



**HAL**  
open science

## Etude théorique de nouveaux concepts de nano-transistors en graphène

Salim Berrada

► **To cite this version:**

Salim Berrada. Etude théorique de nouveaux concepts de nano-transistors en graphène. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2014. Français. NNT : 2014PA112079 . tel-01059811

**HAL Id: tel-01059811**

**<https://theses.hal.science/tel-01059811>**

Submitted on 2 Sep 2014

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE : STITS  
Institut d'Électronique Fondamentale

*DISCIPLINE : PHYSIQUE*

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenance prévue le 16 mai 2014

par

Salim BERRADA

# Etude Théorique de Nouveaux Concepts de Nano-Transistors en Graphène

Composition du jury :

<i>Directeur de thèse :</i>	Philippe Dollfus	Directeur de recherche au CNRS, IEF, Orsay
<i>Rapporteurs :</i>	Marc Bescond	Chargé de recherche au CNRS, IM2NP, Marseille
	Christophe Delerue	Directeur de recherche au CNRS, IEMN, Lille
<i>Examineurs :</i>	Bernard Plaçais (Président)	Directeur de recherche au CNRS, LPA, Paris
	Mairbeck Chshiev	Professeur, CEA/Spintec, Université Joseph Fourier, Grenoble
	Vincent Derycke	Directeur de recherche au CEA, IRAMIS, Saclay
	Viet-Hung Nguyen	Chercheur post-doctorant, IEF, Orsay



## Dédicaces

Je dédie ce manuscrit de thèse à l'ensemble de ma famille pour l'amour et l'affection qu'elle m'a toujours apporté.

Je remercie spécialement mes parents pour leur amour, leur confiance et aussi leur soutien financier durant ces longues années d'études, mes deux frères Omar et Hamza qui m'ont apporté une grande joie de vivre et qui m'ont toujours épaulé moralement, et Lalla Khadouj, la meilleure des grand-mères. Je dédie bien-sûr ce manuscrit à la mémoire de mon grand-père Haj Tayeb Berrada qui a encouragé ma passion pour les sciences dès mon plus jeune âge.

Il m'est également impossible d'oublier le rôle important qu'ont joué les membres de ma « Familia Parisina » et son père spirituel Dr. Louis Chonco J., la faction canadienne avec Stef et Alâa, mes compagnons de route Nawfel Debdoubi, Abdelali El Hiri et Abdellah El Fourtassi, et bien-sûr Adrien et Aline ainsi qu'Omar, mon cousin, pour le bon déroulement de cette thèse... C'est donc avec plaisir que je vous dédie également cette thèse.



# Remerciements

Les mots se bousculent dans ma tête pour exprimer toute ma gratitude envers mon directeur de thèse, Philippe Dollfus. Il m'est difficile d'énumérer en quelques lignes les innombrables qualités scientifiques et humaines de M. Dollfus qui ont fait que j'ai pris beaucoup de plaisir à travailler sous sa direction. J'essaierai de résumer en disant que c'était un immense honneur et un grand privilège d'avoir été le thésard de Philippe Dollfus et que ma rencontre avec ce chercheur a changé ma vie... Merci pour tout Philippe.

Je suis également très reconnaissant envers Viet-Hung Nguyen pour toutes les choses qu'il m'a apprises durant ma thèse. Viet-Hung Nguyen est un excellent scientifique qui aime partager ses connaissances, et avec qui le travail devient vite très agréable. Son implication dans ce travail m'a beaucoup aidé pour le mener à terme.

Je tiens également à remercier Damien Querlioz et Christophe Chassat pour leurs précieux conseils concernant certains aspects numériques des problèmes que j'ai dû traiter durant cette thèse. Je remercie également Jérôme Saint-Martin, Aranud Bournel et l'ensemble des membres du groupe COMICS pour leurs remarques et conseils pertinents durant les réunions de groupe et les répétitions avant les conférences. Ces exercices m'ont bien formé aux présentations scientifiques et je leur en serai toujours reconnaissant.

En résumé, l'ambiance était très bonne dans le groupe et j'ai pris beaucoup de plaisir à en faire partie. Je remercie pour leur soutien et leur bonne humeur Mesdames Valérie Aubry-Fortuna, Sylvie Retailleau, Thi-Thu-Trang Nghiem, Mai-Chung Nguyen et Li Su, et Messieurs Michele Amato, Jérôme Larroque, Adrien Vincent, Ming Shi, Yann Apertet, Vincent Talbo, Fulvio Mazzamuto, Hugues Cazin et tous ceux qui ont visité notre groupe durant ma présence à l'IEF.

Je tiens aussi à remercier l'équipe administrative de l'IEF, et en particulier Mesdames Marie-Pierre Caron et Sylvie Lamour qui m'ont beaucoup facilité la vie...

L'IEF a aussi été l'endroit où j'ai rencontré des collègues très sympathiques qui ont rendu mon quotidien très agréable et resteront de très bon amis. Je pense particulièrement à Adrien Noury, Nicolas Izard, Zouhir, Koro.

Pour finir, je tiens à remercier les membres de mon Jury de thèse qui ont accepté d'évaluer mon travail et dont les remarques ont été pertinentes et très constructives.



# Table des matières

<b>Dédicaces</b> .....	3
<b>Remerciements</b> .....	5
<b>Table des matières</b> .....	7
<b>Introduction</b> .....	13
<b>Chapitre I</b> .....	17
<b>Propriétés électroniques du graphène – Fermions de Dirac et effet tunnel de Klein</b> .....	17
I.1. Structure de bandes du graphène .....	18
I.1.1. Réseau réel et réseau réciproque .....	18
I.1.2. Modèle des liaisons fortes et structure électronique du graphène .....	19
I.2. Le graphène et l'équation de Dirac .....	21
I.2.1. Equation de Schrödinger .....	21
I.2.1.1. Solutions pour une particule libre .....	22
I.2.1.2. Courant de probabilité associé à l'équation de Schrödinger .....	24
I.2.2. Equation de Klein-Gordon .....	26
I.2.2.1. Solutions pour la particule libre .....	29
I.2.2.2. Problèmes associés à l'équation de Klein-Gordon : Absence d'état fondamental et densité de courant de probabilité négatif .....	30
I.2.3. Equation de Dirac .....	31
I.2.3.1. Etablissement de l'équation de Dirac .....	31
I.2.3.2. Equation de Dirac dans un espace à deux dimensions et densité de courant de probabilité associée .....	32
I.3. Analogie entre les électrons dans le graphène et les fermions de Dirac .....	33



I.3.1. Hamiltonien effectif des électrons dans le graphène .....	33
I.3.2. Relation de dispersion et fonctions d'ondes associée à l'Hamiltonien effectif .....	35
I.3.2.1. Relation de dispersion.....	35
I.3.2.2. Fonctions d'onde.....	36
I.3.2.3. Structure de bande des électrons dans le graphène .....	37
I.3.2.4. Densité d'états et densité de charges à température absolue nulle .....	38
I.3.3. La Chiralité comme constante de mouvement dans le graphène.....	39
I.3.4. Résumé en une image de la dynamique des porteurs dans le graphène.....	40
I.4. Le paradoxe de Klein dans le graphène .....	41
I.4.1. Introduction.....	41
I.4.2. Paradoxe de Klein pour les particules sans masse en présence d'une barrière de potentiel .....	42
I.4.2.1. Réfraction dite « anormale » des Fermions de Dirac.....	44
I.4.2.2. Probabilité de transmission des Fermions de Dirac, absence de rétrodiffusion en incidence normale et résonances de Fabry-Pérot .....	45
I.5. Conclusion .....	46
<b>Chapitre II</b> .....	49
<b>Théorie du transport cohérent de charges, application aux dispositifs en graphène</b> .....	49
II.1. Approche semi-classique du transport.....	49
II.2. Formalisme de Green hors équilibre (NEGF) pour le transport balistique .....	51
II.2.1. Cadre théorique de l'étude.....	51
II.2.2. Origine du courant électrique dans les dispositifs électriques.....	52
II.2.3. Formalisme de Green à l'équilibre .....	54
II.2.3.1. Réduction du système fermé en un système ouvert de plus faible dimension .....	54
II.2.3.3. Relation entre le Formalisme de Green et la matrice densité .....	57
II.2.4. Formalisme de la fonction de Green hors équilibre (NEGF) – Formule de Landauer ....	58

II.2.4.1. Transformation du système fermé en système ouvert – fonction de Green de la région active .....	58
II.2.4.2. Fonction de corrélation électronique .....	59
II.2.4.3. Courant dans un dispositif à deux terminaux dans le formalisme NEGF – Formule de Landauer .....	60
II.2.5. Fonction de Green hors équilibre pour les dispositifs en graphène 1D et 2D dans le cadre du modèle des liaisons fortes .....	62
II.2.5.1. Application du formalisme aux nanorubans .....	62
II.2.5.2. Extension aux structures 2D .....	65
II.3. Conclusion .....	67
<b>Chapitre III</b> .....	69
<b>Etude du transistor à effet de champ à base de graphène pristine 2D (GFET)</b> .....	69
III.1. Etat de l’art de l’électronique graphène "Haute Fréquence" .....	69
III.1.1. Il était une fois, avant le h-BN... .....	69
III.1.2. Etat de l’art et les promesses du graphène pour l’électronique HF .....	73
III.1.3. La technologie GFET sur h-BN .....	74
III.2. Modèle et simulation d’un GFET à canal court sur substrat de nitrure de bore hexagonal ..	76
III.2.1. Description de la géométrie du transistor .....	76
III.2.2. Modèle physique du transistor .....	77
III.2.3. Description du Code utilisé dans nos simulations : GRAPHENATOR (GRAPHENE NANODEVICES SIMULATOR) .....	78
III.2.4. Régimes de transport et pseudo gap dans un GFET .....	79
III.3. Résultats .....	81
III.3.1. Origines du Point de Dirac, de son évolution en fonction de $V_{DS}$ et de l’asymétrie entre la branche P et la branche N .....	81
III.3.2. Influence de la longueur de grille et de la température sur les caractéristiques I- $V_{GS}$ .....	84

III.3.2.1. Caractéristiques $I-V_{GS}$ , Point de Dirac.....	84
III.3.2.2. Performances fréquentielles .....	86
III.4. Abaissement de la barrière induite par la tension de drain (DIBL) dans les GFET.....	89
III.4.1. Résultats des simulations .....	89
III.4.2. Modèle proposé pour expliquer le DIBL dans les GFET.....	90
III.5. Conclusion.....	95
<b>Chapitre IV</b> .....	<b>97</b>
<b>Etude du transistor GNMFET (Graphene NanoMesh Field Effect Transistor)</b> .....	<b>97</b>
IV.1. Réalisations expérimentales de Graphene NanoMesh (GNM).....	99
IV.2. Travaux théoriques sur les GNM.....	103
IV.3. Caractéristiques des transistors à canal en GNM (GNMFET) et modèle physique adopté	108
IV.3.1. Caractéristiques géométriques .....	108
IV.3.2. Caractéristiques électroniques des GNM étudiées.....	109
IV.3.3. Modèle du GNM-FET.....	111
IV.4. Caractéristiques courant-tension des GNMFET .....	112
IV.4.1. Amélioration du rapport On/off par rapport aux GFET.....	112
IV.4.2. Suppression du courant dû à l'effet tunnel Chiral dans les GNMFET .....	113
IV.4.3. Décalage du point de Dirac vers les tensions de grilles positives et saturation du courant.....	115
IV.5. Performances fréquentielles de GNMFET.....	116
IV.5.1. Dégradation de la transconductance et fréquence de coupure .....	116
IV.5.2. Amélioration du gain en tension et de la fréquence maximale d'oscillation .....	117
IV.6. Stabilité de la barrière de potentiel dans la branche thermoïnique et saturation du courant .....	118
IV.6. Conclusion .....	120
<b>Chapitre V</b> .....	<b>123</b>

<b>Etude du transistor à effet tunnel de Klein (KTFET)</b> .....	123
V.1. Principe de fonctionnement KTFET : modèle optique .....	124
V.1.1 Trajectoire d'un Fermion de Dirac dans le prisme à effet tunnel de Klein (KTP).....	124
V.1.2. Etats passant et bloqué du KTP : réflexion totale interne .....	126
V.1.3. Géométrie du KTFET étudié.....	127
V.1.4. Modèle d'optique géométrique du KTFET .....	128
V.2. Simulation NEGF du KTFET.....	130
V.2.1. Dispositifs étudiés, modèle NEGF .....	130
V.2.2. Optimisation du temps de calcul .....	130
V.2.3. Résultats du modèle NEGF et comparaison avec le modèle optique.....	134
V.3. Conclusion.....	137
<b>Conclusion</b> .....	139
<b>Annexe A</b> .....	141
<b>Résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson dans les dispositifs en graphène</b> .....	141
A.1. Résolution de l'équation de Poisson par la méthode « Globally convergent Method » .....	141
A.2. Choix du Jacobien .....	144
A.3. Conclusion.....	145
<b>Abréviations</b> .....	147
<b>Symboles</b> .....	151
<b>Références</b> .....	153
<b>Bibliographie de l'auteur</b> .....	161
Articles de revues.....	161
Conférences .....	161
Conférences invitées .....	161
Conférences avec acte .....	161

Conférences sans actes .....162

# Introduction

Cette thèse porte sur l'étude théorique de nouveaux concepts de transistors en graphène par le formalisme des fonctions de Green dans l'hypothèse du transport balistique. Le graphène est un matériau bidimensionnel composé d'atomes de carbone organisés en nid d'abeille. Cette structure confère des propriétés uniques aux porteurs de charge dans le graphène, comme une masse effective nulle et un comportement ultra-relativiste (fermions de Dirac) [Wallace\_PR\_1947]. Du fait de ces particularités, des mobilités intrinsèques extraordinairement élevées ont été théoriquement prédites [Castro\_Neto\_2009] et expérimentalement vérifiées. C'est ainsi que nous avons consacré le premier chapitre de cette thèse à l'étude, dans le cadre du modèle des liaisons fortes, de la structure de bandes des électrons dans ce matériau. Nous verrons comment cette structure de bande se réduit, au voisinage des points K et K' du graphène, à un modèle similaire à celui des fermions de Dirac avec une vitesse  $v_F = 10^6 \text{ m s}^{-1}$ . Ce modèle permet d'expliquer les propriétés uniques des porteurs de charge dans le graphène et leurs conséquences sur le transport dans les dispositifs basés sur ce matériau.

Un matériau avec une mobilité très élevée est un formidable atout pour envisager la fabrication de dispositifs fonctionnant à très haute fréquence. C'est pourquoi des efforts très importants ont été mis en œuvre dans la communauté scientifique pour la réalisation de transistors en graphène (GFET). Les premiers GFET ont été réalisés sur de la silice [Novoselov\_Science\_2004]. Bien qu'on ait pu observer des signatures de fermions de Dirac dans ces dispositifs [Geim\_NatMat\_2007], la silice dégrade très fortement les propriétés intrinsèques des porteurs dans le graphène [Morozov\_PRL\_2008], et ne permet donc pas de tirer profit de tout le potentiel que ce matériau est susceptible d'offrir. L'étude du transport de charge dans le graphène suspendu a montré que l'on pouvait atteindre de très hautes mobilités, de l'ordre de  $200\,000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Cette mobilité est très supérieure à celles obtenues jusque-là dans les GFET sur de la silice. C'est ainsi que la communauté scientifique s'est tournée vers l'utilisation d'autres substrats. L'utilisation de substrats en carbone en structure diamant (DLC) ou encore du carbure de silicium (SiC) a permis d'améliorer considérablement les performances fréquentielles de GFET conventionnels [Wu\_NanoLett\_2012], mais les mesures de mobilités ont montré qu'elles sont bien inférieures à celles des Fermions de Dirac dans le graphène suspendu. C'est dans ce contexte qu'on a découvert que l'utilisation du Nitrure de Bore hexagonal (h-BN), comme substrat pour les GFET, permet d'améliorer considérablement le transport des fermions de Dirac dans le graphène. L'influence de ce substrat sur le transport dans le graphène est tellement faible qu'on obtient dans les GFET sur h-BN, des mobilités de porteurs très proches de celles qu'on obtient dans du graphène suspendu [Zomer\_APL\_2011], et un libre parcours moyen dépassant

1  $\mu\text{m}$  [Mayorov\_NanoLett\_2011]. On a pu constater que la conséquence de ce transport fortement balistique est que les GFET sur h-BN présentent, à longueur de grille égale, des fréquences de coupures et des fréquences d'oscillation maximales bien supérieures à celles que l'on obtient en utilisant d'autres types de substrats [Meric\_IEEE\_Proc\_2013]. Cependant, les GFET sur h-BN réalisés jusqu'ici ont généralement des longueurs de grilles de plusieurs centaines de nanomètres. C'est pourquoi nous avons développé un code auto-cohérent, dans le cadre du formalisme des fonctions de Green hors équilibre (NEGF) couplé à l'équation de poisson et dans l'hypothèse de transport balistique, pour prédire les performances fréquentielles des GFET sur h-BN quand la longueur de grille ne dépasse pas quelques dizaines de nanomètres.

