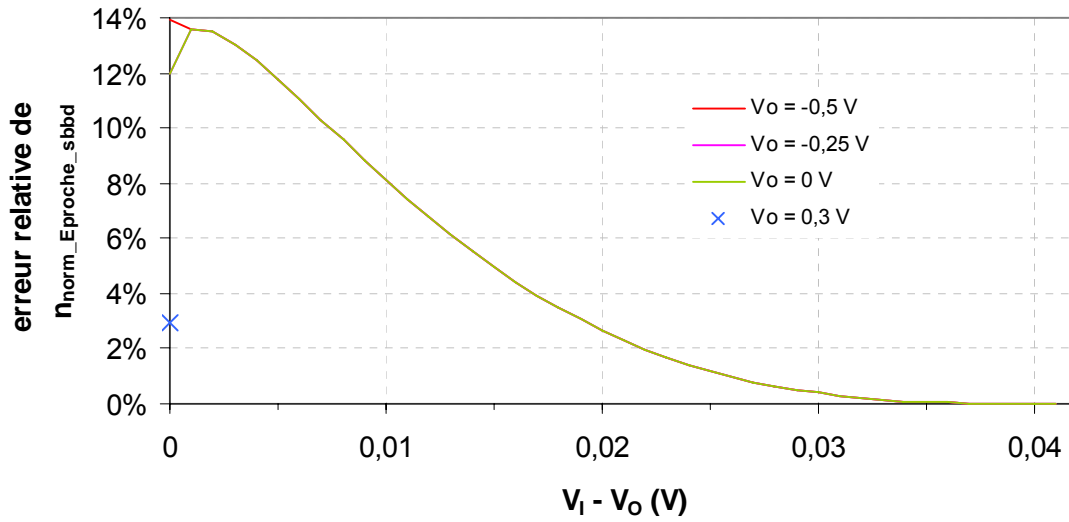


Figure 3.11 Erreur relative de l'équation constitutive de la charge pour les énergies proches du bas de sous-bande (normalisée) en fonction de $V_I - V_O$, entre le calcul numérique et le calcul analytique présentés sur la Figure 3.10.

III.c.3 Cas B : énergies proches de $eV_I - eV_{DS}$, $sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6k_B T > eV_O > sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6k_B T$

Dans cette partie, nous résolvons analytiquement l'équation constitutive de la charge pour les énergies proches de eV_I soit pour les valeurs de eV_O autour de $sbbd[p] + eV_{DS}$. Physiquement, la polarisation $eV_O = sbbd[p] + eV_{DS}$ correspond à l'alignement du bas de la bande de conduction de la région qui limite le déplacement des porteurs de charge avec le niveau de Fermi du contact dont sont issus ces porteurs.

Comme indiqué sur la Figure 3.7, la solution proposée ci-dessous correspond à l'équation constitutive de la charge uniquement pour les énergies comprises entre $eV_I - eV_{DS} - 1,6 k_B T$ et $eV_I - eV_{DS} + 1,6 k_B T$. Pour les fortes énergies, supérieures à $eV_I - eV_{DS} + 1,6 k_B T$, nous utilisons la solution correspondant au cas A avec borne inférieure d'intégration $eV_I - eV_{DS} + 1,6 k_B T$. Ainsi, pour les polarisations décrites ici, l'équation constitutive de la charge est égale à :

$$n_{norm} = n_{norm_Eautour_eV_I} + \int_{eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T}^{\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}\right)} dE \quad 3.31$$

$$= n_{norm_Eautour_eV_I} + n_{norm_Egrd}(V_O = sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6k_B T)$$

L'équation à résoudre est donc :

$$n_{norm_Eautour_eV_I} = \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}\right)} dE \quad 3.32$$

On note que, pour eV_O égal à $sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6 k_B T$, les bornes d'intégration de l'équation ci-dessus sont égales : l'intégrale est nulle et seule la solution du cas A contribue au calcul de la charge.

Lorsque eV_O est inférieur à $sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6 k_B T$, cette solution ne doit pas être prise en compte. La borne inférieure de l'intégrale est alors limitée à $eV_I - eV_{DS} + 1,6 k_B T$.

Dans cette partie, la faible variation de V_O est autour de $sbbd[p] + eV_{DS}$ qui correspond à une faible variation de l'énergie autour de $eV_I - eV_{DS}$ permet de développer la distribution de Fermi autour de $eV_I - eV_{DS}$:

$$f(E + eV_{DS} - eV_I) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}\right)} \quad 3.33$$

$$\approx \frac{1}{2} - \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{4k_B T}$$

L'équation 3.32 est ainsi approchée par :

$$n_{norm_Eautour_eV_I} = \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \left(\frac{1}{2} - \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{4k_B T} \right) dE \quad 3.34$$

Cette équation est intégrable via les formules 3.29 [Grad00i], on obtient donc, après simplifications :

$$n_{norm_Eautour_eV_I} = \sqrt{(eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1,6}{8} + \frac{eV_I - eV_{DS}}{8k_B T} \right) - \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{eV_I - eV_{DS} - \frac{X}{2}}{4k_B T} \right) + \frac{sbbd[p]^2}{8k_B T} \ln \frac{eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T - \sqrt{(eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2}}{X - \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2}} \quad 3.35$$

avec $X = sbbd[p] + eV_I - eV_O$.

La présence de la valeur 1,6 (la limite entre les divers cas) dans la parenthèse du premier terme est laissée non simplifiée volontairement car il s'agit du paramètre de limite d'intégration discuté paragraphe III.c.5.a.

La Figure 3.12 présente le résultat de l'intégration numérique de l'équation 3.32 et le résultat de l'équation 3.35 en fonction de V_I pour différentes valeurs de V_O de $sbbd[p] - 1,6 k_B T$ soit 0,25856 V à $sbbd[p] + 1,6 k_B T$ soit 0,34144 V et avec $V_I > sbbd[p]$, à $V_{DS} = 0$ V, pour $sbbd[p] = 0,3$ eV, à $T \approx 300$ K.

La solution analytique et l'intégration numérique sont en accord. Pour V_O égal à 0,25856 V, les résultats numériques et analytiques valent zéro quel que soit V_I . Cette valeur de V_O correspond à la limite de validité de ce cas : la borne inférieure de l'intégrale 3.32 est égale à la borne supérieure.

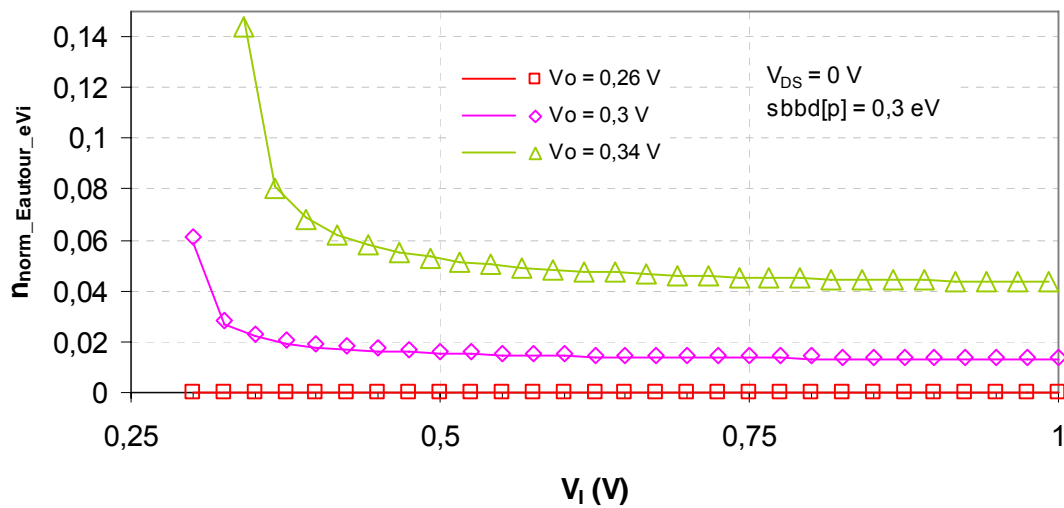


Figure 3.12 Équation constituante de la charge pour les énergies proches de eV_I en fonction de V_I , résolue numériquement (symbole) et analytiquement (ligne) via les équations 3.32 et 3.35 respectivement, pour différentes valeurs de V_O .

L'erreur relative est représentée Figure 3.13. Elle est satisfaisante, elle ne dépasse pas 6%. Pour V_O égal à 0,26 V, l'erreur n'est pas calculable car les résultats numérique et analytique valent zéro : elle n'est donc pas représentée.

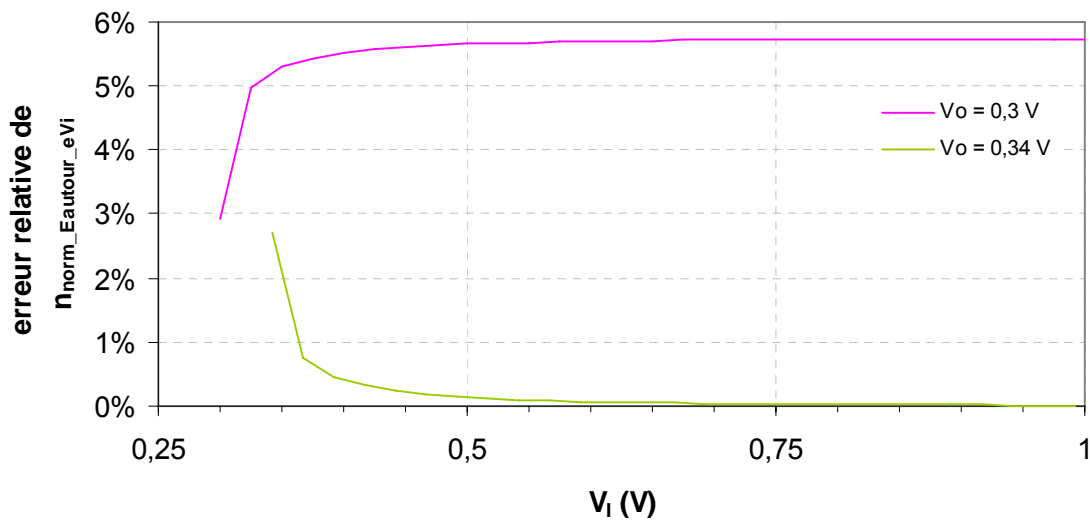


Figure 3.13 Erreur relative de l'équation constituante de la charge pour les énergies proches de eV_I en fonction de V_I , entre le calcul numérique et le calcul analytique présentés sur la Figure 3.12.

III.c.4 Cas C : faibles énergies, $eV_O > sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6 k_B T$

Dans cette partie, nous résolvons analytiquement l'équation constitutive de la charge pour les faibles énergies soit pour les valeurs de eV_O supérieures à $sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6 k_B T$. Physiquement, nous intégrons le produit *densité d'états X distribution de Fermi de source* lorsque la distribution de Fermi est proche de 1.

De la même manière que le cas B est complété par le cas A pour correspondre à l'équation constitutive de la charge pour toutes les énergies, le cas C est complété par les cas A et B pour les énergies supérieures à $eV_I - eV_{DS} - 1,6 k_B T$. Ainsi, pour les polarisations décrites ici, l'équation constitutive de la charge est égale à :

$$n_{norm} = \begin{cases} n_{norm_Efaible} \\ + \int_{eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T}^{eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}} dE \\ + \int_{eV_I - eV_{DS} + 1,6k_B T}^{\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}} dE \end{cases} \quad 3.36$$

$$= \begin{cases} n_{norm_Efaible} \\ + n_{norm_Eautour_eV_I} (V_O = sbbd[p] + eV_{DS} - 1,6k_B T) \\ + n_{norm_Egrd} (V_O = sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6k_B T) \end{cases}$$

L'équation à résoudre est donc :

$$n_{norm_Efaible} = \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}} dE \quad 3.37$$

On note que, pour eV_O égal à $sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6 k_B T$, les bornes d'intégration de l'équation ci-dessus sont égales : l'intégrale est nulle et seules les solutions des cas A et B contribuent au calcul de la charge.

Lorsque eV_O est inférieur à $sbbd[p] + eV_{DS} + 1,6 k_B T$, cette solution ne doit pas être prise en compte. La borne inférieure de l'intégrale est alors limitée à $eV_I - eV_{DS} - 1,6 k_B T$.

Dans ce cas, où les énergies considérées correspondent à la distribution de Fermi proche de 1, nous utilisons le même développement de la distribution de Fermi autour de $E = sbbd[p] + eV_I - eV_O$ que pour le cas A complémentaire (équation 3.26) mais limité au 1^{er} ordre :

$$f(E + eV_{DS} - eV_I) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E + eV_{DS} - eV_I}{k_B T}} \quad 3.38$$

$$\approx a_0 + a_1 (E - (sbbd[p] - eV_O + eV_I))$$

avec :

$$\begin{aligned}
 - a_0 &= \frac{1}{1 + \exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T}} \\
 - a_1 &= - \frac{\exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T}}{k_B T \left(1 + \exp \frac{sbbd[p] + eV_{DS} - eV_O}{k_B T} \right)^2}
 \end{aligned}$$

L'intégrale à résoudre devient :

$$\begin{aligned}
 n_{norm_Efaible} &= \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T} \frac{E}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} (a_0 + a_1 (E - (sbbd[p] - eV_O + eV_I))) dE \\
 &= \int_{sbbd[p] - eV_O + eV_I}^{eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T} \left(\frac{E(a_0 - a_1 (sbbd[p] - eV_O + eV_I))}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} + \frac{a_1 E^2}{\sqrt{E^2 - sbbd[p]^2}} \right) dE
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Cette équation est intégrable via les formules 3.29 [Grad00i]. Finalement, on obtient :

$$\begin{aligned}
 n_{norm_Efaible} &= (a_0 - a_1 X) \left(\sqrt{(eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2} - \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2} \right) \\
 &\quad + \frac{a_1}{2} \left[\begin{aligned} &(eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T) \sqrt{(eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2} \\ &- X \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2} \\ &+ sbbd[p]^2 \ln \frac{eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T + \sqrt{(eV_I - eV_{DS} - 1,6k_B T)^2 - sbbd[p]^2}}{X + \sqrt{X^2 - sbbd[p]^2}} \end{aligned} \right]
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

avec $X = sbbd[p] + eV_I - eV_O$.

La Figure 3.14 présente le résultat de l'intégration numérique de l'équation 3.37 et le résultat de l'équation 3.40 en fonction de V_I pour différentes valeurs de V_O de $sbbd[p] + 1,6 k_B T$ soit 0,34144 V à 1 V, à $V_{DS} = 0$ V, pour $sbbd[p] = 0,3$ eV, à $T \approx 300$ K.

La solution analytique et l'intégration numérique sont en accord. Pour V_O égal à 0,34144 V, les résultats numériques et analytiques valent zéro quel que soit V_I . Cette valeur de V_O correspond à la limite de validité de ce cas : la borne inférieure de l'intégrale 3.37 est égale à la borne supérieure.

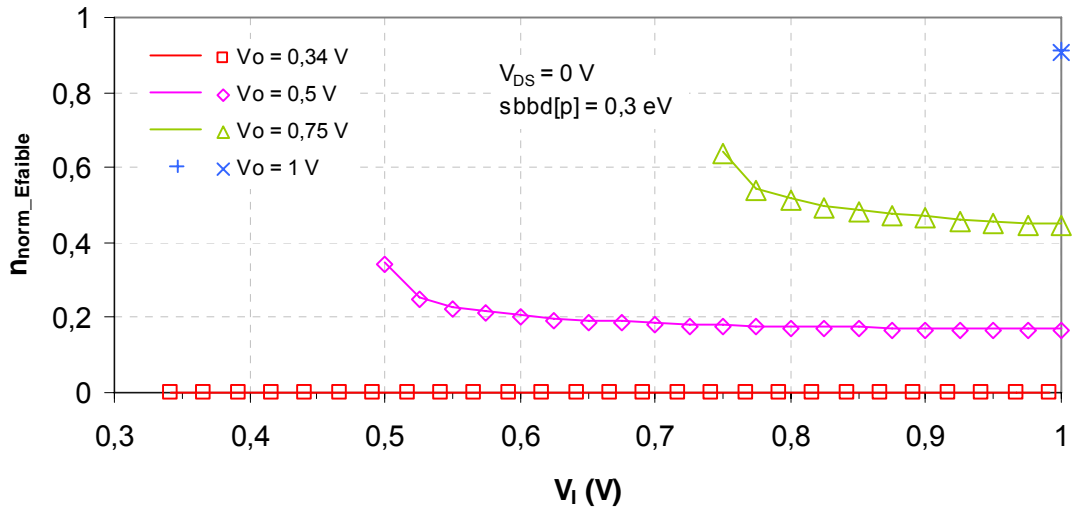


Figure 3.14 Équation constitutive de la charge pour les énergies faibles en fonction de V_1 , résolue numériquement (symbole) et analytiquement (ligne) via les équations 3.37 et 3.40 respectivement, pour différentes valeurs de V_0 .

L'erreur relative est représentée Figure 3.15. Elle est très satisfaisante, elle ne dépasse pas 3%. Pour V_0 égal à 0,34 V, l'erreur n'est pas calculable car les résultats numérique et analytique valent zéro : elle n'est donc pas représentée.

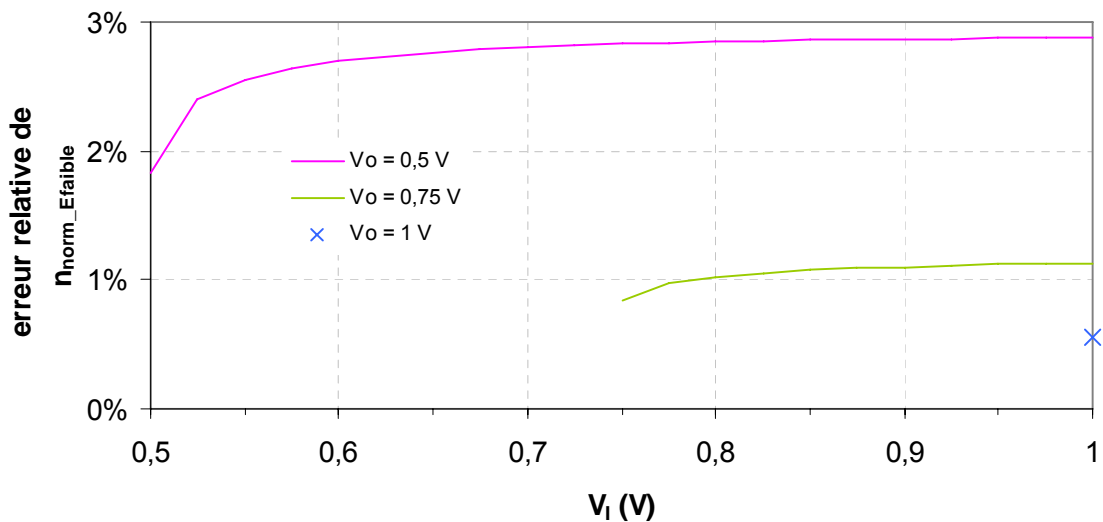


Figure 3.15 Erreur relative de l'équation constitutive de la charge pour les énergies faibles en fonction de V_1 , entre le calcul numérique et le calcul analytique présentés sur la Figure 3.14.

III.c.5 Solution complète

Nous allons expliquer le choix des 2 seuls paramètres empiriques à conséquences minimales sur la solution de l'équation constitutive de la charge 3.13 :

- le paramètre de limite d'intégration qui intervient dans le découpage de l'intégrale dont résultent les différents cas,

- le coefficient qui intervient dans la fonction de lissage entre les différentes solutions.

III.c.5.a Paramètre de limite d'intégration

Le paramètre de limite d'intégration définit la limite entre les solutions analytiques calculées ci-avant.

Afin de choisir la valeur de ce paramètre pour la limite entre le cas A et le cas B, nous calculons l'erreur relative entre la solution analytique et l'intégration numérique pour la polarisation qui convient. Il faut ensuite réitérer ces calculs d'erreur pour la frontière entre le cas B et le cas C et pour la frontière entre le cas A et le cas A complémentaire.

La valeur du paramètre de limite d'intégration à retenir pour la frontière entre cas A et B est de l'ordre de 1,5 (en gardant à l'esprit que la charge est plus importante pour les valeurs de V_I proche de $sbbd[p]$, voir Figure 3.12) mais une variation de 1,1 à 2 induit une erreur relative inférieure à 10 %.

Pour la frontière entre les cas B et C, la valeur optimale est de 1,4 lorsque V_O est à la limite des cas B et C (la solution C n'est alors pas prise en compte) et est de 2 pour des valeurs de V_O plus élevées (limite autour de $V_O = sbbd[p] + 3,5 k_B T$) mais l'erreur relative ne dépasse pas 5,5 % pour des valeurs de 1 à 2 (en prenant 1,6 pour valeur du paramètre de limite d'intégration entre les cas A et B). Le compromis choisi, i.e. la valeur 1,6, implique une erreur relative inférieure à 3 % pour les polarisations du cas C.

Pour la frontière entre les cas A et A complémentaire, la valeur optimale est de 1,6. Avec cette valeur du paramètre, pour V_O supérieur à $sbbd[p] - 2 k_B T$, l'erreur relative est d'environ 4 %. Pour V_O inférieur à $sbbd[p] - 2 k_B T$, il convient de considérer plusieurs cas selon la valeur de V_I :

- Pour $V_I \approx V_O$, l'erreur relative augmente quand V_O diminue : elle est d'environ 10 % pour $V_O = sbbd[p] - 26 k_B T$ (soit $V_O = -0,37 V$ pour $sbbd[p] = 0,3 eV$ à $T \approx 300 K$),
- Pour $V_I \approx V_O + (1,6 k_B T/2)$, l'erreur vaut environ 5 %,
- Pour $V_I \approx V_O + 1,6 k_B T$, l'erreur vaut environ 14 %.

Pour ces valeurs de V_O , la distribution de Fermi est proche de zéro, la valeur de l'équation constituante de la charge est faible (environ 10^{-6} pour $V_O = 0 V$ sur la Figure 3.16) : l'erreur est alors acceptable.

Nous avons donc choisi par simplicité et pour limiter le nombre de valeurs empiriques une seule et même valeur du paramètre de limite d'intégration pour les 3 limites d'intégrales soit 1,6.

III.c.5.b Fonction de lissage

Une fonction de lissage est nécessaire entre le cas A complémentaire et le cas B soit pour les valeurs de V_I autour de $sbbd[p]$ et de V_O entre $sbbd[p] - 1,6 k_B T$ et $sbbd[p]$. Elle a pour but de limiter fortement les discontinuités entre les solutions des cas A complémentaire et B lorsque V_I passe d'une solution à l'autre. Cette fonction est similaire à celle utilisée pour la charge du transistor C-CNFET :

$$f_{SMO}(V_I) = \frac{1}{1 + \exp\left(250 \frac{-eV_I + sbbd[p] + eV_{DS}}{k_B T}\right)} \quad 3.41$$

III.c.5.c Comparaison solutions numérique/analytique

À partir des équations 3.16, 3.22, 3.30, 3.35 et 3.40, l'équation élémentaire de la densité de charge 3.13 a pour solution analytique :

$$n_{norm} = n_{norm_Eproche_sbbd} (1 - f_{SMO}) + (n_{norm_Eautour_eV_i} + n_{norm_Efaible}) f_{SMO} + n_{norm_Egrd_part} (k_B T) - n_{norm_Egrd_part} \left(\frac{k_B T}{2} \right) \quad 3.42$$

La Figure 3.16 montre l'équation constituante de la charge calculée par intégration numérique de l'équation 3.13 et celle calculée à partir de la solution analytique (équation 3.42) pour différentes valeurs de V_O , à $V_{DS} = 0$ V, pour $sbbd[p] = 0,3$ eV, à $T \approx 300$ K. Les courbes pour $V_O < 0$ V, ne sont pas montrées pour une meilleure lisibilité : pour $V_O = -0,5$ V et -1 V, la densité de charge normalisée est de l'ordre de 10^{-15} et 10^{-24} respectivement.

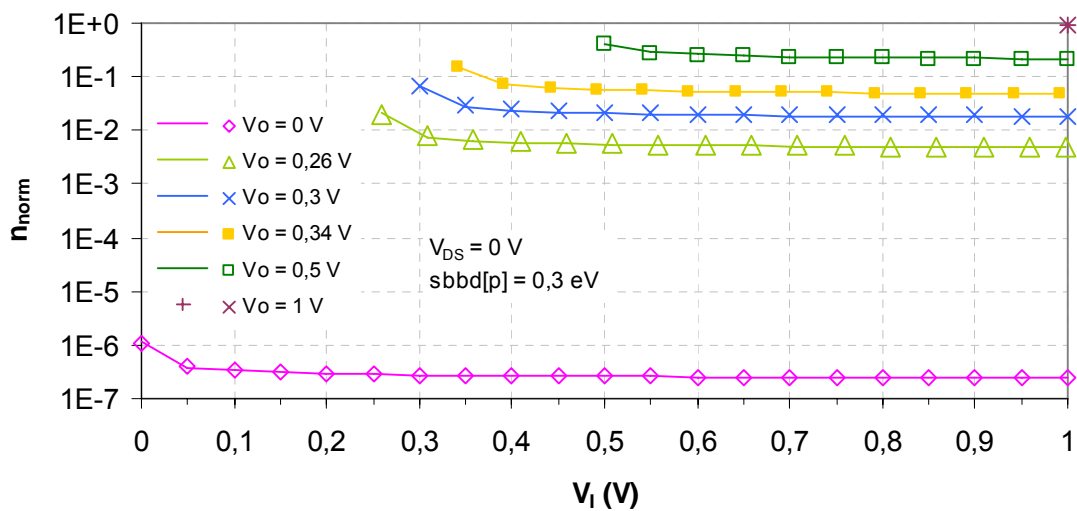


Figure 3.16 Équation constituante de la charge en fonction de V_i , résolue numériquement à partir de l'équation 3.13 (symboles) et calculée à partir de l'équation 3.42 (lignes), pour différentes valeurs de V_O .

La Figure 3.17 montre l'erreur relative entre l'équation constituante de la charge intégrée numériquement et la solution analytique.

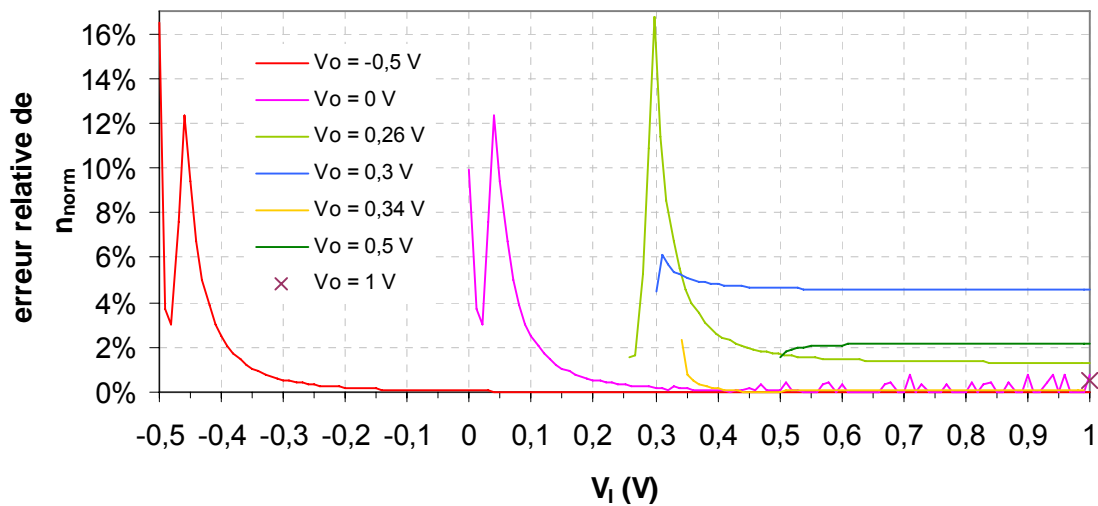


Figure 3.17 Erreur relative de l'équation constitutive de la charge en fonction de V_i , entre le calcul numérique et le calcul analytique présentés sur la Figure 3.16.

L'ensemble des différentes solutions issues de simplifications selon la polarisation permet d'évaluer correctement l'équation constitutive de la charge. L'erreur relative est maîtrisée :

- elle est inférieure à 6 % pour V_O supérieur à $sbbd[p]$, i.e. lorsque la charge devient significative et la région considérée susceptible de conduire un courant On,
- elle est ponctuellement supérieure à 10 %.

L'amélioration de la précision de la solution analytique mène inévitablement à des solutions plus complexes, incompatibles avec la modélisation compacte.

IV. Calcul du courant

Nous avons évoqué dans le paragraphe décrivant le fonctionnement de ce transistor double grille que le courant d'électron (de trous) est limité par la plus haute (faible) barrière, c'est-à-dire par le bas (haut) de sous-bande de conduction (valence) de la région ayant le potentiel du canal V_{CNT} le plus faible (élevé). Pour le courant d'électron, le coefficient de transmission vaut 1 pour les énergies supérieures au bas de sous-bande le plus élevé et 0 pour les énergies inférieures.

Ainsi, de manière similaire au calcul du courant effectué pour le transistor C-CNFET en considérant le potentiel du canal le plus faible des 3 régions, l'équation du courant de drain pour les électrons s'écrit :

$$I_{DS-e^-} = \frac{4ek_B T}{h} \sum_{p=1}^{nb \text{ bands}} \left[\begin{array}{l} \ln \left(1 + \exp \frac{e \min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) - sbbdC[p]}{k_B T} \right) \\ - \ln \left(1 + \exp \frac{e \min(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) - V_{DS} - sbbdC[p]}{k_B T} \right) \end{array} \right] \quad 3.43$$

Et celle pour les trous s'écrit (avec e , la charge de l'électron, toujours positive et $sbbdV[p]$, le haut de la $p^{ième}$ sous-bande de valence, négatif) :

$$I_{DS-h^+} = \frac{4ek_B T}{h} \sum_{p=1}^{nb \text{ bands}} \left[\begin{aligned} & -\ln \left(1 + \exp \frac{-e \max(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) + sbbdV[p]}{k_B T} \right) \\ & + \ln \left(1 + \exp \frac{-e \max(V_{CNTs}, V_{CNTi}, V_{CNTd}) + V_{DS} + sbbdV[p]}{k_B T} \right) \end{aligned} \right] \quad 3.44$$

Dans les 2 cas, le courant est la différence des contributions de source et de drain.

Enfin, le courant de total est la somme des contributions des 2 types de porteur soit :

$$I_{DS} = I_{DS-e^-} + I_{DS-h^+} \quad 3.45$$

V. Schéma électrique équivalent et implantation

Le schéma électrique équivalent du modèle est décrit Figure 3.18. À l'équation 3.45 du courant, I_{DS} , et à celles des charges de la partie interne IP (équation 3.11), de l'accès source SA et de l'accès drain DA (équation 3.9) issues de la source et du drain, il convient d'ajouter les éléments suivants :

- les capacités d'oxyde de grille avant C_{FG} et de grille arrière C_{BGD} et C_{BGS} , dépendante de la géométrie et de la constante diélectrique de l'isolant. La capacité de grille arrière a été scindée afin de pouvoir prendre en compte d'éventuelle dispersions technologiques (telle que la longueur de canal des accès).
- les tensions de bandes plates V_{FB-FG} et V_{FB-BG} qui prennent en compte la différence entre le travail d'extraction du métal de grille (ou l'affinité électronique du semiconducteur faisant office de grille) et l'affinité électronique du nanotube,
- les résistances d'accès de grille avant R_G (évaluée à 10 Ω) et de grille arrière R_{BGD} et R_{BGS} (évaluées à 70 Ω , la grille arrière étant généralement en semiconducteur). La résistance de grille arrière a été scindée afin de pouvoir prendre en compte d'éventuelles dispersions technologiques (liés à la présence de pièges par exemple).
- les résistances d'accès de source et drain, R_S et R_D respectivement, qui prennent en compte la différence de potentiel entre l'électrode de source ou de drain et le nanotube dopé due au contact, égales à 25 k Ω . La littérature [Jave03ii, Jave04, Zhou00] rapporte des valeurs de plusieurs dizaines de k Ω pour la somme de ces deux résistances.

Le régime de fonctionnement dynamique est gouverné par ce circuit équivalent [Hasa06].

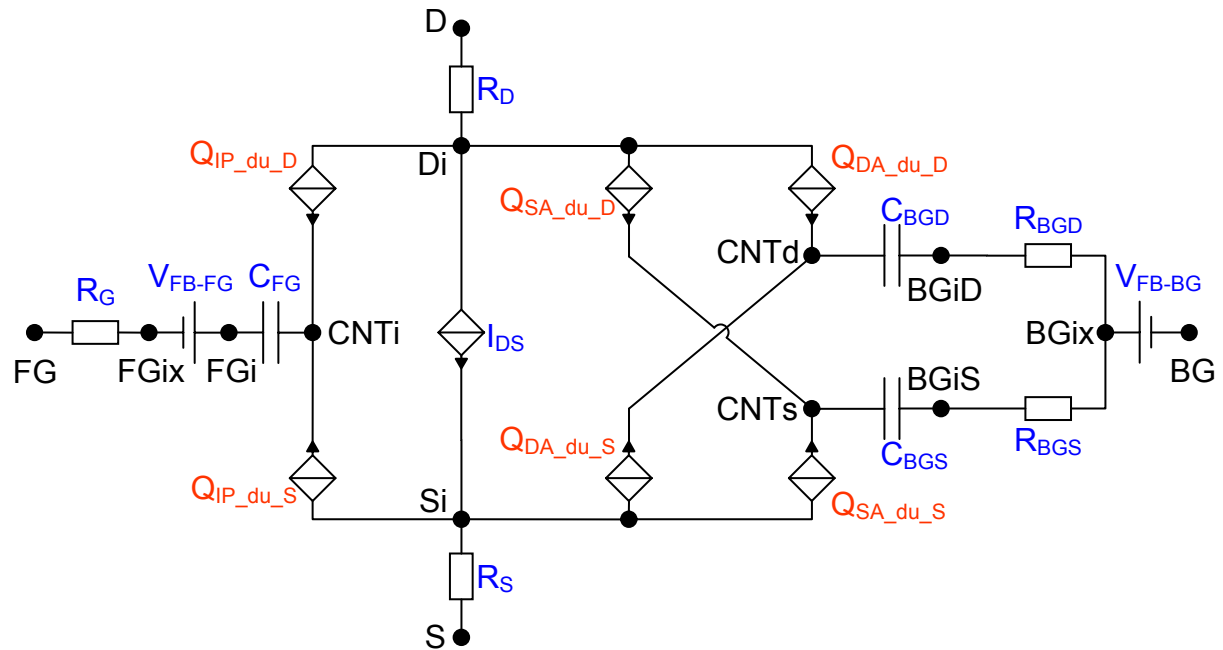


Figure 3.18 Schéma électrique équivalent du DG-CNFET. Les charges présentes dans les différentes régions sont représentées par les générateurs de courant.

Il est possible de rajouter des charges dans les différentes régions afin de prendre en compte l'éventuelle présence de charges piégées. Ce phénomène, étroitement lié au degré de maturité de la technologie, n'est pas représenté sur le schéma équivalent. Un nombre entier de charge peut être précisé (nul par défaut). Il est nécessaire, pour une prise en compte correcte de ces charges, que l'utilisateur indique la longueur de canal de chaque région.

Pour décrire le nanotube, 2 possibilités sont proposées à l'utilisateur du modèle, il peut, comme pour le modèle du transistor C-CNFET :

- choisir le diamètre du tube ou
- entrer les paramètres n et m du vecteur de chiralité.

Le calcul des bas de sous-bandes est ensuite effectué de la même manière que le modèle du transistor C-CNFET.

Pour chaque capacité de grille, l'utilisateur peut :

- donner directement la valeur de la capacité linéique ou
- préciser épaisseur et constante diélectrique de l'isolant (le rayon du nanotube est calculé à partir du diamètre ou de la chiralité selon le choix sur le calcul des bas de sous-bandes).

Dans ce dernier cas, la capacité de grille linéique (entre un cylindre et un plan séparé par un diélectrique plan) est calculée selon la relation [Mart98] :

$$C = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}{\ln\left(2\frac{t+r}{r}\right)} \quad 3.46$$

avec :

- t l'épaisseur de l'isolant,
- ϵ_r la constante diélectrique de l'isolant,

- r le rayon du nanotube.

Martel et al. [Mart98] précisent que la formule est valide pour un nanotube métallique ou lorsque la densité d'états au niveau de Fermi est élevée (ce qui n'est généralement pas le cas). Les autres articles où apparaît cette équation ne traitent pas de cette restriction.

L'équation 3.46 est une simplification de l'équation pour $\frac{t+r}{r} \gg 1$, soit lorsque l'épaisseur de l'isolant est très grande devant le rayon du nanotube (arccosh peut être réécrit sous la forme du logarithme indiqué lorsque l'argument est réel et supérieur à 1) [Abra70ii, Jave02, Vene99] :

$$C = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}{\operatorname{arccosh}\left(\frac{t+r}{r}\right)} = \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_r}{\ln\left(\frac{t+r}{r} + \sqrt{\left(\frac{t+r}{r}\right)^2 - 1}\right)} \quad 3.47$$

Le schéma équivalent et les équations décrites au paragraphe précédent ont été implantés dans le simulateur ADS 2005 A via le langage VerilogA. Ce programme calcule le courant de drain, pour des potentiels V_{FGS} , V_{BGS} et V_{DS} donnés. Il permet la simulation d'un composant dont le nanotube a un diamètre compris entre 0,8 et 3 nm.

VI. Résultats numériques

Dans cette section sont présentés les résultats de simulation du modèle DG-CNFET avec les paramètres suivants :

- un nanotube de chiralité $(n, m) = (15, 2)$, soit un diamètre de 1,26 nm,
- une longueur de canal (pour chaque région) de 100 nm,
- une capacité de grille avant $C_{FG} = 200$ pF/m,
- des capacités de grille arrière $C_{BGD} = C_{BGS} = 60$ pF/m,
- des tensions de bandes plates V_{FB-FG} et V_{FB-BG} nulles,
- des résistances d'accès série de drain, grille, source et grille arrière de 25 k Ω , 10 Ω , 25 k Ω et 70 Ω respectivement,
- pas de charges piégées.

La caractéristique de transfert avec $V_{FGS} = V_{BGS}$ présentée Figure 3.19 montre un fonctionnement ambipolaire : le type de porteur n'est pas sélectionné par une polarisation de grille arrière fixe. La caractéristique est centrée pour les tensions de grille égales à $V_{DS}/2$. En effet pour cette polarisation, les contributions de courant de trous de la source et d'électrons du drain sont égales comme indiqué sur le schéma de bandes d'énergie de la Figure 3.20 : le courant est minimal.

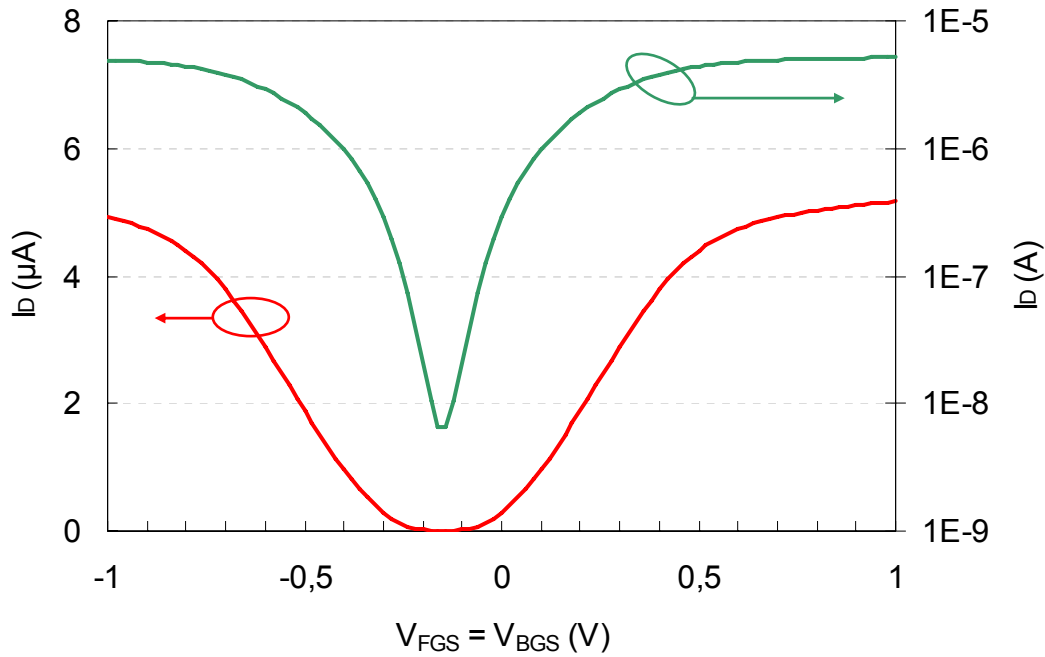


Figure 3.19 Caractéristique de transfert avec $V_{FGS} = V_{BGS}$ pour $V_{DS} = -0,3 V$ à $300 K$.

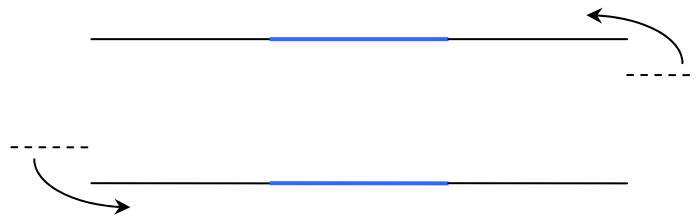


Figure 3.20 Schéma de bandes d'énergie pour $V_{FGS} = V_{BGS} = V_{DS}/2$, avec V_{DS} négatif. La hauteur de barrière pour les trous venant de la source est la même que celle des électrons venant du drain.

La caractéristique de transfert de la Figure 3.21 présente les comportements N ou P recherchés selon la polarisation. Pour V_{BGS} positif, les électrons sont favorisés et la contribution de source est supérieure à celle de drain avec V_{DS} positif. À l'inverse, pour des tensions V_{BGS} et V_{DS} négatives, les trous sont favorisés et vont majoritairement du drain vers la source. Le courant Off correspond au courant des porteurs pénalisés (par exemple les trous pour $V_{BGS} > 0 V$) et dépend de la polarisation de grille arrière V_{BGS} comme vu sur la Figure 3.22. Pour V_{FGS} suffisamment grand (en considérant le type N), V_{BGS} limite également le courant On (visible Figure 3.21, confirmé avec la Figure 3.22) : dès que V_{CNTi} est plus grand que V_{CNTs} , une augmentation de V_{FGS} (et donc de V_{CNTi}) ne change pas le courant d'électron étant donné que celui-ci est commandé par V_{CNTs} . Ceci induit une saturation abrupte du courant.

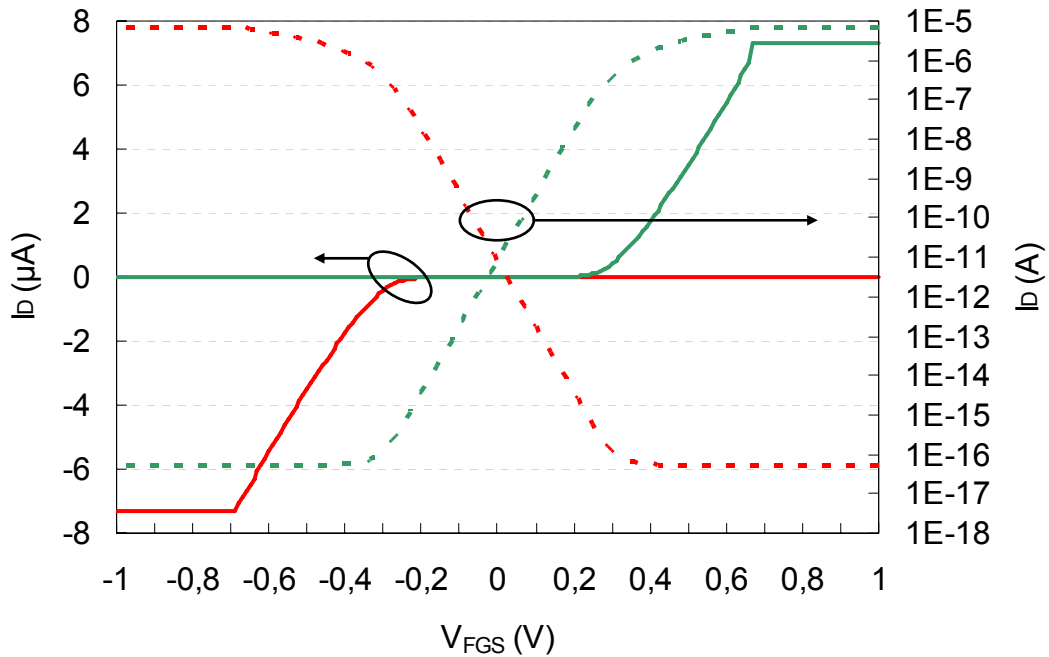


Figure 3.21 Caractéristique de transfert avec (en rouge) $V_{BGS} = 1 \text{ V}$, $V_{DS} = 500 \text{ mV}$ et (en vert) $V_{BGS} = -1 \text{ V}$, $V_{DS} = -500 \text{ mV}$ en échelle linéaire (traits pleins) et en échelle logarithmique (tirets).

La Figure 3.22 présente la caractéristique de transfert pour différents V_{BGS} à $V_{DS} = 0,5 \text{ V}$ (en traits pleins). Pour les polarisations de grille arrière supérieures à $0,5 \text{ V}$, le comportement observé est celui attendu : le composant est bloqué pour V_{FGS} négatif et passant pour V_{FGS} positif. En revanche, pour $V_{BGS} = 0,25$ et 0 V , le comportement est ambipolaire et de type P respectivement. Pour les valeurs de capacités arrière utilisées, la charge a peu d'effet sur les potentiels du canal ce qui implique pour l'accès drain, que son schéma de bandes est abaissé d'une valeur bien inférieure à V_{DS} (pour V_{DS} positif).

Ainsi, pour la polarisation $V_{BGS} = 0 \text{ V}$ pour laquelle le schéma de bandes correspondant est montré Figure 3.23, la tension V_{DS} positive permet un courant de trous (venant du drain) constant quel que soit la tension V_{FGS} négative. La valeur limite de tension V_{FGS} pour laquelle le courant sature (trait gris sur la Figure 3.22) n'est pas exactement de 0 V mais de l'ordre de 80 mV : le courant sature à partir de V_{CNTi} inférieur à V_{CNTd} et la charge dans l'accès drain (majoritairement des trous issus du drain) rend V_{CNTd} est légèrement positif de cette valeur limite. Pour V_{FGS} supérieur à cette limite, le courant de trous est diminué. Le courant Off correspond au courant d'électrons qui franchissent la barrière à l'interface métal source/accès source, comme pour les autres valeurs de V_{FGS} mais avec une tension de grille arrière moins favorable.

Pour la polarisation $V_{BGS} = 0,25 \text{ V}$, lorsque V_{FGS} vaut également $0,25 \text{ V}$, les schémas de bandes des 3 régions sont alignés et la hauteur de barrière vue par les trous issus du drain est la même que celle vue par les électrons issus de la source (de manière analogue au schéma de bandes d'énergie présenté Figure 3.20). Cependant, la différence avec la caractéristique avec $V_{FGS} = V_{BGS}$, est que la modification de V_{FGS} uniquement diminue la contribution d'un des 2 type de porteur sans modifier l'autre. Ainsi, pour V_{FGS} inférieur (supérieur) à $0,25 \text{ V}$, la contribution d'électrons (trous) est diminué, le courant est de type P (N).

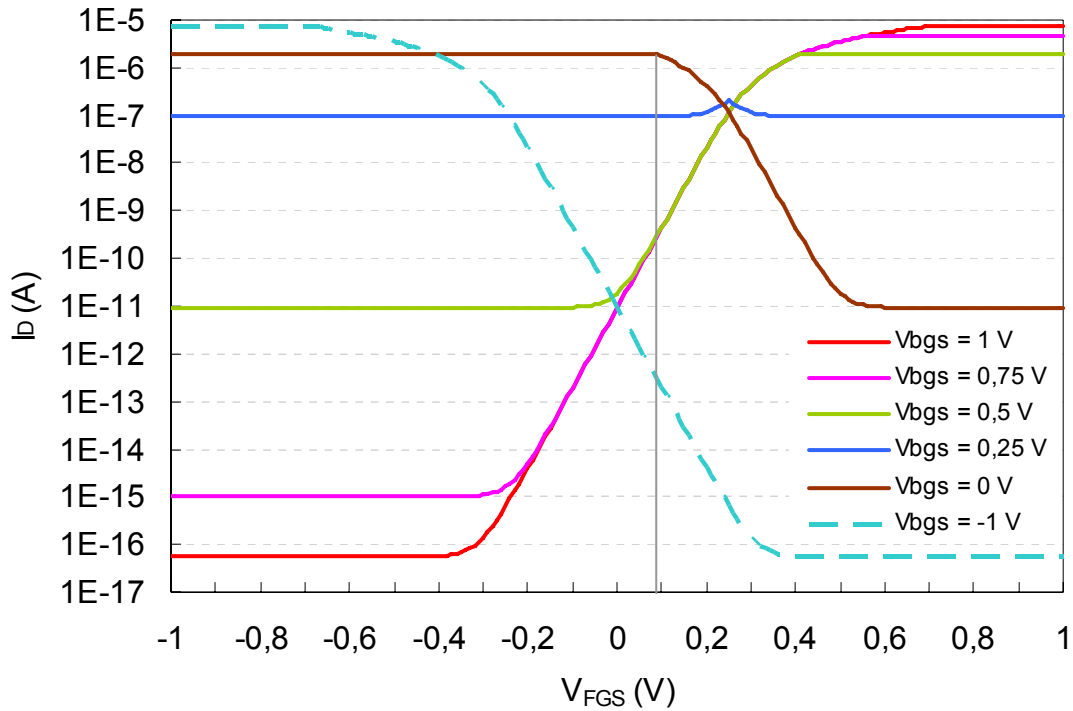


Figure 3.22 Caractéristique de transfert pour différentes polarisations de grille arrière V_{BGS} pour $V_{DS} = 0,5 V$ à $300 K$. En tirets est rappelée la caractéristique pour $V_{BGS} = -1 V$ et $V_{DS} = -500 mV$.

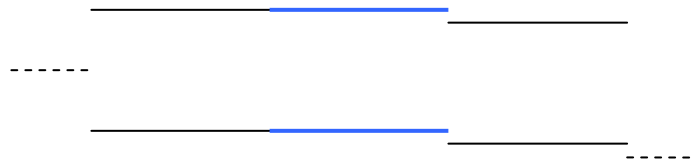


Figure 3.23 Schéma de bande d'énergie pour $V_{FGS} = V_{BGS} = 0 V$ et $V_{DS} > 0 V$ dans le cas où la charge a peu d'effet sur les potentiels du canal.

La Figure 3.24 présente la caractéristique de transfert pour plusieurs polarisations de drain à $V_{BGS} = 1 V$ et $0,6 V$. L'augmentation de la tension V_{DS} augmente la différence entre les contributions de source et de drain : le courant est donc augmenté. Pour $V_{BGS} = 1 V$, les schémas de bandes des accès sont suffisamment abaissés pour que, à V_{FGS} inférieur à $0,6 V$, la saturation due aux accès n'ait pas lieu.

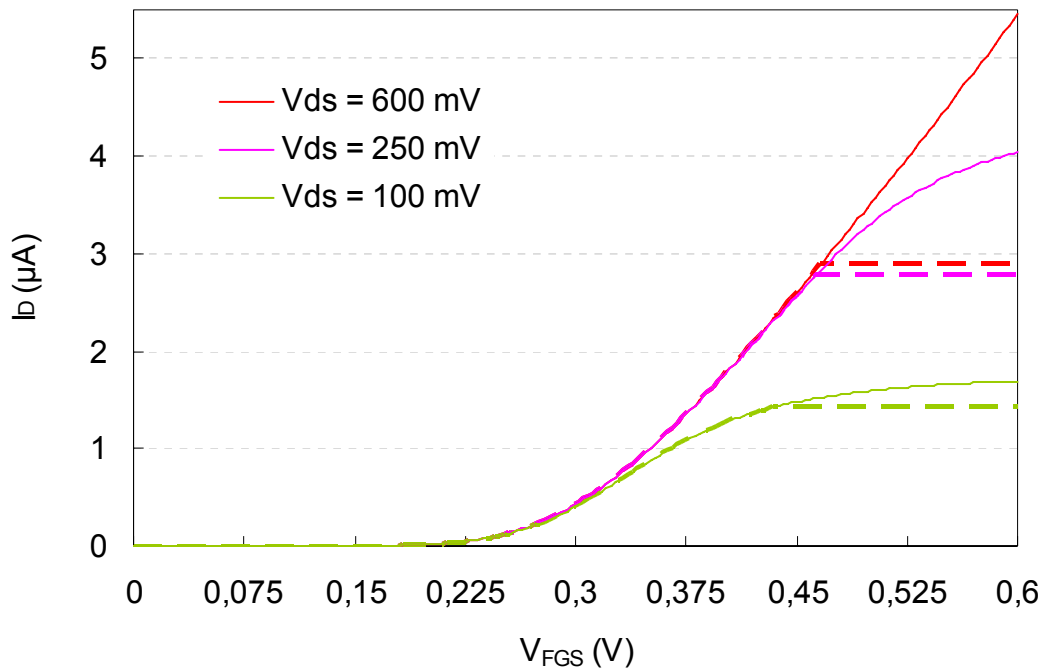


Figure 3.24 Caractéristique de transfert pour différentes valeurs de V_{DS} pour $V_{BGS} = 0,6 V$ (traits pleins) et $1 V$ (tirets) à $300 K$.

La Figure 3.25 présente la caractéristique de sortie selon différentes polarisations de grille avant V_{FGS} à $300 K$ pour $V_{BGS} = 1 V$.

Avant la saturation, par exemple pour V_{DS} inférieur à $0,4 V$ pour $V_{FGS} = 0,6 V$, plus V_{DS} est faible, plus les contributions de source et de drain sont proches : le courant, égal à la différence entre les deux, tend vers zéro.

Lorsque V_{DS} est suffisamment grand, la contribution de drain est négligeable par rapport à celle de source : le courant sature. L'augmentation de V_{FGS} accroît cette contribution de source et élève ainsi le courant de saturation.

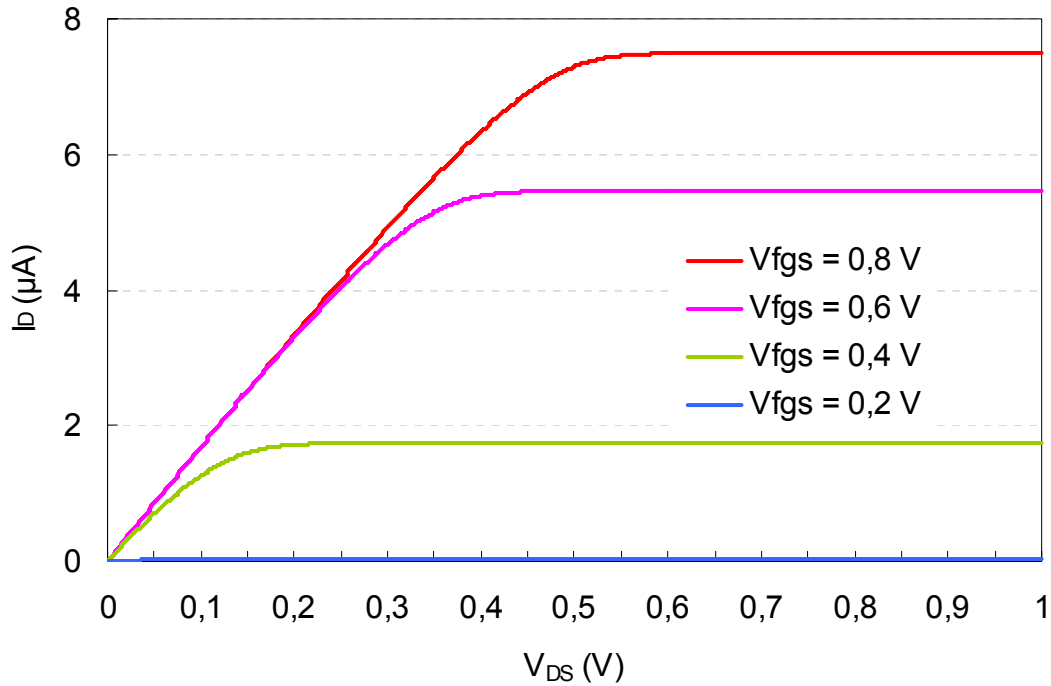


Figure 3.25 Caractéristique de sortie pour différentes valeurs de V_{FGS} pour $V_{BGS} = 1$ V à 300 K.

La Figure 3.26 présente la simulation en AC du gain en courant de 1 à 500 GHz polarisé à $V_{FGS} = 0,6$ V et $V_{BGS} = 1$ V. La fréquence de coupure pour $V_{DS} = 1$ V est de l'ordre de 500 GHz.

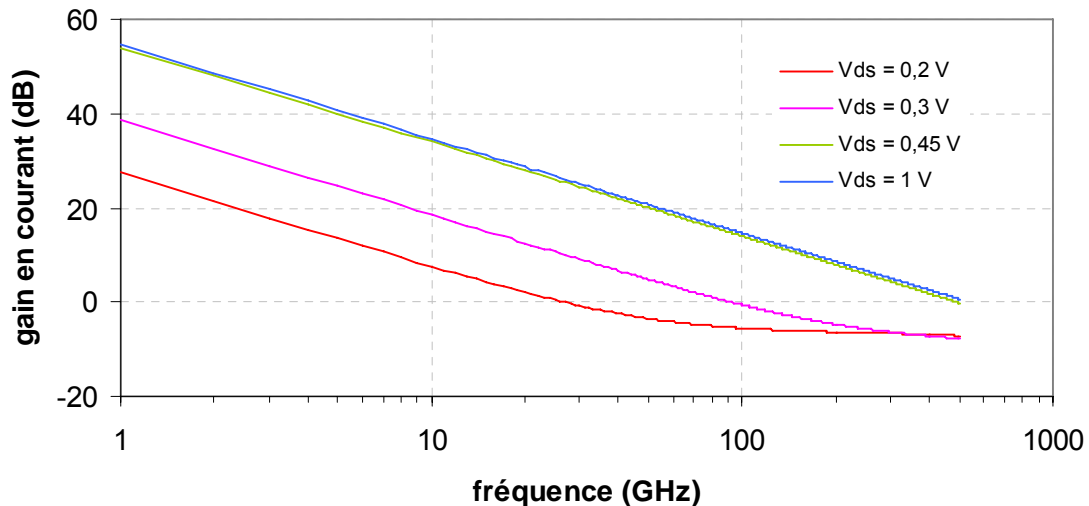


Figure 3.26 Simulation en AC, module du coefficient H_{21} en décibel en fonction de la fréquence pour différentes valeurs de V_{DS} pour $V_{FGS} = 0,6$ V, $V_{BGS} = 1$ V à 300 K.

La Figure 3.27 présente la simulation en transitoire du courant de drain lorsque le transistor est soumis à un échelon de tension sur la grille avant. Le transistor est bloqué pour $V_{FGS} = 0$ V et passant pour $V_{FGS} = 0,6$ V.

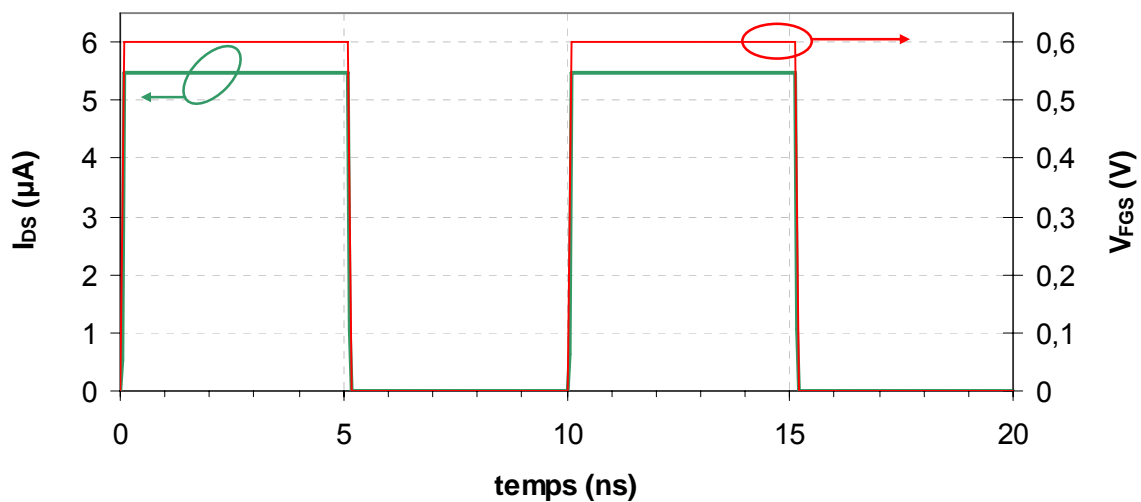


Figure 3.27 Simulation en transitoire, courant de drain en réponse à un échelon de la tension de grille V_{FGS} polarisé à $V_{DS} = V_{BGS} = 1\text{ V}$ à 300 K .

VII. Comparaison avec des mesures

Nous n'avons pas fabriqué ni eu accès à un transistor à nanotube de carbone double grille. Les résultats de simulation de notre modèle sont donc comparés aux mesures présentes dans la littérature. Les équipes d'IBM [Lin05] et de Stanford [Jave04] notamment ont fabriqué des transistors à nanotube de carbone double grille. Alors que le transistor d'IBM correspond bien au type de transistor que nous avons modélisé (potentiel du canal de la partie interne uniquement dépendant de la tension de la grille avant), celui de Stanford utilise une grille avant par-dessus. Pour ce dispositif, il n'y a plus d'écrantage de l'effet de la grille arrière par la grille avant sur la partie interne : le potentiel du canal de la partie interne dépend des tensions de la grille avant et de la grille arrière.

Dans la publication d'IBM [Lin05], les paramètres technologiques sont :

- un nanotube de diamètre autour de 1,4 nm,
- une longueur de canal (pour chaque région) de 200 nm,
- des constantes diélectriques d'isolant de grille avant et arrière de 5 et 3,9 respectivement,
- une épaisseur d'isolant de grille avant de 4 nm,
- des épaisseurs d'isolant de grille arrière d'accès source et drain de 10 nm.

Les résistances d'accès, les tensions de bandes plates et les charges piégées ne sont pas données dans la publication [Lin05] : ce sont des paramètres « subis » et non choisis.

La tension de bandes plates et la charge piégée pour une région donnée décale les courbes de manière similaire mais l'influence de la charge est dépendante de la valeur de la capacité concernée : plus la capacité est élevée, moins la charge piégée a d'influence. L'ajustement de la chiralité modifie la largeur de la bande interdite et donc l'écart des tensions de seuil des branches N et P. Les résistances d'accès modifient le courant ON (i.e. les courants de l'ordre du μA pour des résistances d'accès de source et drain de l'ordre de la dizaine de $\text{k}\Omega$).

La publication d'IBM présente la caractéristique de transfert (I_{DS} en fonction de V_{FGS}) pour une polarisation de grille arrière flottante, i.e. non-connectée. Le papier montre ensuite 2 caractéristiques de transfert du même transistor, l'une à V_{DS} constant pour différents V_{BGS} , l'autre à V_{BGS} constant pour différents V_{DS} .

Nous comparons tout d'abord nos résultats de simulation avec la mesure pour la grille arrière flottante puis ensuite pour les caractéristiques de transfert pour différents V_{BGS} et pour différents V_{DS} .

VII.a. Caractéristique de transfert avec grille arrière flottante

La Figure 3.28 présente la caractéristique de transfert pour une polarisation de grille arrière flottante, i.e. non-connectée, à $V_{DS} = -0,5$ V à 300 K, simulée avec le modèle du DG-CNFET et mesurée par [Lin05]. La caractéristique simulée sans charges piégées présente un état bloqué pour les V_{FGS} négatifs et passant pour les V_{FGS} positifs alors que la caractéristique mesurée présente un courant de fuite inférieur au pA quel que soit la tension de grille avant. L'ajout de charges piégées permet d'obtenir un courant simulé du même ordre de grandeur que la mesure. Le jeu de paramètres utilisé concorde avec celui indiqué dans la publication [Lin05] :

- un nanotube de chiralité $(n, m) = (6, 14)$, soit un diamètre de 1,392 nm,
- une longueur de canal (pour chaque région) de 200 nm,
- des constantes diélectriques d'isolant de grille avant et arrière de 5 et 3,9 respectivement,
- une épaisseur d'isolant de grille avant de 4 nm,
- des épaisseurs d'isolant de grille arrière d'accès source et drain de 10 nm,
- des tensions de bandes plates V_{FB-FG} et V_{FB-BG} nulles,
- des résistances d'accès série de drain, grille, source et grille arrière de 25 k Ω , 10 Ω , 25 k Ω et 70 Ω respectivement.