C'est ainsi que nous avons consacré le deuxième chapitre à la présentation du formalisme NEGF dans l'hypothèse du transport balistique. Nous montrons comment ce modèle permet d'expliquer l'établissement du courant dans un nano-dispositif, de calculer sa valeur, et de calculer la distribution de charges dans la région active du nano-dispositif. La dernière partie de ce chapitre est consacrée à l'application de ce formalisme aux dispositifs basés sur l'utilisation du graphène comme région active.

Nous sommes passés ensuite, dans le troisième chapitre, à l'étude des GFET sur h-BN. Nous y décrivons le modèle qu'utilise notre code auto-cohérent pour coupler l'équation de poisson et le formalisme NEGF. Nos simulations montrent que les GFET sur h-BN ayant une longueur de grille inférieure à 50 nm présentent des fréquences de coupures supérieures à 1 THz. Cependant, nos calculs montrent que l'absence d'une bande interdite, combinée avec l'apparition de l'effet tunnel de Klein, a pour effet de dégrader considérablement le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  des GFET, et de causer un fort abaissement de la barrière de potentiel dans le canal (DIBL) empêchant ainsi toute saturation du courant dans les caractéristiques  $I-V_{DS}$  aux forts  $V_{GS}$ , c'est-à-dire là où se trouve le maximum de la transconductance. La forte conduction de sortie qui en résulte dégrade fortement la fréquence maximale d'oscillation, ce qui constitue un sérieux inconvénient pour les applications très hautes fréquences. Nous avons introduit, dans la dernière partie de ce chapitre, un modèle qui permet d'expliquer le DIBL dans les transistors à base de graphène. Ce modèle prédit que la présence d'une bande interdite dans le canal doit permettre, en plus de l'amélioration du rapport  $I_{On}/I_{Off}$ , de réduire fortement le DIBL dans la branche 'n', et d'augmenter donc fortement la fréquence maximale d'oscillation.

C'est donc dans ce contexte que nous nous sommes proposés d'étudier un nouveau concept de transistor qui utilise une structure à base de graphène possédant une large bande interdite comme canal du transistor. De précédents travaux théoriques et expérimentaux ont montré que la réalisation d'un super-réseau d'anti-dots dans la feuille de graphène – appelée Graphene NanoMesh (GNM) – permet d'ouvrir une bande interdite dans le graphène [Bai\_NatNanotech\_2010]. On s'est donc d'abord proposé d'étudier l'apport de l'introduction de ce type de structure pour former le canal des transistors – appelés GNMFET – par rapport aux GFET « conventionnels ».

Cette étude est présentée dans le quatrième chapitre. La première partie de ce chapitre justifie notre choix de ce type de structures, alors que la deuxième détaille les différentes techniques de réalisation expérimentale de GNM utilisées. La partie suivante est consacrée à l'étude de la structure de bandes des GNM, qui montre qu'un bon dimensionnement des GNM permet d'ouvrir une large bande interdite pour les porteurs de charges. Les parties suivantes sont dédiées à la présentation de nos résultats. La comparaison des résultats obtenus pour un GNM-FET avec un GFET de mêmes dimensions permettent d'affirmer que l'on peut améliorer le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  de trois ordres de grandeurs pour une taille et une périodicité adéquate des trous. Bien que l'introduction d'un réseau de trous réduise légèrement la fréquence de coupure intrinsèque  $f_T$ , il est remarquable de constater que la bonne saturation du courant dans la branche N, qui résulte de la présence de la bande interdite dans le GNM, conduit à une fréquence maximale d'oscillation bien supérieure dans le GNM-FET. Le gain en tension dans ce dernier est aussi amélioré d'un ordre de grandeur par rapport au GFET conventionnel. Nous proposons à la fin de ce chapitre un modèle qui permet d'expliquer l'absence de DIBL dans la branche thermoïnique d'un GNM-FET et qui conduit à cette très bonne saturation.

Bien que les résultats sur le GNM-FET soient très encourageants, l'introduction d'une bande interdite dans la feuille de graphène induit inévitablement une masse effective non nulle pour les porteurs, et donc une vitesse de groupe plus faible que dans le graphène intrinsèque. C'est pourquoi, en complément de ce travail et sur une idée originale de M. Bernard Plaçais, nous avons exploré la possibilité de moduler le courant dans un GFET sans ouvrir de bande interdite dans le graphène. La solution que nous avons proposée consiste à utiliser une grille triangulaire à la place d'une grille rectangulaire. Cette solution exploite les propriétés du type « optique géométrique » des fermions de Dirac dans le graphène, qui sont inhérentes à leur nature « Chirale », pour moduler l'effet tunnel de Klein dans le transistor et bloquer plus efficacement le passage des porteurs dans la branche P quand le dopage des sources et drains sont de type N. C'est pourquoi nous avons choisi d'appeler ce transistor le « Klein Tunneling FET » (KTFET). Le résultat de cette étude est présenté au cinquième et dernier chapitre. Nous avons pu montrer que cette géométrie permettrait d'obtenir un courant  $I_{Off}$  plus faible que ce qui est obtenu d'habitude, pour la même surface de grille, pour les GFET conventionnels. Cela offre la perspective d'une nouvelle approche de conception de dispositifs permettant d'exploiter pleinement le caractère de fermions de Dirac des porteurs de charges dans le graphène.

Cette thèse se termine par une synthèse du résultat de mes travaux et des perspectives que cette thèse est susceptible d'offrir.





# Chapitre I

## Propriétés électroniques du graphène – Fermions de Dirac et effet tunnel de Klein

Le graphène est un matériau bidimensionnel composé d'atomes de carbone organisés en nid d'abeille. Le calcul de la structure de bande de ce matériau par le modèle des liaisons fortes [Wallace\_PR\_1947] révèle qu'il est un semi-métal, c'est-à-dire que la Bande de Conduction (BC) et la Bande de Valence (BV) se touchent en certains points de même énergie de la zone de Brillouin, appelés points de Dirac. Ce calcul montre également que les porteurs de charges dans ce matériau ont une relation de dispersion linéaire, et qu'ils se comportent comme des Fermions de Dirac de vitesse  $v_F = 10^6 \text{ ms}^{-1}$  au voisinage des points de Dirac.

Cette structure de bande unique confère des propriétés très spécifiques aux porteurs de charge dans le graphène, comme une masse effective nulle et un comportement ultra-relativiste, ou encore la possibilité de traverser une barrière de potentiel par effet tunnel de Klein, aussi haute soit-elle, avec un coefficient de transmission égal à l'unité pour une incidence normale. La compréhension des propriétés de transport de charges dans le graphène passe donc par une bonne compréhension de la dynamique des particules sans masse obéissant à un Hamiltonien de Dirac.

Aussi, nous commencerons ce chapitre par le calcul de la structure de bande du graphène dans le cadre du modèle des liaisons fortes, et montrerons comment ce modèle se ramène au modèle de Dirac au voisinage des points de Dirac. Nous passerons ensuite, dans une deuxième partie, à la dynamique des porteurs dans le cadre du modèle de Dirac pour des particules ultra-relativistes (sans masse), et soulignerons les différences qui existent entre ce type de particules et les particules (quantiques) non relativistes. Le troisième paragraphe sera consacré au lien entre les particules dans le graphène et les particules ultra-relativiste. Cette troisième partie se termine par une figure très importante qui résume la dynamique des particules libres dans le graphène. La quatrième partie sera dédiée à un phénomène qui n'a jamais été observé dans aucun autre matériau, et qui va jouer un rôle capital dans les dispositifs à base de graphène que nous avons étudiés dans cette thèse. Il s'agit bien sûr de l'effet tunnel de Klein, appelé également effet tunnel chiral. Nous finirons par une petite conclusion de ce chapitre au cinquième paragraphe.

## I.1. Structure de bandes du graphène

### I.1.1. Réseau réel et réseau réciproque

Le carbone est un atome à 4 électrons de valence. La configuration électronique de cette couche est  $2s^2 2p^2$ . En effet, il est naturel que l'orbitale 2s soit remplie avant l'orbitale 2p celle-ci étant plus haute en énergie de 4 eV. Dans le graphène cependant, la présence des atomes de carbone avoisinants entraîne l'excitation d'un électron de la couche 2s pour venir hybridier les orbitales 2s,  $2p_x$  et  $2p_y$  et créer des liaisons covalentes entre eux qui entraînera un gain en énergie supérieur aux 4eV « investis » dans l'excitation de l'électron 2s. Cette hybridation, appelée  $sp^2$ , consiste en 3 liaisons  $\sigma$  dans le plan, formant entre elles des angles multiples de  $120^\circ$ , de sorte que la distance entre deux atomes de carbone proches voisins est de  $a_c = 0.142 \text{ nm}$  dans les 3 directions. C'est ce qui explique le caractère planaire du graphène et la structure hexagonale de sa maille cristalline.

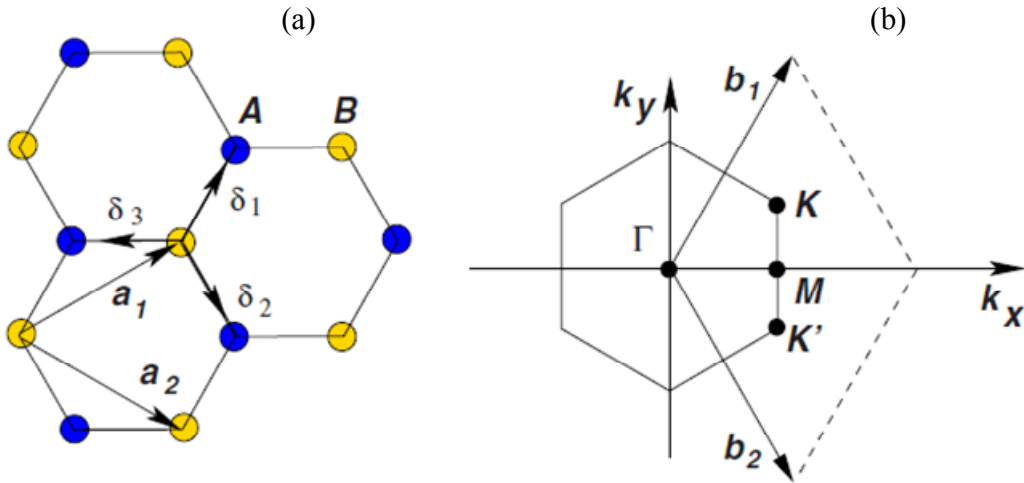


Fig. 1: (a) Réseau dans l'espace réel du graphène (b) réseau réciproque.  
Image extraite de [Castro\_Neto\_2009]

La physique des cristaux est par définition indissociable de la notion de périodicité et on ne peut reproduire la périodicité du graphène avec un seul atome par maille. C'est pourquoi le graphène est modélisé par un réseau triangulaire périodique à deux atomes par Maille Élémentaire (ME) – qu'on appellera A et B – avec une périodicité qui peut être reproduite en considérant la base sous-tendue par [Fig. 1a]

$$\vec{a}_1 = \frac{a_c}{2} (3, \sqrt{3}) \text{ et } \vec{a}_2 = \frac{a_c}{2} (3, -\sqrt{3}). \quad (1.1)$$

Il en résulte que le réseau réciproque est également triangulaire avec des vecteurs de base donnés par [Fig. 1b]

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_c}(1, \sqrt{3}) \text{ et } \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_c}(1, -\sqrt{3}). \quad (1.2)$$

La zone de Brillouin prend ainsi la forme d'un hexagone dont trois des vertex sont appelés points K et les trois autres sont appelés points K'. Les points K sont tous équivalents – reliés par un vecteur du réseau réciproque – au point de coordonnées

$$K = \frac{2\pi}{3a_c}(0, 1), \quad (1.3)$$

alors que les points K' sont tous équivalents au point de coordonnées

$$K' = \frac{2\pi}{3a_c}(0, -1). \quad (1.4)$$

Les électrons qui sont restés sur l'orbitale  $2p_z$  – découplée des autres orbitales  $sp^2$  – sont faiblement liés aux atomes de carbone formant la bande 'anti-liante'  $\pi$  du matériau qui peut conduire du courant à cause des états qu'elle induit à proximité du niveau de Fermi du graphène. Les électrons  $sp^2$  sont par contre fortement liés aux noyaux et contribuent à la formation d'états très profonds en énergie, primordiaux pour les propriétés mécaniques du graphène mais qui sont sans aucun intérêt pour l'étude du transport électronique. **C'est pourquoi nous ne nous intéresserons dans tout ce qui va suivre qu'uniquement aux électrons de la bande  $2p_z$ .**

### ***1.1.2. Modèle des liaisons fortes et structure électronique du graphène***

Les électrons de cette bande sont très bien décrits par le Hamiltonien de liaisons fortes

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, s} a_{i,s}^\dagger b_{j,s} + h.c., \quad (1.5)$$

où la somme porte sur tous les couples d'atomes  $(i, j)$  premiers proches voisins entre eux ainsi que sur les deux configurations de spin possibles  $s$ . L'opérateur  $b_{j,s}$  détruit un électron situé sur le site  $j$  du sous réseau B,  $a_{i,s}^\dagger$  est un opérateur qui crée un électron sur le site  $i$  du sous réseau A proche voisin de  $j$ , h.c. est le conjugué hermitien correspondant et  $t$  est appelé paramètre de saut ("hopping" en anglais) du modèle que l'on l'a pris égal à 2,7 eV dans cette étude [Nguyen\_Nanotech\_2012].