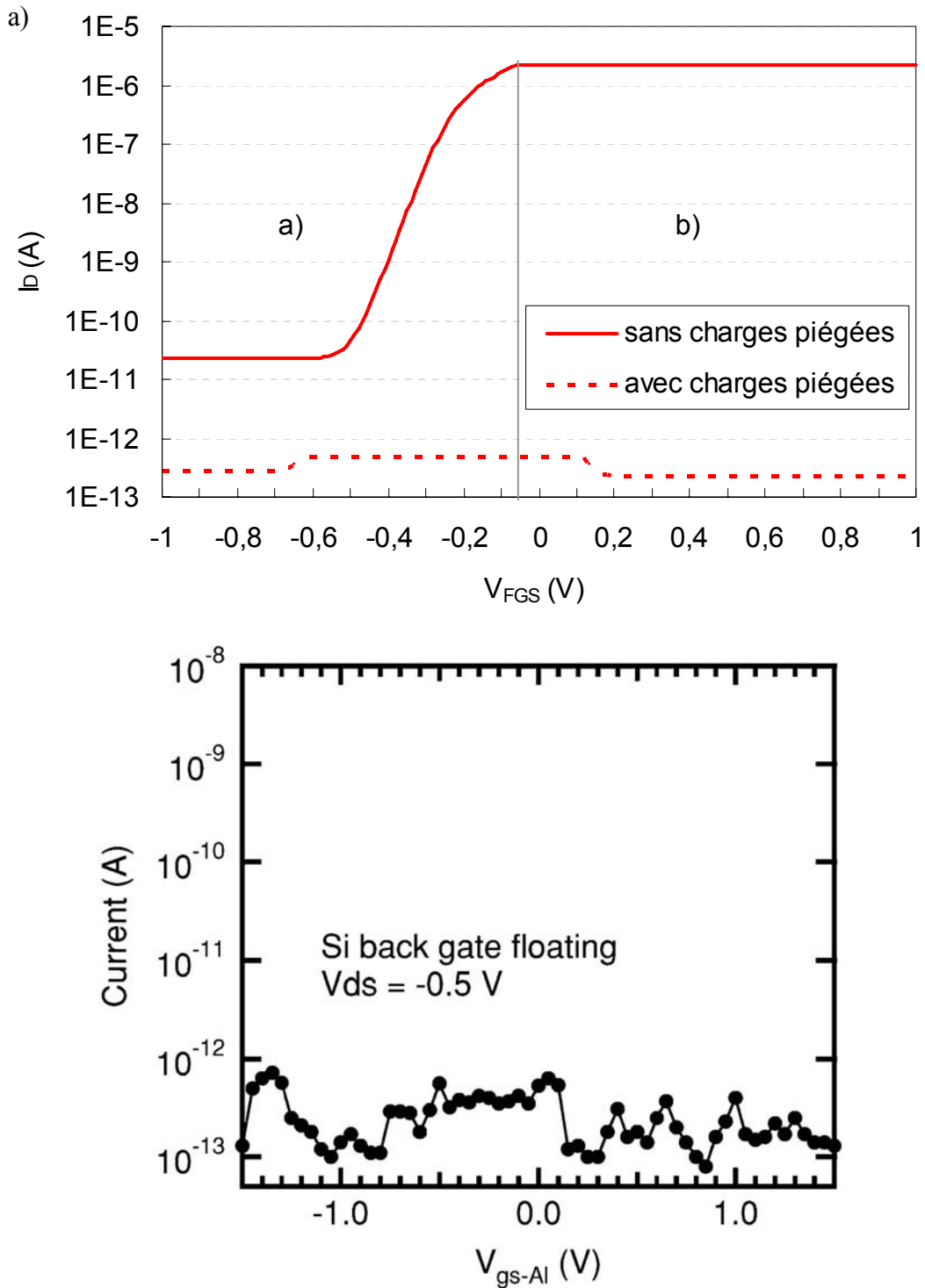


Figure 3.28 Caractéristiques de transfert pour une tension de grille arrière flottante pour $V_{DS} = -0,5$ V à 300 K : a) Simulations sans charges piégées en trait plein (les schémas de bande pour les 2 régimes de polarisation sont indiqués Figure 3.29) et avec charges piégées en tirets et b) mesure issue de [Lin05].

Pour la caractéristique simulée sans charges piégées, pour V_{FGS} négatif (voir schéma de bandes d'énergie correspondant Figure 3.29.a)), les électrons venant du drain sont bloqués à l'interface entre l'accès drain et la partie interne. La valeur de ce courant de fuite (environ

20 pA) est limitée par la contribution des trous venant de la source qui doivent franchir une barrière égale à $E_G/2$ (la charge est négligeable) à l'interface métal source/accès source.

Pour V_{FGS} positif (Figure 3.29.b)), le courant est limité par le bas de la bande de conduction de l'accès drain : la tension de grille avant ne modifie plus le courant.

La frontière entre ces 2 domaines n'est pas exactement située à $V_{FGS} = 0$ V. La charge dans l'accès drain (majoritairement d'électrons) remonte légèrement le schéma de bande de l'accès drain.

Pour faire correspondre la simulation à la caractéristique mesurée de la Figure 3.28, si aucune charge piégée n'est ajoutée, les paramètres d'entrée de la simulation sont aphysiques : une capacité de grille arrière 1 million de fois plus petite pour obtenir un courant à l'état passant inférieur au pA et un nanotube de diamètre 0,56 nm (chiralité (6, 2)) pour diminuer le courant à l'état bloqué. En revanche, en ajoutant des charges piégées, i.e. 9 trous dans l'accès source et 49 électrons dans l'accès drain, on retrouve les mêmes ordres de grandeur de courant.

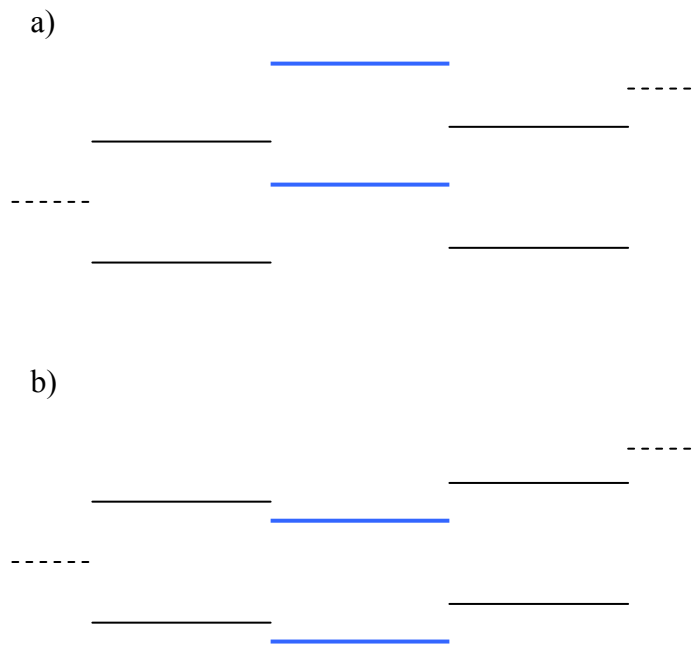


Figure 3.29 Schémas de bande d'énergie décrivant les 2 régimes de fonctionnement de la Figure 3.28.a) sans charges piégées : a) $V_{FGS} < 0$ V et b) $V_{FGS} > 0$ V.

VII.b. Caractéristiques de transfert

La publication d'IBM [Lin05] présente également 2 caractéristiques de transfert du même transistor, l'une à V_{DS} constant pour différents V_{BGS} (symboles de la Figure 3.30), l'autre à V_{BGS} constant pour différents V_{DS} (symboles de la Figure 3.31) que nous comparons aux simulations de notre modèle. Pour les faire correspondre, nous avons ajusté :

- la tension de bande plate de la grille avant V_{FB-FG} et le nombre de charges piégées dans la partie interne pour obtenir la tension de seuil adéquate (décalage de l'ensemble des caractéristiques en V_{FGS}),

Chapitre 3 : Modèle du transistor à nanotube double grille (DG-CNFET)

- la tension de bande plate de la grille arrière V_{FB-BG} et le nombre de charges piégées dans l'accès source pour faire correspondre chaque caractéristique (décalage des caractéristiques en V_{BGS}),
- le nombre de charges piégées dans l'accès drain est ajusté pour obtenir le courant à l'état bloqué qui convient.

Ainsi, le jeu de paramètres utilisé pour les Figure 3.30 et Figure 3.31 concorde avec celui indiqué dans la publication [Lin05] :

- un nanotube de chiralité $(n, m) = (6, 14)$, soit un diamètre de 1,392 nm,
- une longueur de canal (pour chaque région) de 200 nm,
- des constantes diélectriques d'isolant de grille avant et arrière de 5 et 3,9 respectivement,
- une épaisseur d'isolant de grille avant de 4 nm,
- des épaisseurs d'isolant de grille arrière d'accès source et drain de 10 nm,
- des tensions de bandes plates V_{FB-FG} et V_{FB-BG} de -600 et -690 mV respectivement,
- des résistances d'accès série de drain, grille, source et grille arrière de 25 k Ω , 10 Ω , 25 k Ω et 70 Ω respectivement.

Le détail des charges piégées est indiqué dans le Tableau 3.1. La Figure 3.30.a) montre le résultat de simulation le plus proche des mesures. Le résultat de simulation présenté Figure 3.30.b) montre l'existence de la branche de type N dans le cas où il n'y a pas de charge piégée dans l'accès drain.

Nombre et nature des charges piégées	Accès drain	Partie interne	Accès source
Figure 3.30.a)	68 électrons	24 trous	30 trous
Figure 3.30.b)	pas de charge	24 trous	29 trous
Figure 3.31	68 électrons	pas de charge	30 trous

Tableau 3.1 Nombre et nature des charges piégées dans les différentes régions du transistor ajustés selon la caractéristique mesurée.

Le niveau de courant mesuré à l'état bloqué est limité contrairement à nos simulations. Cela peut provenir de la résolution de l'appareil de mesure, ou de courant de fuite via le nanotube ou le substrat.

Les pentes sous le seuil coïncident : nos simulations donnent une pente inverse sous le seuil de 60 mV/déc. qui correspond à la pente idéale. La pente inverse sous le seuil du courant mesuré est d'environ 70 mV/déc. pour $V_{BGS} = -2$ V et -4 V (Figure 3.30), la pente est bien plus faible et difficilement mesurable pour $V_{BGS} = -1$ V. Une telle pente est due à la présence de barrières Schottky aux interfaces métal/région d'accès qui limitent le courant en diminuant le coefficient de transmission pour une partie au moins des porteurs (i.e. les trous dont l'énergie est la plus élevée et qui participent au courant). Nos simulations montrent que, pour $V_{BGS} = -1$ V, la saturation du courant est abrupte car celui-ci est contrôlé par le haut de la bande de valence de l'accès source et c'est justement dans ce cas que l'effet de la barrière Schottky est le plus important : la barrière est la plus épaisse pour les énergies proches du haut de la bande de valence et les porteurs ayant une telle énergie participent au courant pour cette polarisation. Le courant à l'état passant simulé (sans barrière Schottky) devrait donc être supérieur pour cette courbe à $V_{BGS} = -1$ V (Figure 3.30.a)) : c'est le cas sur la Figure 3.30.b) pour laquelle le nombre de trous piégés dans l'accès source est diminué.

Pour les courbes à $V_{BGS} = -2$ et -4 V, la différence qualitative entre simulation et mesure du courant à l'état passant (les courbes mesurées augmente légèrement plus « lentement » que celles simulées au-dessus du seuil) est expliqué de la même manière que la pente sous le seuil : les barrières Schottky (surtout celle côté source pour cette polarisation) ont un effet (plus faible qu'à $V_{BGS} = -1$ V) sur le coefficient de transmission. Ces barrières n'expliquent pas totalement la différence quantitative : les mesures sont de l'ordre de la centaine de nA et les simulations de quelques μ A. Voici les possibilités simulées pour faire correspondre les courbes :

- augmentation des résistances d'accès source et drain, la correspondance n'est obtenue que pour des valeurs supérieures au $M\Omega$ dans nos simulations,
- augmentation de l'épaisseur de l'oxyde de grille avant (diminue la capacité de grille et augmente ainsi l'impact de la charge), n'a pas l'effet escompté sur le courant : doubler l'épaisseur d'oxyde, i.e. de 4 à 8 nm (soit une erreur technologique improbable), n'a réduit le courant simulé que d'un peu plus d'1 μ A (la capacité de grille est peu dépendante de l'épaisseur de l'oxyde car proportionnelle à l'inverse du logarithme, voir équation 3.46),
- augmentation de la constante du matériau de manière significative, ceci supposerait que l'on a changé de matériau.

Alors que le courant est contrôlé par la polarisation de grille avant (voir explication et argument ci-après), nous ne voyons pas d'autre explication qu'un mauvais contact métal/nanotube qui engendrerait une résistance série très élevée. Cependant l'ordre de grandeur des niveaux de courant simulés correspond à celui mesuré par l'équipe de Stanford [Jave04].

Par ailleurs, les caractéristiques mesurées pour $V_{BGS} = -2$ et -4 V ne sont pas superposées contrairement aux simulations. L'explication pour la différence à l'état passant provient là encore très certainement des barrières Schottky quoiqu'il faudrait implémenter ces barrières dans le modèle afin d'en vérifier l'effet quantitativement. Une autre explication pourrait être la saturation due au contrôle du courant par l'accès source et une influence de la charge sur le niveau de saturation induisant 2 valeurs de V_{CNTs} proches alors que la tension de grille arrière varie fortement. Mais les simulations montrent qu'il faut encore diminuer (en deçà de -850 mV) la tension de bandes plates de la grille arrière pour commencer à observer cette saturation. Il n'est alors plus possible de faire correspondre la courbe à $V_{BGS} = -1$ V en conservant des valeurs de paramètres physiques. Le courant mesuré à l'état passant pour $V_{BGS} = -2$ et -4 V n'est donc pas contrôlé par l'accès source.

Ces 2 caractéristiques sont également décalées sous le seuil et l'effet des barrières Schottky devrait être moindre voire s'annuler sur cette plage de tension. Dans nos simulations, la partie interne contrôle le courant sous le seuil et à l'état passant. Ce décalage sous le seuil peut être expliqué par la variation de la charge piégée dans la partie interne. Il faut noter qu'une telle variation de la charge piégée a un faible impact à l'état passant par rapport à sous le seuil et ne compense pas totalement la différence à l'état passant (les courbes sont dans un rapport supérieur à 2).

Ainsi, le décalage des courbes à $V_{BGS} = -2$ V et -4 V mesurées est probablement dû à 2 phénomènes : les barrières Schottky et la variation du nombre de charges piégées dans la partie interne.

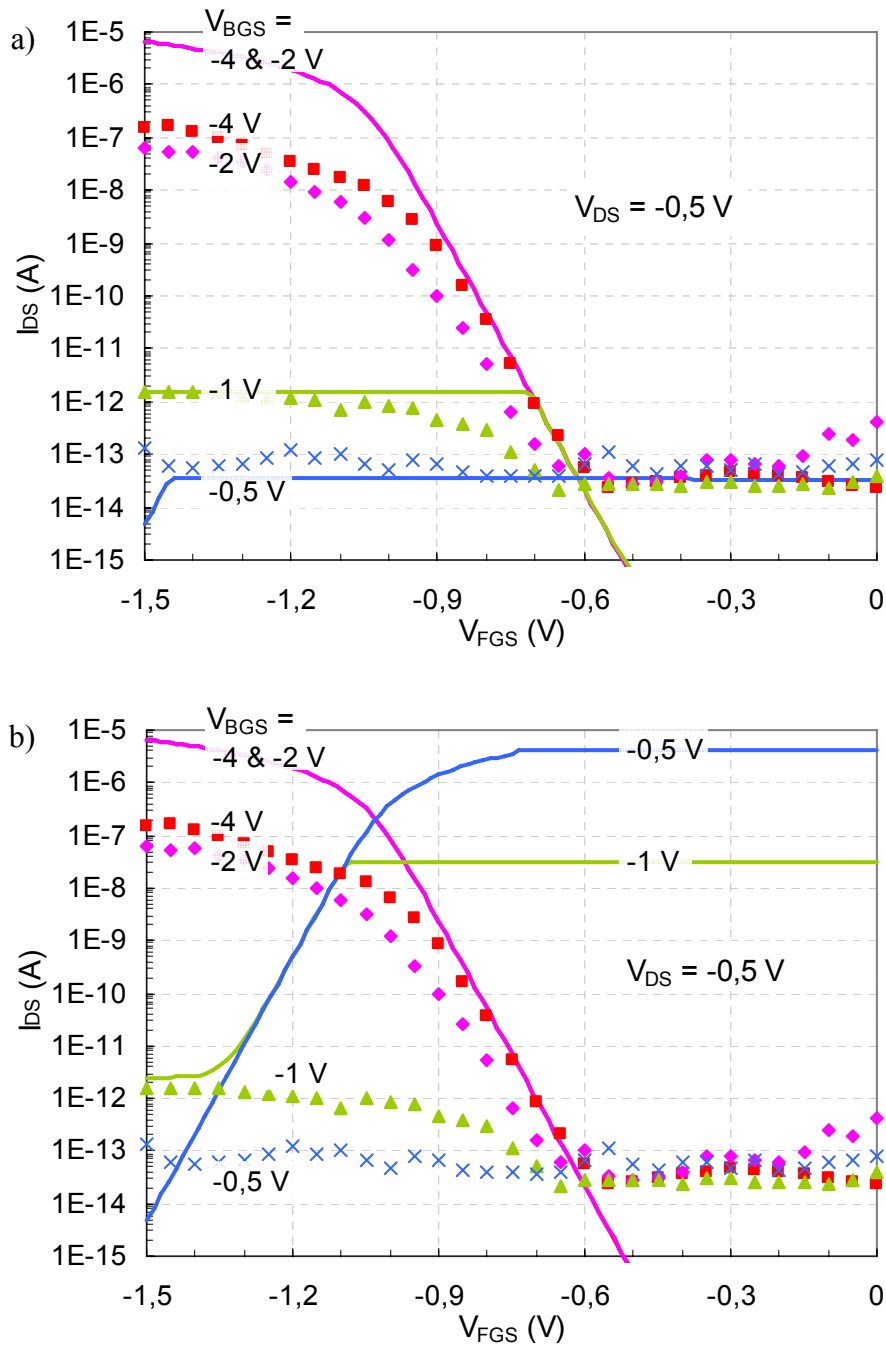


Figure 3.30 Mesure (symboles) et simulation (lignes) de caractéristiques de transfert pour différents V_{BGS} pour $V_{DS} = -0,5$ V avec, pour les simulations, a) 30 trous piégés dans l'accès source et 32 électrons piégés dans l'accès drain et b) 29 trous piégés dans l'accès source et pas de trous piégé dans l'accès drain. Les mesures sont issues de [Lin05].

Il faut noter un décalage des caractéristiques entre les 2 mesures des Figure 3.30 et Figure 3.31 : pour la même polarisation $V_{DS} = -0,5$ V et $V_{BGS} = -4$ V, la caractéristique de transfert pour différents V_{BGS} est décalée vers les V_{FGS} négatifs par rapport à celle pour différents V_{DS} . Nous avons annulé la charge piégée dans la partie interne (soit retiré les 24 trous) pour faire correspondre les caractéristiques.

Sur la Figure 3.31, on observe bien une séparation des courbes simulées selon V_{DS} à l'état passant qui correspond qualitativement aux mesures. Il reste toujours la différence de plus

d'un ordre de grandeur courant à l'état passant déjà évoqué pour la caractéristique de transfert pour différents V_{BGS} .

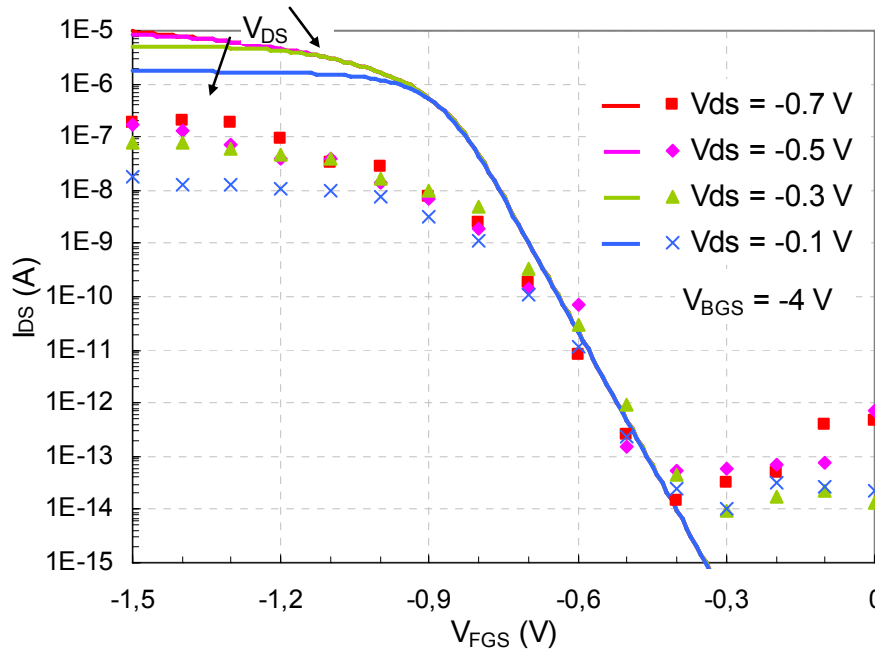


Figure 3.31 Mesure (symboles) et simulation (lignes) de caractéristiques de transfert pour différents V_{DS} pour $V_{BGS} = -4$ V. Les mesures sont issues de [Lin05] et sont effectuées sur le même transistor que celle rapportées sur la Figure 3.30.

Le diamètre du nanotube indiqué dans la publication [Lin05] implique une largeur de bande interdite de l'ordre 0,6 eV : cette largeur de bande interdite couplée à la tension de bande plate de la grille arrière fait que la branche N du transistor apparaît dans nos simulations pour $V_{BGS} = -0,5$ V si la charge piégée dans la région d'accès drain est positive ou nulle (Figure 3.30.b)). Nous avons donc augmenté le nombre d'électrons dans cette région afin de réduire le courant à l'état « passant » de la branche N qui est le courant OFF de la Figure 3.30.a). Il faut rappeler que les tensions de bandes plates et les charges piégées ont un effet similaire sur les caractéristiques. Les valeurs déterminées ici sont à considérer comme des couples : si le premier varie, le second varie de manière opposée.

La valeur du paramètre $V_{pp\pi}$ (l'énergie de liaison entre 2 atomes de carbone) pour effectuer ces simulations est 3,033 eV et est proche des plus fortes valeurs répertoriées dans le Tableau 1.1 (les valeurs trouvées s'échelonnent de 2,4 à 3,14 eV). Augmenter la valeur de ce paramètre ne diminue pas suffisamment le courant OFF.

VIII. Conclusion

Le fonctionnement de ce transistor double grille est décrit : il est reconfigurable en transistor de type N ou de type P selon la polarisation de grille arrière.

Comme pour la modélisation du transistor C-CNFET, il est nécessaire de calculer la charge et le potentiel du canal de chaque région de façon auto-cohérente. La charge des électrons et des trous est évaluée analytiquement par l'intégration du produit de la densité d'états effectifs par la distribution de Fermi de source ou de drain, selon l'origine des porteurs

Chapitre 3 : Modèle du transistor à nanotube double grille (DG-CNFET)

de charge, en considérant différentes polarisations qui permettent de simplifier l'expression à intégrer.

Les courants d'électrons et de trous sont calculés à partir des potentiels du canal en utilisant le formalisme de Landauer.

Enfin, les résultats de simulation sont analysés et comparés avec mesures issues de la littérature : la sensibilité du dispositif aux charges piégées est mise en évidence.

Chapitre 4 : Circuits reconfigurables à base de DG- CNFET

I. Introduction

Ce transistor en lui-même étant reconfigurable, il est donc manifeste de le mettre en œuvre dans des circuits reconfigurables, par exemple des circuits dont la fonction logique dépend d'entrée(s) de configuration. Nous proposons d'illustrer cette fonctionnalité par l'exploitation du modèle dans le cadre d'une porte logique universelle reconfigurable. Auparavant, la validation du modèle en termes de convergence de calcul est démontrée pour des portes logiques usuelles.

Nous utilisons le simulateur ADS 2005A via le logiciel ICCAP 2006B sous le système d'exploitation SUN version 5.9 avec l'environnement SOLARIS 9. Ce simulateur ajoute automatiquement une résistance de 100 M Ω entre un nœud de la netlist non connecté à une alimentation et la masse. Ceci peut avoir un effet significatif notamment sur les simulations transitoires. Deux solutions ont été trouvées pour résoudre ce problème :

- Ajouter une porte inverseuse sur la sortie. Le nœud de sortie n'est plus inscrit dans la netlist. L'accès à la valeur du potentiel ou du courant s'effectue par affichage, demandé dans le code VerilogA. Cette solution a pour inconvénient d'augmenter le temps de simulation et d'en rendre plus difficile la convergence.
- Ajouter une capacité en parallèle de cette résistance pour les simulations transitoires afin d'augmenter la constante de temps du nœud de sortie.
- Ajouter une source de courant de 0 A sur la sortie.

Les temps de simulation sont de quelques secondes à quelques minutes selon la complexité du circuit en termes de nombre de transistors et de leur nature.

Tout d'abord, nous simulons un inverseur (avec charge passive puis charge active) à base de DG-CNFET et étudions l'impact de la chiralité du nanotube sur le fonctionnement de cette porte logique élémentaire. La reconfigurabilité de ce transistor est ensuite exploitée dans une porte logique inverseuse ou buffer selon l'entrée de configuration associée. Enfin, la porte logique universelle innovante à deux entrées [O'Con07] est présentée et simulée.

II. Inverseur

La porte logique inverseuse comporte une entrée et une sortie. Sa fonction logique est d'inverser le signal logique reçu en entrée : un '1' logique en entrée (soit la tension d'alimentation du circuit) donne un '0' en sortie (soit une tension nulle) et un '0' en entrée donne un '1' en sortie. Cette porte logique simple très utilisée en électronique comporte deux transistors : un de type N et un de type P. La mise en œuvre du DG-CNFET dans ce circuit n'utilise pas la propriété reconfigurable de ce transistor mais est une première étape de validation du modèle dans le cadre de son utilisation dans un circuit simple.

Il est également possible de réaliser un inverseur plus simple avec un seul transistor et une résistance (qui remplace le transistor de type P). Nous présentons tout d'abord les résultats de simulation de cet inverseur avec charge passive puis ceux de l'inverseur composé de deux transistors (avec charge active). Enfin, l'impact du diamètre sur les performances de l'inverseur avec charge active obtenu en simulant diverses chiralités du nanotube permet de poser les toutes premières règles de conception avec ce type de transistor.

II.a. Inverseur avec charge passive

La Figure 4.1 présente le circuit classique de l'inverseur avec charge passive, une résistance de 500 kΩ. Le transistor présent dans ce circuit doit être de type N : sa tension de grille arrière doit être positive.

Lorsque l'entrée 'IN' est à '1', la tension de grille avant du transistor est, comme la grille arrière, positive : le transistor est passant. Un courant circule dans la porte et engendre une chute de potentiel aux bornes de la résistance. Plus la valeur de celle-ci est élevée, plus la tension de sortie sera proche de 0 V. Mais une trop grande résistance limite les performances dynamiques par l'augmentation de la valeur de la cellule RC (R la résistance de la porte logique et C la capacité à charger) et donc du temps de commutation.

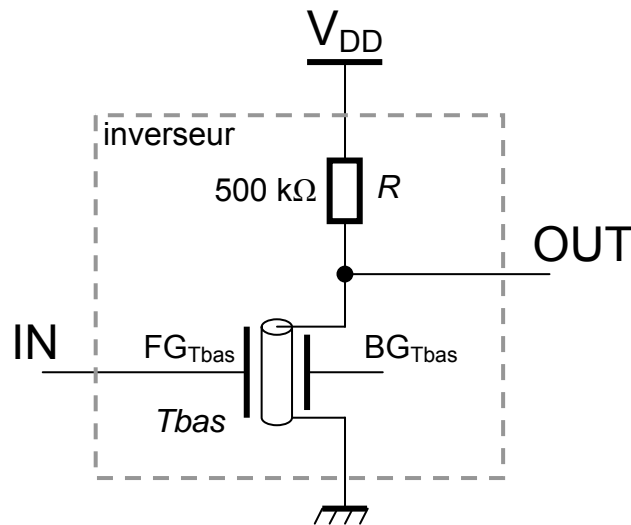


Figure 4.1 Schéma électrique de l'inverseur avec charge passive (T_{bas} : nom du transistor).

La Figure 4.2 présente la caractéristique de transfert pour une polarisation de grille arrière de 1 V, en alimentant le circuit sous 0,6 V avec les paramètres suivants :

- un nanotube de chiralité $(n, m) = (15, 2)$,
- une longueur de canal (pour chaque région) de 100 nm,
- une capacité de grille avant $C_{FG} = 200$ pF/m,
- des capacités de grille arrière $C_{BGD} = C_{BGS} = 60$ pF/m,
- des tensions de bandes plates V_{FB-FG} et V_{FB-BG} nulles,
- des résistances d'accès série de drain, grille, source et grille arrière de 25 kΩ, 10 Ω, 25 kΩ et 70 Ω respectivement,
- pas de charges piégées.

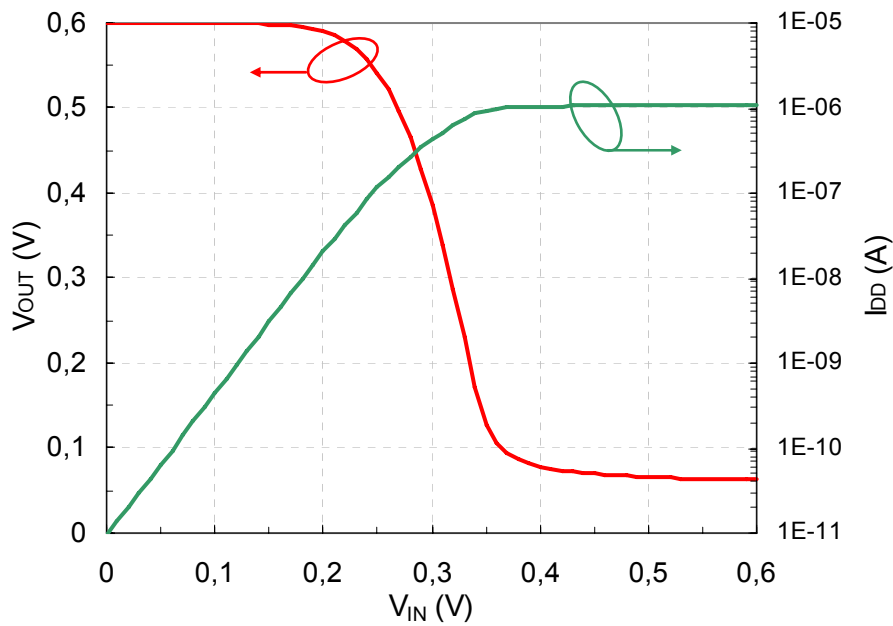


Figure 4.2 Caractéristique de transfert et courant consommé en fonction de V_{IN} de l'inverseur avec charge passive pour $V_{BGTbas} = 1$ V alimenté sous 0,6 V.

L'allure de la caractéristique est satisfaisante : le signal de sortie est bien l'inverse de celui d'entrée. Le courant consommé par la porte est de l'ordre du μA lorsque la sortie vaut '0' : ce courant dépend de la valeur de la résistance de la porte logique. Ce courant impose alors une tension V_{DS} non nulle pour le transistor : la tension de sortie, égale à V_{DS} , ne peut atteindre 0 V. Lorsque la sortie est proche de '1', le courant consommé par la porte tend vers zéro avec le blocage de T_{bas} .

La simulation transitoire en réponse à une tension d'entrée en créneau de 0 à 0,6 V pour les mêmes paramètres est présentée Figure 4.3. La valeur de la sortie est bien l'inverse de l'entrée sans retard notable.

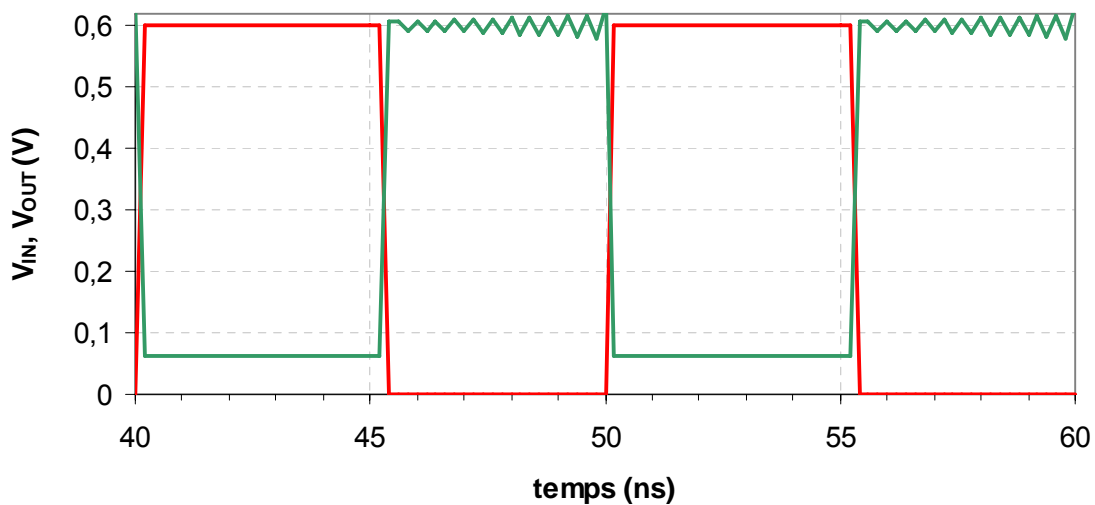


Figure 4.3 Simulation transitoire, V_{IN} en rouge, V_{OUT} en vert.

Comme remarqué sur la caractéristique statique, la valeur de la sortie n'atteint pas 0 V pour une entrée à '1'.

Lorsque l'entrée est à '0', le signal de sortie, proche de V_{DD} , oscille : la période de ses oscillations correspond à 2 pas de simulation. La cause de ces oscillations reste à rechercher précisément : les fonctions minimum et maximum utilisées pour le calcul des charges et du courant induisent pour certaines polarisations (notamment pour V_{CNTi} proche de V_{CNTs} ou V_{CNTd}) deux solutions différentes pour le courant. Ces oscillations seraient donc liées à la manière de calculer les grandeurs dans notre modèle et non au composant en lui-même.

II.b. Inverseur

Les caractéristiques de l'inverseur présenté Figure 4.2 (courant consommé, marges de bruit, valeur à l'état '0' de la sortie parmi d'autres non présentées) peuvent être améliorées en remplaçant la résistance par un transistor de type P. Le circuit de l'inverseur entièrement réalisé avec des transistors double grille est présenté Figure 4.4. Le transistor connecté à la masse, T_{bas} , doit être de type N, sa tension de grille arrière doit donc être positive, et le transistor connecté à V_{DD} , T_{haut} , doit être de type P, sa tension de grille arrière doit donc être négative.

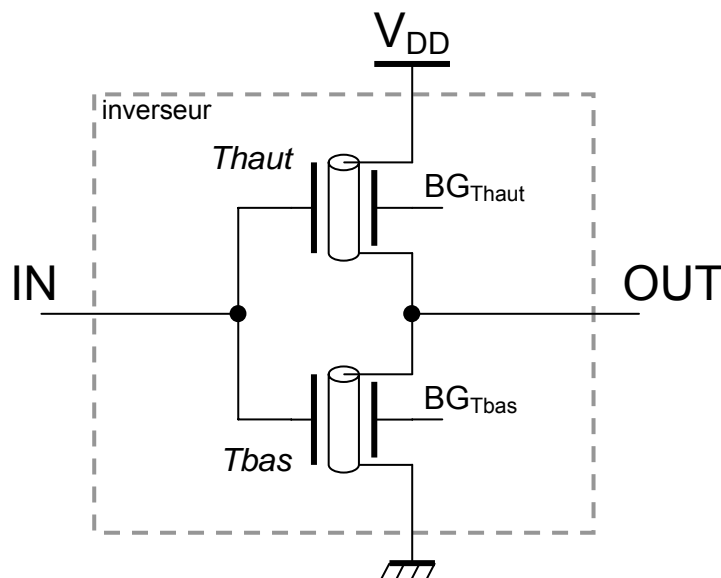


Figure 4.4 Schéma électrique de l'inverseur réalisé avec 2 DG-CNFET.

Le fonctionnement idéal de cette porte logique est le suivant :

- Lorsque l'entrée 'IN' est à '1': le transistor T_{bas} est passant alors que T_{haut} est bloqué. Le courant consommé par la porte est nul et impose la tension V_{DS} de T_{bas} , égale à la tension de sortie V_{OUT} , à zéro volt.
- Lorsque l'entrée 'IN' est à '0': le transistor T_{bas} est bloqué alors que T_{haut} est passant. Le courant consommé par la porte est nul et impose la tension V_{DS} de T_{haut} à zéro volt. V_{OUT} vaut alors la tension V_{DD} ou '1'.

La Figure 4.5 présente la caractéristique de transfert de la porte logique. Les paramètres des transistors sont les mêmes que ceux utilisés pour l'inverseur avec charge passive. En traits pleins, la tension de grille arrière du transistor T_{bas} , $V_{BG_{Tbas}}$, est de 1 V avec une alimentation de 0,6 V. La tension de grille arrière du transistor T_{haut} , $V_{BG_{Thaut}}$, est de -0,4 V par rapport à la masse du circuit, elle est donc de -1 V pour rapport à sa source (connectée à $V_{DD} = 0,6$ V) :

on obtient alors un fonctionnement symétrique à T_{bas} . Pour le jeu de paramètres, cette polarisation, une tension de grille arrière de 1 V et des tensions de drain et de grille avant inférieures ou égales à 0,6 V (l'opposé pour T_{haut}), permet de rester dans la zone linéaire, i.e. sans saturation du courant due à l'accès source ou drain (voir Figure 3.24).

Afin de concevoir des circuits ne requérant qu'une seule alimentation, il est intéressant de simuler cette même porte inverseuse pour des polarisations de grille arrière des transistors T_{haut} et T_{bas} de 0 et 0,6 V respectivement (bien que les transistors risquent de fonctionner dans la zone de saturation). Les résultats de ces simulations (symboles) ne présentent aucune différence par rapport à la polarisation précédente pour le comportement DC.

Les marges de bruit pour le niveau logique bas ($V_{IL} - V_{OL}$) et haut ($V_{OH} - V_{IH}$) sont d'environ 255 mV pour cette polarisation soit 42 % de la valeur de l'alimentation : $V_{IL} \approx 279$ mV, $V_{IH} \approx 321$ mV, $V_{OL} \approx 24$ mV et $V_{OH} \approx 576$ mV déterminés pour un gain en tension de -1. Ces caractéristiques simulées sont bien meilleures que celles de l'inverseur TTL fonctionnant sous 3,3 V pour lequel les marges de bruit pour les niveaux logiques bas et haut sont habituellement d'environ 0,4 V soit 12 % de l'alimentation : $V_{IL} \approx 0,8$ V, $V_{IH} \approx 2$ V, $V_{OL} \approx 0,4$ V et $V_{OH} \approx 2,4$ V. Représenté sur la Figure 4.6 pour cette polarisation en tension $\frac{\Delta V_{OUT}}{\Delta V_{IN}}$ lors de la transition, de l'ordre de -20 000, est lié à ces fortes marges de bruit.

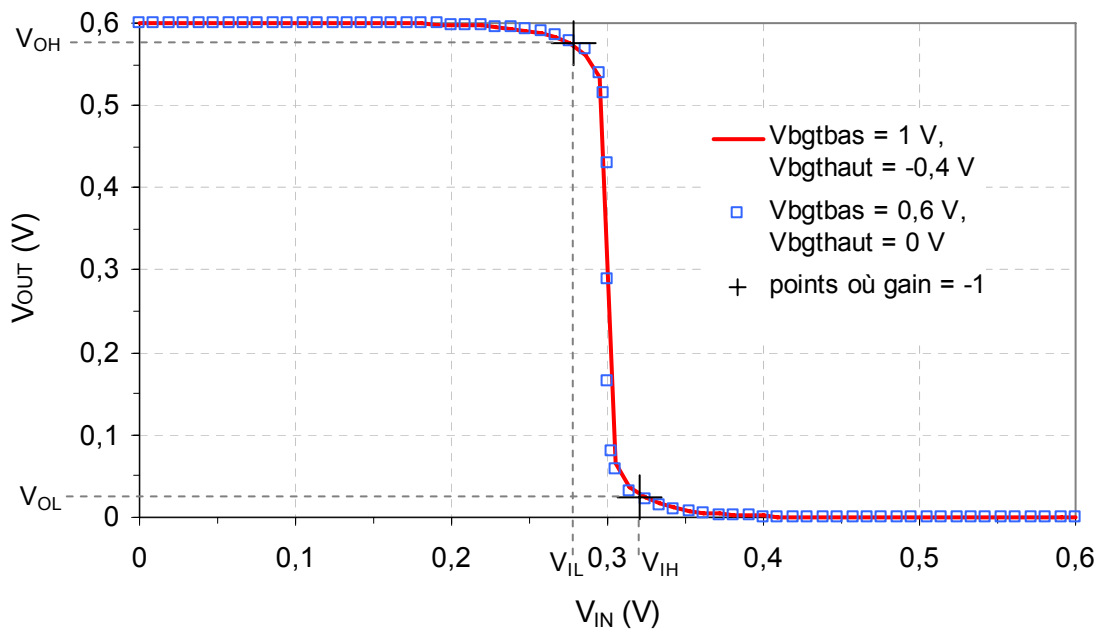


Figure 4.5 Caractéristiques de transfert de l'inverseur pour 2 polarisations de grilles arrière alimenté sous 0,6 V avec les niveaux logiques V_{IL} , V_{IH} , V_{OL} et V_{OH} qui permettent de calculer les marges de bruit (déterminés pour $V_{BGT_{bas}} = 0,6$ V et $V_{BGT_{haut}} = 0$ V).

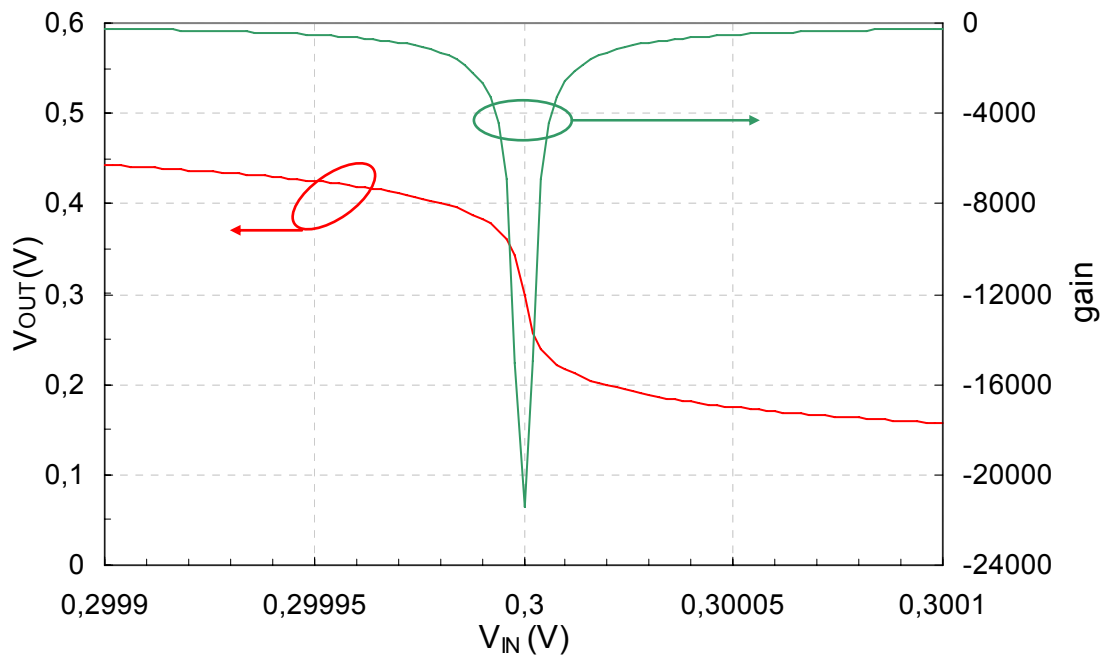


Figure 4.6 Caractéristique de transfert partielle et le gain en tension en fonction de V_{IN} autour de $V_{DD}/2$ soit 0,3 V pour $V_{BGTbas} = 0,6$ V et $V_{BGTaut} = 0$ V.

Pour le type N, notons que pour obtenir une caractéristique de transfert sans saturation due aux accès source ou drain quel que soit V_{FGS} inférieur ou égal à V_{BGS} , il faut que l'effet de la polarisation de grille arrière sur le potentiel du canal associé soit plus important que celui de la grille avant sur le potentiel du canal de la partie interne, c'est-à-dire que la capacité de grille arrière soit plus élevée que celle de grille avant.

La même remarque est valable pour le type P avec V_{FGS} supérieur ou égal à V_{BGS} .

La Figure 4.7 montre les caractéristiques de transfert pour différentes chiralités (les mêmes pour les 2 transistors) qui correspondent à des diamètres de 1,1 à 1,75 nm environ. Sur ces caractéristiques, on remarque que plus le nanotube est gros, moins la caractéristique de la porte est abrupte et plus la marge de bruit est réduite. La largeur de bande interdite, dépendante de la chiralité du nanotube, en est la cause. En effet, rappelons que la largeur de bande interdite est inversement proportionnelle au diamètre (équation 2.31), les nanotubes de gros diamètre ont une bande interdite d'environ 500 meV, plus faible que celle des nanotubes de petit diamètre (800 meV). Les transistors faits avec les gros nanotubes ont une tension de seuil (par analogie avec le transistor MOS Silicium) plus faible et commencent à conduire pour des tensions de grille plus faibles par rapport aux transistors à nanotube de petit diamètre. La tension d'alimentation V_{DD} et les polarisations de grille arrière doivent être réduites pour améliorer la caractéristique de la porte logique faite à partir de gros nanotubes.

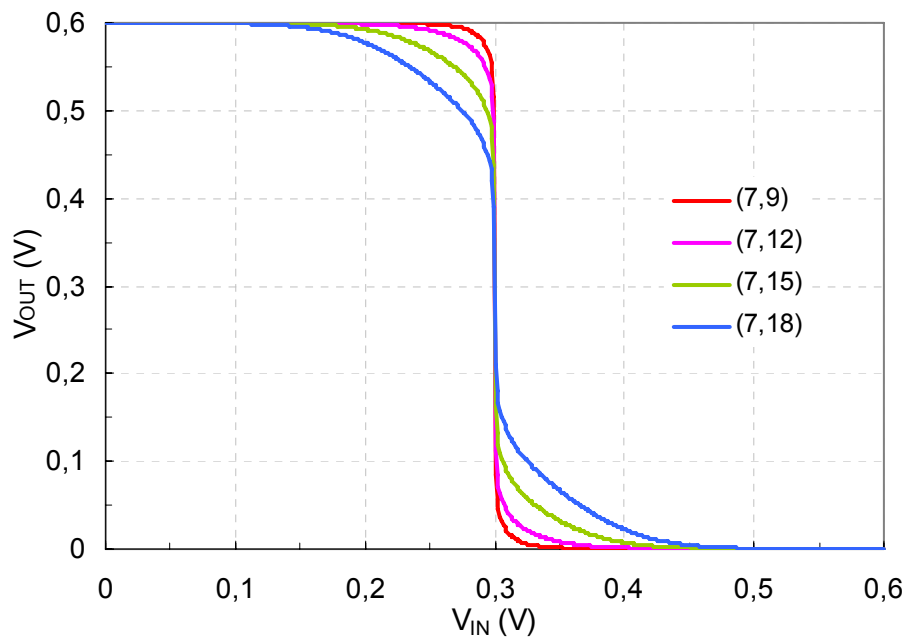


Figure 4.7 Caractéristiques de transfert de l'inverseur pour $V_{BGTbas} = 0,6 V$ et $V_{BGT haut} = 0 V$ alimenté sous $0,6 V$ pour différentes chiralités.

La Figure 4.8 montre le résultat de la simulation en AC du gain en courant en polarisant la porte à $V_{IN} = 0,3 V$, $V_{BGTbas} = 0,6 V$ et $V_{BGT haut} = 0 V$. La fréquence de coupure est d'environ 230 GHz. À 100 GHz, le fanout, égal au gain en courant, est de 3 (environ 10 dB).

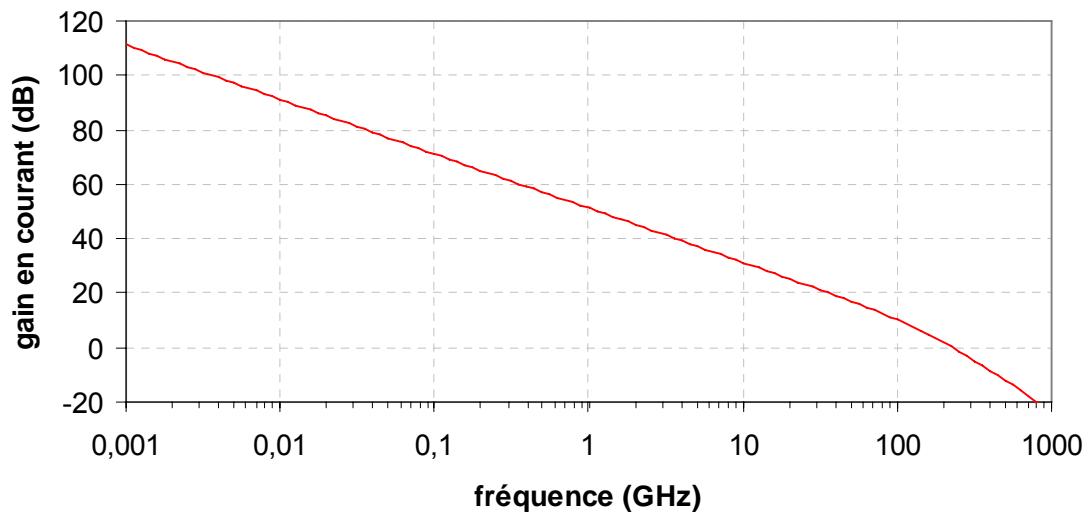


Figure 4.8 Simulation en AC, module du paramètre H_{21} en décibel en fonction de la fréquence pour $V_{IN} = 0,3 V$, $V_{BGTbas} = 0,6 V$ et $V_{BGT haut} = 0 V$.

La Figure 4.9 montre la simulation transitoire pour les mêmes paramètres et pour $V_{BGTbas} = 0,6 V$ et $V_{BGT haut} = 0 V$. Des transitions « lentes » par rapport à la période du signal d'entrée (temps de descente 1,8 ns) sont nécessaires afin d'obtenir la convergence de la simulation : le temps de montée est de 3 ns, celui de descente est de 1,8 ns pour un pas de

simulation de 500 ps. L'origine de ce problème ne semble pas venir des potentialités des transistors puisque i) la sortie commute plus rapidement que le signal d'entrée : l'inversion du signal de sortie pour le front montant de l'entrée de 3 ns est effectuée en 1 ns maximum (le transistor ne semble pas à la limite de son fonctionnement en fréquence) et ii) les simulations peinent à converger autour de $V_{IN} = V_{DD}/2$ (constaté pour d'autres valeurs de V_{DD} et donc indépendamment de la polarisation d'un transistor) pour des transitions plus rapides. La difficulté de convergence viendrait de la porte elle-même, de la manière dont les portes sont reliées, tout en sachant que ce modèle est complexe et comporte de nombreux nœuds. Afin de tenter de résoudre ce problème, nous avons réduit le nombre de nœuds à l'intérieur du code VerilogA, i.e. une version du modèle allégée sans les résistances d'accès ni les tensions de bandes plates dans le code mais présentes dans la netlist AMS, a été créée. Finalement, aucun des stimuli de tension d'entrée présentés sur la porte pour une simulation transitoire et pour lesquels la simulation converge avec la version « complète », n'a permis la convergence des simulations avec la version allégée.

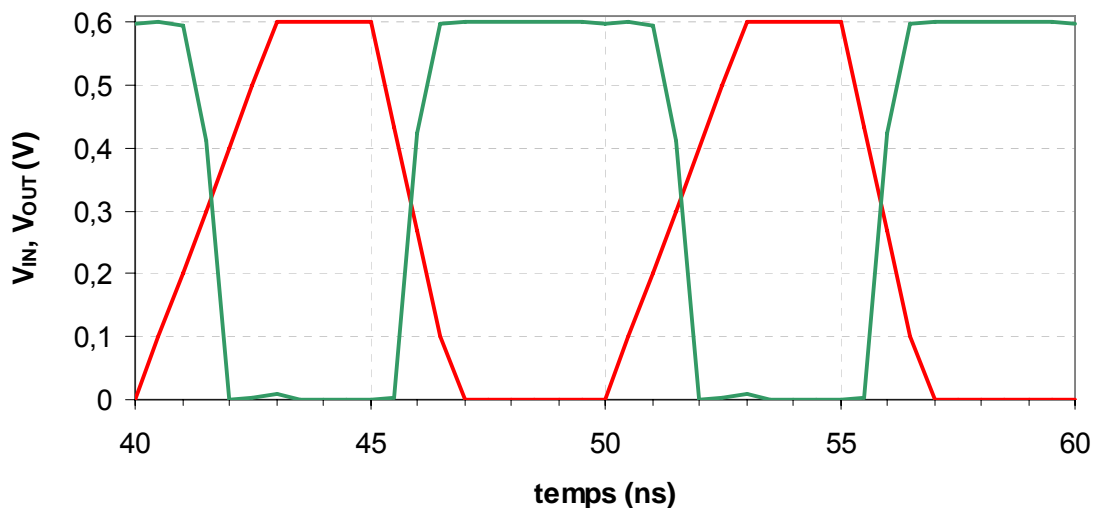


Figure 4.9 Simulation transitoire, V_{IN} en rouge, V_{OUT} en vert.

III. Porte logique reconfigurable à 1 entrée : inverseur ou buffer

Dans ce paragraphe est présentée une porte logique à une entrée dont la sortie est l'inverse ou non de l'entrée selon la valeur de l'entrée de configuration. Cette porte fonctionne soit en buffer soit en inverseur. Nous analysons le fonctionnement de la porte buffer avant de présenter la porte reconfigurable.

III.a. Porte buffer

À partir de l'inverseur présenté précédemment (avec $V_{BGN} = V_{DD}$ et $V_{BGP} = 0$ V), les polarisations de grille arrière sont inversées afin d'obtenir une porte logique qui suit l'entrée : $V_{BGN} = 0$ V et $V_{BGP} = V_{DD}$ (voir Figure 4.10). Les tensions de grille arrière par rapport à leur source respective sont alors nulles. Ces transistors sont donc passants si le niveau de Fermi côté drain est suffisamment décalé pour que la contribution de drain du courant soit

suffisamment importante. La tension V_{DS} du transistor T_{bas} est positive, les trous sont favorisés, ce transistor est de type P. À l'inverse, la tension V_{DS} du transistor T_{haut} est négative, les électrons sont favorisés, ce transistor est de type N.

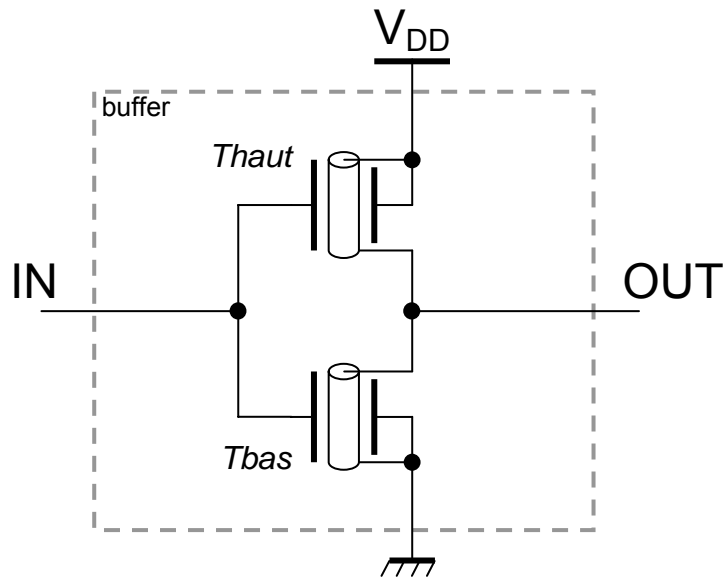


Figure 4.10 Schéma électrique du buffer réalisé avec des transistors double grille.

Ce montage buffer a un gain en tension proche de 1 pour V_{IN} autour de $V_{DD}/2$ (voir Figure 4.11 avec les mêmes paramètres que précédemment). En effet, il est nécessaire pour les tensions V_{DS} de T_{haut} et T_{bas} de suivre leur tension de grille avant respective afin de conduire le même courant. Pour cette polarisation, comme montré en noir sur la Figure 4.12, les hauteurs de barrière s'opposant au passage des porteurs de charge majoritaires des deux transistors (les trous issus du drain pour T_{bas} et les électrons issus du drain pour T_{haut}) sont les mêmes et égales à $E_G/2$.

Si V_{OUT} ne suit pas V_{IN} , le courant circulant dans les deux transistors est différent. Par exemple si V_{OUT} était inférieur à V_{IN} (cas en gris sur la Figure 4.12), la tension V_{DS} de T_{bas} serait inférieure à sa tension de grille avant et, pour T_{haut} , V_{DS} serait supérieur à V_{FGS} (en valeurs absolues). La hauteur de barrière pour les trous issus du drain de T_{bas} serait supérieure à celle des électrons issus du drain de T_{haut} : T_{haut} conduirait « mieux » que T_{bas} .

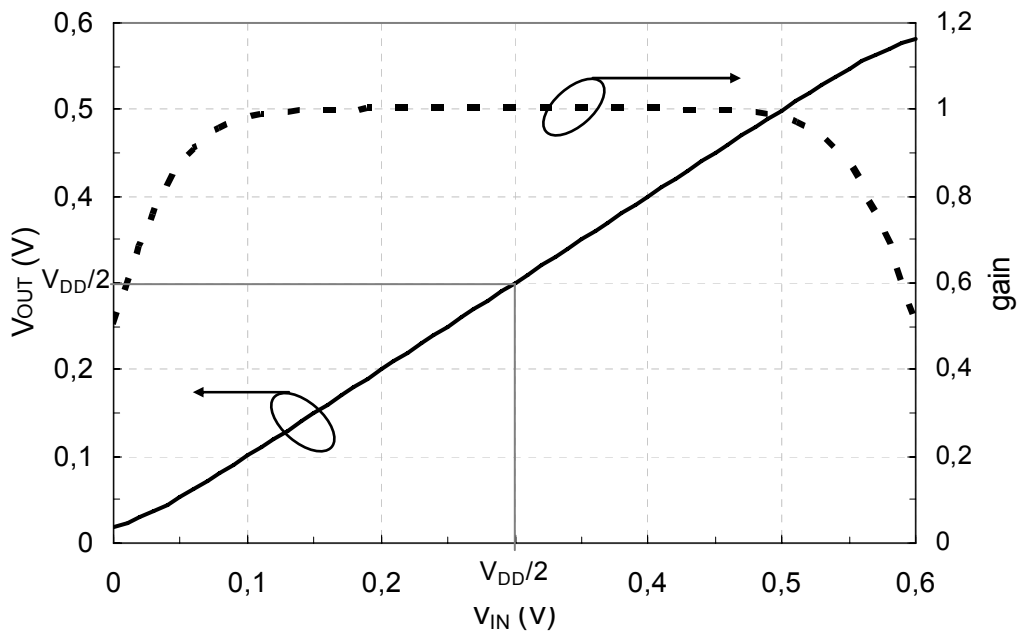


Figure 4.11 Caractéristique de transfert (trait plein) et gain du buffer (tirets) en fonction de V_{IN} .

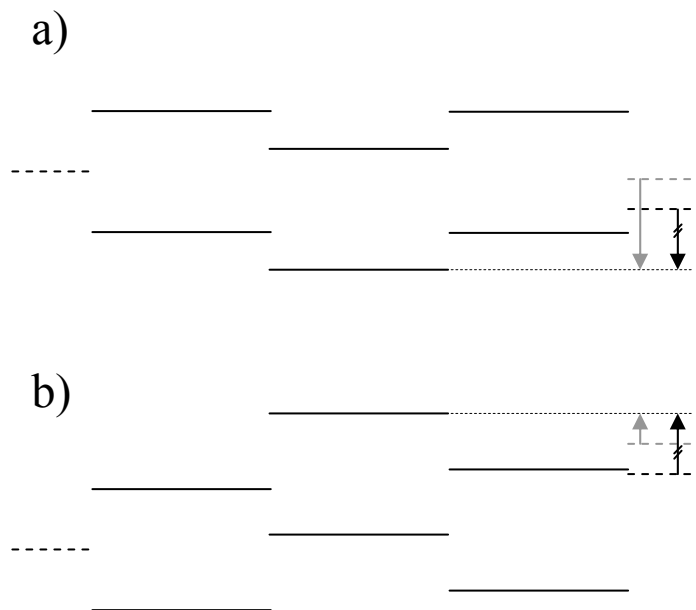


Figure 4.12 Schémas de bandes des transistors a) T_{bas} et b) T_{haut} (la position des bandes correspond à environ $V_{IN} = 0,2 V$). Côté drain, en tirets noirs la position du niveau de Fermi réelle, en gris, la position du niveau de Fermi si V_{OUT} est plus faible. La flèche correspondante montre la hauteur de barrière dans chaque cas.

Ce type de porte est intéressant pour introduire un retard dans un circuit afin, par exemple, de conserver plusieurs signaux synchronisés.

III.b. Porte inverseuse ou buffer

Le but recherché avec cette porte est d'inverser le signal d'entrée ou de le suivre selon la valeur logique présente sur l'entrée de configuration 'Select'.

Le schéma de cette porte est présenté Figure 4.13. Elle comporte 4 transistors double grille. La polarisation des grilles arrière des transistors du bloc « inverseur ou buffer » dépend de l'entrée 'Select' et de son complément, réalisé avec le bloc « inverseur de 'Select' ». Il est possible de remplacer les transistors DG-CNFET de ce bloc par des C-CNFET.

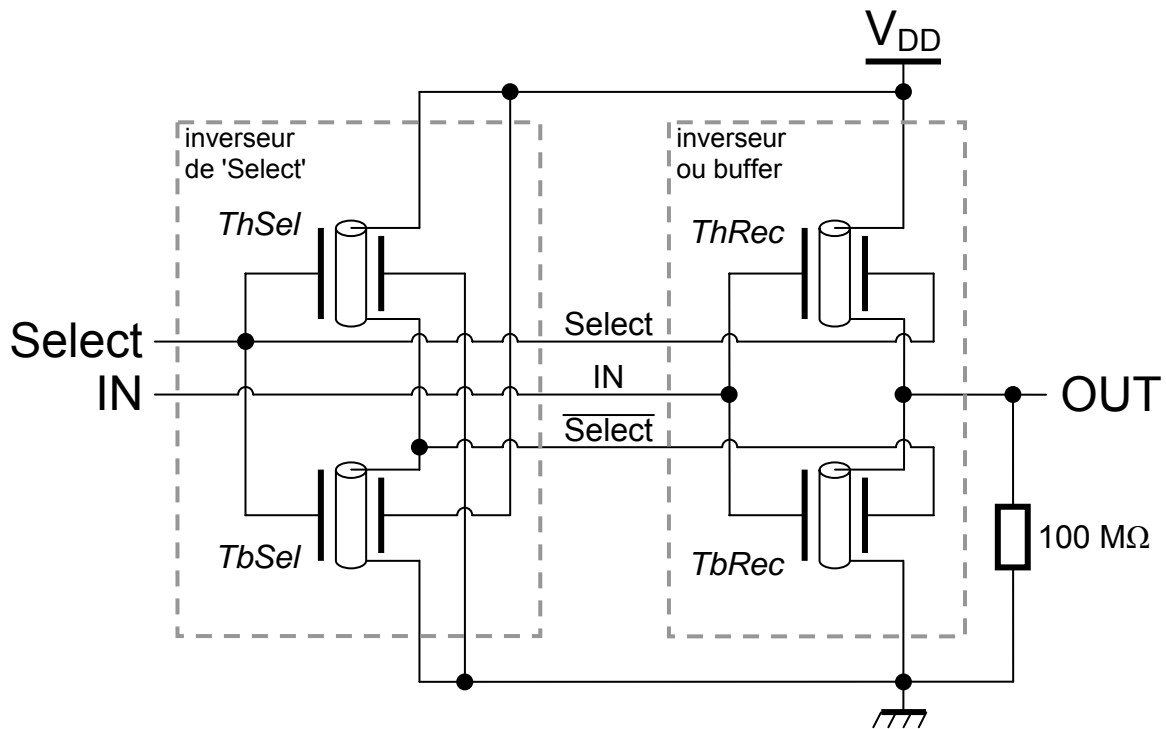


Figure 4.13 Schéma électrique de la porte reconfigurable : l'entrée 'Select' et son complément permettent de choisir le type (N ou P pour que le couple de transistors du bloc « inverseur ou buffer »).

La Figure 4.14 présente le résultat de simulation transitoire où l'entrée 'Select' est modifiée sans prendre de précaution, i.e. lorsque l'entrée est à '0' ou '1'. La porte est inverseuse lorsque 'Select' vaut '0' et est buffer lorsque 'Select' vaut '1'. Le choix entre porte inverseuse ou buffer selon 'Select' à '1' ou '0' est arbitraire : le fonctionnement opposé pour la valeur de 'Select' a été vérifié.

On remarque sur cette figure que la caractéristique de sortie est détériorée (n'atteint pas 0,6 V en buffer) par la présence de la résistance de 100 MΩ rajoutée par le simulateur. On peut ainsi voir les conséquences de cette charge sur le fonctionnement du circuit.

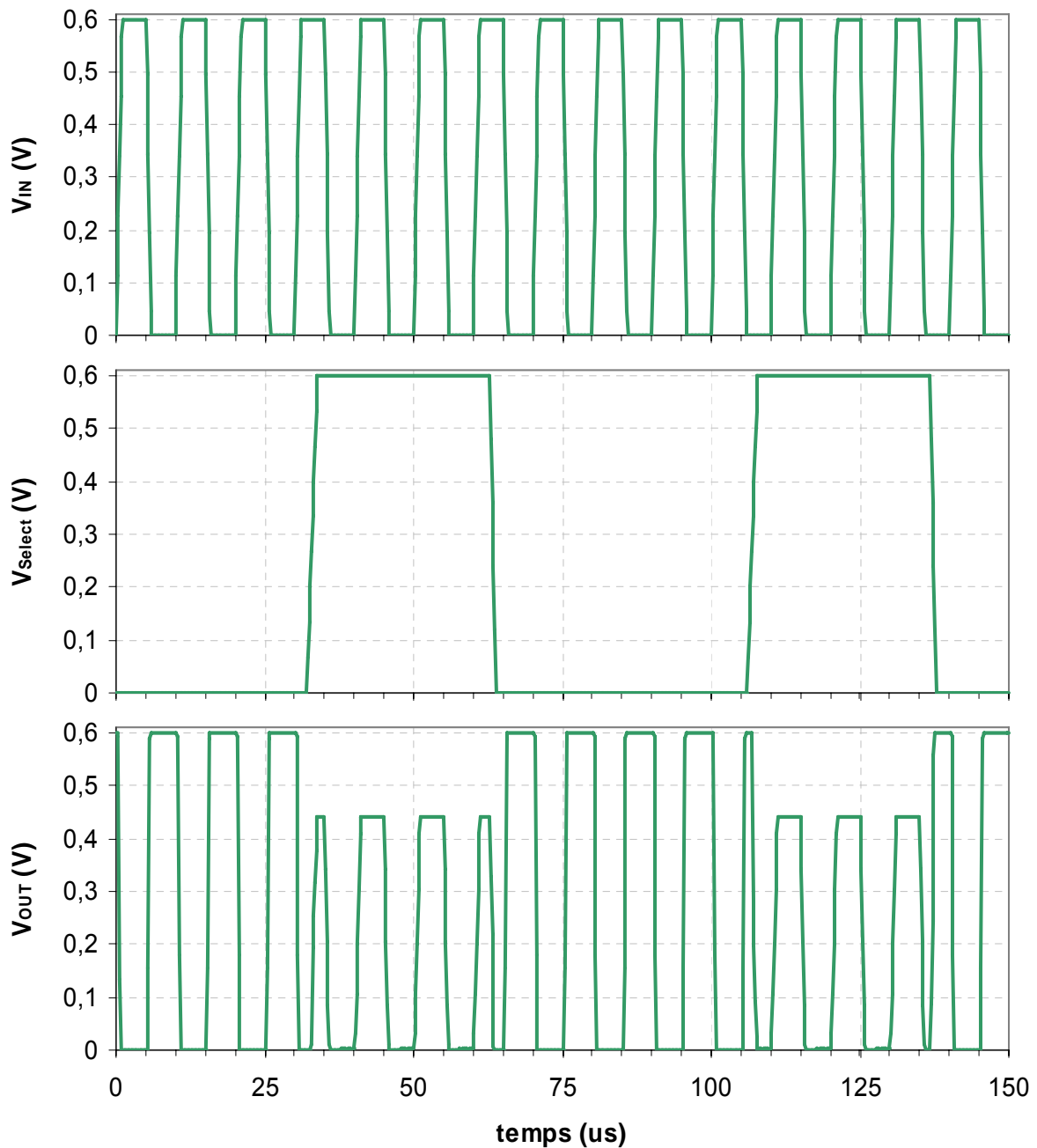


Figure 4.14 Simulation transitoire de la sortie de la porte logique montrant l'inversion, ou non, du signal V_{IN} selon le potentiel de l'entrée de configuration V_{Select} .