La structure de bande s'obtient en calculant les valeurs propres de l'équation (1.2) de Schrödinger (ES) pour les électrons de la bande  $2p_z$  :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (1.6)$$

Pour ce faire il convient d'exprimer  $\psi$  sous forme d'une combinaison linéaire des orbitales atomiques  $u_m^{(A)}$  et  $u_m^{(B)}$  des atomes A et B de toutes les mailles élémentaire (ME) indexée par  $m$ , c'est-à-dire

$$\psi = \sum_m \psi_m^{(A)} u_m^{(A)} + \psi_m^{(B)} u_m^{(B)}. \quad (1.7)$$

La représentation matricielle de (1.9) dans la base  $\left\{ \left\langle u^{(A)}, u^{(B)} \right\rangle_m \right\}$  s'écrit pour tout couple de coordonnées de  $\psi$  dans la maille  $m$

$$E \begin{pmatrix} \psi_m^{(A)} \\ \psi_m^{(B)} \end{pmatrix} = \sum_n H_{m,n} \begin{pmatrix} \psi_n^{(A)} \\ \psi_n^{(B)} \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

où  $H_{m,n}$  est une matrice ( $2 \times 2$ ). En utilisant la périodicité du réseau, on peut écrire

$$\begin{pmatrix} \psi_m^{(A)} \\ \psi_m^{(B)} \end{pmatrix} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \begin{pmatrix} \phi^{(A)} \\ \phi^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Alors (1.8) devient

$$E \begin{pmatrix} \phi^{(A)} \\ \phi^{(B)} \end{pmatrix} = \left( \sum_n H_{m,n} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)} \right) \begin{pmatrix} \phi^{(A)} \\ \phi^{(B)} \end{pmatrix} = H_{\langle m,n \rangle}^{\vec{k}} \begin{pmatrix} \phi^{(A)} \\ \phi^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

La périodicité du réseau permet de poser  $\vec{R}_m = \vec{0}$  et  $H_{\langle m,n \rangle}^{\vec{k}}$  est non identiquement nulle que lorsque  $\vec{R}_n = \pm \vec{a}_{1,2}$ . Ainsi,

$$\begin{aligned} H_{\langle m,n \rangle}^{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} 0 & -t \\ -t & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -te^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -te^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \dots \\ &\dots + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -te^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -te^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Donc quelle que soit la ME, repérée par les indice  $(m, n)$ , où l'on se place, nous avons

$$H_{\langle m,n \rangle}^{\vec{k}} = H_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} 0 & h(\vec{k}) \\ h^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

avec

$$h(\vec{k}) = -t \left( 1 + 2e^{i\frac{3a_c}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a_c}{2}k_x\right) \right). \quad (1.13)$$

L'équation (1.12) conduit à des valeurs propres du Hamiltonien données par

$$E(k_x, k_y) = \pm |h(\vec{k})| = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a_c}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{3a_c}{2}k_x\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}a_c}{2}k_y\right)}. \quad (1.14)$$

Cette équation nous dit que les valeurs propres viennent en paires symétriques par rapport au point d'énergie  $E = 0$  eV, appelé point de neutralité ou "Neutrality Point" (NP). Les valeurs propres positives forment la Bande Conduction (BC) et les valeurs propres négatives la bande valence (BV). On remarque que la BC et la BV se touchent en un seul point en énergie  $E = 0$  autour des six points K et K' [Fig. 2].

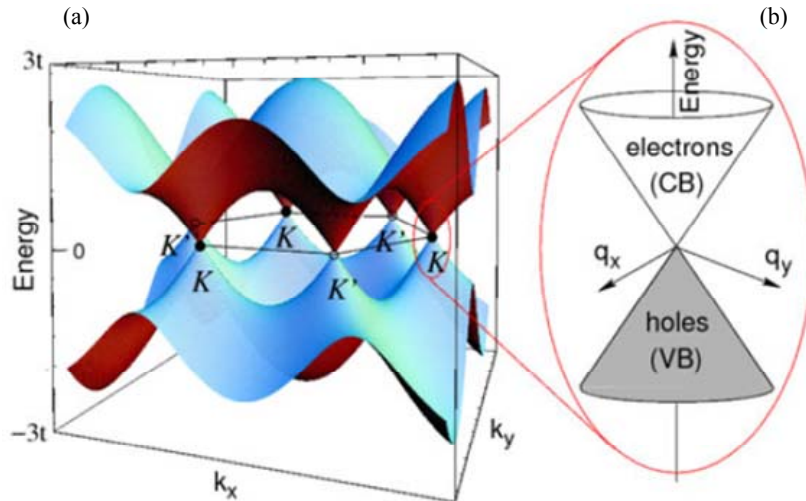


Fig. 2: (a) Relation de dispersion du graphène en fonction du vecteur d'onde pris du centre de la zone de Brillouin (point  $\Gamma$ ). (b) Zoom sur la relation de dispersion au voisinage du point K et mise en évidence de la relation de dispersion conique en fonction du vecteur d'onde réduit au voisinage de ce point ( $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$ ).

Repris de [Allain\_EPJB\_2011]

## I.2. Le graphène et l'équation de Dirac

### I.2.1. Equation de Schrödinger

Historiquement, l'invention de cette équation a été nécessaire pour expliquer, entre autres, le phénomène de discrétisation des spectres atomiques. C'est un domaine où la mécanique classique a complètement échoué. Le terme quantique apparaît pour la première fois quand Planck postule l'existence de quanta d'énergie dans la lumière pour résoudre le problème de la « catastrophe

ultraviolette » [Cohen-Tanoudji\_book]. Ces quantas d'énergie présents dans la lumière seront appelés photons. Sur la base d'observations expérimentales, Niels Bohr avait proposé en 1913 un modèle où les électrons dans un atome gravitaient autour du noyau dans des orbites qui sont en fait des états stationnaires possédants des énergies bien définies [Cohen-Tanoudji\_book]. Ceci permettait d'expliquer les spectres d'absorption dès que l'on postulait qu'un électron pouvait « sauter » d'une orbite à une autre, et que par conséquent (conservation d'énergie oblige), il ne pouvait absorber ou émettre que des photons d'énergie correspondant à la différence d'énergie entre les deux états stationnaires « mis en jeu ».

Cependant, on ignorait tout de la formation de ces états discrets ainsi que la dynamique des électrons dans ces états. C'est alors qu'Erwin Schrödinger publia en 1926 la célèbre formule qui portera son nom. Bien que ce dernier l'ait introduite comme équation du mouvement, elle sera interprétée par la suite – sur proposition de Max Born la même année – comme l'équation d'évolution de la densité de probabilité associée à la particule. Heisenberg lui donna sa formulation matricielle et Dirac les notations Bra-Ket que nous lui connaissons actuellement. Dans cette notation, l'équation de Schrödinger (ES) d'un système physique s'écrit

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (1.15)$$

où  $H$  est le Hamiltonien du système, c'est-à-dire l'opérateur associé à son énergie totale et  $E$  la valeur de cette dernière. Cette équation traduit le fait qu'un système fermé d'énergie totale  $E$  se trouvant dans un état  $|\Psi\rangle$  y reste indéfiniment, et que la valeur de son énergie totale  $E$  est une valeur propre de l'Hamiltonien  $H$  dans ce même état  $|\Psi\rangle$ .

Nous allons à présent rappeler le traitement du problème de la propagation d'une particule libre dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste. Nous allons insister sur la forme de la fonction d'onde, la relation de dispersion et la densité de courant de probabilité, et voir comment les corrections relativistes changent de manière radicale les réponses à ce problème.

### **I.2.1.1. Solutions pour une particule libre**

Une particule libre est une particule dont l'énergie potentielle est uniformément nulle et qui ne subit aucune interaction durant son évolution. L'énergie totale de cette particule se résume donc à son énergie cinétique, et la mécanique Hamiltonienne nous dit que son énergie cinétique est donnée par  $E_C = p^2/2m$ . L'opérateur qui lui est associé est donc

$$E_c = \frac{\vec{P} \cdot \vec{P}}{2m}, \quad (1.16)$$

où  $\vec{P}$  l'opérateur impulsion. Cet opérateur s'écrit en représentation  $|\vec{r}\rangle$  sous la forme

$$\vec{P} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}}. \quad (1.17)$$

Alors que l'énergie totale de la particule est représentée par l'opérateur

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (1.18)$$

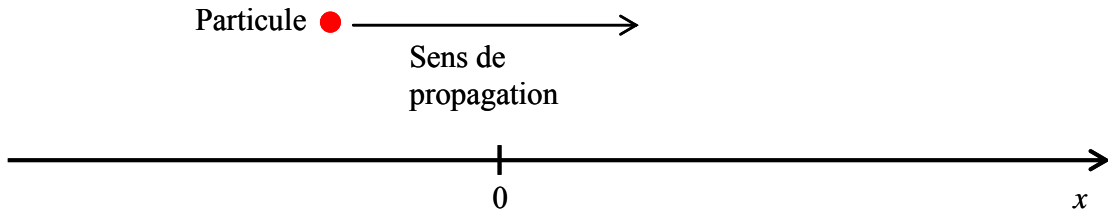
l'ES de cette particule s'écrit en représentation  $|\vec{r}\rangle$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t). \quad (1.19)$$

Comme ici le Hamiltonien ne dépend pas du temps, la fonction d'onde se factorise en une composante spatiale et une composante temporelle sous la forme

$$\Psi(\vec{r}, t) = \xi(\vec{r}) \varphi(t). \quad (1.20)$$

Résolvons alors cette équation pour une particule se propageant dans espace à une dimension dans le sens des abscisses croissants 'x', comme indiqué en Fig. 3.



**Fig. 3: particule libre se propageant de la gauche vers la droite dans le sens des 'x' croissants**

L'équation (1.19) s'écrit alors :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial x^2}}{\xi(x)} = f(x) = \frac{i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}}{\varphi(t)} = g(t) = E, \quad (1.21)$$

où  $E$  a la dimension d'une énergie. En posant



$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \omega = i \frac{E}{\hbar} \end{cases}, \quad (1.22)$$

Les solutions de ce système sont

$$\begin{cases} \varphi(t) = Ce^{-i\omega t} \\ \xi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \end{cases}. \quad (1.23)$$

La fonction d'onde de la particule libre est alors donnée par

$$\Psi(x, t) = C(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\omega t}. \quad (1.24)$$

Comme on le verra dans la section suivante, une composante  $B \neq 0$  donnerait lieu à une composante du courant de probabilité allant dans le sens contraire au sens de propagation de la particule que nous avons spécifié [Fig. 3], c'est-à-dire dans le sens des 'x' décroissants. La normalisation de la fonction d'onde de la particule sur l'espace de volume  $\Omega$  qu'elle occupe nous donne finalement l'onde plane

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(kx - \omega t)}. \quad (1.25)$$

Une remarque très importante à propos de cette dernière équation. Etant donné l'expression du vecteur d'onde  $k$  dans l'équation (1.22), on voit que **la forme de la fonction d'onde (1.25) interdit la propagation de particules d'énergie négative**. On a alors dans ce cas des ondes évanescentes.

### 1.2.1.2. Courant de probabilité associé à l'équation de Schrödinger

D'après l'équation (1.17) et l'Hermitéité de l'Hamiltonien, on remarque que :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) \quad (1.26)$$

En multipliant (1.19) par  $\Psi^*(\vec{r})$  et (1.26) par  $\Psi(\vec{r})$  à droite, on obtient après soustraction des deux équations

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left( \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) \right) \\ &= -\vec{\nabla}_{\vec{r}} \left( \text{Re} \left( \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \vec{V}_g \cdot \Psi(\vec{r}, t) \right) \right),\end{aligned}\quad (1.27)$$

Où l'on a posé que l'opérateur  $\vec{V}_g$ , qui a la dimension d'une vitesse, est donné par

$$\vec{V}_g = \frac{1}{m} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}}. \quad (1.28)$$

En posant

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Psi^*(\vec{r}, t) \right) \\ &= \text{Re} \left( \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \vec{V}_g \cdot \Psi(\vec{r}, t) \right)\end{aligned}\quad (1.29)$$

$$\rho(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.30)$$

Il vient

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot \vec{J}, \quad (1.31)$$

où  $\rho(\vec{r}, t)$ , appelée densité de probabilité, et  $\vec{J}(\vec{r}, t)$ , appelée Densité de Courant de Probabilité, sont respectivement en  $m^{-N}$  et  $m^{-(N-1)} s^{-1}$ ,  $N$  étant la dimension de l'espace en question. L'équation (1.31) traduit la conservation du courant de probabilité en mécanique quantique.

Comme  $\vec{V}_g = \frac{\vec{P}}{m}$  et  $E_c = \frac{\vec{P} \cdot \vec{P}}{2m}$  sont des fonctions d'opérateurs l'un de l'autres, ils commutent et ont par conséquent les mêmes vecteurs propres. Il vient alors

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \vec{v}_g, \quad (1.32)$$

où  $v_g$  est la valeur propre de l'opérateur de vitesse  $\vec{V}_g$  associé à la particule. Si on applique (1.29) à la particule libre se propageant à une dimension, on trouve pour la densité de courant l'expression

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J} = \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{\hbar k}{m}\right) \vec{e}_x. \quad (1.33)$$

Nous retrouvons donc l'expression (1.32), quand nous utilisons la relation bien connue de la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes planes centré sur  $\vec{k}$

$$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}), \quad (1.34)$$

où  $E(\vec{k})$  est appelée relation de dispersion. On la déduit de (1.20), sous la forme

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.35)$$

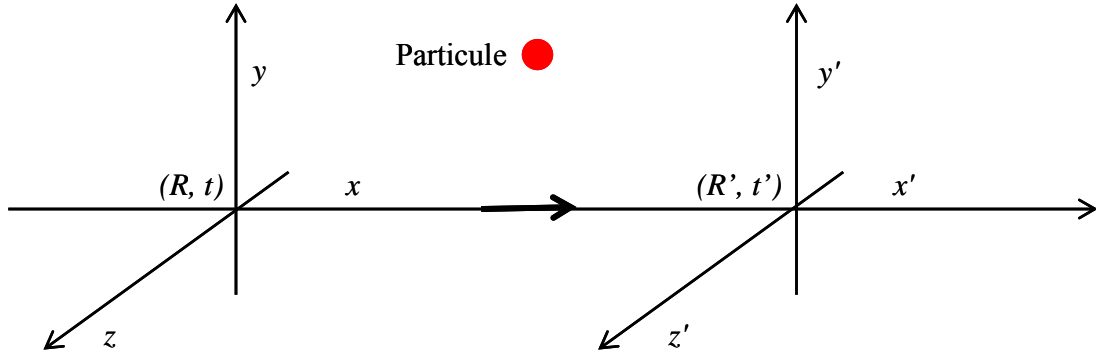
On dit alors qu'on a une relation de dispersion parabolique. On voit donc que l'opérateur vitesse de l'équation (1.28) n'est rien d'autre que l'opérateur associé à la vitesse de groupe de la particule libre ayant une relation de dispersion parabolique. Il est important de noter que nous sommes en régime d'« écoulement stationnaire » de la densité de probabilité, c'est-à-dire

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\Omega}\right) = 0. \quad (1.36)$$

On voit donc d'après (1.32), ou sur le cas particulier (1.33), que la densité de courant de probabilité et la vitesse de groupe sont toujours parallèles et orientées dans le même sens quand la particule obéit à l'ES non relativiste. Le coefficient de proportionnalité n'est rien que la densité de probabilité qui s'écoule. Cette expression du courant de densité de probabilité en régime stationnaire est similaire à celle du courant – en régime stationnaire – de toutes les autres quantités pouvant être représentées par une densité des autres branches de la physique : électrocinétique, mécanique des fluides.

### ***1.2.2. Equation de Klein-Gordon***

Naturellement, des auteurs se sont rapidement demandés ce que deviendrait l'ES pour une particule relativiste. Dans la première « version » de la mécanique quantique, le temps est traité comme un paramètre et non comme une variable, qui de plus est séparée des variables de l'espace. Or, d'après la mécanique relativiste, on sait que c'est faux. En effet, pour avoir une description correcte d'une particule relativiste, sa position doit être décrite par un quadruplet comprenant les variables d'espace et la variable temps.



**Fig. 4: Référentiels Galiléens en mouvement de translation uniforme l'un par rapport à l'autre de vitesse  $v$ , chacun possédant son propre temps  $t$  (respectivement  $t'$ ) et sa propre règle  $(x, y, z)$  (respectivement  $(x', y', z')$ ) pour rapporter les coordonnées de la particule dans l'espace et dans le temps.**

Considérons deux référentiels  $R(t, x, y, z)$  et  $R'(t', x', y', z')$ , chacun étant muni de sa propre « règle de mesure » et de sa propre horloge.

Si le second référentiel a son axe d'abscisses  $Ox'$  colinéaire à l'axe  $Ox$  du repère initial et se trouve en translation uniforme de vitesse  $v$  constante par rapport au premier référentiel, le quadruplet doit subir la transformation de Lorentz [Lambert]

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (1.37)$$

où  $\beta = \frac{v}{c}$  et  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ . On voit clairement que le temps «  $t'$  » mesuré dans  $R'$  est lié au

temps «  $t$  » mesuré dans le référentiel  $R$ , mais aussi à la variable d'espace «  $x$  » de ce même référentiel. Il devient donc évident que l'on ne peut plus traiter le temps et les variables d'espace séparément étant donné le couplage qui les relie.