Cette porte logique reconfigurable à une entrée, inverseuse ou buffer selon le potentiel appliqué sur l'entrée de configuration, réalisée avec 4 transistors à nanotube est fonctionnelle.

IV. Circuit reconfigurable

Le circuit reconfigurable présenté Figure 4.15 peut être configurée pour obtenir plusieurs fonctions logiques selon la polarisation des grilles arrière des DG-CNFETs. Le circuit est composé de 7 transistors à nanotube dont 3 double grille (TA, TB et TC) les autres sont des C-CNFET de type N (Tpc1, Tev1, Tpc2 et Tev2). Ce circuit présente 2 entrées logiques (A et

B), 3 entrées de configuration (connectées aux grilles arrières, bA, bB et bC) et nécessite une horloge avec un circuit de commande (signaux pc1, ev1, pc2 et ev2) afin de synchroniser les différentes parties du circuit.

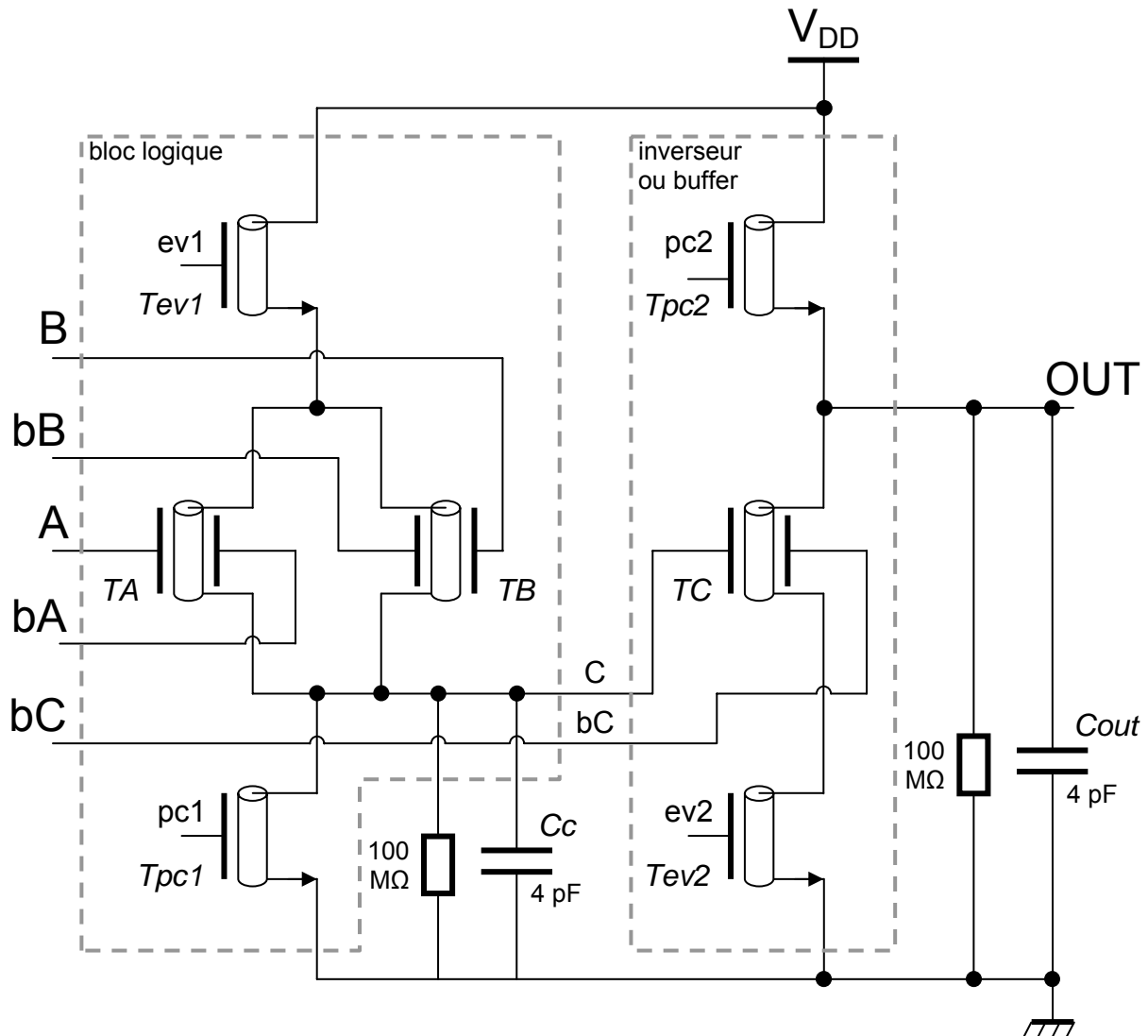


Figure 4.15 Schéma électrique du circuit reconfigurable à 7 transistors. Les résistances de $100\text{ M}\Omega$ rajoutées par le simulateur sont présentes sur ce schéma et sont « compensées » par des capacités en parallèle de 4 pF pour permettre un bon fonctionnement du circuit.

Ce circuit fonctionne selon le principe de charge-précharge. Considérons le bloc « fonction logique » de la porte, dont la sortie est C. La précharge de ce sous-circuit consiste à rendre passant le transistor T_{pc1} (le transistor T_{ev1} est bloqué) afin d'imposer un '0' en sortie. La 2^e étape, la charge (le transistor T_{pc1} est bloqué, T_{ev1} est passant), le '0' imposé précédemment est changé en '1' si l'un des 2 transistors double grille est passant.

Le bloc « inverseur ou buffer », avec C en entrée, fonctionne de manière similaire : T_{pc2} est passant pour imposer un '1' puis T_{ev2} est passant pour annuler la sortie selon l'état du transistor T_C .

Les différentes polarisations de grille arrière permettent ainsi de définir 8 fonctions logiques différentes répertoriées dans le Tableau 4.1 [O'Con07].

V_{bA}	V_{bB}	V_{bC}	C	OUT
V_{DD}	V_{DD}	V_{DD}	$A + B$	$\overline{A + B}$
V_{DD}	V_{DD}	0	$A + B$	$A + B$
V_{DD}	0	V_{DD}	$A + \overline{B}$	$\overline{A} \cdot B$
V_{DD}	0	0	$A + \overline{B}$	$A + \overline{B}$
0	V_{DD}	V_{DD}	$\overline{A} + B$	$A \cdot \overline{B}$
0	V_{DD}	0	$\overline{A} + B$	$\overline{A} + B$
0	0	V_{DD}	$\overline{A \cdot B}$	$A \cdot B$
0	0	0	$\overline{A \cdot B}$	$\overline{A \cdot B}$

Tableau 4.1 Fonction logique de la porte reconfigurable en fonction des potentiels des grilles arrière. Le résultat du bloc « fonction logique », le signal 'C', est également indiqué.

Ce circuit nécessite donc un circuit de synchronisation délivrant les signaux de commande des transistors C-CNFET. Ce fonctionnement requiert une simulation en mode transitoire.

Les résultats de simulation transitoire sont présentés Figure 4.16, Figure 4.17 et Figure 4.18 pour différentes configurations de grilles arrières avec les paramètres suivants pour les 3 transistors double grille :

- un nanotube de chiralité $(n, m) = (15, 2)$,
- une longueur de canal (pour chaque région) de 100 nm,
- une capacité de grille avant $C_{FG} = 200$ pF/m,
- des capacités de grille arrière $C_{BGD} = C_{BGS} = 60$ pF/m,
- des tensions de bandes plates V_{FB-FG} et V_{FB-BG} nulles,
- des résistances d'accès série de drain, grille, source et grille arrière de 15 k Ω , 10 Ω , 15 k Ω et 70 Ω respectivement,
- pas de charges piégées,

Les paramètres suivants ont été utilisés pour les 4 transistors C-CNFET :

- un nanotube de chiralité $(n, m) = (19, 0)$,
- des résistances d'accès série de drain, grille et source de 15 k Ω , 10 Ω et 15 k Ω respectivement,
- une capacité de grille $C_{INS} = 100$ pF/m,
- une tension de bandes plates $V_{FB} = -40$ mV,
- des capacités électrostatiques de drain et de source $C_{DE} = C_{SE} = 0,1$ aF,

Pour ces simulations, afin de ne pas décharger trop rapidement les nœuds 'C' et 'OUT', reliés à la masse par les résistances de 100 M Ω (rajoutées par le simulateur), nous avons ajouté les capacités C_c et C_{out} de 4 pF en parallèle à ces résistances. Le circuit est alimenté sous 1 V.

Pour la Figure 4.16, les 3 entrées de configuration bA , bB et bC sont à '1' : les transistors double-grille sont donc passants si leur grille avant est à '1' et bloqués dans le cas contraire. Pour le bloc « fonction logique », la précharge (mise à '1' du signal de commande $pc1$) met sa sortie C à zéro. L'évaluation (mise à '1' du signal $ev1$ et $pc1$ à '0') charge le condensateur C_c lorsque l'un des transistors TA ou TB est passant, c'est-à-dire que C vaut '1' si A ou B sont à

'1' soit $C = A + B$. Pour le bloc « inverseur ou buffer », la précharge via le transistor pc2 charge la capacité Cout. Celle-ci reste chargée, et la sortie reste à '1', si le transistor TC est bloqué lors de l'évaluation (mise à '1' du signal ev2 et pc2 à '0'), c'est-à-dire si C est à '0'. On a donc $OUT = \overline{C}$. Finalement, on a réalisé la fonction NON OU : $OUT = \overline{C} = \overline{A + B}$.

Pour la Figure 4.17, les entrées de configuration bA et bB sont à '1' et l'entrée bC est à '0' : les transistors double-grille TA et TB sont donc passants si leur grille avant est à '1' et bloqués dans le cas contraire, le transistor TC est passant si C vaut '0'. Le bloc « fonction logique » fonctionne de la même manière pour la polarisation de la Figure 4.16 ($C = A + B$). Pour le bloc « inverseur ou buffer », la précharge via le transistor pc2 charge la capacité Cout. Celle-ci reste chargée, et la sortie reste à '1', si le transistor TC est bloqué lors de l'évaluation, c'est-à-dire si C est à '1'. On a donc $OUT = C$. Finalement, on a réalisé la fonction OU : $OUT = C = A + B$.

Pour la Figure 4.18, les entrées de configuration bB et bC sont à '1' et l'entrée bA est à '0' : les transistors double-grille TB et TC sont donc passants si leur grille avant est à '1' et bloqués dans le cas contraire, le transistor TA est passant si A vaut '0'. Pour le bloc « fonction logique », la précharge met sa sortie C à zéro. L'évaluation charge le condensateur Cc lorsque l'un des transistors TA ou TB est passant, c'est-à-dire que C vaut '1' si A vaut '0' ou si B vaut '1' soit $C = \overline{A} + B$. Le bloc « inverseur ou buffer » fonctionne de la même manière pour la polarisation de la Figure 4.16 ($OUT = \overline{C}$). Finalement, on a réalisé la fonction ET entre l'entrée A et l'entrée B inversée : $OUT = \overline{C} = \overline{\overline{A} + B} = A \cdot \overline{B}$.

Les simulations présentées permettent en même temps de valider le modèle du DG-CNFET en utilisant pleinement son caractère reconfigurable et de vérifier le fonctionnement de ce circuit logique reconfigurable innovant.

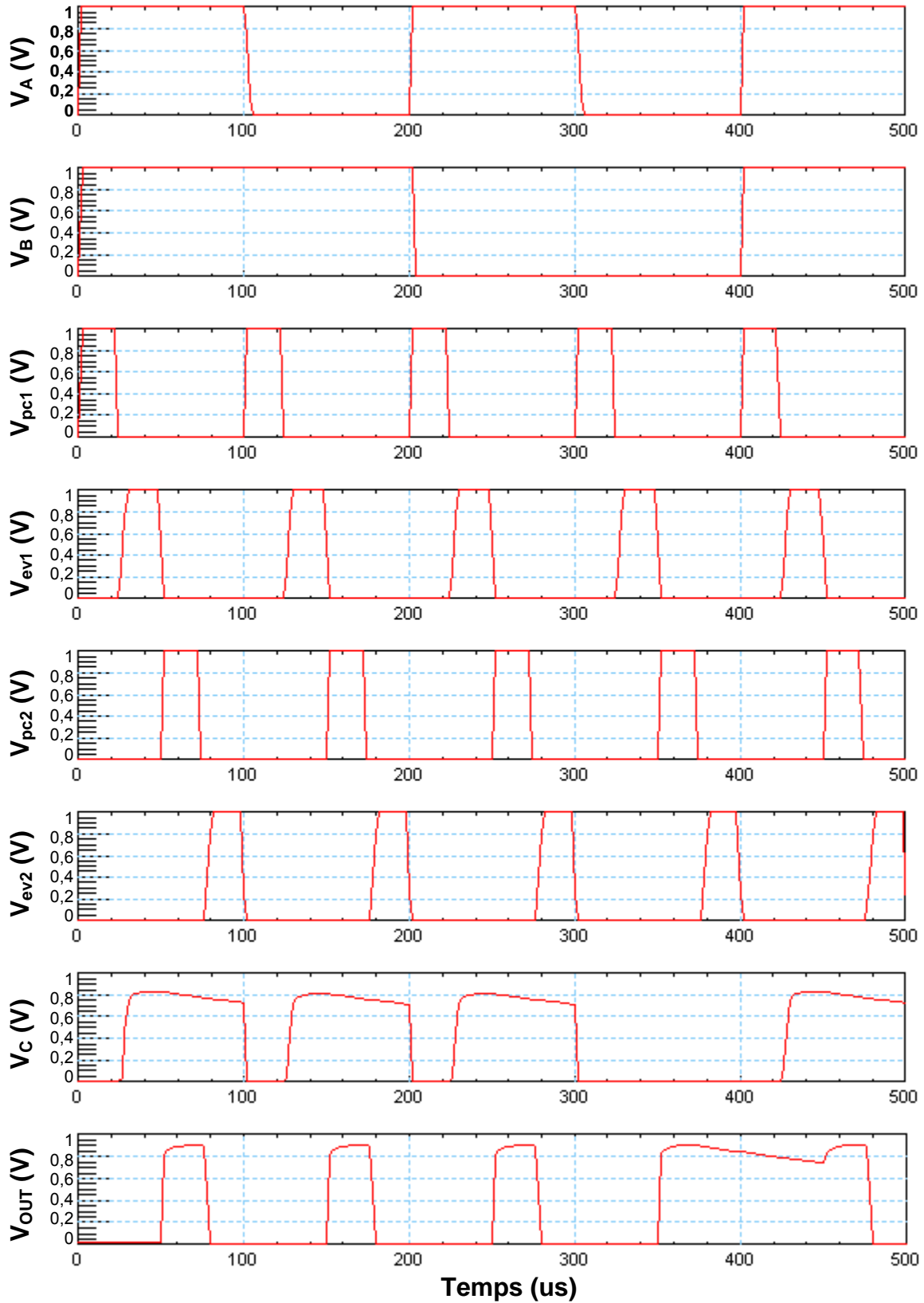


Figure 4.16 Simulation transitoire du circuit reconfigurable avec $V_{bA} = V_{bB} = V_{bC} = 1V$ soit une porte NON OU.

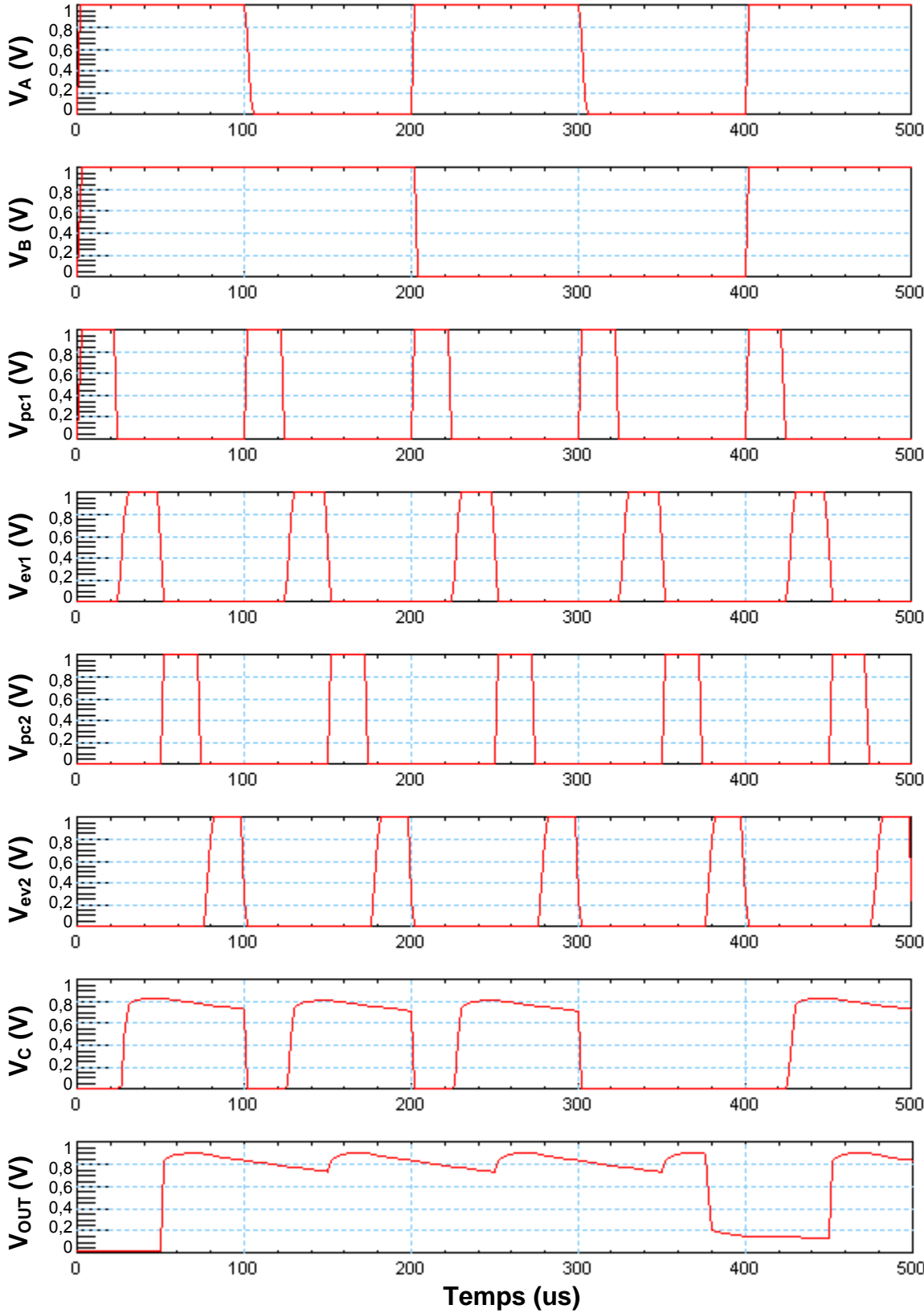


Figure 4.17 Simulation transitoire du circuit reconfigurable avec $V_{bA} = V_{bB} = 1V$ et $V_{bC} = 0V$ soit une porte OU.

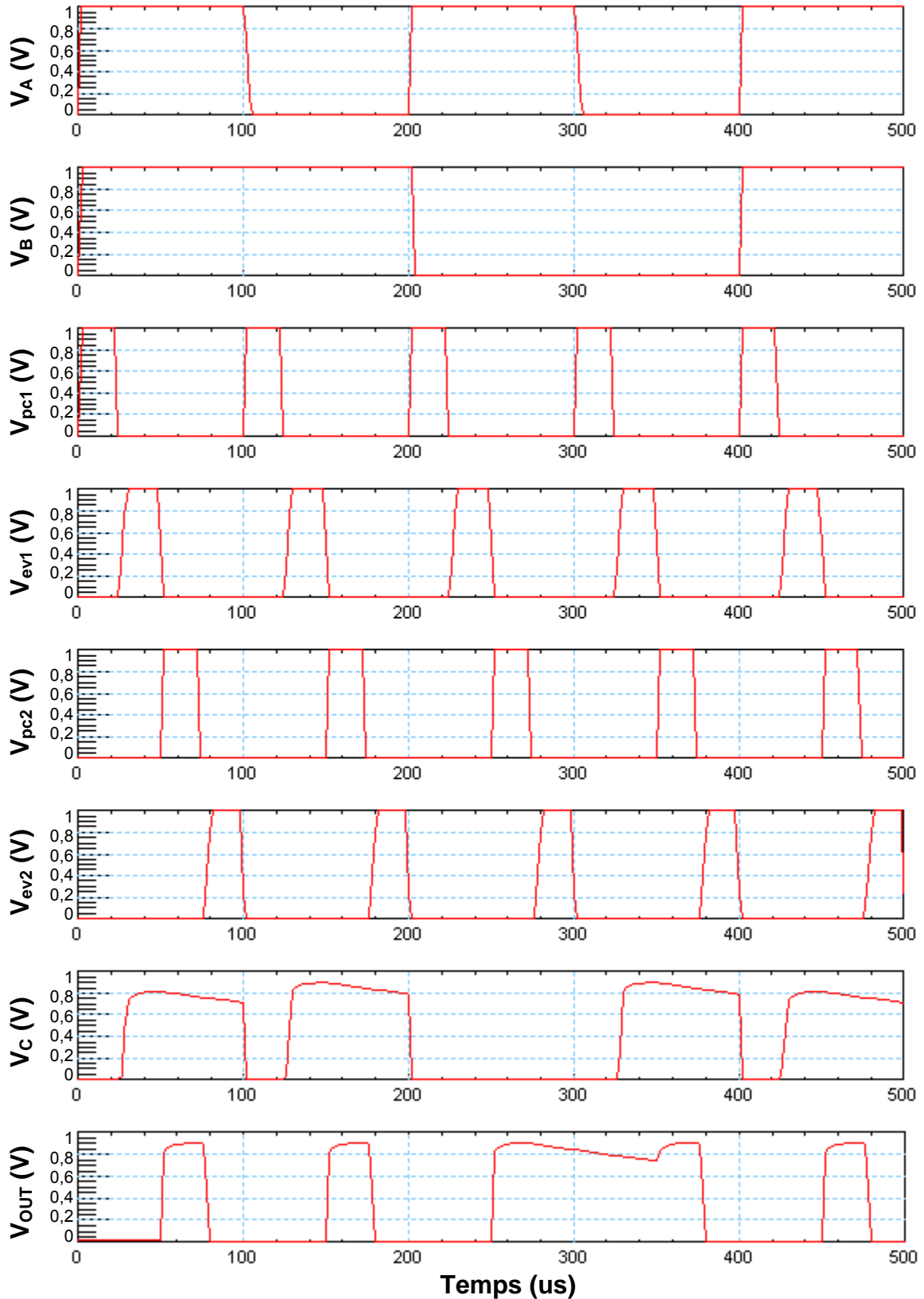


Figure 4.18 Simulation transitoire du circuit reconfigurable avec $V_{bA} = 0\text{ V}$ et $V_{bB} = V_{bC} = 1\text{ V}$ soit une porte réalisant la fonction $A \cdot \bar{B}$.

Les 3 résultats de simulation présentés ci-dessus ont été obtenus à partir du même stimulus {pc1, ev1, pc2, ev2}. La convergence de la simulation pour d'autres polarisations de grille arrière nécessite des ajustements des fronts montants et descendants des signaux du stimulus : l'augmentation des temps de montée et de descente favorise la convergence. Ces changements de niveaux logiques induisent parfois un alignement des schémas de bandes d'énergie des 3 régions d'un des transistors double grille : la discontinuité issue du calcul du courant (limité par le plus haut bas de bande de conduction pour les électrons) est probablement la cause de cette divergence. Des tentatives de lissage des fonctions minimum et maximum utilisées dans le calcul du courant ont été intégrées sans amélioration de la convergence de la simulation du circuit.

Les modèles du transistor C-CNFET et du transistor DG-CNFET utilisés pour ce circuit sont disponibles sur le site <http://www.ims-bordeaux.fr> : recherche, équipe MODEL, Codes Verilog ADS.

V. Conclusion

L'utilisation du modèle du DG-CNFET dans le cadre de simulations de circuits reconfigurables a été démontrée avec succès. Néanmoins, cette première réussite a permis également de détecter des problèmes de convergence dont il reste encore à déterminer plus précisément la cause et/ou à approfondir les solutions. Ces résultats encourageants permettent d'envisager des circuits plus complexes à partir de ces blocs reconfigurables.

Conclusion

Le succès industriel des nanotechnologies sera clairement conditionné par le développement, au plus tôt de leurs phases d'intégration, de leur modèle compact avancé autorisant de nouveaux paradigmes de conception pour les circuits. Cette étape est un préalable au développement de nouvelles architectures de circuits très différentes de celles mettant en œuvre les technologies conventionnelles. En 2005, l'équipe de Ph. Avouris [Lin05] du Watson Research Center d'IBM a développé un transistor à nanotube de carbone basé sur quatre électrodes, le DG-CNFET. Selon la polarisation de la quatrième électrode, le dispositif peut être assimilé à un transistor à effet de champ de type N ou P. Ce comportement électrique autorise un degré de liberté supplémentaire aux concepteurs de circuits qui peut être mis à profit dans le développement d'architectures innovantes. D'une façon générale et pour le DG-CNFET en particulier, les modèles compacts des nouveaux transistors doivent reposer sur des bases physiques pour prendre en compte les paramètres limitatifs telle la dispersion technologique. Ainsi, l'intégration de ces données dans un modèle compact permettra aux concepteurs de circuits de faire un choix (entre sensibilité à la technologie, performances en termes de vitesse, puissances dissipées, densité d'intégration, ...) entre les différentes options technologiques.

Le premier chapitre décrit les procédés de fabrication des nanotubes et leur incidence sur le fonctionnement des transistors. Il n'est pas encore possible de maîtriser simultanément la chiralité (définissant le type de nanotube, métallique ou semi-conducteur, ainsi que la largeur de bande interdite dans le 2nd cas), la localisation et l'orientation du nanotube utilisé comme canal du transistor avec un faible taux de nanotubes défectueux. La qualité du contact métallique entre l'électrode de source ou de drain et le nanotube influence largement les performances du transistor.

Le deuxième chapitre présente le modèle du transistor à modulation de hauteur de barrière ou C-CNFET. Ce modèle est physique, l'équation de la charge est résolue analytiquement par la simplification de son expression selon différentes plages de polarisation et d'énergie. Ceci permet le calcul auto-cohérent de la charge et du potentiel du canal incluant l'influence de la tension de grille. Ensuite, le courant de drain, calculé en utilisant le formalisme de Landauer, est fonction du potentiel du canal. Les résultats de simulation de ce modèle ont été validés par comparaison aux simulations Monte-Carlo. Enfin, ce modèle permet d'estimer l'impact de la dispersion technologique du diamètre sur les résultats de simulation d'un circuit.

Le troisième chapitre expose le modèle du transistor à nanotube double grille ou DG-CNFET, reconfigurable en type N ou P selon le potentiel de la grille supplémentaire. Par analogie avec le C-CNFET, les équations de la charge des 3 régions (accès source, partie interne et accès drain) sont résolues analytiquement. Il est alors possible de calculer de façon auto-cohérente les charges et les potentiels de canal des 3 régions. Les courants de trous et

d'électrons sont ainsi calculés selon les trois potentiels de canal. Une validation partielle du modèle DG-CNFET a pu être effectuée grâce à la comparaison avec les mesures d'IBM [Lin05].

Le quatrième et dernier chapitre traite de la mise en œuvre du modèle DG-CNFET pour réaliser :

- un inverseur sur lequel est étudié l'impact de la variabilité technologique du diamètre sur la caractéristique de transfert pour en déduire l'amorce de règles de conception,
- une porte logique reconfigurable à 1 entrée et 1 entrée de configuration composée de 4 transistors DG-CNFET, réalisant la fonction d'inverseur ou de buffer,
- un circuit logique reconfigurable innovant à 2 entrées et 3 entrées de configuration composé de 7 transistors dont 3 DG-CNFET, réalisant 8 fonctions logiques.

Les résultats de ces simulations démontrent que des circuits logiques complexes à base de DG-CNFET sont réalisables même si les performances du modèle en termes de convergence sont perfectibles.

L'ensemble de ces résultats ouvre des perspectives sur l'élaboration et l'évaluation d'un nouveau paradigme de conception possible grâce à cette porte innovante reconfigurable à base de transistor DG-CNFET. D'ores et déjà, les bases de ce type de circuits font l'objet d'une approche originale de reconfiguration à grain « ultra-fin » : il s'agit du programme ANR « NANOGRAIN » débuté en janvier dernier.

Les grandes lignes de ce projet visent :

- la modélisation compacte du DG-CNFET afin de disposer de modèles précis pour les validations des composants et des architectures,
- l'étude au niveau circuit pour :
 1. affiner la structure existante et la décliner vers d'autres variantes adaptées à des applications spécifiques,
 2. aborder les aspects de mémorisation de la configuration,
 3. étudier les technologies d'interconnexions entre les cellules,
- l'élaboration d'une architecture basée sur des différentes cellules (de type "sea of gates") programmables et capables de réaliser des fonctions complexes, avec une prise en compte de l'aspect tolérance aux fautes,
- l'étude du modèle de programmation de l'architecture, et démonstration d'une application système,
- l'analyse des caractéristiques de l'architecture, notamment vis-à-vis de sa tolérance aux fautes, dans le contexte de la fiabilité réduite au niveau composant.

Le modèle du transistor C-CNFET est d'ores et déjà amélioré par Montassar NAJARI pour en faire un modèle de transistor à nanotube à barrières Schottky ou SB-CNFET [Naja09]. Sébastien FRÉGONÈSE a créé une version de ce modèle prenant en compte les interactions électron-phonon [Frég09]. Enfin, Si-Yu LIAO a complété le modèle du C-CNFET pour élaborer celui du transistor à grille commandée optiquement ou OG-CNFET [Liao09].

Références

- [Abra70i] M. Abramowitz, I. A. Stegun, « Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables », 9^{ième} impression (Dover Publications), 1970, ch. 9, pp. 378, équation 9.7.2.
- [Abra70ii] M. Abramowitz, I. A. Stegun, « Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables », 9^{ième} impression (Dover Publications), 1970, ch. 4, pp. 87, équation 4.6.21.
- [Anan06] M. P. Anantram et F. Léonard, « Physics of carbon nanotube electronic devices », Reports on Progress in Physics, vol. 69, no. 3, pp. 507-561, 2006.
- [Appe02] J. Appenzeller, J. Knoch, V. Derycke, R. Martel, S. Wind et P. Avouris, « Field-modulated carrier transport in carbon nanotube transistors », Physical Review Letters, vol. 89, no. 12, no. 126801, pp. 126801-1-126801-4, 2002.
- [Appe05] J. Appenzeller, Y.-M. Lin, J. Knoch, Z. Chen et P. Avouris, « Comparing carbon nanotube transistors - the ideal choice: a novel tunneling device design », IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 52, no. 12, pp. 2568-2576, 2005.
- [Arno06] M. S. Arnold, A. A. Green, J. F. Hulvat, S. I. Stupp et M. C. Hersam, « Sorting carbon nanotubes by electronic structure using density differentiation », Nature nanotechnology, vol. 1, no. 1, pp. 60-65, 2006.
- [Avou03] P. Avouris, J. Appenzeller, R. Martel et S. J. Wind, « Carbon nanotube electronics », Proceedings of the IEEE, vol. 91, no. 11, pp. 1772-1784, 2003.
- [Avou06] P. Avouris, J. Chen, M. Freitag, V. Perebeinos et J. C. Tsang, « Carbon nanotube optoelectronics », Physica Status Solidi (B) Basic Research, vol. 243, no. 13, pp. 3197-3203, 2006.
- [Bach03] S. M. Bachilo, L. Balzano, J. E. Herrera, F. Pompeo, D. E. Resasco et R. B. Weisman, « Narrow (n,m) – Distribution of single walled carbon nanotubes grown using a solid supported catalyst », Journal of the American Chemical Society, vol. 125, no. 37, pp. 11186-11187, 2003.
- [Berb00] S. Berber, Y.-K. Kwon et D. Tománek, « Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes », Physical Review Letters, vol. 84, no. 20, pp. 4613-4616, 2000.

- [Beth93] D. S. Bethune, C. H. Kiang, M. S. Devries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vasquez et R. Beyers, « Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single atomic layer walls », *Nature*, vol. 363, no. 6430, pp. 605-607, 1993.
- [Boeh97] H. P. Boehm, « The first observation of carbon nanotubes », *Carbon*, vol. 35, no. 4, pp. 581-584, 1997.
- [Borg06] J. Borghetti, V. Derycke, S. Lenfant, P. Chenevier, A. Filoramo, M. Goffman, D. Vuillaume et J.-P. Bourgoin, « Optoelectronic switch and memory devices based on polymer-functionalized carbon nanotube transistors », *Advanced Materials*, vol. 18, no. 19, pp. 2535-2540, 2006.
- [Burk03] P. J. Burke, « An RF circuit model for carbon nanotubes », *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 2, no. 1, pp. 55-58, 2003.
- [Cast07] D. Casterman et M. M. De Souza, « Ab initio investigation of charge transfer technique for control of Schottky contacts in CNTs », *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 18, no. 7, pp. 729-734, 2007.
- [Cazi05] H. Cazin d'Honincthun, S. Galdin-Retailleau, J. Sèe et P. Dollfus, « Electron-phonon scattering and ballistic behavior in semiconducting carbon nanotubes », *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 12, no. 172112, pp. 172112-1-172112-3, 2005.
- [Cazi08i] H. Cazin d'Honincthun, « Des propriétés de transport des nanotubes de carbone au transistor : Étude par simulation Monte Carlo », Thèse de doctorat, soutenue le 10 mars 2008, laboratoire IEF, Université Paris XI Orsay, 2008.
- [Cazi08ii] H. Cazin d'Honincthun, S. Galdin-Retailleau, A. Bournel, P. Dollfus and J.P. Bourgoin, « Monte Carlo study of coaxially gated CNTFETs: capacitive effects and dynamic performance », *Comptes Rendus Physique*, vol. 9, no. 1, pp. 67-77, 2008.
- [Chen05i] J. Chen, C. Klinke, A. Afzali et P. Avouris, « Self-aligned carbon nanotube transistors with charge transfer doping », *Applied Physics Letters*, vol. 86, no. 12, no. 123108, pp. 123108-1-123108-3, 2005.
- [Chen05ii] Z. Chen, J. Appenzeller, J. Knoch, Y.-M. Lin et P. Avouris, « The role of metal-nanotube contact in the performance of carbon nanotube field-effect transistors », *Nano Letters*, vol. 5, no. 7, pp. 1497-1502, 2005.
- [Chen06] B.-H. Chen, J.-H. Wei, P.-Y. Lo, H.-H. Wang, M.-J. Lai, M.-J. Tsai, T. S. Chao, H.-C. Lin et T.-Y. Huang, « A carbon nanotube field effect transistor with tunable conduction-type by electrostatic effects », *Solid-State Electronics*, vol. 50, no. 7-8, pp. 1341-1348, 2006.
- [Coll00] P. G. Collins et P. Avouris, « Nanotubes for electronics », *Scientific American*, vol. 283, no. 6, pp. 62-69, 2000.
- [Dai06] H. Dai, A. Javey, E. Pop, D. Mann, W. Kim et Y. Lu, « Electrical transport properties and field effect transistors of carbon nanotubes », *Nano*, vol. 1, no. 1, pp. 1-13, 2006.

- [Datt97] S. Datta, « Electronic transport in mesoscopic systems », Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering, vol. 3, Cambridge University Press, 1997.
- [Dery01] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller et P. Avouris, « Carbon nanotube inter- and intramolecular logic gates », Nano Letters, vol. 1, no. 9, pp. 453-456, 2001.
- [Dery02i] V. Derycke, R. Martel, M. Radosavljevic, F. M. Ross et P. Avouris, « Catalyst-free growth of ordered single-walled carbon nanotube networks », Nano Letters, vol. 2, no. 10, pp. 1043-1046, 2002.
- [Dery02ii] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller et Ph. Avouris, « Controlling doping and carrier injection in carbon nanotube transistors », Applied Physics Letters, vol. 80, no. 15, pp. 2773-2775, 2002.
- [Desh06] V. V. Deshpande, H.-Y. Chiu, H. W. Ch. Postma, C. Mikó, L. Forró et M. Bockrath, « Carbon nanotube linear bearing nanoswitches », Nano Letters, vol. 6, no. 6, pp. 1092-1095, 2006.
- [Endo75] M. Endo, « Mécanisme de croissance en phase vapeur de fibres de carbone », Thèse de doctorat, soutenue en 1975, laboratoire Marcel Mathieu, Université d'Orléans, 1975.
- [Endo95] M. Endo, K. Takeuchi, K. Kobori, K. Takahashi, H. W. Kroto et A. Sarkar, « Pyrolytic carbon nanotubes from vapor-grown carbon fibers », Carbon, vol. 33, no. 7, pp. 873-881, 1995.
- [Esaw07] A. M. K. Esawi et M. M. Farag, « Carbon nanotube reinforced composites: Potential and current challenges », Materials and Design, vol. 28, no. 9, pp. 2394-2401, 2007.
- [Ferr97] D. K. Ferry et S. M. Goodnick, « Transport in nanostructures », Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering, vol. 6, Cambridge University Press, 1997.
- [Frég07] S. Frégonèse, Y. Zhuang et J. N. Burghartz, « Modeling of Strained CMOS on Disposable SiGe Dots: strain impacts on devices' electrical characteristics », IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 54, no. 9, pp. 2321-2326, 2007.
- [Frég08] S. Frégonèse, H. Cazin d'Honinchtun, J. Goguet, C. Maneux, T. Zimmer, J.-P. Bourgoin, P. Dollfus et S. Galdin-Retailleau, « Computationally efficient physics-based compact CNTFET model for circuit design », IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 55, no. 6, pp. 1317-1327, 2008.
- [Frég09] S. Frégonèse, J. Goguet, C. Maneux et T. Zimmer, « Implementation of electron-phonon scattering in a CNTFET compact model », IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 56, no. 6, pp. 1184-1190, 2009.
- [Freh05] F. Frehill, M. in het Panhuis, N. A. Young, W. Henry, J. Hjelm et J. G. Vos, « Microscopy and spectroscopy of interactions between metallopolymers and carbon nanotubes », Journal of Physical Chemistry B, vol. 109, no. 27, pp. 13205-13209, 2005.

- [Frei03] M. Freitag, Y. Martin, J. A. Misewich, R. Martel et P. Avouris, « Photoconductivity of single carbon nanotubes », *Nano Letters*, vol. 3, no. 8, pp. 1067-1071, 2003.
- [Gogu08] J. Goguet, S. Frégonèse, C. Maneux et T. Zimmer, « A charge approach for a compact model of dual gate CNTFET », *International Conference on Design and Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era, DTIS'08*, Tozeur, Tunisie, 26-28 Mars 2008, no. 4540246, 2008.
- [Goya05] A. Goyal, S. Tadigadapa, A. Gupta et P. C. Eklund, « Use of single-walled carbon nanotubes to increase the quality factor of an AT-cut micromachined quartz resonator », *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 20, no. 204102, pp. 204102-1-204102-3, 2005.
- [Grad94] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzshik, « *Table of Integrals, Series, and Products* », 5^{ième} édition, Academic Press, 1994, ch. 3, p. 363, équation 3.365.2.
- [Grad00i] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzshik, « *Table of Integrals, Series, and Products* », 6^{ième} édition, Academic Press, 2000, ch. 2, p. 98, équations 2.271.7, 2.272.3 et 2.272.7.
- [Grad00ii] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzshik, « *Table of Integrals, Series, and Products* », 6^{ième} édition, Academic Press, 2000, ch. 2, p. 104, équation 2.313.1.
- [Grad00iii] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzshik, « *Table of Integrals, Series, and Products* », 6^{ième} édition, Academic Press, 2000, ch. 2, p. 104, équations 2.322.1 et 2.322.2.
- [Guo02] J. Guo, M. Lundstrom et S. Datta, « Performance projections for ballistic carbon nanotube field-effect transistors », *Applied Physics Letters*, vol. 80, no. 17, pp. 3192-3194, 2002.
- [Hasa06] S. Hasan, S. Salahuddin, M. Vaidyanathan et M. A. Alam, « High-frequency performances projections for ballistic carbon-nanotube transistors », *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 5, no.1, pp. 14-22, 2006.
- [Hein02] S. Heinze, J. Tersoff, R. Martel, V. Derycke, J. Appenzeller et P. Avouris, « Carbon nanotubes as Schottky barrier transistors », *Physical Review Letters*, vol. 89, no. 10, no. 106801, pp. 106801-1-106801-4, 2002.
- [Hein05] S. Heinze, N.-P. Wang et J. Tersoff, « Electromigration forces on ions in carbon nanotubes », *Physical Review Letters*, vol. 95, no. 18, pp. 1-4, 2005.
- [Hein06] S. Heinze, J. Tersoff et P. Avouris, « Carbon nanotube electronics and optoelectronics », *Lecture Notes in Physics*, vol. 680, pp. 381-409, 2006.
- [Hill58] M. Hillert et N. Lange, « The structure of graphite filaments », *Zeitschrift für Kristallographie*, vol. 111, pp. 24-34, 1958.
- [Hu06] X. J. Hu, A. A. Padilla, J. Xu, et T. S. Fisher et K. E. Goodson, « 3-omega measurements of vertically oriented carbon nanotubes on silicon », *Journal of Heat Transfer*, vol. 128, no. 11, pp. 1109-1113, 2006.

- [Huan04] S. Huang, M. Woodson, R. Smalley et J. Liu, « Growth mechanism of oriented long single walled carbon nanotubes using "fast-heating" chemical vapor deposition process », *Nano Letters*, vol. 4, no. 6, pp. 1025-1028, 2004.
- [Hugh1889] T.V. Hughes et C.R. Chambers, « Manufacture of carbon filaments », US Patent no. 405480, 1889.
- [Iiji91] S. Iijima, « Helical microtubules of graphitic carbon », *Nature*, vol. 354, no. 6348, pp. 56-58, 1991.
- [Iiji93] S. Iijima et T. Ichihashi, « Single-shell carbon nanotubes of 1 nm diameter », *Nature*, vol. 363, no. 6430, pp. 603-605, 1993.
- [ITRS05_06] International Technology Roadmap for Semiconductors, 2005 et mise à jour 2006.
- [Jaco89] C. Jacoboni et P. Lugli, « The Monte Carlo method for semiconductor device simulation », Springer-Verlag, 1989.
- [Jang05] J. E. Jang, S. N. Cha, Y. Choi, G. A. J. Amaratunga, D. J. Kang, D. G. Hasko, J. E. Jung et J. M. Kim, « Nanoelectromechanical switches with vertically aligned carbon nanotubes », *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 16, no. 163114, pp. 163114-1-163114-3, 2005.
- [Jave02] A. Javey, H. Kim, M. Brink, Q. Wang, A. Ural, J. Guo, P. McIntyre, P. McEuen, M. Lundstrom et H. Dai, « High- κ dielectrics for advanced carbon-nanotube transistors and logic gates », *Nature Materials*, vol. 1, no. 4, pp. 241-246, 2002.
- [Jave03i] A. Javey, Q. Wang, W. Kim et H. Dai, « Advancements in complementary carbon nanotube field-effect transistors », *Technical Digest - International Electron Devices Meeting, IEDM 2003, Washington DC, USA, 8-10 Décembre 2003*, pp. 741-744, 2003.
- [Jave03ii] A. Javey, J. Guo, Q. Wang, M. Lundstrom et H. Dai, « Ballistic carbon nanotube field-effect transistors », *Nature*, vol. 424, no. 6949, pp. 654-657, 2003.
- [Jave04] A. Javey, J. Guo, D. B. Farmer, Q. Wang, D. Wang, R. G. Gordon, M. Lundstrom et H. Dai, « Carbon nanotube field-effect transistors with integrated ohmic contacts and high- κ gate dielectrics », *Nano Letters*, vol. 4, no. 3, pp. 447-450, 2004.
- [Jave05] A. Javey, R. Tu, D. B. Farmer, J. Guo, R. G. Gordon et H. Dai, « High performance n-type carbon nanotube field-effect transistors with chemically doped contacts », *Nano Letters*, vol. 5, no. 2, pp. 345-348, 2005.
- [Jeon05] G. H. Jeong, A. Yamazaki, S. Susuki, H. Yoshimura, Y. Kobayashi et Y. Homma, « Cobalt-filled apoferritin for suspended single-walled carbon nanotube growth with narrow diameter distribution », *Journal of the American Chemical Society*, vol. 127, no. 23, pp. 8238-8239, 2005.
- [Jish94] R. A. Jishi, D. Inomata, K. Nakao, M. S. Dresselhaus et G. Dresselhaus, « Electronic and lattice properties of carbon nanotubes », *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 63, no. 6, pp. 2252-2260, 1994.

- [John04] D. L. John, L. C. Castro et D. L. Pulfrey, « Quantum capacitance in nanoscale device modeling », *Journal of Applied Physics*, vol. 96, no. 9, pp. 5180-5184, 2004.
- [Jori08] A. Jorio, M. S. Dresselhaus et G. Dresselhaus, « Carbon nanotubes: advanced topics in the synthesis, structure, properties, and applications », *Topics in Applied Physics*, vol. 111, Springer, 2008.
- [Kane98] C. L. Kane, E. J. Mele, R. S. Lee, J. E. Fischer, P. Petit, H. Dai, A. Thess, R. E. Smalley, A. R. M. Verschueren, S. J. Tans et C. Dekker, « Temperature-dependent resistivity of single-wall carbon nanotubes », *Europhysics Letters*, vol. 41, no. 6, pp. 683-688, 1998.
- [Kim08] H.-S. Kim, E.-K. Jeon, J.-J. Kim, H.-M. So, H. Chang, J.-O Lee et N. Park, « Air-stable n-type operation of Gd-contacted carbon nanotube field effect transistors », *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 12, no. 123106, pp. 123106-1-123106-3, 2008.
- [Lee06] M. Lee, J. Im, B.Y. Lee, S. Myung, J. Kang, L. Huang, Y.-K. Kwon et S. Hong, « Linker-free directed assembly of high-performance integrated devices based on nanotubes and nanowires », *Nature nanotechnology*, vol. 1, no. 1, pp. 66-71, 2006.
- [Léon99] F. Léonard et J. Tersoff, « Novel length scales in nanotube devices », *Physical Review Letters*, vol. 83, no. 24, pp. 5174-5177, 1999.
- [Léon00] F. Léonard et J. Tersoff, « Role of Fermi-level pinning in nanotube Schottky diodes », *Physical Review Letters*, vol. 84, no. 20, pp. 4693-4696, 2000.
- [Li03] C. Li et T.-W. Chou, « Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators », *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 68, no. 7, no. 073405, pp. 073405-1-073405-3, 2003.
- [Li08] C. Li, E. T. Thostenson et T.-W. Chou, « Sensors and actuators based on carbon nanotubes and their composites: A review », *Composites Science and Technology*, vol. 68, no. 6, pp. 1227-1249, 2008.
- [Liao08] S.-Y. Liao, C. Maneux, S. Frégonèse et T. Zimmer, « Toward compact model of optical-gated carbon nanotube field effect transistor (OG-CNTFET) », *Journées Nationales sur les Technologies Émergentes en Micro-nanofabrication, JNTE 08*, Toulouse, France, 19-21 novembre 2008, We-M11, 2008.
- [Liao09] S.-Y. Liao, C. Maneux, V. Pouget, S. Frégonèse et T. Zimmer, « Compact modeling of optically gated carbon nanotube field effect transistor », *Trends in NanoTechnology, TNT 2009*, Barcelone, Espagne, 7-11 septembre 2009.
- [Lin04] Y.-M. Lin, J. Appenzeller et P. Avouris, « Ambipolar to unipolar conversion of carbon nanotube transistors by gate structure engineering », *Nano Letters*, vol. 4, no. 5, pp. 947-950, 2004.
- [Lin05] Y.-M. Lin, J. Appenzeller, J. Knoch et P. Avouris, « High-performance carbon nanotube field-effect transistor with tunable polarities », *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 4, no. 5, pp. 481-489, 2005.

- [Lin08] J.-H. Lin, C.-S. Chen, H.-L. Ma, C.-W. Chang, C.-Y. Hsu et H.-W. Chen, « Self-assembling of multi-walled carbon nanotubes on a porous carbon surface by catalyst-free chemical vapor deposition », *Carbon*, vol. 46, no. 12, pp. 1619-1623, 2008.
- [Lois00] A. Loiseau, « Les nanotubes, matériau du futur », Conférence de l'Université de tous les savoirs, Conservatoire National des Arts et Métiers, Paris, France, 12 Octobre 2000, site : « www.onera.fr/conferences/nanotubes/ », 2000.
- [Lund06] M. Lundstrom et J. Guo, « Nanoscale transistors », Springer, 2006.
- [Luo07] D. Luo, W.-X. Wang et Y. Takao, « Effects of the distribution and geometry of carbon nanotubes on the macroscopic stiffness and microscopic stresses of nanocomposites », *Composites Science and Technology*, vol. 67, no. 14, pp. 2947-2958, 2007.
- [Mach05] M. Machón, S. Reich, H. Telg, J. Maultzsch, P. Ordejón et C. Thomsen, « Strength of radial breathing mode in single-walled carbon nanotubes », *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 71, no. 3, no. 035416, pp. 035416-1-035416-4, 2003.
- [Maki06] H. Maki, K. Ishibashi et T. Sato, « Electron and hole injection into single-walled carbon nanotubes by using electrode metals with small and large work function », 7th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, NANOTUBE 2006, NT'06, Nagano, Japon, 18-23 Juin 2006, p. 404, contribution G.006, 2006.
- [Mane06] C. Maneux, J. Goguet, S. Frégonèse, T. Zimmer, H. Cazin d'Honinethun et S. Galdin-Retailleau, « Analysis of CNTFET physical compact model », International Conference on Design and Technology of Integrated Systems in Nanoscale Technology, DTIS'06, Tunis, Tunisie, 5-7 Septembre 2006, pp. 40-45, 2006.
- [Mart98] R. Martel, T. Schmidt, H. R. Shea, T. Hertel et P. Avouris, « Single- and multi-wall carbon nanotube field-effect transistors », *Applied Physics Letters*, vol. 73, no. 17, pp. 2447-2449, 1998.
- [Meng05] H. Meng, J. Wang et J.-P. Wang, « A Spintronics Full Adder for Magnetic CPU », *IEEE Electron Device Letters*, vol. 26, no. 6, pp. 360-362, 2005.
- [Merk00] V. I. Merkulov, D. H. Lowndes, Y. Y. Wei, G. Eres et E. Voelkl, « Patterned growth of individual and multiple vertically aligned carbon nanofibers », *Applied Physics Letters*, vol. 76, no. 24, pp. 3555-3557, 2000.
- [Mint95] J. W. Mintmire et C. T. White, « Electronic and structural properties of carbon nanotubes », *Carbon*, vol. 33, no. 7, pp. 893-902, 1995.
- [Mint98] J. W. Mintmire et C. T. White, « Universal density of states for carbon nanotubes », *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 12, pp. 2506-2509, 1998.
- [Mont06] M. Monthieux et V. L. Kuznetsov, « Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes? », *Carbon*, vol. 44, no. 9, pp. 1621-1623, 2006.

- [Naja09] M. Najari, C. Maneux, T. Zimmer, H. Mnif et N. Masmoudi, « Efficient physics-based compact Schottky barrier carbon nanotube FET », Trends in NanoTechnology, TNT 2009, Barcelone, Espagne, 7-11 septembre 2009.
- [Ober76] A. Oberlin, M. Endo et T. Koyama, « Filamentous growth of carbon through benzene decomposition », Journal of Crystal Growth, vol. 32, no. 3, pp. 335-49, 1976.
- [O'Con07] I. O'Connor, J. Liu, F. Gaffiot, F. Prégaldiny, C. Lallement, C. Maneux, J. Goguet, S. Frégonèse, T. Zimmer, L. Anghel, T.-T. Dang et R. Leveugle, « CNTFET modeling and reconfigurable logic circuit design », IEEE Transactions on Circuits And Systems I: Regular papers, vol. 54, no. 11, pp. 2365-2379, 2007.
- [Odom98] T. W. Odom, J.-L. Huang, P. Kim et C. M. Lieber, « Atomic structure and electronic properties of single-walled carbon nanotubes », Nature, vol. 391, no. 6662, pp. 62-64, 1998.
- [Ohna05] H. Ohnaka, Y. Kojima, S. Kishimoto, Y. Ohno et T. Mizutani, « Fabrication of CNT-FETs using PECVD-grown nanotubes », 2005 International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Tokyo, Japon, 25-28 Octobre 2005, vol. 2005, no. 1595327, pp. 288-289, 2005.
- [Paul06] B. C. Paul, S. Fujita, M. Okajima et T. Lee, « Modeling and analysis of circuit performance of ballistic CNFET », Proceedings of the 43rd annual conference on Design automation, 43rd DAC, San Francisco, États-Unis, 24-26 Juillet 2006, pp. 717-722, 2006.
- [Pear05] S. J. Pearton, D. P. Norton, R. Frazier, S. Y. Han, C. R. Abernathy et J. M. Zavada, « Spintronics Device Concepts », IEE Proceedings - Circuits, Devices and Systems, vol. 152, no. 4, pp. 312-322, 2005.
- [Péla1903] C. Pélabon et H. Pélabon, « Sur une variété de carbone filamenteux », Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences Paris, tome 137, pp. 706-708, 1903.
- [Penn03] G. Pennington et N. Goldsman, « Semiclassical transport and phonon scattering of electrons in semiconducting carbon nanotubes », Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, vol. 68, no. 4, no. 045426, pp. 045426-1-045426-11, 2003.
- [Pime98] M. A. Pimenta, A. Marucci, S. A. Empedocles, M. G. Bawendi, E. B. Hanlon, A. M. Rao, P. C. Eklund, R. E. Smalley, G. Dresselhaus et M. S. Dresselhaus, « Raman modes of metallic carbon nanotubes », Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, vol. 58, no. 24, pp. R16016-R16019, 1998.
- [Plan05] N. O. V. Plank, G. A. Forrest, R. Cheung et A. J. Alexander, « Electronic properties of n-type carbon nanotubes prepared by CF₄ plasma fluorination and amino functionalization », Journal of Physical Chemistry B, vol. 109, no. 47, pp. 22096-22101, 2005.

- [Pop06] E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson et H. Dai, « Thermal conductance of an individual single-wall carbon nanotube above room temperature », *Nano Letters*, vol. 6, no. 1, pp. 96-100, 2006.
- [Popo04] V. N. Popov et L. Henrard, « Comparative study of the optical properties of single-walled carbon nanotubes within orthogonal and nonorthogonal tight-binding models », *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 70, no. 11, no. 115407, pp. 115407-1-115407-12, 2004.
- [Pour05] M. Pourfath, E. Ungersboeck, A. Gehring, B. H. Cheong, W. J. Park, H. Kosina et S. Selberherr, « Optimization of Schottky barrier carbon nanotube field effect transistors », *Microelectronic Engineering*, vol. 81, no. 2-4, pp. 428-433, 2005.
- [Qiu05] X. Qiu, M. Freitag, V. Perebeinos et P. Avouris, « Photoconductivity spectra of single-carbon nanotubes: Implications on the nature of their excited states », *Nano Letters*, vol. 5, no. 4, pp. 749-752, 2005.
- [Quei06] P. Queipoa, A. G. Nasibulina, D. Gonzalez, U. Tapperb, H. Jiangb, T. Tsunetac, K. Grigorasd, J. A. Dueñase et E. I. Kauppinen, « Novel catalyst particle production method for CVD growth of single- and double-walled carbon nanotubes », *Carbon*, vol. 44, no. 8, pp. 1604-1608, 2006.
- [Radu52] L.V. Radushkevich et V.M. Lukyanovich, « About the carbon structure, thermal CO decomposition on metal contact synthesized », *Journal of Physical Chemistry*, vol. 26, no. 1, pp. 88-95, 1952.
disponible en russe à : <http://carbon.phys.msu.ru/publications/1952-radushkevich-lukyanovich.pdf>
- [Rafa00] P. M. Rafailov, H. Jantoljak et C. Thomsen, « Electronic transitions in single-walled carbon nanotubes: A resonance Raman study », *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 61, no. 23, pp. 16179-16182, 2000.
- [Rahm03] A. Rahman, J. Guo, S. Datta et M. Lundstrom, « Theory of ballistic nanotransistors », *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 50, no. 9, pp. 1853-1864, 2003.
- [Rani05] R. Ranica, A. Villaret, P. Mazoyer, S. Monfray, D. Chanemougame, P. Masson, A. Regnier, C. N. Dray, R. Bez et T. Skotnicki, « A new 40-nm SONOS structure based on backside trapping for nanoscale memories », *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 4, no. 5, pp. 581-587, 2005.
- [Rayc04] A. Raychowdhury, S. Mukhopadhyay et K. Roy, « A circuit-compatible model of ballistic carbon nanotube field-effect transistors », *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 23, no. 10, pp. 1411-1420, 2004.
- [Reib06] M. Reibold, P. Paufler, A. A. Levin, W. Kochmann, N. Patzke et D. C. Meyer, « Materials: Carbon nanotubes in an ancient Damascus sabre », *Nature*, vol. 444, no. 7117, pp. 286, 2006.

- [Reic02] S. Reich, C. Thomsen et P. Ordejón, « Electronic band structure of isolated and bundled carbon nanotubes », *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 65, no. 15, no. 155411, pp. 155411-1-155411-11, 2002.
- [Risp08] L. Rispal et U. Schwalke, « Structural and electrical characterization of carbon nanotube field-effect transistors fabricated by novel self-aligned growth method », *International Conference on Design and Technology of Integrated Systems in Nanoscale Era, DTIS'08*, Tozeur, Tunisie, 26-28 Mars 2008, no. 4540244, 2008.
- [Robe08] G. Robert, V. Derycke, M. F. Goffman, S. Lenfant, D. Vuillaume et J.-P. Bourgoïn, « Self-assembled molecular monolayers as ultrathin gate dielectric in carbon nanotube transistors », *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 14, no. 143117, pp. 143117-1-143117-3, 2008.
- [Roch07] C. G. Rocha, A. Wall, A. R. Rocha et M. S. Ferreira, « Modeling the effect of dispersed doping agents in carbon nanotubes », *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 7, no. 10, pp. 3446-3449, 2007.
- [Ruec00] T. Rueckes, K. Kim, E. Joselevich, G. Y. Tseng, C.-L. Cheung et C. M. Lieber, « Carbon nanotube-based nonvolatile random access memory for molecular computing », *Science*, vol. 289, no. 5476, pp. 94-97, 2000.
- [Sait98] R. Saito, G. Dresselhaus et M. S. Dresselhaus, « Physical properties of carbon nanotubes », Imperial College Press, 1998.
- [Sang04] W.L. Sang, S.L. Dong, R.E. Morjan, H.J. Sung, M. Sveningsson, O.A. Nerushev, W.P. Yung et E.E.B. Campbell, « A three-terminal carbon nanorelay », *Nano Letters*, vol. 4, no. 10, pp. 2027-2030, 2004.
- [Sasa08] K.-I. Sasaki, R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, H. Farhat et J. Kong, « Curvature-induced optical phonon frequency shift in metallic carbon nanotubes », *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 77, no. 24, no. 245441, pp. 245441-1-245441-8, 2008.
- [Schü1890] P. Schützenberger et L. Schützenberger, « Sur quelques faits relatifs à l'histoire du carbone », *Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences Paris*, tome 111, pp. 774-778, 1890.
- [Schn08] J. J. Schneider, N. I. Maksimova, J. Engstler, R. Joshi, R. Schierholz et R. Feile, « Catalyst free growth of a carbon nanotube-alumina composite structure », *Inorganica Chimica Acta*, vol. 361, no. 6, pp. 1770-1778, 2008.
- [Seid04] R. V. Seidel, A. P. Graham, G. S. Duesberg, M. Liebau, E. Unger, F. Kreupl et W. Hoenlein, « Faster and smaller with carbon nanotubes? », *Conference proceedings of GAAS 2004*, Amsterdam, Pays-Bas, 10-15 Octobre 2004, pp. 5-8, 2004.
- [Shis06] J. Shishido, T. Izumida, R. Hatakeyama et W. Oohara, « Electronic transport properties of single-walled carbon nanotubes modified by alkali-metal encapsulation via a plasma ion irradiation method », *7th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, NANOTUBE 2006, NT'06*, Nagano, Japon, 18-23 Juin 2006, p. 412, contribution G.014, 2006.

- [Tana05] M. Tanaka, « Spintronics: recent progress and tomorrow's challenges », *Journal of Crystal Growth*, vol. 278, no. 1-4, pp. 25-37, 2005 ; présenté lors de : 13th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Edinbourg, Royaume-Uni, 22-27 août 2004.
- [Tans97] S. J. Tans, M. H. Devoret, H. Dai, A. Thess, R. E. Smalley, L. J. Geerligs et C. Dekker, « Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires », *Nature*, vol. 386, no. 6624, pp. 474-477, 1997.
- [Tans98] S. J. Tans, A. R. M. Verschueren et C. Dekker, « Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube », *Nature*, vol. 393, no. 6680, pp. 49-52, 1998.
- [Teo04] K. B. K. Teo, R. G. Lacerda, M. H. Yang, A. S. Teh, L. A. W. Robinson, S. H. Dalal, N. L. Rupesinghe, M. Chhowalla, S. B. Lee, D. A. Jefferson, D. G. Hasko, G. A. J. Amaratunga, W. L. Milne, P. Legagneux, L. Gangloff, E. Minoux, J. P. Schnell et D. Pribat, « Carbon nanotube technology for solid state and vacuum electronics », *IEE Proceedings: Circuits, Devices and Systems*, vol. 151, no. 5, pp. 443-451, 2004.
- [Thos05] E. T. Thostenson, C. Li et T.-W. Chou, « Nanocomposites in context », *Composites Science and Technology*, vol. 65, no. 3-4, pp. 491-516, 2005.
- [Tsen04] Y.-C. Tseng, P. Xuan, A. Javey, R. Malloy, Q. Wang, J. Bokor et H. Dai, « Monolithic integration of carbon nanotube devices with silicon MOS technology », *Nano Letters*, vol. 4, no. 1, pp. 123-127, 2004.
- [Tsen06] Y.-C. Tseng, K. Phoa, D. Carlton et J. Bokor, « Effect of diameter variation in a large set of carbon nanotube transistors », *Nano Letters*, vol. 6, no. 7, pp. 1364-1368, 2006.
- [Umem01] K. Umemura, J. Komatsu, T. Uchihashi, N. Choi, S. Ikawa, T. Nishinaka, T. Shibata, Y. Nakayama, S. Katsura, A. Mizuno, H. Tokumoto, M. Ishikawa et R. Kuroda, « Atomic force microscopy of RecA-DNA complexes using a carbon nanotube tip », *Biochemical and Biophysical Research Communications*, vol. 281, no. 2, pp. 390-395, 2001.
- [Vene99] L. C. Venema, J. W. G. Wildöer, J. W. Janssen, S. J. Tans, H. L. J. Temminck Tuinstra, L. P. Kouwenhoven et C. Dekker, « Imaging Electron Wave Functions of Quantized Energy Levels in Carbon Nanotubes », *Science*, vol. 283, no. 5398, pp. 52-55, 1999.
- [Whit05] C. T. White et J. W. Mintmire, « Fundamental properties of single-wall carbon nanotubes », *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 109, no. 1, pp. 52-65, 2005.
- [Whit98] C. T. White et J. W. Mintmire, « Density of states reflects diameter in nanotubes », *Nature*, vol. 394, no. 6688, pp. 29-30, 1998.
- [Wild98] J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley et C. Dekker, « Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes », *Nature*, vol. 391, no. 6662, pp. 59-62, 1998.

- [Wind02] S. J. Wind, J. Appenzeller, R. Martel, V. Derycke et P. Avouris, « Vertical scaling of carbon nanotube field-effect transistors using top gate electrodes », *Applied Physics Letters*, vol. 80, no. 20, pp. 3817-3819, 2002.
- [Wind03] S. J. Wind, J. Appenzeller et P. Avouris, « Lateral scaling in carbon nanotube field-effect transistors », *Physical Review Letters*, vol. 91, no. 5, no. 058301, pp. 058301-1-058301-4, 2003.
- [Yais04] Y. Yaish, J.-Y. Park, S. Rosenblatt, V. Sazonova, M. Brink et P. L. McEuen, « Electrical nanoprobng of semiconducting carbon nanotubes using an atomic force microscope », *Physical Review Letters*, vol. 92, no. 4, no. 046401, pp. 046401-1-046401-4, 2004.
- [Yoon06] Y. Yoon, Y. Ouyang et J. Guo, « Effect of phonon scattering on intrinsic delay and cutoff frequency of carbon nanotube FETs », *IEEE Transactions On Electron Devices*, vol. 53, no. 10, pp 2467-2470, 2006.
- [Zhou00] C. Zhou, J. Kong et H. Dai, « Electrical measurements of individual semiconducting single-walled carbon nanotubes of various diameters », *Applied Physics Letters*, vol. 76, no. 12, pp. 1597-1599, 2000.