En mécanique classique, quand on prend deux évènements qui se produisent dans l'univers, l'intervalle de temps et l'intervalle d'espace qui les séparent sont les mêmes selon qu'on les « enregistre » suivant des mesures effectuées depuis le référentiel  $R$  ou selon le référentiel  $R'$ , pourvu que les deux référentiels soient Galiléens. En effet, on a en mécanique classique  $\Delta x' = \Delta x$ ,  $\Delta y' = \Delta y$ ,  $\Delta z' = \Delta z$  et  $\Delta t' = \Delta t$ . En relativité restreinte, les choses sont différentes.

Dans la situation décrite précédemment, nous avons  $\Delta x' = \frac{\Delta x}{\gamma}$ ,  $\Delta y' = \Delta y$ ,  $\Delta z' = \Delta z$  et  $\Delta t' = \gamma \Delta t$ .

On remarque donc que la distance spatiale n'est plus la même et que la distance temporelle des deux évènements n'est plus la même non plus. La description des évènements devient très compliquée dans le cadre d'une séparation de l'espace et du temps puisque la physique peut dépendre du référentiel.

On a besoin d'introduire ce qu'on appelle l'espace-temps de Minkowski, caractérisé par la métrique de Minkowski

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.38)$$

La métrique est tout simplement la matrice de la forme bilinéaire symétrique associée au produit scalaire dans un espace vectoriel. Dans le cadre de cette métrique, on voit que l'intervalle « d'espace-temps », qu'on notera  $\Delta S$  et qui mesure la norme d'un quadri-vecteur, est une grandeur qui se conserve par passage d'un référentiel galiléen à un autre. En effet,

$$\Delta S = \sum_{\mu,\nu=1}^4 \Delta x'^{\mu} g_{\mu\nu} \Delta x'^{\nu} = \sum_{\mu,\nu=1}^4 \Delta x^{\mu} g_{\mu\nu} \Delta x^{\nu} = c\Delta t^2 - \Delta x^2 - \Delta y^2 - \Delta z^2. \quad (1.39)$$

On montre également que dans le cadre de la relativité, l'impulsion seule d'une particule, sous la forme d'un vecteur de 3 composantes  $(p_x, p_y, p_z)$ , ne se conserve pas par transformation entre deux référentiels galiléens  $(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \neq p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2)$ . Il en est de même pour l'énergie totale seule de la particule. On doit donc adjoindre une quatrième composante aux composantes de l'impulsion pour trouver un quadruplet (ou un quadri-vecteur dans la terminologie de la relativité) telle que la norme de ce dernier soit la même – dans le cadre de la métrique de Minkowski – dans tous les référentiels galiléens.

Ce quadri-vecteur s'appelle « impulsion-énergie » :  $\vec{\tilde{P}} = \left( \frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right)$ . On voit que pour une particule donnée de masse au repos «  $m$  », la norme de son quadri-vecteur impulsion-énergie avec la métrique (1.38) est donné par  $\vec{\tilde{P}} \cdot \vec{\tilde{P}} = P^{\mu} g_{\mu\nu} P^{\nu} = \frac{E^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2$ . Cette norme est un invariant relativiste [Lambert], c'est-à-dire constant dans tous les référentiels galiléens :

$$\vec{\tilde{P}} \cdot \vec{\tilde{P}} = \frac{E^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = \text{Const}. \quad (1.40)$$

On peut voir que la valeur de cet invariant est précisément  $\vec{\tilde{P}} \cdot \vec{\tilde{P}} = \frac{E^2}{c^2} = m_0^2 c^2$ , où  $E = m_0 c^2$  est l'énergie de la particule dans son référentiel de centre de masse, c'est-à-dire au repos  $(m = m_0, p_x = 0, p_y = 0, p_z = 0)$ .

C'est ce fait qu'ont dû utiliser indépendamment Schrödinger, Klein et Gordon pour poser l'équation donnant l'évolution des particules relativistes. On pourrait s'attendre à ce que, pour une particule libre dans un état stationnaire  $|\Psi\rangle$ , la mesure du carré de la norme du quadrivecteur  $\vec{P}$  donne le même résultat de mesure  $m_0^2 c^2$  quel que soit le référentiel où l'on se place. Mis en équation on aurait :

$$\vec{P}.\vec{P}|\Psi\rangle = m_0^2 c^2 |\Psi\rangle. \quad (1.41)$$

On se base alors sur les mêmes règles – celle des relations entre les variables de la mécanique Hamiltonienne et leur conjuguées – qu'en mécanique quantique classique, pour exprimer les opérateurs figurant dans l'expression (1.40). On obtient l'expression

$$\left( \frac{-\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(ct, \vec{r}) = m_0^2 c^2 \Psi(ct, \vec{r}). \quad (1.42)$$

Cette équation a exactement la même forme dans tous les référentiels Galiléens, et pour passer dans un référentiel  $R'(t', x', y', z')$ , il suffit tout simplement de remplacer dans l'équation (1.40) les coordonnées  $(t, x, y, z)$  par  $(t', x', y', z')$ . L'équation (1.42), appelée Equation de Klein-Gordon (EKG), prend une forme « vectorielle » plus condensée :

$$\left( \square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) |\Psi\rangle = 0, \quad (1.43)$$

avec

$$\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2. \quad (1.44)$$

Cet opérateur est appelé « d'Alembertien ».

### 1.2.2.1. Solutions pour la particule libre

Nous pouvons à présent essayer de résoudre l'EKG pour une particule libre à une dimension [Fig. 3]. Nous chercherons une solution du type

$$\Psi(\vec{r}) = A e^{-ik.\vec{r}}, \quad (1.45)$$

où  $\vec{x}(ct, x, y, z)$  est le quadrivecteur position,  $\vec{k}\left(\frac{\omega}{c}, k_x, k_y, k_z\right)$  le quadrivecteur et le produit scalaire effectué dans le cadre de la métrique (1.36). On voit que (1.43) est une solution de (1.42) si

$$-\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 + (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} = 0. \quad (1.46)$$

En posant

$$E = \hbar\omega \text{ et } \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (1.47)$$

l'équation (1.45) devient

$$\Psi(\vec{r}) = Ae^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \frac{E}{\hbar} t)}. \quad (1.48)$$

Cette fonction est solution de l'EKG pour une particule libre avec

$$E = \pm\sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (1.49)$$

On voit clairement que l'EKG n'interdit pas la propagation d'une particule libre avec des énergies totales négatives !

### 1.2.2.2. Problèmes associés à l'équation de Klein-Gordon : Absence d'état fondamental et densité de courant de probabilité négatif

Nous avons donc vu que le premier « problème » de l'EKG était l'apparition de solutions avec des énergies négatives. Nous allons voir par la suite que ceci est possible. Ce qui heurte plutôt dans l'équation de Klein-Gordon réside dans le fait que si l'on suit la même procédure que dans la section (1.2) pour déterminer une équation de continuité du courant de probabilité, on trouve la même expression pour  $\vec{J}$  que dans (1.29) mais une expression différente pour la densité de probabilité  $\rho$  dont l'expression est

$$\rho(\vec{r}) = \frac{i\hbar}{2m c^2} \left( \Psi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}) - \Psi(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}) \right) \quad (1.50)$$

On voit donc que cette quantité peut prendre des valeurs négatives – pour s'en convaincre, appliquer (1.50) à (1.48) – et ne peut donc plus être interprétée comme une densité de probabilité. C'est un fait assez grave qu'un invariant d'une théorie entraîne des incohérences dans une autre.

La mécanique quantique apparaissait en rupture avec la relativité et c'est là où l'Equation de Dirac (ED) va intervenir pour rétablir les choses.

### 1.2.3. Equation de Dirac

#### 1.2.3.1. Etablissement de l'équation de Dirac

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que l'EGK impliquait la possibilité de l'existence d'une densité de probabilité négative. On s'aperçoit en analysant l'expression (1.50) que le problème provient du fait que l'équation gouvernant l'évolution de la particule contient une dérivée seconde par rapport à la variable du temps. En effet, comme on doit fixer la valeur de  $\Psi^*(\vec{r}_0)$  et  $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_0)$  comme conditions aux limites pour trouver la solution de (1.43) de manière univoque, rien n'interdit un choix tel que (1.50) soit négatif. C'est pourquoi il fallait substituer à (1.43) une équation d'évolution de  $|\Psi\rangle$  de la forme

$$A|\Psi\rangle = 0, \quad (1.51)$$

comportant une dérivée temporelle du premier ordre uniquement. Le génie de Dirac a été de considérer que la fonction d'onde n'est plus un scalaire mais un vecteur ayant  $N$  composantes dans un espace à  $N$  dimensions, avec la contrainte que chacune des composantes satisfasse à l'EKG [Charlotte\_Elster\_Cours\_Ohio-University]. Il a exigé alors que  $|\Psi\rangle$  obéisse à l'équation (1.51), en imposant à l'opérateur  $A$ , qui s'applique au **vecteur**  $|\Psi\rangle$  de  $N$  composantes, qu'il soit une matrice de dimension  $N \times N$ , ce qui se traduit par

$$A^\dagger.A|\Psi\rangle = \left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}\right)I|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

où  $I$  désigne la matrice identité des matrices  $N \times N$ . Pour cela, considérons pour  $A$  l'expression suivante :

$$A = i\hbar\Gamma\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i=1}^N \gamma^i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} - m_0 c \gamma^0, \quad (1.53)$$

où les matrice  $\Gamma$  et  $\gamma^i$  sont des matrices  $N \times N$ . Pour que  $A$  satisfasse (1.52), il faut que ces matrices satisfassent les conditions suivantes



$$(\gamma^i)^\dagger = \gamma^i ; \Gamma^\dagger = \Gamma \quad (1.54)$$

$$\{\gamma^i, \gamma^j\} = 2\delta_{i,j}I \quad (1.55)$$

$$\Gamma \cdot \Gamma = I \quad \text{et} \quad \gamma^i \Gamma - \Gamma \gamma^i = 0. \quad (1.56)$$

Les conditions (1.54) et (1.56) impliquent que  $(\gamma^i)^2 = 1$ , ce qui en fait des matrices unitaires au même titre que  $\Gamma$ , c'est-à-dire que  $(\gamma^i)^{-1} = \gamma^i$  et que leurs valeurs propres sont égales à  $\pm 1$ .

**Poser l'équation de Dirac pour un espace de dimension  $N$  se ramène donc à trouver les matrices  $\Gamma$  et  $\gamma^i$  qui satisfont aux conditions (1.54-56).**

Une autre remarque importante, qui découle des propriétés basiques des déterminants appliquées à (1.53), est que **la dimension de l'espace doit être obligatoirement paire** [Fuchs\_JN]. En effet,

$$\det(\gamma^i \gamma^j) = \det(-\gamma^j \gamma^i) = (-1)^N \det(\gamma^j \gamma^i) = (-1)^N \det(\gamma^i \gamma^j) \Rightarrow N = 2.k. \quad (1.57)$$

### 1.2.3.2. Equation de Dirac dans un espace à deux dimensions et densité de courant de probabilité associée

Nous venons de voir dans le paragraphe précédent que la dimension  $N$  de l'espace dans lequel se meut la particule doit obligatoirement être paire. Nous nous proposons de résoudre l'équation de Dirac dans le plus petit de ces espaces, c'est-à-dire pour  $N = 2$

$$\left( i \hbar \Gamma \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i=1}^2 \gamma^i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} - m_0 c \gamma^0 \right) |\Psi\rangle = 0. \quad (1.58)$$

Or, dans un espace de dimension 2, nous connaissons déjà les matrices pour poser l'ED. En effet, en comparant les équations (1.54-56) avec les matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.59)$$

on voit que celles-ci vérifient les mêmes propriétés que les matrices  $\gamma^i$  et la matrice identité  $I$  vérifie les mêmes propriétés que la matrice  $\Gamma$ . En utilisant les correspondances (1.17-18), l'équation de Dirac pour une particule libre évoluant dans un espace à deux dimensions s'écrit donc dans n'importe quel référentiel  $R$

$$(E.I + c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} - m_0 c^2 \sigma_z) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (1.60)$$

avec

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \vec{e}_x + \sigma_y \vec{e}_y, \quad (1.61)$$

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} = p_x \vec{e}_x + p_y \vec{e}_y. \quad (1.62)$$

L'équation (1.60) rappelle l'équation de Schrödinger (1.15) avec le Hamiltonien de Dirac  $H_D$  comme Hamiltonien

$$H = H_D = c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} - m_0 c^2 \sigma_z. \quad (1.63)$$

Comme  $E$  représente l'énergie totale de particule dans le référentiel  $R$ , la présence d'un potentiel scalaire est prise en compte en faisant

$$H = H_D + V(x, y). \quad (1.64)$$

Comme chaque composante de la fonction d'onde vérifie l'EKG, les valeurs propres de (1.64) sont les mêmes que dans (1.49). L'ED permet donc l'existence de particules d'énergie aussi bien positive que négative. Ces dernières sont appelées les **anti-particules**.

La différence entre l'équation (1.60) et sa conjuguée permet d'établir une équation de continuité similaire à (1.31) avec la même expression que (1.30) pour la densité de probabilité, et une nouvelle expression pour la densité de courant de probabilité

$$\vec{J}(ct, x, y) = c \left( \Psi^*(ct, x, y) \cdot \vec{\sigma} \cdot \Psi(ct, x, y) \right). \quad (1.65)$$

On verra par la suite que cette forme de densité de courant de probabilité a des conséquences très importantes sur l'évolution des particules en présence d'une barrière de potentiel.

### **I.3. Analogie entre les électrons dans le graphène et les fermions de Dirac**

#### ***I.3.1. Hamiltonien effectif des électrons dans le graphène***

Dans l'équation (1.12), un développement limité de  $H_k$ , exprimé dans la base  $(|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle)$ , autour de l'un des trois points K – celui de l'équation (1.1) par exemple – donne

$$H_{K,\bar{k}} = \hbar.v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.66)$$

avec

$$\bar{q} = \bar{k} - \bar{K}, \bar{K}', \quad (1.67)$$

$$v_F = \frac{3a_c t}{2} \approx 10^6 \text{ m.s}^{-1}. \quad (1.68)$$

L'Equation (1.66) peut être réécrite sous la forme

$$H_{K,\bar{q}} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \bar{q}. \quad (1.69)$$

En se rappelant que  $\bar{p} = \hbar\bar{k}$ , l'analogie entre ce Hamiltonien et celui de Dirac à deux dimensions (1.63) pour des particules de masse nulle qui se déplaceraient avec une vitesse  $v_F$  au lieu de  $c$  devient frappante.

On voit donc que le graphène offre, en plus des propriétés extraordinaires que nous allons voir par la suite, la possibilité d'accéder à la physique des particules ultra-relativistes à très faible coût. Ceci est souvent caricaturé en appelant le graphène : Le CERN dans son propre laboratoire.