Annexes

I. Code VerilogA du modèle du transistor à nanotube à modulation de hauteur de barrière : ACSOM

```
// Authors: Johnny Goguet & Sébastien Fregonese
// Affiliation: University Bordeaux 1, Laboratory IXL, France
// mail: johnny.goguet@ims-bordeaux.fr / sebastien.fregonese@ims-bordeaux.fr
// last modified: september, 6th, 2007

// Copyright University Bordeaux 1, 2006

// ACSOM Version 1.0.2
// Summary: This VerilogA program models the electrical characteristics of a
//          MOS-like CNTFET.
// The parameter Flag_N_or_P must be set to 1 to compute a N type CNTFET and
// must be 0 to choose a P CNTFET (the comments correspond to a N CNTFET).
// The CNTFET is realised with ohmic source and drain contacts.

// Key input parameters are: the chirality of the nanotube (n, m) or the
// diameter.
// The default values correspond to a (19,0) nanotube (diameter 1.4878 nm).

// The number of subbands is automatically adjusted to obtain an accuracy of 1%.
// It means, that additional subband contributions will not yield in a higher
// accuracy.

`include "constants.vams"
`include "disciplines.vams"

module acsom(d, g, s, sub);
inout d, g, s, sub;
electrical d, g, s;          // "external" ports
electrical di, si, gi;      // i for intrinsic
electrical cnt, sub, gix;
    // cnt for the channel potential, sub for the substrate potential, and gix
    // is the node between the flatband voltage and the serial gate
    // resistance.

parameter real P__Q = 1.6021918e-19;    // q : electron charge in Coulomb
parameter real P__H = 6.6260755e-34;   // h : Planck's constant in J.s
parameter real P__K = 1.3806226e-23;   // k : Boltzmann's constant in J/K
parameter real M__PI = 3.14159265358979323846; // value of PI
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
parameter integer Flag_N_or_P = 1 from [0:1]; // Flag_N_or_P = 1 -> N type
// Flag_N_or_P = 0 -> P type
real sign; // Used for P or N type device

parameter real T = 300.0 from [4:500]; // temperature in K
parameter real kBT = P_K*T/P_Q;
// Boltzmann's constant * temperature / q (approximately 25mV @ 300K)

parameter real sbbd_contribution = 0.01;
// maximum contribution of the highest subband taken into account
parameter integer NB = 7 from [2:20];
// number of subbands taken into account

// !!! if NB is too small, some non-negligible subband contributions
// will not be considered and the result will be false !!!

parameter real sbbd_metal = 10;
// This value will be allocated to all subbands if the nanotube is
// metallic.
parameter real sbbd_too_small = 10.5;
// This value will be allocated to the first subbands if the nanotube is
// too small.

parameter real L = 100e-9 from [15e-9:300e-9];
// Nanotube length (used for total charge /capacitance calculation) in m.
parameter real RD = 17k; // serial drain resistance in ohms
parameter real RS = 23k; // serial source resistance in ohms
parameter real RG = 10; // serial gate resistance in ohms
parameter real VFB = -40e-3; // gate flatband voltage in V

real sbbd[1:NB]; // The 7 first subbands will be calculated
real sum_Id; // receives the contributions of the NB
real pth_contrib; // current contribution of the pth subband
integer p_Id;
// for the computing of the current contribution of the pth subband

//----- parameters to compute the first "NB" subbands minima -----

parameter integer Flag_model_sbbd = 1 from [0:1];
// Flag_model_sbbd = 0 -> approximative model based on diameter
// Flag_model_sbbd = 1 -> more accurate model based on chirality
parameter integer n = 19; // n and m define the
parameter integer m = 0; // chirality vector
parameter real diameter = 1.4878e-9 from [0.4e-9:4e-9];
// carbon nanotube diameter in m

parameter real a = 2.46e-10;
// distance between 2 nearest non-neighbour carbon atoms in m
parameter real t = -3.033; // covering factor in eV
parameter real num_delta1 = -t*a/sqrt(3);
// used for subband computation with diameter model in eV/m

parameter real a1 [0:1] = {sqrt(3)*a/2, a/2}; // base vector a1
parameter real a2 [0:1] = {sqrt(3)*a/2, -a/2}; // base vector a2
parameter real a3 [0:1] = {0, a};
// This vector is the difference between a1 and a2
parameter real b1 [0:1] = {2*M_PI/(sqrt(3)*a), 2*M_PI/a};
// reciprocal space base vector b1
parameter real b2 [0:1] = {2*M_PI/(sqrt(3)*a), -2*M_PI/a};
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
// reciprocal space base vector b2

real x, y, remainder;           // variables to compute a gcd
real gcd_sc_OR_m;              // gcd=3 => metal, gcd!=3 => semiconductor
real dr;                       // gcd between 2*n+m and 2*m+n
real Ncell;
    // number of cell units of graphene in the nanotube
real t1, t2;
    // definition of the base vectors of the translation vector
real K1[0:1], K2[0:1];         // reciprocal space vectors
integer i, j;
    // i will be incremented to give a "high value" to all the subbands in a
    // FOR loop
    // i and j are used to rank the subband minima in a double FOR loop
integer k_quant;
    // will be incremented in the FOR loop to take into account the k
    // quantification
real r;                         // r=0 defines the subband minima
real k[0:1];                   // wave vector
real E2;                       // E2 : bottom of the subband in the Conduction Band in eV
integer max_bd;
    // The maximum of subbands to be taken into account equals the minimum
    // between NB and Ncell

integer class_OK;              // Subband minima ranking flag

//----- parameters to compute the capacitance -----
parameter real CI = 100e-12 from [1e-12:1e-9];
    // physical gate capacitance in F/m
parameter real CDE = 1e-19;    // electrostatic drain capacitance in F
parameter real CSE = 1e-19;    // electrostatic source capacitance in F
real capa;                    // is the lumped sum of CSE, CDE, and CI
parameter real CSUB = 0.4e-18;
    // substrate-source capacitance in F, the default value corresponds to:
    // SiO2 thickness 100 nm, electrode surface 20 nm * 20 nm

//----- parameters to compute the charge -----

integer p;
    // loop variable used for charge contribution computing of the pth subband

real pth_dens_S;
    // normalised lineic charge density contribution from source of the pth
    // subband (multiplied by 2)
real pth_dens_D;
    // normalised lineic charge density contribution from drain of the pth
    // subband (multiplied by 2)
real pth_dens_null_bias;
    // normalised lineic charge density contribution from source and drain of
    // the pth subband without bias
real dens_S;
    // normalised lineic charge density from source (multiplied by 2)
real dens_D;
    // normalised lineic charge density from drain (multiplied by 2)
real dens_null_bias;
    // normalised lineic charge density from source and drain without bias

real charge_source;           // electron charge coming from source
```


Annexes : code verilogA de ACSOM

```
real charge_drain;           // electron charge coming from drain
real charge_null_bias;      // electron charge without bias
parameter real sbbd_charge = 0.01;
    // maximum charge contribution of the highest subband taken into account

parameter real ch_smooth_factor = 1.3;
    // aligns the 2 functions describing the lineic charge density
parameter real ch_offset = 0.05;           // shifts the overlap point
parameter real ch_alpha = 0.33;
    // allows an approximation on the DOS when (Vdisi - Vcnt + sbbd[i] -
    // offset) is negative
parameter real ch_epsilon1 = 1E-5;        // avoids a null denominator
parameter real ch_epsilon2 = 1E-15;      // avoids null square roots
parameter real ch_b = 1.42E-10;         // carbon-carbon distance in m
parameter real ch_Vpppi = - t;
    // C-C bonding energy (= - covering factor) en eV
parameter real ch_norm_factor = (8/(3*M__PI*ch_b*ch_Vpppi))*P__Q ;

//----- function to compute the lineic charge density -----
----

analog function real lin_dens_norm;
    // compute the normalised lineic charge density

    input ch_V, sbbd, kBT, M__PI, ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha,
ch_epsilon1, ch_epsilon2;

    //--- function input variables (already defined parameters) ---
    real kBT;
    real M__PI;
    real ch_smooth_factor;
    real ch_offset;
    real ch_alpha;
    real ch_epsilon1;
    real ch_epsilon2;
    //-----

    real ch_V;           // Vsi-Vcnt (Vdi-Vcnt), source (drain) barrier height
    real sbbd;           // bottom of the considered subband
    real ch_a0;          // first term of the development of the Fermi function
    real ch_a1;          // second term of the development of the Fermi function
    real ch_fs;         // smoothing function
    real ch_funct_high_Vdisi;
        // solution of the charge integral for (V + sbbd - offset) positive
    real ch_delta;      // intermediate bound to solve the integral
    real ch_funct_high_Vcnt_main;
        // solution of the charge integral for (V + sbbd - offset) negative
        // and for sbbd<E<ch_delta
    real ch_funct_high_Vcnt_sec;
        // solution of the charge integral for (V + sbbd - offset) negative
        // and for ch_delta<E<infinity

begin
    ch_a0 = 1/(1+exp((sbbd+ch_V)/kBT));
    ch_a1 = -exp((sbbd+ch_V)/kBT)*ch_a0*ch_a0/kBT;

    ch_delta = - ch_V - kBT*ln(ch_a0);

    ch_funct_high_Vdisi = sqrt(M__PI*sbbd*kBT/2)*exp((-sbbd-ch_V)/kBT);
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
        ch_funct_high_Vcnt_main = (ch_a1*ch_delta/2+ch_a0-
ch_a1*sbbd)*sqrt(ch_epsilon2+ch_delta*ch_delta-sbbd*sbbd) +
0.5*ch_a1*sbbd*sbbd*(ln(ch_delta+sqrt(ch_epsilon2+ch_delta*ch_delta-sbbd*sbbd))-
ln(sbbd));

        ch_funct_high_Vcnt_sec =
ch_alpha*kBT*ch_delta*ch_a0/(ch_epsilon1+sqrt(ch_epsilon2+ch_delta*ch_delta-
sbbd*sbbd));

        ch_fs = 1/(1+exp(ch_smooth_factor*(ch_V+sbbd-ch_offset)/kBT));

        lin_dens_norm =
(ch_funct_high_Vcnt_main+ch_funct_high_Vcnt_sec)*ch_fs + ch_funct_high_Vdisi*(1-
ch_fs);

    end
endfunction

analog begin

//----- Initialisation -----

    @ ( initial_step ) begin

        //----- P or N CNT FET device selection -----
        sign=0;
        if (Flag_N_or_P == 0)          // P-CNTFET selected
            sign = -1;

        if (Flag_N_or_P == 1)          // N-CNTFET selected
            sign = 1;
        //-----

        //----- subband minima computation -----

        if (Flag_model_sbbd == 1) begin
// Subband computation based on chirality

            //----- gcd computation between n-m and 3 -----
            if (n>m)          //
                x = n-m;      // To be sure that x is positive
            else              //
                x = m-n;      //

            y = 3;

            remainder = 3;
// Not entering the WHILE loop means that n-m is a multiple of 3
// The nanotube is then metallic

            while ((x%y) != 0) begin          // Is the (new) remainder null ?
                remainder = x % y;
                x = y;                        // gcd(x;y) = gcd(y;(x%y))
                y = remainder;
            end

            gcd_sc_OR_m = remainder;
// The gcd is the last non-null remainder
//-----

            for (i=1;i<=NB;i=i+1)            // i is the number of the subband
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
        sbbd[i] = sbbd_metal;
// The subbands receive a "high value" to be sure that true values are saved
// The subbands will conserve that value if the nanotube is metallic

        if (gcd_sc_OR_m != 3) begin
// Is the nanotube semiconductor ?

        //----- Definition of intermediate variables -----

        //----- gcd computation for dr -----
        x = 2*n+m;
        y = 2*m+n;
        remainder = y;
// Not entering the WHILE loop means that x is a multiple of y
        while ((x%y)!=0) begin // Is the (new) remainder null ?
            remainder = x % y;
            x = y;           // gcd(x;y) = gcd(y;(x%y))
            y = remainder;
        end
// The gcd is the last non-null remainder
        //-----

        dr = remainder; // dr is the gcd of 2*n+m and 2*m+n
        Ncell=2*(n*n+m*m+n*m)/dr;
// number of graphene unit cells in this nanotube
        t1=(2*m+n)/dr;
// Definition of t1 for the translation vector
        t2=-(2*n+m)/dr;
// Definition of t2 for the translation vector
        K1[0]=(-t2*b1[0]+t1*b2[0])/Ncell;
        K1[1]=(-t2*b1[1]+t1*b2[1])/Ncell;
// Definition of the nanotube base vector K1
        K2[0]=(m*b1[0]-n*b2[0])/Ncell;
        K2[1]=(m*b1[1]-n*b2[1])/Ncell;
// Definition of the nanotube base vector K2, unused here because r=0
        //-----

        if (Ncell<7)
// If this condition is true, it means that the nanotube is too small and can
// not exist.
            for (i=1;i<Ncell;i=i+1)
// The first subbands receive then a "high" value.
                sbbd[i] = sbbd_too_small;
            else begin
                if (Ncell>NB)
// The computation for the subbands minima is limited to the minimum between NB
// and Ncell.
                    max_bd = NB;
                else
                    max_bd = Ncell;

//**--- Loop to take into account the quantification of k : each value of k
creates a subband ---**

        for (k_quant=0;k_quant+1<=(Ncell-1)/2;k_quant=k_quant+1) begin
            r=0; // to have the minimum of the subband
            k[0]=((r*K2[0])/sqrt(K2[0]*K2[0]+K2[1]*K2[1]))+k_quant*K1[0];
            k[1]=((r*K2[1])/sqrt(K2[0]*K2[0]+K2[1]*K2[1]))+k_quant*K1[1];
// definition of the vector k equivalent to k=((r.*K2)/norm(K2))+k_quant.*K1
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
E2=-t*sqrt(3 + 2*cos(k[0]*a3[0]+k[1]*a3[1])
+ 2*cos(k[0]*a1[0]+k[1]*a1[1])
+ 2*cos(k[0]*a2[0]+k[1]*a2[1]) );
// definition of the energy in the Conduction Band

//----- The lowest subband values are saved -----
if (E2<sbbd[max_bd]) begin
// Is this value small enough to be taken into account ?
// The number of cells could be much higher than the considered number of
// subbands. example: Ncell = 662 for a 10,11 tube. So this "if" optimizes the
// computation time.
class_OK = 0; // When class_OK = 1, the ranking is done.
for(i=1;(i<=max_bd)&&(class_OK==0);i=i+1)
// for all the subbands while the ranking is not done
if (E2<sbbd[i]) begin
// Is this value smaller than the actual ith subband ?
for (j=max_bd;j>=i+1;j=j-1)
// For the subband higher than the ith subband,
sbbd[j]=sbbd[j-1];
// the jth subband receives the value of the j-1th subband.
sbbd[i]=E2;
// At least, the ith subband receives the last calculated energy.
class_OK = 1; // The ranking is done.
end
end
end
//-----
end
//-*--- end "for" loop on k_quant---*-

end // end "else" corresponding to "if Ncell>7"
end // end "if" the nanotube is semiconductor

if (Flag_N_or_P==0)
for (p=1;p<=max_bd;p=p+1)
sbbd[p] = -sbbd[p];
// the positive subband minima of the conduction band become the negative
// subband maxima of the valence band for the P type
end // end "if" the model based on chirality is chosen

if (Flag_model_sbbd == 0) begin
// Subband computation based on diameter
max_bd = NB;
sbbd[1] = sign*num_delta/diameter;
for (p=2;p<=max_bd;p=p+1)
sbbd[p] = sbbd[1]*(6*p-3-pow(-1,p))/4;
//the pth subband minimum is function of delta and p is the subband number.
end

//-----

//----- Null bias charge -----
dens_null_bias = lin_dens_norm(0, sign*sbbd[1], kBT, M__PI,
ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);
pth_dens_null_bias = lin_dens_norm(0, sign*sbbd[2], kBT, M__PI,
ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);

for
(p=3;(pth_dens_null_bias>dens_null_bias*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
dens_null_bias = dens_null_bias + pth_dens_null_bias;
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
                pth_dens_null_bias = lin_dens_norm(0, sign*sbbd[p], kBT,
M__PI, ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);
                end

                charge_null_bias = -sign*ch_norm_factor*dens_null_bias*L;
//-----

        end

//----- end Initialisation -----

//----- lineic density computation of Source contribution -----
        dens_S = lin_dens_norm(sign*V(si, cnt), sign*sbbd[1], kBT, M__PI,
ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);
        pth_dens_S = lin_dens_norm(sign*V(si, cnt), sign*sbbd[2], kBT, M__PI,
ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);

        for (p=3;(pth_dens_S > dens_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                dens_S = dens_S + pth_dens_S;
                pth_dens_S = lin_dens_norm(sign*V(si, cnt), sign*sbbd[p], kBT,
M__PI, ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);
        end
//-----

//----- lineic density computation of Drain contribution -----

        dens_D = lin_dens_norm(sign*V(di, cnt), sign*sbbd[1], kBT, M__PI,
ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);
        pth_dens_D = lin_dens_norm(sign*V(di, cnt), sign*sbbd[2], kBT, M__PI,
ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);

        for (p=3;(pth_dens_D > dens_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                dens_D = dens_D + pth_dens_D;
                pth_dens_D = lin_dens_norm(sign*V(di, cnt), sign*sbbd[p], kBT,
M__PI, ch_smooth_factor, ch_offset, ch_alpha, ch_epsilon1, ch_epsilon2);
        end
//-----

        charge_source = -sign*ch_norm_factor*L*(dens_S)/2;
        charge_drain = -sign*ch_norm_factor*L*(dens_D)/2;

        sum_Id = 0; // reset
        pth_contrib = 1E-3; // reset

//----- FOR loop to add the current contribution of each subband -----
        for (p_Id=1;(pth_contrib > sum_Id*sbbd_contribution)&&(p_Id <=
max_bd);p_Id=p_Id+1) begin
                pth_contrib = ln(1+exp(sign*(V(cnt, si)-sbbd[p_Id])/kBT))
- ln(1+exp(sign*(V(cnt, di)-sbbd[p_Id])/kBT));
// The pth contribution is the difference between the pth source contribution
// and the pth drain contribution.
                sum_Id = sum_Id+pth_contrib;
// sum_Id is the sum of the contribution of the first pth subbands.
        end
//-----

        capa = L*CI + CDE + CSE;

// "assignments", Kirchhoff's law
```

Annexes : code verilogA de ACSOM

```
V(cnt, sub) <+ (V(gi, sub)*CI*L + V(si, sub)*CSE + V(di, sub)*CDE +
(charge_source+charge_drain-charge_null_bias)) / capa;
I(di, si) <+ sign*(4*P__Q*P__K*T/P__H)*sum_Id;
I(di, d) <+ V(di, d)/RD;
I(si, s) <+ V(si, s)/RS;
V(gix, gi) <+ sign*VFB;
I(g, gix) <+ V(g, gix)/RG;

// AC simulation
I(gi, cnt) <+ (L*CI) * ddt(V(gi, cnt));
I(si, cnt) <+ ddt(CSE*V(si, cnt) + charge_source);
I(di, cnt) <+ ddt(CDE*V(di, cnt) + charge_drain);

I(s, sub) <+ CSUB*ddt(V(s, sub));

end

endmodule
```

II. Code VerilogA du modèle du transistor à nanotube double grille DG-CNFET

```
// Authors: Johnny Goguet & Sébastien Fregonese
// Affiliation: University Bordeaux 1, Laboratory IMS, France
// mail: johnny.goguet@ims-bordeaux.fr / sebastien.fregonese@ims-bordeaux.fr
// last modified: december, 3rd, 2009

// Copyright University Bordeaux 1, 2009

// DG CNTFET Version 1.0.0
// Summary: This VerilogA program models the electrical characteristics of a
// Dual Gate CNTFET.

// Key input parameters are: the chirality of the nanotube (n, m) or the
// diameter.
// The default values correspond to a (19,0) nanotube (diameter 1.4878 nm).

// The number of subbands is automatically adjusted to obtain an accuracy of 1%.
// It means, that additional subband contributions will not yield in a higher
// accuracy.

`include "constants.vams"
`include "disciplines.vams"

`define      M__PI 3.14159265358979323846 // value of PI
`define      P__Q  1.6021918e-19          // q : electron charge in Coulomb
`define      P__H  6.6260755e-34         // h : Planck's constant in J.s
`define      P__K  1.3806226e-23         // k : Boltzmann's constant in J/K
`define      P__EPS0 8.85418792394420013968e-12
           // E0 : permittivity of vacuum in F/m

module dgcnfet(d, g, s, bg);
inout d, g, s, bg;
electrical d, g, s, bg; // "external" ports
electrical di, si, gi, bgis, bgid; // i for intrinsic
electrical cntd, cnti, cnts; // cnti for the channel potential, cnts(d) for the
// source (drain) control potential
electrical gix, bgix; // (b)gix is the node between the flatband voltage
// and the serial (back) gate resistance.

branch (d, di)          ddi;
branch (di, si)        dis;
branch (si, s)         sis;
branch (g, gix)        ggix;
branch (gix, gi)       gixgi;
branch (cnti, gi)      cntigi;
branch (bg, bgix)      bgbgix;
branch (bgix, bgid)    bgixbgid;
branch (bgix, bgis)    bgixbgis;
branch (cntd, bgid)    cntdbgid;
branch (cnts, bgis)    cntsbgis;
branch (cntd, di)      cntddi;
branch (cntd, si)      cntdsi;
branch (cnti, di)      cntidi;
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
branch (cnti, si)          cntisi;
branch (cnts, di)          cntsdi;
branch (cnts, si)          cntssi;

parameter real T = 300.0 from [4:500];          // temperature in K
parameter real kBT = `P__K*T/`P__Q;
// Boltzmann's constant * temperature / q (approximately 25mV @ 300K)

parameter real sbbd_contribution = 0.01;
// maximum contribution of the highest subband taken into account
parameter integer NB = 7 from [2:20];
// number of subbands taken into account

//      !!!   if NB is too small, some non-negligible subband contributions
//              will not be considered and the result will be false  !!!

parameter real sbbd_metal = 10;
// This value will be allocated to all subbands if the nanotube is
// metallic.
parameter real sbbd_too_small = 10.5;
// This value will be allocated to the first subbands if the nanotube is
// too small.

parameter real LD = 200e-9 from [15e-9:300e-9];
// drain access channel length
parameter real LI = 200e-9 from [15e-9:300e-9];
// inner channel length
parameter real LS = 200e-9 from [15e-9:300e-9];
// source access channel length
parameter real RD = 25k;          // serial drain resistance in ohms
parameter real RG = 10;          // serial gate resistance in ohms
parameter real RS = 25k;          // serial source resistance in ohms
parameter real RBGD = 70;
// serial back gate resistance in ohms (drain side)
parameter real RBGS = 70;
// serial back gate resistance in ohms (source side)
parameter real VFB_G = -40e-3;    // front gate flatband voltage in V
parameter real VFB_BG = -40e-3;   // back gate flatband voltage in V

parameter integer Flag_capa = 1 from [0:1];
// = 0 -> user gives the capacitances,
//   1 -> user gives k and oxide thicknesses
parameter real CIin = 100e-12 from [1e-18:1e-6];
// physical front gate capacitance in F/m
parameter real CBGDin = 10e-12 from [1e-18:1e-6];
// physical back gate capacitance in F/m for the drain side
parameter real CBGSin = 10e-12 from [1e-18:1e-6];
// physical back gate capacitance in F/m for the source side

parameter real CSUB = 0.4e-18;
// substrate-source capacitance in F, the default value corresponds to:
// SiO2 thickness 100 nm, electrode surface 20 nm * 20 nm
real CI;          // Flag_capa dependent
real CBGD;        // Flag_capa dependent
real CBGS;        // Flag_capa dependent
parameter real thI = 4e-9 from [1e-9:200e-9];
// front gate oxide thickness in m
parameter real thD = 10e-9 from [1e-9:500e-9];
// back gate oxide thickness (drain side) in m
parameter real thS = 10e-9 from [1e-9:500e-9];
// back gate oxide thickness (source side) in m
```


Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
parameter real Kfg = 5;           // front gate relative permittivity
parameter real Kbg = 3.9;        // back gate relative permittivity

real sbbdC[1:NB];                // The 7 first subbands will be calculated
real sbbdV[1:NB];
real sum_Id_N;
    // receives the contributions of the NB first conduction subband
real sum_Id_P;
    // receives the contributions of the NB first valence subband
real pth_contrib_N;             // current contribution of the pth conduction subband
real pth_contrib_P;             // current contribution of the pth valence subband
integer p_Id;
    // for the computing of the current contribution of the pth subband
real VcntNmin;
real VcntPmax;

//----- parameters to compute the first "NB" subbands minima -----

parameter integer Flag_model_sbbd = 1 from [0:1];
    // Flag_model_sbbd = 0 -> approximative model based on diameter
    // Flag_model_sbbd = 1 -> more accurate model based on chirality
parameter integer n = 19;        // n and m define the
parameter integer m = 0;        // chirality vector
parameter real diameter = 1.4878e-9 from [0.4e-9:4e-9];
    // carbon nanotube diameter in m
real radius;

parameter real a = 2.46e-10;
    // distance between 2 nearest non-neighbour carbon atoms in m
parameter real t = -3.033;       // covering factor in eV
parameter real num_delta1 = -t*a/sqrt(3);
    // used for subband computation with diameter model in eV/m

parameter real a1 [0:1] = {sqrt(3)*a/2, a/2};           // base vector a1
parameter real a2 [0:1] = {sqrt(3)*a/2, -a/2};        // base vector a2
parameter real a3 [0:1] = {0, a};
    // This vector is the difference between a1 and a2
parameter real b1 [0:1] = {2*`M__PI/(sqrt(3)*a), 2*`M__PI/a};
    // reciprocal space base vector b1
parameter real b2 [0:1] = {2*`M__PI/(sqrt(3)*a), -2*`M__PI/a};
    // reciprocal space base vector b2

real x, y, remainder;           // variables to compute a gcd
real gcd_sc_OR_m;               // gcd=3 => metal, gcd!=3 => semiconductor
real dr;                         // gcd between 2*n+m and 2*m+n
real Ncell;
    // number of cell units of graphene in the nanotube
real t1, t2;
    // definition of the base vectors of the translation vector
real K1[0:1], K2[0:1];          // reciprocal space vectors
integer i, j;
    // i will be incremented to give a "high value" to all the subbands in a
    // FOR loop
    // i and j are used to rank the subband minima in a double FOR loop
integer k_quant;
    // will be incremented in the FOR loop to take into account the k
    // quantification
real r;                          // r=0 defines the subband minima
real k[0:1];                      // wave vector
real E2;                          // E2 : bottom of the subband in the Conduction Band in eV
integer max_bd;
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
// The maximum of subbands to be taken into account equals the minimum
// between NB and Ncell

integer class_OK; // Subband minima ranking flag

//----- parameters to compute the charge -----

integer p;
// loop variable used for charge contribution computing of the pth subband

// normalised lineic charge density variables :
real pth_e_in_DA_from_S;
// - (e-) in the Drain Access of the pth subband (multiplied by 2) from Source
real pth_e_in_DA_from_D;
// - (e-) in the Drain Access of the pth subband (multiplied by 2) from Drain
real pth_e_in_IP_from_S;
// - (e-) in the Intrinsic Part of the pth subband (multiplied by 2) from Source
real pth_e_in_IP_from_D;
// - (e-) in the Intrinsic Part of the pth subband (multiplied by 2) from Drain
real pth_e_in_SA_from_S;
// - (e-) in the Source Access of the pth subband (multiplied by 2) from Source
real pth_e_in_SA_from_D;
// - (e-) in the Source Access of the pth subband (multiplied by 2) from Drain
real pth_h_in_DA_from_S;
// - (h+) in the Drain Access of the pth subband (multiplied by 2) from Source
real pth_h_in_DA_from_D;
// - (h+) in the Drain Access of the pth subband (multiplied by 2) from Drain
real pth_h_in_IP_from_S;
// - (h+) in the Intrinsic Part of the pth subband (multiplied by 2) from Source
real pth_h_in_IP_from_D;
// - (h+) in the Intrinsic Part of the pth subband (multiplied by 2) from Drain
real pth_h_in_SA_from_S;
// - (h+) in the Source Access of the pth subband (multiplied by 2) from Source
real pth_h_in_SA_from_D;
// - (h+) in the Source Access of the pth subband (multiplied by 2) from Drain
real pth_dens_null_bias_N;
// - (e-) in the Source, Intrinsic or Drain region of the pth subband w/o bias
real pth_dens_null_bias_P;
// - (h+) in the Source, Intrinsic or Drain region of the pth subband w/o bias
real e_in_DA_from_S;
// - (e-) in the Drain Access (multiplied by 2) from Source
real e_in_DA_from_D;
// - (e-) in the Drain Access (multiplied by 2) from Drain
real e_in_IP_from_S;
// - (e-) in the Intrinsic Part (multiplied by 2) from Source
real e_in_IP_from_D;
// - (e-) in the Intrinsic Part (multiplied by 2) from Drain
real e_in_SA_from_S;
// - (e-) in the Source Access (multiplied by 2) from Source
real e_in_SA_from_D;
// - (e-) in the Source Access (multiplied by 2) from Drain
real h_in_DA_from_S;
// - (h+) in the Drain Access (multiplied by 2) from Source
real h_in_DA_from_D;
// - (h+) in the Drain Access (multiplied by 2) from Drain
real h_in_IP_from_S;
// - (h+) in the Intrinsic Part (multiplied by 2) from Source
real h_in_IP_from_D;
// - (h+) in the Intrinsic Part (multiplied by 2) from Drain
real h_in_SA_from_S;
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
// - (h+) in the Source Access (multiplied by 2) from Source
real h_in_SA_from_D;
// - (h+) in the Source Access (multiplied by 2) from Drain
real dens_null_bias_N;
// - (e-) in the Source, Intrinsic or Drain region w/o bias
real dens_null_bias_P;
// - (h+) in the Source, Intrinsic or Drain region w/o bias

real charge_d;          // charge in Drain Access due to Vcnt modification
real charge_i;          // charge in the Intrinsic Part due to Vcnt modification
real charge_s;          // charge in Source Access due to Vcnt modification
parameter integer trap_ch_d = 0;    // trapped charge in Drain Access
parameter integer trap_ch_i = 0;    // trapped charge in the Intrinsic Part
parameter integer trap_ch_s = 0;    // trapped charge in Source Access
real charge_null_bias;           // charge without bias
parameter real sbbd_charge = 0.01;
    // maximum charge contribution of the highest subband taken into account

parameter real ch_b = 1.42E-10;      // carbon-carbon distance in m
parameter real ch_Vpppi = - t;
    // C-C bonding energy (= - covering factor) en eV
parameter real ch_norm_factor = (8/(3*`M__PI*ch_b*ch_Vpppi))*`P__Q ;

parameter real smooth_fac=250;
parameter real coef=1.6;

//-----
analog function real mymin;

    input x, y;

    real x, y;

    begin
        if (x>y)
            mymin=y;
        else
            mymin=x;
    end
endfunction

analog function real mymax;

    input x, y;

    real x, y;

    begin
        if (x>y)
            mymax=x;
        else
            mymax=y;
    end
endfunction

//----- functions to compute the lineic charge density -----
analog function real solEgreat;
```

```

input X, Vds, Vi, kBT, sbbd;

real X;
real Vds;
real Vi;
real kBT;
real sbbd;

begin
    solEgreat=kBT*exp((-X-Vds+Vi)/kBT)*(X/sqrt(X*X-
sbbd*sbbd)+kBT*(1/sqrt(X*X-sbbd*sbbd)-X*X/pow(X*X-sbbd*sbbd,1.5)));
end
endfunction

analog function real solE_near_sbbd;

input X, Vds, Vi, kBT, sbbd, coef;

real X;
real Vds;
real Vi;
real kBT;
real sbbd;
real coef;

real a0, a1, a2, sqrt;

begin
    if (X<=sbbd) // the numerical calculation can give X lower than sbbd
        sqrt=0;
    else
        sqrt=sqrt(X*X-sbbd*sbbd);

        a0=1/(1+exp((X+Vds-Vi)/kBT));
        a1=-exp((X+Vds-Vi)/kBT)/(kBT*(1+exp((X+Vds-Vi)/kBT))*(1+exp((X+Vds-
Vi)/kBT)));
        a2=2.0*(exp((X+Vds-Vi)/kBT))*(exp((X+Vds-
Vi)/kBT))/(pow(1+exp((X+Vds-Vi)/kBT),3)*kBT*kBT)-exp((X+Vds-
Vi)/kBT)/((1+exp((X+Vds-Vi)/kBT))*(1+exp((X+Vds-Vi)/kBT))*kBT*kBT);
        solE_near_sbbd=(a0-a1*X+a2/2*X*X+a2/3*sbbd*sbbd)
*(sqrt((sbbd+coef*kBT)*(sbbd+coef*kBT)-sbbd*sbbd)-sqrt)
+0.5*(a1-a2*X)*((sbbd+coef*kBT)*sqrt((sbbd+coef*kBT)*(sbbd+coef*kBT)-
sbbd*sbbd)+sbbd*sbbd*ln((sbbd+coef*kBT+sqrt((sbbd+coef*kBT)*(sbbd+coef*kBT)-
sbbd*sbbd))/(X+sqrt))-X*sqrt)
+a2/6.0*((sbbd+coef*kBT)*(sbbd+coef*kBT)*sqrt((sbbd+coef*kBT)*(sbbd+coef*k
BT)-sbbd*sbbd)-X*X*sqrt);
end
endfunction

analog function real solEaroundVi;

input X, Vds, Vi, kBT, sbbd, coef;

real X;
real Vds;
real Vi;
real kBT;
real sbbd;
real coef;
real sqrtX, sqrtVi;

```

```

begin
    if (X<=sbbd) // the numerical calculation can give X lower than sbbd
        sqrootX=0;
    else
        sqrootX=sqrt(X*X-sbbd*sbbd);

    if ((Vi-Vds+coef*kBT)<sbbd)
        sqrootVi=0;
    else
        sqrootVi=sqrt((Vi-Vds+coef*kBT)*(Vi-Vds+coef*kBT)-sbbd*sbbd);

    solEaroundVi=sqrootVi*(0.5-coef/8+(Vi-Vds)/(8*kBT)) -
sqrootX*(0.5+(Vi-Vds-X/2)/(4*kBT)) +sbbd*sbbd/(8*kBT)*ln((Vi-Vds+coef*kBT-
sqrootVi)/(X-sqrootX));
    end
endfunction

analog function real solEsml;

    input X, Vds, Vi, kBT, sbbd, coef;

    real X;
    real Vds;
    real Vi;
    real kBT;
    real sbbd;
    real coef;

    real a0, a1, sqrootX, sqrootVi;

begin
    if (X<=sbbd) // the numerical calculation can give X lower than sbbd
        sqrootX=0;
    else
        sqrootX=sqrt(X*X-sbbd*sbbd);

    if ((Vi-Vds-coef*kBT)<sbbd)
        sqrootVi=0;
    else
        sqrootVi=sqrt((Vi-Vds-coef*kBT)*(Vi-Vds-coef*kBT)-sbbd*sbbd);

    a0=1/(1+exp((X+Vds-Vi)/kBT));
    a1=-exp((X+Vds-Vi)/kBT)/(kBT*(1+exp((X+Vds-Vi)/kBT))*(1+exp((X+Vds-
Vi)/kBT)));
    solEsml=(a0-a1*X)*(sqrootVi-sqrootX) +a1/2*((Vi-Vds-
coef*kBT)*sqrootVi+sbbd*sbbd*ln((Vi-Vds-coef*kBT+sqrootVi)/(X+sqrootX))-
X*sqrootX);
    end
endfunction

analog function real lin_dens_norm;

    input Vi, Vo, Vds, kBT, sbbd, fs, coef;
// Vi for Vcnt-inside-the-region-the-charge-is-calculated, Vo for Vcnt-outside

    real kBT;
    real sbbd;
    real Vi;
    real Vo;
    real Vds;
    real coef;

```

```

real fs;

begin
    lin_dens_norm=solE_near_sbbd(sbbd+Vi-mymax(Vo, Vi-coef*kBT), Vds,
Vi, kBT, sbbd, coef)*(1-fs)+(solEsml(sbbd+Vi-mymax(Vo, sbbd+Vds+coef*kBT), Vds,
Vi, kBT, sbbd, coef)+solEaroundVi(sbbd+Vi-mymax(mymin(Vo, sbbd+Vds+coef*kBT),
sbbd+Vds-coef*kBT), Vds, Vi, kBT, sbbd, coef))*fs+solEgreat(sbbd+Vi-
mymin(mymin(Vo, sbbd+Vds-coef*kBT), Vi-coef*kBT), Vds, Vi, kBT, sbbd)-
solEgreat(sbbd+Vi-mymin(mymin(Vo, sbbd+Vds-coef*kBT), Vi-coef*kBT), Vds, Vi,
kBT/2, sbbd);
    end
endfunction

analog begin

//----- Initialisation -----

    @ ( initial_step ) begin

        //----- subband minima computation -----

        if (Flag_model_sbbd == 1) begin
// Subband computation based on chirality

            radius = a * sqrt(n*n+n*m+m*m)/(2*`M__PI);
//----- gcd computation between n-m and 3 -----
            if (n>m) //
                x = n-m; // To be sure that x is positive
            else //
                x = m-n; //

            y = 3;

            remainder = 3;
// Not entering the WHILE loop means that n-m is a multiple of 3
// The nanotube is then metallic

            while ((x%y) != 0) begin // Is the (new) remainder null?
                remainder = x % y;
                x = y; // gcd(x;y) = gcd(y;(x%y))
                y = remainder;
            end

            gcd_sc_OR_m = remainder;
// The gcd is the last non-null remainder
//-----

            for (i=1;i<=NB;i=i+1) // i is the number of the subband
                sbbdC[i] = sbbd_metal;
// The subbands receive a "high value" to be sure that true values are saved
// The subbands will conserve that value if the nanotube is metallic

            if (gcd_sc_OR_m != 3) begin
// Is the nanotube semiconductor?