On peut effectuer le développement de (1.12) autour d'un point  $K'$  – celui de l'équation (1.3) par exemple – et on obtient

$$H_{K',\bar{k}} = \hbar.v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} = (H_{K,\bar{k}})^T, \quad (1.70)$$

où le ' $T$ ' en exposant désigne la transposée de la matrice (sans conjuguer ses éléments). Cependant, grâce à l'absence du terme de masse, on remarque que si on passe de la base  $(|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle)$  à la base  $(|\phi_B\rangle, |\phi_A\rangle)$  au voisinage du point  $K'$ , il suffit de transposer une deuxième fois  $(H_{K,\bar{k}})^T$ . Donc en adoptant la base  $(|\phi_B\rangle, |\phi_A\rangle)$  nous avons :

$$H_{K',\bar{k}} = H_{K,\bar{k}} \quad (1.71)$$

### I.3.2. Relation de dispersion et fonctions d'ondes associée à l'Hamiltonien effectif

#### I.3.2.1. Relation de dispersion

Essayons à présent de trouver les valeurs propres et les fonctions propres du Hamiltonien (1.66). Dans la suite, nous appellerons  $\vec{k}$  le vecteur d'onde au voisinage du point K ou K', c'est-à-dire

$$\vec{k} \equiv \vec{k} - \vec{K}, \vec{K}' . \quad (1.72)$$

Réécrivons d'abord (1.66) sous une forme plus commode pour les calculs à venir.

$$H_{K,\vec{k}} = \hbar.v_F \cdot |\vec{k}| \cdot \begin{pmatrix} 0 & \frac{k_x - ik_y}{|\vec{k}|} \\ \frac{k_x + ik_y}{|\vec{k}|} & 0 \end{pmatrix} = \hbar.v_F \cdot |\vec{k}| \cdot \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta_k} \\ e^{i\theta_k} & 0 \end{pmatrix} . \quad (1.73)$$

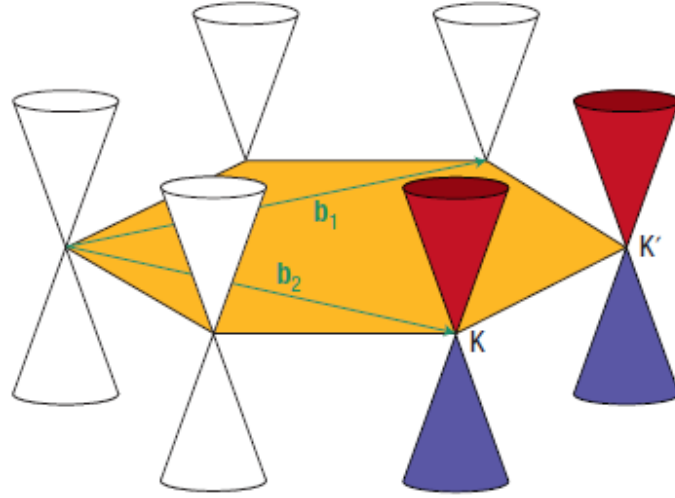
$\theta_k$  est ici l'angle que fait le vecteur d'onde avec l'axe des 'x' [Fig. 1b] de l'espace réciproque et peut être exprimé par la formule

$$\theta_k = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right) \quad (1.74)$$

On voit aisément que les valeurs propres de (1.73) sont de la forme

$$E(\vec{k}) = \sigma \hbar.v_F \cdot |\vec{k}| \quad (1.75)$$

Ici  $\sigma$  est un scalaire, entier, et vaut +1 pour les électrons et -1 pour les trous. La relation (1.75) constitue la relation de dispersion dans le graphène, indépendamment de la vallée K ou K' où se trouve l'électron. Il faut se rappeler que la référence en énergie  $E = 0$  eV est située au niveau de l'énergie sur les atomes de carbone, énergie de site, ou "On-Site Energy".



**Fig. 5: Relation de dispersion dans le graphène dans les deux vallées K et K' dans le cadre du modèle effectif. On voit que les 3 point K sont reliés entre eux par des vecteurs du réseau réciproque ( $b_1$  et  $b_2$ ). Il en est de même pour les point K'. Figure tirée de [Freitag\_NatNano\_2008]**

Ainsi, les électrons de la bande  $p_z$  du graphène de vecteur d'onde  $\vec{k}$  dans le graphène peuvent avoir aussi bien une énergie supérieure à l'énergie de site, et dans ce cas on parle de pseudo-électrons, que des énergies qui lui sont inférieures et on parle alors de pseudo-trous. Dans la suite, on les désignera simplement par électrons et trous et nous verrons dans les prochains paragraphes et tout au long de cette thèse que ces pseudo-particules se comportent exactement comme les paires particules-antiparticules de la théorie de Dirac.

### I.3.2.2. Fonctions d'onde

Cherchons à présent les vecteurs propres  $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$  associés à une particule libre de vecteur d'onde  $\vec{k}$ , d'impulsion  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  et d'énergie  $E(\vec{k}) = \sigma \cdot \hbar v_F \cdot |\vec{k}|$  dont le Hamiltonien est (1.66). Rappelons que  $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$  est un vecteur d'onde à deux composantes  $|\phi_A\rangle$  et  $|\phi_B\rangle$  (1.9), appelé spineur, tout comme dans la théorie de Dirac à deux dimensions. Considérons la forme suivante de la fonction d'onde en représentation  $|\vec{r}\rangle$  de manière à ce que la mesure de l'impulsion par application de l'opérateur (1.17) sur celle-ci donne précisément  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  :

$$\langle \vec{r} | \Psi_{\vec{k}} \rangle = \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (1.76)$$

où  $\phi_A$  et  $\phi_B$  sont indépendantes de  $\vec{r}$ . Le spineur (1.76) est vecteur propre de (1.73) avec les valeurs propres (1.75) si et seulement si

$$(E.I - H_{K,\vec{k}})|\Psi_{\vec{k}}\rangle = \hbar.v_F.|\vec{k}| \cdot \left( \sigma I - \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta_k} \\ e^{i\theta_k} & 0 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} |\vec{k}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.77)$$

Il suffit de prendre par exemple la deuxième équation pour avoir la relation entre les composantes du spineur, qui définit la forme des vecteurs du sous-espace propre associé. Ainsi,

$$\sigma \phi_B + e^{i\theta_k} \phi_A = 0. \quad (1.78)$$

On peut choisir alors comme vecteur engendrant le sous espace un vecteur orthonormé, c'est-à-dire tel que  $\langle \Psi_{\vec{k}} | \Psi_{\vec{k}} \rangle = 1$ , et la surface du cristal égale à un.

On obtient alors que les vecteurs de la base du Hamiltonien (1.73) sont de la forme

$$|\Psi_{\vec{k},\sigma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sigma e^{i\theta_k} \end{pmatrix} |\vec{k}\rangle, \quad (1.79)$$

où, rappelons-le,  $\sigma = +1$  désigne les états électroniques (énergies positives) et  $\sigma = -1$  désigne les états de trous (énergies négatives). Les vecteurs (1.79) sont donc les vecteurs propres des électrons libres dans la vallée K dans la base  $(|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle)$ , et ceux des électrons de la vallée K' dans la base  $(|\phi_B\rangle, |\phi_A\rangle)$ .

### I.3.2.3. Structure de bande des électrons dans le graphène

Le Hamiltonien total des électrons dans le graphène s'écrit donc, dans la base  $(|\phi_A^K\rangle, |\phi_B^K\rangle, |\phi_B^{K'}\rangle, |\phi_A^{K'}\rangle)$ , sous la forme

$$H = \tau_0 \otimes \hbar.v_F.\vec{\sigma}.\vec{k} = \hbar.v_F.|\vec{k}| \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta_k} & 0 & 0 \\ e^{i\theta_k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta_k} \\ 0 & 0 & e^{i\theta_k} & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.80)$$

où  $\tau_0$  est la matrice identité. Les vecteurs propres associés à ce Hamiltonien sont les bispineurs définis par

$$\Psi_{\vec{k},\sigma}^K(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sigma e^{i\theta_k} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik \cdot \vec{r}} ; \quad \Psi_{\vec{k},\sigma}^{K'}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \sigma e^{i\theta_k} \end{pmatrix} e^{ik \cdot \vec{r}} . \quad (1.81)$$

Le découplage entre les vallées K et K' que l'on peut voir dans (1.80) est dû au fait que les développements limités sont effectués dans des endroits très éloignés de l'espace réciproque par rapport à la gamme d'énergie à laquelle on s'intéresse.

En effet, la distance entre deux points K et K' proches voisins est de  $|\vec{G}| = 2 \frac{2\pi}{3a} \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{1\pi}{3\sqrt{3}a} = 1,7 \times 10^{10} m^{-1}$ , et pour les densités de porteurs de l'ordre de  $10^{13} cm^{-2}$ , la norme requise du vecteur d'onde réduit au voisinage de  $\vec{k}$  est de  $|\vec{q}_{\max}| = \frac{E_{\max}}{\hbar v_F} = \frac{0,3 eV}{10^6 m s^{-1} \times 6,582 \cdot 10^{-16} eV s} = 4,55 \times 10^8 m^{-1}$ , soit pratiquement 2 ordres de grandeurs devant la distance dans l'ER séparant les deux vallées.

**Donc pour caractériser complètement un électron dans le graphène, il faut quatre nombres quantiques :**

- L'isospin de Vallée  $\tau_0$  pour spécifier si l'électron se trouve dans la vallée K ou dans la vallée K'.
- L'isospin de sous-réseau  $\sigma$  – ou pseudo-spin – qui spécifie sur quel sous-réseau, A ou B, se trouve l'électron
- Le vecteur d'onde  $\vec{k}$ .
- Le 'vrai' spin de l'électron, dont nous tiendrons compte par une simple multiplication par 2 à cause de l'absence de champ magnétique et du très faible couplage spin-orbite [Castro\_Neto\_2009]

Comme les deux vallées sont indépendantes l'une de l'autre, mais ont le même Hamiltonien et la même relation de dispersion, l'étude du transport et autres propriétés dynamiques peut être faite dans une seule des deux vallées et multiplier les résultats par  $g_v = 2$ , appelée dégénérescence de vallée.

**On ne spécifiera donc par la suite que  $\vec{k}$  et  $\sigma$ .**

#### **I.3.2.4. Densité d'états et densité de charges à température absolue nulle**

La densité d'états se calcule aisément en considérant la relation de dispersion au voisinage d'un des points K puis en multipliant par quatre à cause de la dégénérescence de vallée et de spin qui valent deux chacune. Il vient alors

$$\rho(E) = \frac{2E}{\pi\hbar^2 v_F^2}. \quad (1.82)$$

La densité de charge à  $T = 0 K$  est alors donnée par

$$n(E_F) = \int_0^{E_F} dE \rho(E) = \frac{E_F^2}{\pi\hbar^2 v_F^2}, \quad (1.83)$$

où  $E_F$  est le niveau de Fermi. On peut se reporter à [Cheremisin\_Arxive\_2011] pour le cas  $T \neq 0$ .

### ***1.3.3. La Chiralité comme constante de mouvement dans le graphène***

Considérons une particule libre se trouvant dans un état propre du type (1.79) et calculons sa chiralité  $\chi = \vec{k} \cdot \vec{\sigma} / |\vec{k}|$ , c'est-à-dire la projection de son spin sur son impulsion normalisée à la norme de cette dernière. On a ainsi

$$\frac{\vec{k} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{k}|} \Psi_{\vec{k}, \sigma}^K(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta_k} \\ e^{i\theta_k} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sigma e^{i\theta_k} \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (1.84)$$

On voit donc que pour les particules de type électron  $\sigma = +1$ , c'est-à-dire avec des énergies positives, nous avons

$$\Rightarrow \frac{\vec{k} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{k}|} |\Psi_{\vec{k}, e}^K\rangle = + |\Psi_{\vec{k}, e}^K\rangle, \quad (1.85)$$

alors que pour les particules de type trous  $\sigma = -1$ , c'est-à-dire avec des énergies négatives, nous avons

$$\frac{\vec{k} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{k}|} |\Psi_h^K\rangle = - |\Psi_h^K\rangle. \quad (1.86)$$

Les états électroniques dans le graphène sont donc de chiralité  $\chi = +1$  et sont dits dextrogyres alors que les états de trous ont une chiralité de  $\chi = -1$  et sont dits lévogyres. Comme l'opérateur de projection que nous avons utilisé commute avec l'Hamiltonien, on voit bien que la chiralité est une constante de mouvement dans le graphène. On notera par la suite les états propres



$$\left| \Psi_{\vec{k},(e,h)}^K \right\rangle = \left| \vec{k}, \sigma \right\rangle \quad (1.87)$$

où  $\sigma = +1$  désigne les états propres relatifs aux électrons et  $\sigma = -1$  les états propres relatifs aux trous.

### 1.3.4. Résumé en une image de la dynamique des porteurs dans le graphène

Faisons une dernière remarque avant de résumer en image les propriétés dynamiques des électrons dans le graphène. L'opérateur vitesse de groupe peut être déduit à partir du théorème d'Ehrenfest [Allain\_APR\_2011]

$$\vec{V}_g = \frac{d}{dt} \vec{R} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{R}, H] = v_F \frac{1}{i\hbar} \vec{\sigma} \cdot [\vec{R}, \vec{P}] = v_F \vec{\sigma} \quad (1.88)$$

La valeur moyenne de cet opérateur dans un état propre de l'Hamiltonien est

$$\langle \vec{k}, \sigma | \vec{V}_g | \vec{k}, \sigma \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \sigma e^{-i\theta_k} \end{pmatrix} v_F (\sigma_x \vec{e}_x + \sigma_y \vec{e}_y) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sigma e^{i\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (1.89)$$

$$\langle \vec{V}_g \rangle = \sigma v_F (\cos \theta_k \vec{e}_x + \sin \theta_k \vec{e}_y) = \sigma v_F \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}. \quad (1.90)$$

On voit donc que si les électrons ont une vitesse de groupe colinéaire au vecteur d'onde et orientée dans le même sens, la vitesse de groupe des trous est antiparallèle au vecteur d'onde. Il en est de même pour les densité de courant de probabilité. En effet, l'évolution des électrons dans le graphène étant régie par un Hamiltonien similaire de Dirac, les densités de courants de probabilités (DCP) sont données par une expression similaire à (1.65) en remplaçant  $c$  par  $v_F$ . Il s'ensuit que la DCP associée à une particule dans un état propre (1.75) vaut

$$\vec{J} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \langle \vec{V}_g \rangle = \sigma v_F \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}. \quad (1.91)$$

Dans cette expression, nous avons pris la surface du cristal égale à l'unité. La figure 6 résume l'ensemble des caractéristiques des porteurs sur un mono-feuillet de graphène au voisinage d'une des vallées, K ou K'. Les particules de chiralité positive sont celles qui appartiennent à la branche rouge de la relation de dispersion et les particules de chiralité négative appartiennent à la branche bleue.

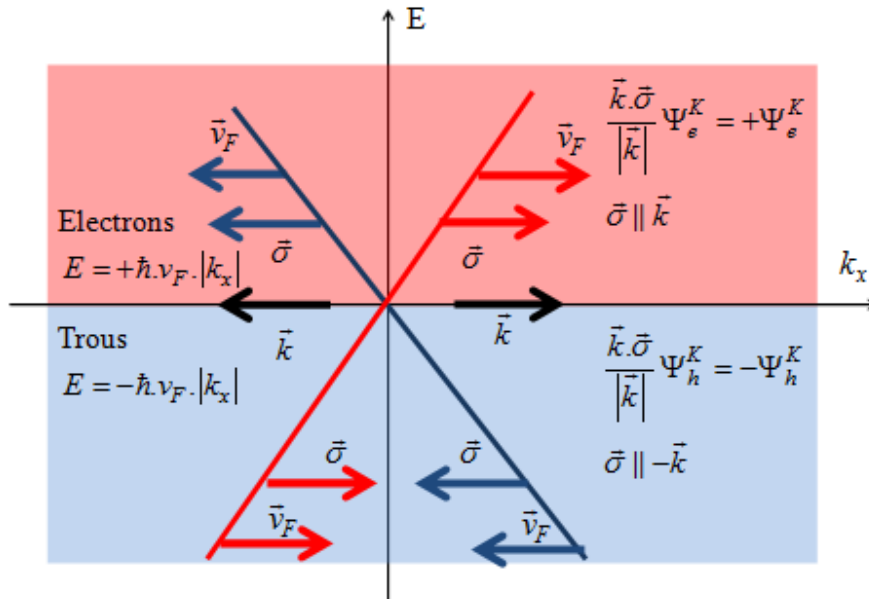


Fig. 6: Illustration des propriétés des électrons de la bande  $\pi$  du carbone au voisinage du point K (ou K') dans le cadre du modèle effectif, qui est justifié et en parfait accord avec l'expérience pour la gamme d'énergie que nous allons considérer dans ce travail ( $E \leq 0,4$  eV). Les électrons de cette figure sont supposés en incidence normale (cela ne change rien à la physique grâce à l'isotropie en absence de potentiel). Sont représentés sur cette figure la courbe de dispersion, les vitesses de groupes et les pseudo-spins avec une distinction entre les états électroniques (en rouge pâle) et les états de trous (bleu pâle)

## I.4. Le paradoxe de Klein dans le graphène

### I.4.1. Introduction

Nous allons maintenant aborder un des phénomènes les plus importants résultant de la « corrélation » qui existe entre les états de trous et ceux des électrons dans le graphène : le paradoxe de Klein, appelé également effet tunnel chiral (CT, pour « Chiral Tunneling »). Ce phénomène est contre-intuitif dans la mesure où une particule incident sur une barrière de hauteur  $V_0$  ne peut la traverser que si  $V_0 > mc^2$  [Calogeracos\_ContempPhys\_1999],  $m$  étant la masse de la particule. Ce phénomène fut longtemps considéré comme un paradoxe pour deux raisons. La première est que la probabilité de transmission dépend peu de la hauteur de la barrière et tend vers l'unité quand la barrière est très haute, contrairement à l'effet tunnel non relativiste, où cette probabilité de transmission tend à décroître exponentiellement avec  $V_0$ . La deuxième réside dans le fait qu'il n'ait jamais été observé expérimentalement depuis sa prédiction théorique par Oscar Klein en 1929. En effet, son observation expérimentale pour les particules relativistes massives est conditionnée par la possibilité de créer un champ électrique au-delà de ce que nos technologies permettent actuellement, soit de l'ordre de  $10^{16}$  V/cm<sup>-1</sup>, car il faudrait créer au minimum une chute de potentiel de  $mc^2$  sur une longueur d'onde de Compton  $\hbar/mc$ .

Comme nous l'avons vu dans ce chapitre, les porteurs de charges dans le graphène se comportent comme des particules relativistes de masse nulle se déplaçant à la vitesse  $v_F$ .

Contrairement aux semi-conducteurs classiques, où il n'existe aucune relation entre les équations décrivant les trous et les électrons (par exemple, ils ont des masses effectives différentes), les électrons et les trous dans le graphène sont intimement liés les uns aux autres car ils sont décrits par la même équation. Les bi-spineurs qui les représentent vérifient les relations de conjugaison de charge et donc de conservation de chiralité, tout comme les particules ultra-relativistes. On devrait donc pouvoir observer l'effet tunnel chiral (CT) dans le graphène en employant des champs électriques aisément réalisables, de l'ordre  $10^5 \text{V/cm}^{-1}$ . En effet, l'absence de masse dans le modèle qui décrit les fermions de Dirac dans le graphène fait qu'il n'existe pas de limite (inférieure) au champ électrique pour observer l'effet tunnel de Klein dans ce matériau [Katsnelson\_NatPhys\_2006]. C'est ainsi que le CT a bien été observé pour la première fois dans le graphène [Gorbachev\_NanoLett\_2008] [Stander\_PRL\_2009] [Young-A\_NatPhysLett\_2009].

#### ***1.4.2. Paradoxe de Klein pour les particules sans masse en présence d'une barrière de potentiel***

Considérons une particule de vecteur d'onde  $\vec{k}(k_x, k_y)$  qui arrive sur une barrière de potentiel  $V$  de forme carrée [Fig. 7.a], c'est-à-dire

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < d \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (1.92)$$

Le dopage dans le graphène peut être réalisé électrostatiquement [Novoselov\_Science\_2004] ou chimiquement [Geim\_NatMat\_2007]. On opte souvent pour le premier type de dopage, en utilisant une grille arrière pour réaliser les dopages du type 'n', et une grille placée en haut et au centre du dispositif pour réaliser le dopage du type 'p'. **Le modèle que nous allons décrire [Katsnelson\_NatPhys\_2006], et que nous avons reproduit à partir de la référence [Allain\_EPJB\_2011], est donc tout à fait valable pour comprendre l'effet tunnel de Klein – qu'on appellera par la suite effet tunnel Chiral car il est intimement lié à la chiralité des porteurs de charges – dans le cas d'un transistor en graphène à grille rectangulaire (GFET, pour « Graphene Field Effect Transistor »).**

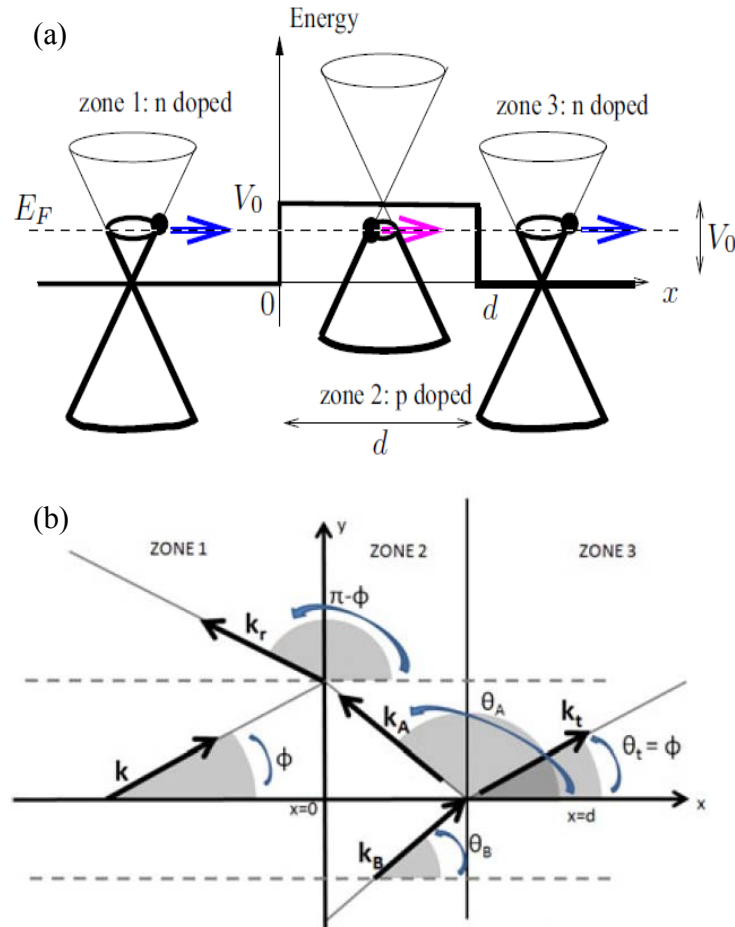
Le Hamiltonien de la particule soumise au potentiel (1.92) s'écrit alors :

$$H = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k} + V(x) \quad (1.93)$$

On peut voir, à cause de la présence du terme en  $x$  et de la relation d'incertitude, que  $H$  commute avec  $k_y$  mais pas avec  $k_x$ . Donc  $k_y$  est une quantité qui se conserve durant le mouvement de la particule.

La figure 7.b montre les vecteurs d'onde dans les trois zones ainsi que les angles qu'ils forment avec les différentes interfaces. Le vecteur d'onde incident est noté

$\vec{k} = (k_x, k_y) = E(\hbar v_F)^{-1} (\cos \phi, \sin \phi)$ , le vecteur d'onde réfléchi en zone 1 est  $\vec{k}_r = (-k_x, k_y) = E(\hbar v_F)^{-1} (\cos(\pi - \phi), \sin \phi)$ , ceux transmis et réfléchis dans la barrière sont notés respectivement  $\vec{k}_A = (k'_x, k_y) = -(E - V_0)(\hbar v_F)^{-1} (\cos \theta_A, \sin \theta_A)$  et  $\vec{k}_B = (-k'_x, k_y) = -(E - V_0)(\hbar v_F)^{-1} (\cos \theta_B, \sin \theta_B)$ , alors que le vecteur d'onde transmis dans la troisième zone est noté  $\vec{k}_t = \vec{k}$ .



**Fig. 7: (a) Structure de bande dans toute la barrière. Les flèches en bleu et magenta représentent la vitesse de groupe de la particule (b) Schéma précisant les vecteurs d'onde, leur orientations ainsi que les angles qu'ils forment avec les interfaces dans les trois régions délimitées par la barrière. Figure tirée de [Allain\_EPJ\_2011].**

On remarque sur ce schéma que le vecteur d'onde transmis dans la zone 2  $\vec{k}_A$  est du même côté de la normale à l'interface que le vecteur d'onde incident  $\vec{k}$ . C'est un résultat de la conservation du courant de probabilité et de l'invariance par translation dans la direction  $y$ , transverse au transport. En effet, comme le Hamiltonien ne dépend pas du temps nous avons  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$ , et en tenant en compte de l'invariance par translation suivant  $y$  il vient que  $\vec{J}(x, y) = \vec{J}_x(x) = \text{const}$ . Comme l'électron change d'indice de bande quand il passe de la

première zone dopée ‘n’ à la deuxième zone dopée ‘p’, la composante longitudinale  $k_A^x$  du vecteur d’onde de la deuxième zone doit être de signe contraire à celle du vecteur incident  $\vec{k}$ . Cette dernière propriété combinée à la conservation du vecteur d’onde transverse implique nécessairement que les vecteurs d’onde incident et transmis appartiennent aux mêmes demi-plans délimités par les normales aux interfaces des jonctions ‘np’ et ‘pn’ d la figure 7a. C’est ce qu’on appelle une réfraction anormale.

#### I.4.2.1. Réfraction dite « anormale » des Fermions de Dirac

La conservation de la composante transverse du vecteur d’onde ainsi que la différence d’indice de bande  $\sigma$  entre les zones ‘n’ et ‘p’ entraînent que, à chaque interface, nous ayons une relation du type Snell-Descartes avec un indice de réfraction négatif. Pour le voir, considérons par exemple l’interface entre la première et la deuxième zone. Nous avons

$$E \sin \phi = -(E - V_0) \sin \theta_A. \quad (1.94)$$

Définissons  $\theta_N = -(\pi - \theta_A)$  l’angle orienté de la normale à l’interface vers la porteuse du vecteur  $\vec{k}_A$  de la figure 7.b. Avec  $n_1 = E$  et  $n_2 = V_0 - E$ , il vient

$$\frac{\sin \phi}{\sin \theta_N} = -\frac{n_2}{n_1} \quad (1.95)$$

Il faut noter qu’à  $T = 0$  K, pour les électrons occupant le niveau de Fermi  $E = E_F$  [fig. 7a] qui contribuent le plus au transport, nous avons

$$-\frac{n_2}{n_1} = -\sqrt{\frac{p}{n}} \quad (1.96)$$

En effet, nous savons d’après (1.83) que  $E_F = \hbar v_F \sqrt{n \pi}$  et  $V_0 - E_F = \hbar v_F \sqrt{p \pi}$  où  $p$  est la densité d’états inoccupés, créés sous la barrière par le potentiel  $V_0$ , et  $n$  la densité des électrons se trouvant dans la zone 1. Le signe ‘moins’ dans les formules (1.95-96) indique une réfraction dite anormale, où les vecteurs d’onde incidents et transmis se trouvent dans le même demi-plan délimité par la normale à l’interface au point d’incidence du porteur sur la barrière. C’est un phénomène qu’on retrouve également en optique quand les photons se propagent dans un méta-matériau, c’est-à-dire un matériau avec un indice de réfraction négatif.

Nous verrons dans le 5ème chapitre comment on peut utiliser cette réfraction anormale, due à l’effet tunnel de Klein, pour moduler le courant dans un transistor à base de graphène, et ce, en faisant varier par exemple la densité d’états libres  $p$  sous la grille.

#### I.4.2.2. Probabilité de transmission des Fermions de Dirac, absence de rétrodiffusion en incidence normale et résonances de Fabry-Pérot

Revenons à présent au calcul de la probabilité de transmission des particules à travers la barrière de la figure 7a. Les spineurs dans les trois zones s'écrivent [Allain\_EPJB\_2011]

$$\psi_1 = e^{ik_y y} \left[ e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ +e^{i\phi} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\phi} \end{pmatrix} \right], \quad (1.97)$$

$$\psi_2 = e^{ik_y y} \left[ A e^{ik'_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\theta_A} \end{pmatrix} + B e^{-ik'_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ +e^{-i\theta_A} \end{pmatrix} \right], \quad (1.98)$$

$$\psi_3 = t e^{ik_y y} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (1.99)$$

En exprimant l'égalité de chaque composante des spineurs en  $x=0$  et  $x=d$ , on obtient un système de quatre équations avec les coefficients complexes  $A$ ,  $B$ ,  $r$  et  $t$ . On en tire aisément la valeur de  $r$ , et on en déduit la transmission  $T = 1 - |r|^2$ . Cette dernière a pour expression

$$T = \frac{\cos^2 \phi \cos^2 \theta_A}{\cos^2 \phi \cos^2 \theta_A \cos^2 (k'_x d) + \sin^2 (k'_x d) [1 + \sin \phi \sin \theta_A]}, \quad (1.100)$$

avec

$$k'_x d = -2\pi l \sqrt{1 - 2\varepsilon + \varepsilon^2 \cos^2 \phi}, \quad (1.101)$$

où  $l = V_0 d / (2\pi \hbar v_F)$  et  $\varepsilon = E / V_0$  sont des grandeurs sans dimension. On peut voir immédiatement que la probabilité de transmission  $T$  vaut 1 pour une particule en incidence normale sur la barrière, c'est-à-dire en posant dans (1.98)  $\phi = \theta_A = 0$ . Cette absence de rétrodiffusion pour les particules en incidence normale n'est pas due à des résonances dans la barrière. C'est un phénomène propre aux Fermions de Dirac sans masse et qui résulte de la conservation de la chiralité de la particule pendant qu'elle parcourt les trois zones. Comme on peut le voir sur la figure 6, un électron dans la bande de conduction ( $\sigma = +1$ ) et de vecteur d'onde positif ( $k_x > 0$ ) possède une chiralité positive (branche rouge de la relation de dispersion). Cet électron peut très bien passer dans la bande de valence ( $\sigma = -1$ ), créée par la barrière de potentiel, et continuer à se propager sous celle-ci sans atténuation, pourvu qu'il renverse son vecteur d'onde ( $k_x < 0$ ) pour qu'il conserve sa chiralité positive et qu'il reste sur

cette même branche rouge de la relation de dispersion. L'électron renverse une deuxième fois son vecteur d'onde à la sortie de la barrière et passe dans la bande de conduction de la troisième zone. C'est ce qui est représenté sur la figure 7a.

Il est important de souligner que l'électron ne se « transforme » pas en trou quand il franchit la première interface, sinon on ne pourrait pas avoir simultanément la conservation de la chiralité, qui est une constante du mouvement, et la conservation du courant électrique à cet endroit. En effet, le courant électrique est le produit de la charge et de la valeur moyenne de la vitesse de groupe. On peut voir d'après (1.88) que l'expression de la densité de courant qui vaut  $\vec{I}_{ext} = q \langle \vec{V}_g \rangle = (-e) \cdot [(\sigma = +1) \cdot (\vec{k} = +k_x \cdot \vec{e}_x) / |k_x|] \cdot v_F$  à l'extérieur de la barrière serait différente après le franchissement de la barrière si l'électron se transformait en trou, tout en conservant sa chiralité (entre crochets) car la densité de courant vaudrait  $\vec{I}_{int} = (+e) \cdot [(-1) \cdot (-k_x \cdot \vec{e}_x) / |k_x|] \cdot v_F = -\vec{I}_{ext}$ .