//----- Definition of intermediate variables -----

//----- gcd computation for dr -----
                x = 2*n+m;
                y = 2*m+n;

```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```

        remainder = y;
// Not entering the WHILE loop means that x is a multiple of y
        while ((x%y)!=0) begin // Is the (new) remainder null?
            remainder = x % y;
            x = y;           // gcd(x;y) = gcd(y;(x%y))
            y = remainder;
        end
// The gcd is the last non-null remainder
//-----

        dr = remainder; // dr is the gcd of 2*n+m and 2*m+n
        Ncell=2*(n*n+m*m+n*m)/dr;
// number of graphene unit cells in this nanotube
        t1=(2*m+n)/dr;
// Definition of t1 for the translation vector
        t2=-(2*n+m)/dr;
// Definition of t2 for the translation vector
        K1[0]=(-t2*b1[0]+t1*b2[0])/Ncell;
        K1[1]=(-t2*b1[1]+t1*b2[1])/Ncell;
// Definition of the nanotube base vector K1
        K2[0]=(m*b1[0]-n*b2[0])/Ncell;
        K2[1]=(m*b1[1]-n*b2[1])/Ncell;
// Definition of the nanotube base vector K2, unused here because r=0
//-----

        if (Ncell<7)
// If this condition is true, it means that the nanotube is too small and can
// not exist.
            for (i=1;i<Ncell;i=i+1)
// The first subbands receive then a "high" value.
                sbbd[i] = sbbd_too_small;
            else begin
                if (Ncell>NB)
// The computation for the subbands minima is limited to the minimum between NB
// and Ncell.
                    max_bd = NB;
                else
                    max_bd = Ncell;
            end

//-**- Loop to take into account the quantification of k: each value of k
creates a subband -**-

        for (k_quant=0;k_quant+1<=(Ncell-1)/2;k_quant=k_quant+1) begin
            r=0; // to have the minimum of the subband
            k[0]=((r*K2[0])/sqrt(K2[0]*K2[0]+K2[1]*K2[1]))+k_quant*K1[0];
            k[1]=((r*K2[1])/sqrt(K2[0]*K2[0]+K2[1]*K2[1]))+k_quant*K1[1];
// definition of the vector k equivalent to k=((r.*K2)/norm(K2))+k_quant.*K1

            E2=-t*sqrt(3 + 2*cos(k[0]*a3[0]+k[1]*a3[1])
                + 2*cos(k[0]*a1[0]+k[1]*a1[1])
                + 2*cos(k[0]*a2[0]+k[1]*a2[1]) );
// definition of the energy in the Conduction Band

//----- The lowest subband values are saved -----
            if (E2<sbbd[max_bd]) begin
// Is this value small enough to be taken into account?
// The number of cells could be much higher than the considered number of
// subbands. example: Ncell = 662 for a 10,11 tube. So this "if" optimizes the
// computation time.
                class_OK = 0; // When class_OK = 1, the ranking is done.
                for(i=1;(i<=max_bd)&&(class_OK==0);i=i+1)

```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```

// for all the subbands while the ranking is not done
    if (E2<sbbd[i]) begin
// Is this value smaller than the actual ith subband?
        for (j=max_bd;j>=i+1;j=j-1)
// For the subband higher than the ith subband,
            sbbd[j]=sbbd[j-1];
// the jth subband receives the value of the j-1th subband.
            sbbd[i]=E2;
// At least, the ith subband receives the last calculated energy.
            class_OK = 1;                // The ranking is done.
        end
    end
end
//-----
end
//***--- end "for" loop on k_quant---**

        end // end "else" corresponding to "if Ncell>7"
    end // end "if" the nanotube is semiconductor
end // end "if" the model based on chirality is chosen

else begin // Subband computation based on diameter
    max_bd = NB;
    radius = diameter/2;
    sbbdC[1] = num_delta/diameter;
    for (p=2;p<=max_bd;p=p+1)
        sbbdC[p] = sbbdC[1]*(6*p-3-pow(-1,p))/4;
//the pth subband minimum is function of delta1 and p is the subband number.
    end

    for (p=1;p<=max_bd;p=p+1)
        sbbdV[p] = -sbbdC[p];
// The valence band is symmetric to the conduction band

//-----

    if (Flag_capa == 0) begin // user gives capacitances values
        CI = CIin;
        CBGS = CBGSin;
        CBGD = CBGDin;
    end

    else begin // user gives thicknesses and relative permittivities
        CI = 2*_M_PI*_P__EPS0*Kfg/ln(2*(thI+radius)/radius);
        CBGS = 2*_M_PI*_P__EPS0*Kbg/ln(2*(thS+radius)/radius);
        CBGD = 2*_M_PI*_P__EPS0*Kbg/ln(2*(thD+radius)/radius);
    end

//----- Null bias charge -----
    dens_null_bias_N = lin_dens_norm(0, 0, 0, kBT, sbbdC[1],
1/(1+limexp(smooth_fac*(-0+sbbdC[1]+0))), coef);
    pth_dens_null_bias_N = lin_dens_norm(0, 0, 0, kBT, sbbdC[2],
1/(1+limexp(smooth_fac*(-0+sbbdC[2]+0))), coef);

    for
(p=3;(pth_dens_null_bias_N>dens_null_bias_N*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1)
begin
        dens_null_bias_N = dens_null_bias_N + pth_dens_null_bias_N;
        pth_dens_null_bias_N = lin_dens_norm(0, 0, 0, kBT, sbbdC[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(-0+sbbdC[p]+0))), coef);
    end
end

```



```

        dens_null_bias_P = lin_dens_norm(0, 0, 0, kBT, -sbbdV[1],
1/(1+limexp(smooth_fac*(0-sbbdV[1]+0))), coef);
        pth_dens_null_bias_P = lin_dens_norm(0, 0, 0, kBT, -sbbdV[2],
1/(1+limexp(smooth_fac*(0-sbbdV[2]+0))), coef);

        for
(p=3;(pth_dens_null_bias_P>dens_null_bias_P*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1)
begin
                dens_null_bias_P = dens_null_bias_P + pth_dens_null_bias_P;
                pth_dens_null_bias_P = lin_dens_norm(0, 0, 0, kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(0-sbbdV[p]+0))), coef);
        end

        charge_null_bias = ch_norm_factor*(dens_null_bias_P-
dens_null_bias_N);
        //-----

        end

//----- end Initialisation -----

//----- lineic density computation in the Drain Access for electrons -----
//-----from source-----
        e_in_DA_from_S = lin_dens_norm(V(cntdsi), mymin(mymin(V(cntisi),
V(cntdsi)), V(cntssi)), 0, kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntdsi)+sbbdC[1]+0))), coef);
        pth_e_in_DA_from_S = lin_dens_norm(V(cntdsi), mymin(mymin(V(cntisi),
V(cntdsi)), V(cntssi)), 0, kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntdsi)+sbbdC[2]+0))), coef);

        for (p=3;(pth_e_in_DA_from_S >
e_in_DA_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                e_in_DA_from_S = e_in_DA_from_S + pth_e_in_DA_from_S;
                pth_e_in_DA_from_S = lin_dens_norm(V(cntdsi), mymin(mymin(V(cntisi),
V(cntdsi)), V(cntssi)), 0, kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntdsi)+sbbdC[p]+0))), coef);
        end

//-----from drain-----
        e_in_DA_from_D = 2*lin_dens_norm(V(cntdsi), V(cntdsi), V(dis), kBT,
sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntdsi)+sbbdC[1]+V(dis))))), coef)
        -lin_dens_norm(V(cntdsi), mymin(mymin(V(cntisi), V(cntdsi)),
V(cntssi)), V(dis), kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntdsi)+sbbdC[1]+V(dis))))), coef);
        pth_e_in_DA_from_D = 2*lin_dens_norm(V(cntdsi), V(cntdsi), V(dis), kBT,
sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntdsi)+sbbdC[2]+V(dis))))), coef)
        -lin_dens_norm(V(cntdsi), mymin(mymin(V(cntisi), V(cntdsi)),
V(cntssi)), V(dis), kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntdsi)+sbbdC[2]+V(dis))))), coef);

        for (p=3;(pth_e_in_DA_from_D >
e_in_DA_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                e_in_DA_from_D = e_in_DA_from_D + pth_e_in_DA_from_D;
                pth_e_in_DA_from_D = 2*lin_dens_norm(V(cntdsi), V(cntdsi), V(dis),
kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntdsi)+sbbdC[p]+V(dis))))), coef)
                -lin_dens_norm(V(cntdsi), mymin(mymin(V(cntisi), V(cntdsi)),
V(cntssi)), V(dis), kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntdsi)+sbbdC[p]+V(dis))))), coef);

```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
end
//-----

//----- lineic density computation in the Intrinsic Part for electrons -----

if (V(dis_i) >= 0) begin

    //-----from source-----
    e_in_IP_from_S = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntssi),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[1]+0))),
coef);
    pth_e_in_IP_from_S = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntssi),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[2]+0))),
coef);

    for (p=3;(pth_e_in_IP_from_S >
e_in_IP_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        e_in_IP_from_S = e_in_IP_from_S + pth_e_in_IP_from_S;
        pth_e_in_IP_from_S = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntssi),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[p]+0))),
coef);
    end

    //-----from drain-----
    e_in_IP_from_D = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntdsi),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[1]+V(dis_i)))), coef)
        +lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymax(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[1]+V(dis_i)))), coef)
        -lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymin(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[1]+V(dis_i)))), coef);
    pth_e_in_IP_from_D = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntdsi),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[2]+V(dis_i)))), coef)
        +lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymax(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[2]+V(dis_i)))), coef)
        -lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymin(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[2]+V(dis_i)))), coef);

    for (p=3;(pth_e_in_IP_from_D >
e_in_IP_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        e_in_IP_from_D = e_in_IP_from_D + pth_e_in_IP_from_D;
        pth_e_in_IP_from_D = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntdsi),
V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[p]+V(dis_i)))), coef)
            +lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymax(V(cntssi),
V(cntdsi)), V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[p]+V(dis_i)))), coef)
            -lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymin(V(cntssi),
V(cntdsi)), V(cntisi)), V(dis_i), kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[p]+V(dis_i)))), coef);
    end

end

else begin

    //-----from source-----
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
        e_in_IP_from_S = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntssi),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[1]+0))),
coef)
        +lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymax(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[1]+0))),
coef)
        -lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymin(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[1]+0))),
coef);
        pth_e_in_IP_from_S = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntssi),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[2]+0))),
coef)
        +lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymax(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[2]+0))),
coef)
        -lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymin(V(cntssi), V(cntdsi)),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[2]+0))),
coef);

        for (p=3;(pth_e_in_IP_from_S >
e_in_IP_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
            e_in_IP_from_S = e_in_IP_from_S + pth_e_in_IP_from_S;
            pth_e_in_IP_from_S = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntssi),
V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntisi)+sbbdC[p]+0))),
coef)
            +lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymax(V(cntssi),
V(cntdsi)), V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[p]+0))), coef)
            -lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(mymin(V(cntssi),
V(cntdsi)), V(cntisi)), 0, kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[p]+0))), coef);
            end
        //-----from drain-----
            e_in_IP_from_D = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntdsi),
V(cntisi)), V(disi), kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[1]+V(disi)))), coef);
            pth_e_in_IP_from_D = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntdsi),
V(cntisi)), V(disi), kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[2]+V(disi)))), coef);

            for (p=3;(pth_e_in_IP_from_D >
e_in_IP_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                e_in_IP_from_D = e_in_IP_from_D + pth_e_in_IP_from_D;
                pth_e_in_IP_from_D = lin_dens_norm(V(cntisi), mymin(V(cntdsi),
V(cntisi)), V(disi), kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cntisi)+sbbdC[p]+V(disi)))), coef);
            end
        end
//-----

//----- lineic density computation in the Source Access for electrons -----
//-----from source-----
            e_in_SA_from_S = 2*lin_dens_norm(V(cntssi), V(cntssi), 0, kBT, sbbdC[1],
1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntssi)+sbbdC[1]+0))), coef)
            -lin_dens_norm(V(cntssi), mymin(mymin(V(cntisi), V(cntdsi)),
V(cntssi)), 0, kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntssi)+sbbdC[1]+0))),
coef);
            pth_e_in_SA_from_S = 2*lin_dens_norm(V(cntssi), V(cntssi), 0, kBT,
sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cntssi)+sbbdC[2]+0))), coef)
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
        -lin_dens_norm(V(cnttssi), mymin(mymin(V(cnttisi), V(cntdsi)),
V(cnttssi)), 0, kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cnttssi)+sbbdC[2]+0))),
coef);

    for (p=3;(pth_e_in_SA_from_S >
e_in_SA_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        e_in_SA_from_S = e_in_SA_from_S + pth_e_in_SA_from_S;
        pth_e_in_SA_from_S = 2*lin_dens_norm(V(cnttssi), V(cnttssi), 0, kBT,
sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cnttssi)+sbbdC[p]+0))), coef)
            -lin_dens_norm(V(cnttssi), mymin(mymin(V(cnttisi), V(cntdsi)),
V(cnttssi)), 0, kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-V(cnttssi)+sbbdC[p]+0))),
coef);
    end

//-----from drain-----
    e_in_SA_from_D = lin_dens_norm(V(cnttssi), mymin(mymin(V(cnttisi),
V(cntdsi)), V(cnttssi)), V(disi), kBT, sbbdC[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cnttssi)+sbbdC[1]+V(disi)))), coef);
    pth_e_in_SA_from_D = lin_dens_norm(V(cnttssi), mymin(mymin(V(cnttisi),
V(cntdsi)), V(cnttssi)), V(disi), kBT, sbbdC[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cnttssi)+sbbdC[2]+V(disi)))), coef);

    for (p=3;(pth_e_in_SA_from_D >
e_in_SA_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        e_in_SA_from_D = e_in_SA_from_D + pth_e_in_SA_from_D;
        pth_e_in_SA_from_D = lin_dens_norm(V(cnttssi), mymin(mymin(V(cnttisi),
V(cntdsi)), V(cnttssi)), V(disi), kBT, sbbdC[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(-
V(cnttssi)+sbbdC[p]+V(disi)))), coef);
    end
//-----

//----- lineic density computation in the Drain Access for holes -----
//-----from source-----
    h_in_DA_from_S = lin_dens_norm(-V(cntdsi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -
V(cntdsi)), -V(cnttssi)), 0, kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-
sbbdV[1]+0))), coef);
    pth_h_in_DA_from_S = lin_dens_norm(-V(cntdsi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -
V(cntdsi)), -V(cnttssi)), 0, kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-
sbbdV[2]+0))), coef);

    for (p=3;(pth_h_in_DA_from_S >
h_in_DA_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        h_in_DA_from_S = h_in_DA_from_S + pth_h_in_DA_from_S;
        pth_h_in_DA_from_S = lin_dens_norm(-V(cntdsi), mymin(mymin(-
V(cnttisi), -V(cntdsi)), -V(cnttssi)), 0, kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-sbbdV[p]+0))), coef);
    end

//-----from drain-----
    h_in_DA_from_D = 2*lin_dens_norm(-V(cntdsi), -V(cntdsi), -V(disi), kBT, -
sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-sbbdV[1]-V(disi)))), coef)
        -lin_dens_norm(-V(cntdsi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -V(cntdsi)), -
V(cnttssi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-
sbbdV[1]-V(disi)))), coef);
    pth_h_in_DA_from_D = 2*lin_dens_norm(-V(cntdsi), -V(cntdsi), -V(disi),
kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-sbbdV[2]-V(disi)))), coef)
        -lin_dens_norm(-V(cntdsi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -V(cntdsi)), -
V(cnttssi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-
sbbdV[2]-V(disi)))), coef);
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```
        for (p=3;(pth_h_in_DA_from_D >
h_in_DA_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
            h_in_DA_from_D = h_in_DA_from_D + pth_h_in_DA_from_D;
            pth_h_in_DA_from_D = 2*lin_dens_norm(-V(cntdsi), -V(cntdsi), -
V(disi), kBT, -sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-sbbdV[p]-V(disi))))),
coef)
                -lin_dens_norm(-V(cntdsi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -
V(cntdsi)), -V(cnttssi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntdsi)-sbbdV[p]-V(disi))))), coef);
            end
//-----

//----- lineic density computation in the Intrinsic Part for holes -----

        if (-V(disi) >= 0) begin

            //-----from source-----
                h_in_IP_from_S = lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(-V(cnttssi), -
V(cnttisi)), 0, kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[1]+0))),
coef);
                pth_h_in_IP_from_S = lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(-V(cnttssi), -
V(cnttisi)), 0, kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[2]+0))),
coef);

                for (p=3;(pth_h_in_IP_from_S >
h_in_IP_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                    h_in_IP_from_S = h_in_IP_from_S + pth_h_in_IP_from_S;
                    pth_h_in_IP_from_S = lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(-
V(cnttssi), -V(cnttisi)), 0, kBT, -sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-
sbbdV[p]+0))), coef);
                end
            //-----from drain-----
                h_in_IP_from_D = lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(-V(cntdsi), -
V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-
sbbdV[1]-V(disi))))), coef)
                    +lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(mymax(-V(cnttssi), -
V(cntdsi)), -V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[1],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[1]-V(disi))))), coef)
                    -lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(mymin(-V(cnttssi), -
V(cntdsi)), -V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[1],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[1]-V(disi))))), coef);
                pth_h_in_IP_from_D = lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(-V(cntdsi), -
V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-
sbbdV[2]-V(disi))))), coef)
                    +lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(mymax(-V(cnttssi), -
V(cntdsi)), -V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[2],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[2]-V(disi))))), coef)
                    -lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(mymin(-V(cnttssi), -
V(cntdsi)), -V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[2],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[2]-V(disi))))), coef);

                for (p=3;(pth_h_in_IP_from_D >
h_in_IP_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
                    h_in_IP_from_D = h_in_IP_from_D + pth_h_in_IP_from_D;
                    pth_h_in_IP_from_D = lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(-
V(cntdsi), -V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[p]-V(disi))))), coef)
                        +lin_dens_norm(-V(cnttisi), mymin(mymax(-V(cnttssi), -
V(cntdsi)), -V(cnttisi)), -V(disi), kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttisi)-sbbdV[p]-V(disi))))), coef)
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```

        -lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymin(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-sbbdV[p]-V(dis_i)))), coef);
    end
end

else begin
//-----from source-----
    h_in_IP_from_S = lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(-V(cntssi), -
V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-sbbdV[1]+0))),
coef)
        +lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymax(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[1]+0))), coef)
        -lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymin(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[1]+0))), coef);
    pth_h_in_IP_from_S = lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(-V(cntssi), -
V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-sbbdV[2]+0))),
coef)
        +lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymax(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[2]+0))), coef)
        -lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymin(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[2]+0))), coef);

    for (p=3;(pth_h_in_IP_from_S >
h_in_IP_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        h_in_IP_from_S = h_in_IP_from_S + pth_h_in_IP_from_S;
        pth_h_in_IP_from_S = lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(-
V(cntssi), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)+
sbbdV[p]+0))), coef)
            +lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymax(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[p]+0))), coef)
            -lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(mymin(-V(cntssi), -
V(cntdsi)), -V(cntisi)), 0, kBT, -sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[p]+0))), coef);
    end
//-----from drain-----
    h_in_IP_from_D = lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(-V(cntdsi), -
V(cntisi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[1]-V(dis_i)))), coef);
    pth_h_in_IP_from_D = lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(-V(cntdsi), -
V(cntisi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-
sbbdV[2]-V(dis_i)))), coef);

    for (p=3;(pth_h_in_IP_from_D >
h_in_IP_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        h_in_IP_from_D = h_in_IP_from_D + pth_h_in_IP_from_D;
        pth_h_in_IP_from_D = lin_dens_norm(-V(cntisi), mymin(-
V(cntdsi), -V(cntisi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cntisi)-sbbdV[p]-V(dis_i)))), coef);
    end
end
//-----

//----- lineic density computation in the Source Access for holes -----
//-----from source-----
```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```

    h_in_SA_from_S = 2*lin_dens_norm(-V(cnttssi), -V(cnttssi), 0, kBT, -
sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[1]+0))), coef)
    -lin_dens_norm(-V(cnttssi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -V(cntdsi)), -
V(cnttssi)), 0, kBT, -sbbdV[1], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[1]+0))),
coef);
    pth_h_in_SA_from_S = 2*lin_dens_norm(-V(cnttssi), -V(cnttssi), 0, kBT, -
sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[2]+0))), coef)
    -lin_dens_norm(-V(cnttssi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -V(cntdsi)), -
V(cnttssi)), 0, kBT, -sbbdV[2], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[2]+0))),
coef);

    for (p=3;(pth_h_in_SA_from_S >
h_in_SA_from_S*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        h_in_SA_from_S = h_in_SA_from_S + pth_h_in_SA_from_S;
        pth_h_in_SA_from_S = 2*lin_dens_norm(-V(cnttssi), -V(cnttssi), 0, kBT,
-sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[p]+0))), coef)
        -lin_dens_norm(-V(cnttssi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -
V(cntdsi)), -V(cnttssi)), 0, kBT, -sbbdV[p], 1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-
sbbdV[p]+0))), coef);
    end

//-----from drain-----
    h_in_SA_from_D = lin_dens_norm(-V(cnttssi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -
V(cntdsi)), -V(cnttssi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[1],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[1]-V(dis_i))))) , coef);
    pth_h_in_SA_from_D = lin_dens_norm(-V(cnttssi), mymin(mymin(-V(cnttisi), -
V(cntdsi)), -V(cnttssi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[2],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[2]-V(dis_i))))) , coef);

    for (p=3;(pth_e_in_SA_from_D >
e_in_SA_from_D*sbbd_charge)&&(p<=max_bd);p=p+1) begin
        h_in_SA_from_D = h_in_SA_from_D + pth_h_in_SA_from_D;
        pth_h_in_SA_from_D = lin_dens_norm(-V(cnttssi), mymin(mymin(-
V(cnttisi), -V(cntdsi)), -V(cnttssi)), -V(dis_i), kBT, -sbbdV[p],
1/(1+limexp(smooth_fac*(V(cnttssi)-sbbdV[p]-V(dis_i))))) , coef);
    end
//-----

    charge_d = ch_norm_factor*LD*(h_in_DA_from_S+h_in_DA_from_D-
e_in_DA_from_S-e_in_DA_from_D)/2;
    charge_i = ch_norm_factor*LI*(h_in_IP_from_S+h_in_IP_from_D-
e_in_IP_from_S-e_in_IP_from_D)/2;
    charge_s = ch_norm_factor*LS*(h_in_SA_from_S+h_in_SA_from_D-
e_in_SA_from_S-e_in_SA_from_D)/2;

    VcntNmin = mymin(mymin(V(cnttssi), V(cntdsi)), V(cnttisi));
    VcntPmax = -mymin(mymin(-V(cnttssi), -V(cntdsi)), -V(cnttisi));

    sum_Id_N = 0; // reset
    pth_contrib_N = 1E-3; // reset

//----- FOR loop to add the current contribution of each subband N -----
    for (p_Id=1;(pth_contrib_N > sum_Id_N*sbbd_contribution)&&(p_Id <=
max_bd);p_Id=p_Id+1) begin
        pth_contrib_N = ln(1+exp((VcntNmin-sbbdC[p_Id])/kBT))
        - ln(1+exp((VcntNmin-V(dis_i)-sbbdC[p_Id])/kBT));
// The pth contribution is the difference between the pth source contribution
// and the pth drain contribution.
        sum_Id_N = sum_Id_N+pth_contrib_N;
// sum_Id_N is the sum of the contribution of the first pth conduction subbands.

```

Annexes : code verilogA du DG-CNFET

```

end
//-----

sum_Id_P = 0; // reset
pth_contrib_P = 1E-3; // reset

//----- FOR loop to add the current contribution of each subband P -----
for (p_Id=1;(pth_contrib_P > sum_Id_P*sbbd_contribution)&&(p_Id <=
max_bd);p_Id=p_Id+1) begin
    pth_contrib_P = - ln(1+exp((-VcntPmax+sbbdV[p_Id])/kBT))
        + ln(1+exp((-VcntPmax+V(dis_i)+sbbdV[p_Id])/kBT));
// The pth contribution is the difference between the pth source contribution
// and the pth drain contribution.
    sum_Id_P = sum_Id_P+pth_contrib_P;
// sum_Id_P is the sum of the contribution of the first pth valence subbands.
end
//-----

// "assignments", Kirchhoff's law
V(cntd) <+ V(bgid) + V(dis_i) + (trap_ch_d*`P__Q+charge_d-
charge_null_bias*LD) / (CBGD*LD);
V(cnti) <+ V(gi) + (trap_ch_i*`P__Q+charge_i-charge_null_bias*LI) /
(CI*LI);
V(cnts) <+ V(bgis) + (trap_ch_s*`P__Q+charge_s-charge_null_bias*LS) /
(CBGS*LS);

I(dis_i) <+ (4*`P__Q*`P__K*T/`P__H)*( sum_Id_N +sum_Id_P );//+1e-15;
I(ddi) <+ V(ddi)/RD;
I(sis) <+ V(sis)/RS;
I(ggix) <+ V(ggix)/RG;
V(gixgi) <+ VFB_G;
V(bgbgix) <+ VFB_BG;
I(bgixbgis) <+ V(bgixbgis)/RBGS;
I(bgixbgid) <+ V(bgixbgid)/RBGD;

// AC simulation
I(cntdbgid) <+ (LD*CBGD) * ddt(V(cntdbgid));
I(cntigi) <+ (LI*CI) * ddt(V(cntigi));
I(cntsbgis) <+ (LS*CBGS) * ddt(V(cntsbgis));

//--- charge variation : trapped and null bias charges are independant of time -
--
I(cntddi) <+ ch_norm_factor*LD*ddt(h_in_DA_from_D - e_in_DA_from_D)/2;
I(cntdsi) <+ ch_norm_factor*LD*ddt(h_in_DA_from_S - e_in_DA_from_S)/2;
I(cntidi) <+ ch_norm_factor*LI*ddt(h_in_IP_from_D - e_in_IP_from_D)/2;
I(cntisi) <+ ch_norm_factor*LI*ddt(h_in_IP_from_S - e_in_IP_from_S)/2;
I(cntsdi) <+ ch_norm_factor*LS*ddt(h_in_SA_from_D - e_in_SA_from_D)/2;
I(cntssi) <+ ch_norm_factor*LS*ddt(h_in_SA_from_S - e_in_SA_from_S)/2;

end

endmodule

```


Résumé :

Selon l'ITRS, le transistor à nanotube de carbone est une des alternatives prometteuses au transistor MOS Silicium notamment en termes de taille de composant et d'architectures de circuits innovantes. Cependant, à l'heure actuelle, la maturité des procédés de fabrication de ces technologies ne permet pas de contrôler finement les caractéristiques électriques. C'est pourquoi, nous proposons un modèle compact basé sur les principes physiques qui gouvernent le fonctionnement du transistor à nanotube. Cette modélisation permet de lier les activités technologiques à celles de conception de circuit dans le contexte de prototypage virtuel. Pour peu qu'elle inclut des paramètres reflétant la variation des procédés, il est alors possible d'estimer les performances potentielles des circuits intégrés.

Le transistor à nanotube de carbone à modulation de hauteur de barrière (C-CNFET), i.e. « MOS-like », est modélisé analytiquement en supposant le transport balistique des porteurs dans le canal. Le formalisme de Landauer est utilisé pour décrire le courant modulé par le potentiel du canal calculé de façon auto-cohérente avec la charge associée selon le potentiel appliqué sur la grille.

Le modèle du transistor à nanotube de carbone double grille, DG-CNFET est basé sur celui du C-CNFET. Ce transistor est de type N ou P selon la polarisation de la grille supplémentaire. Ce transistor est modélisé de manière similaire pour les 3 régions : la partie interne modulée par la grille centrale, et les accès source et drain modulés par la grille arrière. La charge, plus complexe à calculer que celle du C-CNFET, est résolue analytiquement en considérant différentes plages de polarisation et d'énergie.

Le modèle du DG-CNFET a été mis en œuvre dans le cadre d'architectures de circuits électroniques innovants : une porte logique à 2 entrées comportant 7 transistors CNFET dont 3 DG-CNFET pouvant, selon la polarisation des 3 entrées de configuration, réaliser 8 fonctions logiques différentes.

Mots clefs : électronique, transistor, nanotube de carbone, modélisation compacte, circuit intégré.

Summary:

According to ITRS, the carbon nanotube transistor is one promising alternative to the silicon MOS transistor particularly in terms of device dimensions and novel circuit architectures. However, today, the fabrication processes maturity of these technologies does not allow controlling accurately their electrical characteristics. That's why we propose a compact model based on physical principles that govern the nanotube transistor operation. That modelling allows linking the technological activities to the circuit design ones in the virtual prototyping context. As it includes parameters that reflect the processes variation, it is possible to estimate the potential performances of integrated circuits.

The barrier-height modulated carbon nanotube transistor (C-CNFET), i.e. MOS-like transistor, is analytically modelled assuming ballistic transport of carriers in the channel. The Landauer's formalism is used to describe the current modulated by the channel potential which is self-consistently calculated with the associated charge according to the gate potential.

The model of the double-gate carbon nanotube transistor, DG-CNFET, is based on the C-CNFET one. That transistor is N or P type depending on the additional gate polarisation. That transistor is modelled in a similar way for the 3 regions: the inner part modulated by the central gate, and the source and drain accesses modulated by the back gate. The charge, more complex to calculate than the C-CNFET one, is analytically solved considering different polarisation and energy ranges.

Moreover, the DG-CNFET model has been used into novel electronic circuit architectures: a 2 inputs logic gate, composed of 7 CNFET transistors, 3 of which are DG-CNFET, able to realize 8 different logic functions, according to the polarisation of the 3 configuration inputs.

Key words: electronic, transistor, carbon nanotube, compact modelling, integrated circuit.