Une autre conséquence importante de l'expression de la probabilité de transmission (1.98) est l'existence de résonances dans la transmission pour certaines valeurs de l'angle d'incidence données par :

$$\frac{k'_x d}{\pi} = m = -2l \sqrt{1 - 2\varepsilon + \varepsilon^2 \cos^2 \phi} \quad , \quad (1.102)$$

où  $m$  est un entier. Ces résonances s'expliquent par le fort couplage des spineurs de la bande de valence et de la bande de conduction dans le graphène. Les ondes électroniques pénètrent alors aisément sous la barrière et vont résonner dès que l'angle d'incidence fera tourner  $\vec{k}$  suffisamment pour que la barrière puisse accommoder un nombre demi-entier de longueur d'ondes  $2\pi / k'_x$  suivant l'axe  $x$ . On obtient alors des résonances du type Fabry-Pérot sous la barrière [Katsnelson\_NatPhys\_2006]. On verra clairement ces résonances dans les figures de densité locale d'états (LDOS, pour « Local Density Of States ») dans les transistors de graphène que nous allons présenter aux troisième et quatrième chapitres. Nous allons voir qu'ils jouent un rôle fondamental dans la dégradation des performances dans les transistors à base de graphène à grille rectangulaire, puis, au cinquième chapitre, comment l'utilisation d'une grille triangulaire permet de résoudre en partie ce problème.

## I.5. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les propriétés électroniques intrinsèques d'une monocouche de graphène, considérée comme un système fermé. Le graphène est un matériau fait d'atomes de carbone organisés en structure hexagonale, qui peut être vu comme un réseau triangulaire à deux atomes par maille, ou, de manière équivalente, comme deux sous-réseaux triangulaires décalés l'un par rapport à l'autre. La description des électrons  $2p_z$  de ce matériau -- ceux qui peuvent transporter du courant électrique -- nécessite donc l'utilisation de bispineurs.

chaque composante du bispineur étant liée à un des sous-réseaux. De par sa structure cristallographique, la zone de Brillouin du graphène est donc elle-même de forme hexagonale. Trois coins de cette zone sont appelés point K et sont équivalents entre eux, alors que les trois autres sont appelés points K' et sont équivalents entre eux, mais pas aux trois autres points K. Le calcul de la structure de bande de ce matériau montre qu'il ne possède pas de bande d'énergie interdite. Les électrons ont une relation de dispersion linéaire au voisinage des points K et K' et se comportent donc comme des Fermions de Dirac sans masse de vitesse  $v_F$ . De manière similaire, la bande de valence, région d'états d'énergie cinétique négative à laquelle correspond un pseudo-spin  $\sigma = -1$ , est également disponible pour la propagation libre des électrons du fait de la conservation de la chiralité. L'absence de masse pour les porteurs de charges dans le graphène et leur caractère chiral a rendu possible l'observation de l'effet tunnel de Klein. Il est important de noter que les vallées K et K' sont découplées pour les énergies que nous allons considérer pour le transport de charges. On tient compte de cette dégénérescence de vallée en calculant les grandeurs dans une seule des deux vallées, puis on les multiplie par la dégénérescence de vallée qui vaut deux, à laquelle s'ajoute la dégénérescence de spin (qui vaut également deux) en raison du faible couplage spin-orbite.

Nous allons mettre en application toutes les notions introduites dans ce chapitre pour analyser le fonctionnement des transistors à base de graphène dans les troisième, quatrième et cinquième chapitres. Entre-temps, nous allons devoir introduire les concepts nécessaires à l'étude du transport de charges dans les dispositifs à base de graphène. En effet, dès que le graphène est contacté au niveau de la source et du drain, la monocouche de graphène cesse d'être un système fermé et l'injection ainsi que l'extraction des porteurs au niveau de ces contacts doivent être prises en compte. L'expérience montre que le transport est fortement balistique dans le graphène quand ce matériau est déposé sur un substrat de nitrure de bore avec des libres parcours moyens dépassant le micron [Zomer\_APL\_2011], et également cohérent avec des interférences électronique du type Fabry-Pérot [Wu\_NanoLett\_2012-2]. Le formalisme que nous devons choisir pour cette étude devait donc pouvoir également tenir compte du caractère ondulatoire des porteurs dans ce matériau. C'est pourquoi nous sommes donc appuyés sur la technique des fonctions de Green, qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger tout en tenant compte de l'injection et de l'extraction des porteurs à partir des contacts et allons l'introduire dans le chapitre suivant.





## Chapitre II

# Théorie du transport cohérent de charges, application aux dispositifs en graphène

Nous allons commencer ce chapitre par un rappel de la méthode semi-classique utilisée pour calculer le courant dans les dispositifs – notamment dans les transistors – dont la dimension la plus petite est de plusieurs fois le libre parcours moyen électronique (LPM). Quand l'une des dimensions du dispositif à modéliser devient comparable au LPM, il devient nécessaire de résoudre l'ES au moins dans cette direction et d'utiliser ensuite les modèles 'effectifs' dans les autres. Quand toutes les dimensions du système deviennent de l'ordre du LPM, l'utilisation d'une technique permettant la résolution de l'équation de tout le système devient une nécessité pour tenir compte des phénomènes quantiques : délocalisation, effet tunnel, tunnel chiral, etc... C'est dans ce but que nous introduirons le formalisme de la fonction de Green hors équilibre (NEGF) dans l'hypothèse du transport balistique. Nous avons choisi de nous placer dans cette hypothèse car comme on le verra dans le troisième chapitre, le transport de charges est fortement cohérent et balistique. On verra que cette hypothèse balistique simplifie fortement le formalisme NEGF.

Nous nous sommes fortement inspirés des deux livres de Supriyo Datta, « Electronic transport in mesoscopic systems » et « Quantum transport, atom to transistor », ainsi que des cours de Mark Lundstrom sur [www.nanohub.org](http://www.nanohub.org). Nous invitons le lecteur qui désire plus de détails à propos du transport balistique à consulter ces ouvrages ainsi que le site web en question.

### II.1. Approche semi-classique du transport

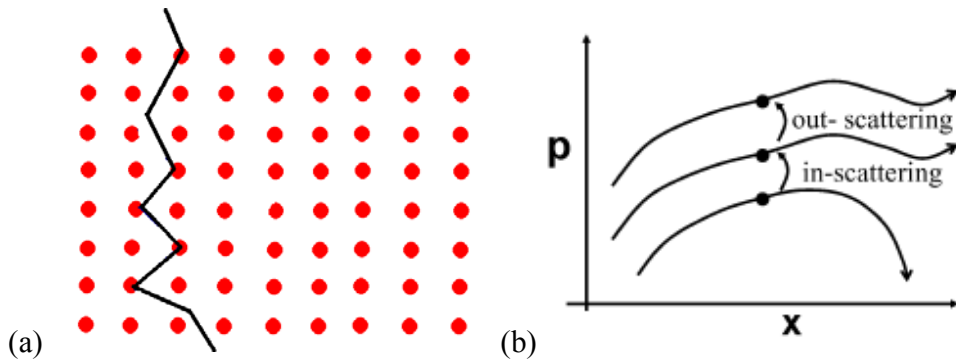
La mécanique quantique nous dit qu'on peut associer à un électron d'impulsion  $\vec{p}$  un vecteur d'onde  $\vec{k} = \vec{p} / \hbar$ . Un électron dans un cristal est soumis à un potentiel périodique créé par les noyaux des atomes qui composent le cristal. La résolution de l'ES pour cet électron, dans le cadre de l'approximation de l'électron quasi-libre et en négligeant son interaction coulombienne avec les autres électrons, permet de montrer que  $\vec{k}$  est un bon nombre quantique et d'en déduire la relation de dispersion  $E(\vec{k})$ . L'électron est donc représenté par un paquet d'ondes qui se déplace avec une vitesse de groupe donnée par

$$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\vec{k})}{d\vec{k}}. \quad (2.1)$$

L'approche semi-classique consiste à traiter les porteurs comme des particules classiques de masse effective  $m^*$  obéissant à la seconde loi de Newton :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = m^* \frac{d\vec{v}_g}{dt} = \sum \vec{F}_{ext} \quad \text{où} \quad (m^*)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk_\mu dk_\nu} \quad (2.2)$$

La masse effective  $m^*$  est un tenseur calculé à partir de la relation de dispersion des électrons dans le matériau, traduisant l'effet de la présence du potentiel périodique des noyaux, et  $\sum \vec{F}_{ext}$  représente les forces que subit l'électron (électrique ou magnétique). Quand le libre parcours moyen est très faible devant les dimensions du dispositif, un électron subit beaucoup d'interactions, et le paquet d'ondes qui lui est associé se retrouve localisé autour de l'électron [Querlioz\_PRB\_2008]. On peut alors confondre ce dernier et le centre de son paquet d'ondes, lui affecter sa vitesse de groupe et étudier l'évolution de sa position et de son impulsion par les équations (2.1) et (2.2) respectivement, comme s'il s'agissait d'un point matériel classique [Fig. 1a]. Dans la technique particulière Monte Carlo (MC), par exemple, les évènements de diffusion sont pris en compte en tirant au sort des temps de vols libres après lesquels la trajectoire de l'électron peut changer dans l'espace des phases [Fig. 1b]. On fait subir ce traitement à un grand nombre d'électrons pendant un temps suffisamment long pour que le système atteigne son état stationnaire.



**Fig 1 : (a) En noir est représentée la trajectoire dans l'espace réel d'un électron dans un cristal en rouge (b) mouvement d'un électron dans l'espace des phases avec des interactions qui peuplent (in-scattering) ou qui dépeuplent (out-scattering) un état donné [Anantram\_IEEE\_Proc\_2008]**

Les grandeurs physiques sont obtenues en moyennant sur toutes les trajectoires dans cet espace. Cette approche Monte Carlo particulière est en fait une méthode stochastique pour résoudre l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\vec{F}_{ext}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \hat{C}f, \quad (2.3)$$

où  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  est la fonction de distribution, qui donne la probabilité qu'un état d'impulsion  $\hbar\vec{k}$  soit occupé à la position  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ ,  $e$  la charge de l'électron, et  $\hat{C}$  l'opérateur de collision. La connaissance de  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  permet de déduire toutes les grandeurs physique pertinentes. Par exemple, les expressions de la densité de charge et de la densité de courant dans le cadre de ce formalisme sont données respectivement par

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{dV} \sum_k f(\vec{r}, \vec{k}, t), \quad (2.4)$$

$$I(\vec{r}, t) = \frac{1}{dV} \sum_k e\vec{v}f(\vec{r}, \vec{k}, t). \quad (2.5)$$

Quand les dimensions du dispositif deviennent comparables à la longueur d'onde de De Broglie des électrons, cette approche n'est plus valide car la particule ne peut plus être considérée comme ponctuelle mais possède une fonction d'onde délocalisée. Il devient donc nécessaire de résoudre l'ES de tout le système.

## II.2. Formalisme de Green hors équilibre (NEGF) pour le transport balistique

### II.2.1. Cadre théorique de l'étude

La résolution de l'ES de tout le système est en général une tâche très complexe à cause des nombreux degrés de libertés des sous-systèmes et du couplage entre eux. Le formalisme de Green apporte la réponse à la première difficulté. En effet, un dispositif électrique est souvent composé d'une région active (C) connectée à deux réservoirs appelés parfois source (S) et drain (D) de très grandes dimensions devant C. S et D sont tellement grands qu'ils sont considérés comme étant constamment en équilibre thermodynamique et tous les phénomènes hors équilibre sont localisés dans C. L'approche NEGF permet de traiter C comme un système ouvert et de prendre en compte l'effet du couplage avec S et D à travers des termes appelés "Self-énergie" (SE), dont nous reparlerons.

Les systèmes étudiés durant cette thèse sont balistiques et possèdent deux propriétés qui permettent de simplifier considérablement le problème :

1. Le détail des interactions entre les électrons peut être négligé en première approximation et on peut considérer que les électrons sont assujettis à un 'champ moyen' créé par tous les autres électrons.

2. Dans les dispositifs étudiés, les électrons ne subissent aucun type de diffusion susceptible d'entraîner de la décohérence. Les diffusions par les défauts fixes – comme ceux des GNM – ne peuvent pas causer de la décohérence car leur effet peut être inclus dans l'Hamiltonien par un terme de potentiel de défaut approprié.

Dans le cadre de ces hypothèses, le Hamiltonien des systèmes que l'on va étudier peut se ramener à un 'Hamiltonien à une particule', où le potentiel est calculé de manière auto-cohérente. C'est dans ce cadre théorique précis que nous allons introduire le formalisme NEGF.

### II.2.2. Origine du courant électrique dans les dispositifs électriques

Quand la tension est nulle aux bornes d'un dispositif, l'ensemble de la structure est en équilibre thermodynamique, et le courant qui y circule est nul. L'application d'une tension plus grande côté drain (D) entraîne l'abaissement des niveaux d'énergie de celui-ci par rapport à ceux de la source (S). Les niveaux de Fermi sont reliés par la relation  $\mu_D = \mu_S - qV_{DS}$ , et le canal (C) devient le siège d'une compétition entre la source et le drain – tous deux supposés en équilibre thermodynamique – qui veulent voir le canal en équilibre avec leur distribution de Fermi respectives. Il en résulte que, tant que l'alimentation peut maintenir la différence des deux niveaux de Fermi, la source va continuellement tendre à injecter des électrons dans le canal tandis que le drain va tendre à les absorber. Le canal est par conséquent constamment hors équilibre, ce qui entraîne l'établissement d'un courant entre S et D [fig. 2].

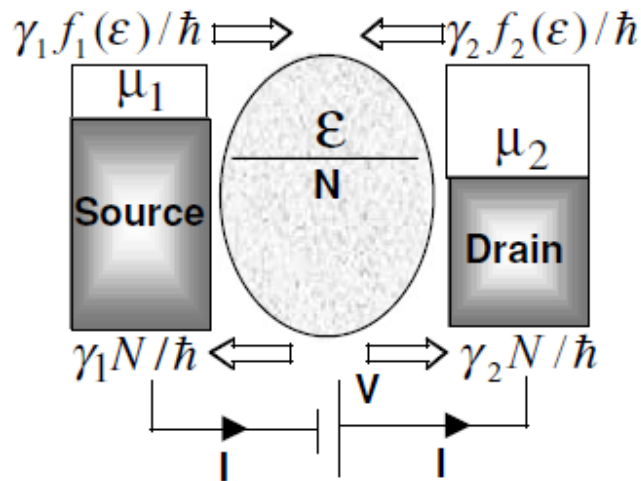


Fig.2 : Schéma représentant l'injection (flèches en haut de la figure) depuis les réservoirs de source et drain, qui ont des potentiels chimiques  $\mu_1$  et  $\mu_2$  respectivement, dans un conducteur n'ayant qu'un seul niveau d'énergie  $\varepsilon$  et une densité électronique  $N$ . L'extraction des électrons par les contacts est représentée par les flèches du bas et sortant du conducteur. Les quantités devant les flèches sont les taux d'injection et d'extraction de chaque contact. Repris de [Datta1].

Pour calculer ce courant, considérons d'abord un canal à un seul état ayant pour énergie  $\varepsilon$ . Le couplage du niveau discret  $\varepsilon$  du canal aux continus d'états de la S et du D entraîne des élargissements de ce niveau, notés respectivement  $\gamma_S$  et  $\gamma_D$ . La relation d'incertitude permet de

déduire les durées de vie  $\tau$  de ce niveau ( $\tau\gamma_i = \hbar$ ) et de calculer les flux sortants du canal  $N\gamma_i / \hbar$ . Les flux entrants s'obtiennent en remarquant qu'à l'équilibre le flux entrant est égal au flux sortant avec  $N = f_i$ . Comme il n'existe pas de relation causale entre l'abaissement du niveau de Fermi du drain (suite à l'application de la tension  $V_{DS}$ ) et les propriétés du contact de source, il en résulte que le flux entrant reste égal à  $\gamma_s f_s / \hbar$ . Il est en est de même pour le taux d'injection depuis le drain  $\gamma_D f_D / \hbar$ . Le courant est donc donné par

$$I = I_s = -I_D, \quad (2.6)$$

C'est-à-dire par

$$\begin{aligned} I &= q \frac{\gamma_s}{\hbar} (f_s - N) = q \frac{\gamma_D}{\hbar} (N - f_D) \\ &= \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_s \gamma_D}{\gamma_s + \gamma_D} (f_s - f_D) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Si le canal possède plus d'états, il est nécessaire de sommer sur l'ensemble de ces états (modèle des niveaux indépendants):

$$\begin{aligned} I &= \frac{2q}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) \cdot \{f_s(E) - f_D(E)\} \\ &\text{avec } T(E) = DOS(E) \cdot \frac{\gamma_s \gamma_D}{\gamma_s + \gamma_D}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

où  $T(E)$  est appelée 'fonction de transmission' et peut être supérieure à 1. Elle dépend du nombre de sous-bandes dans C et de la probabilité de transmission à travers chacun de ces canaux. Cette probabilité de transmission dépend fortement de la forme du potentiel auto-cohérent (PAC).

On voit donc qu'une différence entre les deux fonctions d'occupation de S et D – ici nous nous sommes focalisés sur une différence induite par une source de tension, mais une différence de température aurait le même effet – entraîne l'établissement d'un courant dans le dispositif, et que pour le calculer correctement nous avons besoin de connaître trois grandeurs :

- La charge  $N$  pour calculer le Potentiel Auto-Cohérent dans le dispositif
- Le Potentiel Auto-Cohérent (PAC) pour calculer la charge  $N$
- La fonction de transmission pour calculer le courant auto-cohérent, une fois qu'on a calculé le PAC et  $N$ .

Nous verrons dans ce qui suit comment le formalisme NEGF permet, une fois qu'on a calculé le potentiel auto-cohérent, de calculer la charge  $N$  et la transmission  $T(E)$ . Le Potentiel Auto-

Cohérent quant à lui est obtenu par un couplage de l'Equation de Poisson (EP) et de la fonction de Green hors équilibre. Nous verrons comment le faire au troisième chapitre.

### II.2.3. Formalisme de Green à l'équilibre

Avant d'appliquer le formalisme de Green aux dispositifs se trouvant hors équilibre, il est utile de voir comment il s'applique aux dispositifs se trouvant à l'équilibre. Cette étape permet de mieux comprendre comment on transforme un système fermé de très grande dimension en un système ouvert de plus faible dimension. Cela permet également de mieux comprendre la signification physique de chaque terme.

#### II.2.3.1. Réduction du système fermé en un système ouvert de plus faible dimension

Nous allons pour cela considérer un dispositif composé d'une région active C connectée à un réservoir R [Fig. 3].

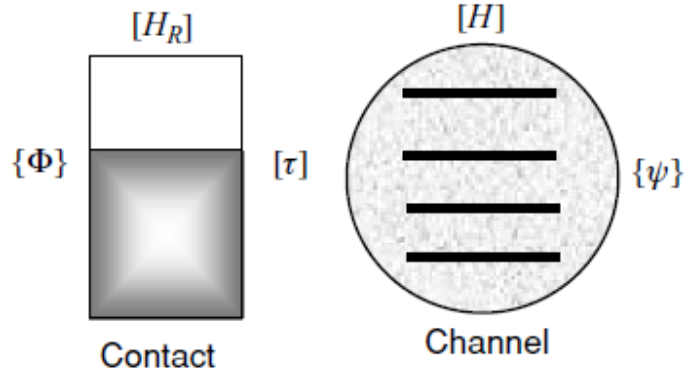


Fig.3: Schéma représentant une région active (ici noté Channel), ayant un Hamiltonien  $H$  et où les électrons ont une fonction d'onde  $\psi$ , avant d'être couplée à un réservoir (contact) ayant un Hamiltonien  $H_R$  et où les électrons ont une fonction d'onde  $\Phi$ . Le couplage entre les deux se fait par la matrice  $\tau$ . Repris de [Datta1].

Nous appelons  $H_R$  le Hamiltonien des électrons dans R avant contact avec C et  $|\phi_R\rangle$  la fonction d'onde qui leur est associée,  $H$  le Hamiltonien des électrons de C avant contact avec R et  $|\psi\rangle$  la fonction d'onde qui leur est associée. La base de l'espace des états dans C est  $\{|\psi_\alpha\rangle\}_{\alpha \leq m}$  et celle de l'espace des états dans R est  $\{|\phi_\alpha\rangle\}_{\alpha \leq n}$ ,  $\alpha$  étant un indice positif et  $m \ll n$  (On a général bien plus de modes dans un contact que dans la zone active). Par conséquent, la dimension de la matrice de  $H_R$  dans cette représentation est  $(n \times n)$ ,  $(m \times m)$  est la dimension de  $H$  et  $(m \times n)$  celle de  $\tau$  qui représente la matrice de couplage entre  $H_R$  et  $H$ .  $|\psi\rangle$  et  $|\phi_R\rangle$  sont des vecteurs de dimension  $m$  et  $n$ , respectivement. L'ES du système total s'écrit alors

$$\begin{pmatrix} EI - H_R + i\eta & -\tau^\dagger \\ -\tau & EI - H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_R + \chi \\ \psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_R \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Nous avons rajouté certains termes à l'ES du système pour tenir compte de tous les phénomènes après contact entre C et R, c'est-à-dire :

- \*  $i\eta|\phi_R\rangle$  pour tenir compte de l'extraction des électrons du contact
- \*  $S_R$  pour tenir compte de la réinjection des électrons dans le contact par C
- \* permet de tenir compte des ondes réfléchies à l'intérieur du contact et excitées par  $\psi$

On verra la signification de chacun de ces termes plus en détail un peu plus loin. Pour l'instant, voyons comment transformer ce système en un système ouvert. Nous supposons que

$$(EI - H_R + i\eta)|\phi_R\rangle = |S_R\rangle. \quad (2.10)$$

Si on pose

$$G_R = (EI - H_R + i\eta)^{-1}, \quad (2.11)$$

il vient que  $|\chi\rangle = G_R \tau^\dagger |\psi\rangle$ . On obtient alors une équation décrivant C comme un système ouvert :

$$(EI - H - \Sigma)|\psi\rangle = |S\rangle, \quad (2.12)$$

avec

$$\Sigma = \tau G_R \tau^\dagger \text{ et } |S\rangle = \tau |\phi_R\rangle. \quad (2.13)$$

La quantité  $\Sigma$  est appelée Self-Energie (SE) et revêt une grande importance dans ce formalisme. Il est très important de noter que  $E$  n'est pas une énergie propre du système, mais une variable indépendante qui représente l'énergie à laquelle on excitera le système.

La quantité

$$G(E) = [EI - H - \Sigma]^{-1} \quad (2.14)$$

est appelée fonction de Green de la région active C (forme générale pour les systèmes ouverts).

### II.2.3.2. Densité d'états et fonction spectrale

Considérons un système fermé constitué d'une région active C à un seul état  $|\psi\rangle$  d'énergie  $\varepsilon$ , connectée à un réservoir R possédant un grand nombre d'états  $\{|\phi_n\rangle\}$  d'énergies  $\{\varepsilon_n\}$ .



La densité d'états d'un système fermé est donnée par :

$$DOS(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) = \delta(E - \varepsilon) + \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) \quad (2.15)$$

Le problème de cette définition est qu'elle ne donne aucune indication sur la localisation spatiale de ces niveaux. En effet, la mise en contact de C et de R fait en sorte que  $|\psi\rangle$  débordent dans R et les  $\{|\phi_{\alpha}\rangle\}$  débordent dans C. L'obtention de cette information nécessite, pour chaque énergie et à chaque position, la pondération des états correspondants par le carré des fonctions d'onde évaluées en cette position :

$$DOS(\vec{r}, E) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) = LDOS(\vec{r}, E) \quad (2.16)$$

Cette quantité est appelée densité d'états locale (LDOS) et rappelle, à  $2\pi$  près, les éléments diagonaux d'un opérateur plus général appelé fonction spectrale  $A(\vec{r}, \vec{r}', E)$ , qui s'écrit en représentation  $\vec{r}$

$$\langle \vec{r} | A(E) | \vec{r}' \rangle = 2\pi \left\langle \vec{r} \left| \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) \langle \phi_{\alpha} | \right| \vec{r}' \right\rangle. \quad (2.17)$$

On peut voir d'après (2.17) que, dans la base propre du Hamiltonien,

$$A_{ij}(E) = \delta_{ij} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}). \quad (2.18)$$

En définissant les fonctions de Green retardée et avancée, respectivement, par

$$G = \left[ (E + i0^+) I - H \right]^{-1}, \quad (2.19)$$

$$G^{\dagger} = \left[ (E - i0^+) I - H \right]^{-1}, \quad (2.20)$$

en utilisant la relation entre la distribution de Dirac et la fonction Lorentzienne

$$2\pi\delta(E - \varepsilon_{\alpha}) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2\eta}{(E - \varepsilon_{\alpha})^2 + \eta^2} = i \left[ \frac{1}{(E + i0^+) - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{1}{(E - i0^+) - \varepsilon_{\alpha}} \right], \quad (2.21)$$

qui, en se plaçant dans une représentation qui diagonalise l'Hamiltonien, peut être réécrite sous la forme

$$2\pi\delta(EI - H) = i \left[ \left[ (E + i0^+)I - H \right]^{-1} + \left[ (E - i0^+)I - H \right]^{-1} \right], \quad (2.22)$$

il vient alors

$$A(E) = i \left[ G(E) - G^\dagger(E) \right]. \quad (2.23)$$

En effet, cette relation étant vraie dans la représentation des vecteurs propres de l'Hamiltonien, elle devient vraie dans toute autre représentation.

### II.2.3.3. Relation entre le Formalisme de Green et la matrice densité

On suppose que chaque état propre du réservoir  $|\phi_\alpha\rangle$  est occupé avec une probabilité donnée par la distribution de Fermi  $f_0(\varepsilon_\alpha - \mu)$ . Après la mise en contact de R et de C, chaque  $|\phi_\alpha\rangle$  donne naissance à un terme de source  $|S_\alpha\rangle = \tau|\phi_\alpha\rangle$  qui excite une onde  $|\psi_\alpha\rangle = G\tau|\phi_\alpha\rangle$  dans C avec la même probabilité d'occupation  $f_0(\varepsilon_\alpha - \mu)$  que la fonction qui l'a engendré. La matrice densité de ce mélange statistique d'états induit par R dans C est donné par

$$\begin{aligned} [\rho] &= \sum_\alpha |\psi_\alpha\rangle f_0(\varepsilon_\alpha - \mu) \langle \psi_\alpha| \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0(E - \mu) \sum_\alpha |\psi_\alpha\rangle \delta(E - \varepsilon_\alpha) \langle \psi_\alpha| \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_0(E - \mu) G\tau \left[ \sum_\alpha |\phi_\alpha\rangle \delta(E - \varepsilon_\alpha) \langle \phi_\alpha| \right] \tau^\dagger G^\dagger \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} f_0(E - \mu) G \{ \tau A_R \tau^\dagger \} G^\dagger. \end{aligned} \quad (2.24)$$

On définit la matrice d'élargissement spectral par

$$\Gamma_R = i \left[ \Sigma - \Sigma^\dagger \right] = \tau A_R \tau^\dagger. \quad (2.25)$$

Cette Matrice  $\Gamma_R$  est l'équivalent matriciel de  $\gamma_1$ , qui traduit le fait que la durée de vie des états dans le contact devient finie quand ce contact est couplé à la zone active. La matrice  $\Gamma_R$ , et donc la partie imaginaire de la self-énergie, détermine donc le taux d'injection depuis le réservoir R vers la zone active. C'est pour cette raison que la partie imaginaire de la self-énergie doit toujours être positive.

En remarquant que  $(G^\dagger)^{-1} - G^{-1} = -i\Gamma$  et en multipliant chaque terme de cette identité par  $G$  à gauche et  $G^\dagger$  à droite, on peut voir que

$$A(E) = i[G - G^\dagger] = G\Gamma_R G^\dagger, \quad (2.26)$$

G étant définie par (2.19). On définit la fonction de corrélation électronique par

$$\begin{aligned} G^n(E) &= f_0(E - \mu) G\Gamma G^\dagger \\ &= f_0(E - \mu) A(E). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Il vient finalement

$$[\rho] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} G^n(E). \quad (2.28)$$

La fonction de corrélation représente en fait la matrice de densité électronique par unité d'énergie à  $(2\pi)^{-1}$  près. L'élément diagonal ( $i$ ) de (2.28) fournit la densité électronique sur le site ( $i$ ). Il est très important de noter que le développement de (2.24) a été rendu possible grâce à l'indépendance des modes  $|\phi_\alpha\rangle$  et nous allons souvent utiliser ce fait.

## II.2.4. Formalisme de la fonction de Green hors équilibre (NEGF) – Formule de Landauer

### II.2.4.1. Transformation du système fermé en système ouvert – fonction de Green de la région active

Considérons maintenant l'ensemble du dispositif composé d'une source S et d'un drain D qui jouent le rôle de réservoirs d'électrons et sont couplés à un canal C [Fig. 4]. L'ES du système est donnée par

$$\begin{pmatrix} EI - H_S + i\eta & -\tau_S^\dagger & 0 \\ -\tau_S & EI - H_C & -\tau_D \\ 0 & -\tau_D^\dagger & EI - H_D + i\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_S + \chi_S \\ \psi \\ \phi_D + \chi_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_S \\ 0 \\ S_D \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

La résolution du système d'équation (2.29) permet d'arriver à l'équation à laquelle obéit la fonction d'onde des électrons dans C, quand ce dernier est considéré comme système ouvert couplé à S et D

$$[EI - H_C - \Sigma_S - \Sigma_D]|\psi\rangle = |S\rangle, \quad (2.30)$$

avec

$$\Sigma_S = \tau_S G_S \tau_S^\dagger \text{ et } \Sigma_D = \tau_D G_D \tau_D^\dagger, \quad (2.31)$$

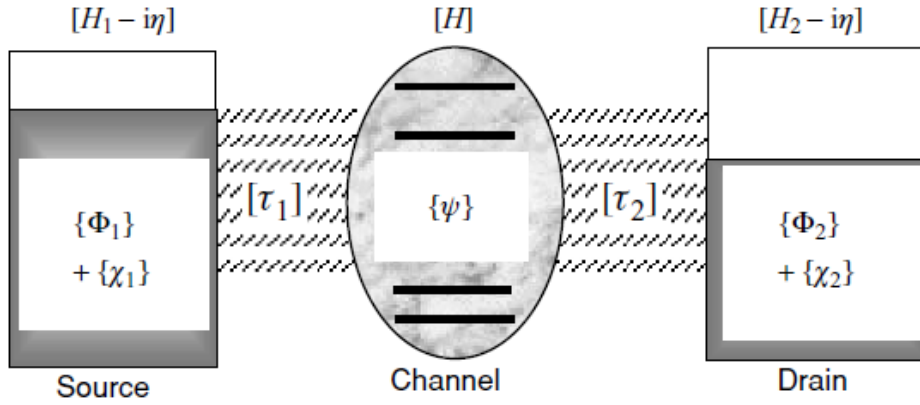
$$G_S = [EI - H_S + i\eta]^{-1} \text{ et } G_D = [EI - H_D + i\eta]^{-1}, \quad (2.32)$$

$$|S\rangle = \tau_S |\phi\rangle_S + \tau_D |\phi\rangle_D. \quad (2.33)$$

La quantité

$$G_C = [EI - H - \Sigma_S - \Sigma_D]^{-1} \quad (2.34)$$

est appelée fonction de Green du dispositif.



**Fig.4:** schéma représentant une région active (Channel) ayant un Hamiltonien  $H$  et où les électrons ont une fonction d'onde  $\psi$ , couplée à un réservoir à gauche (source) ayant un Hamiltonien  $H_1 - i\eta$  et où les électrons ont une fonction d'onde  $\Phi_1 + \chi_1$ , et couplée à un réservoir de droite (source) ayant un Hamiltonien  $H_2 - i\eta$  et où les électrons ont une fonction d'onde  $\Phi_1 + \chi_1$ . Le couplage entre les deux se fait par la matrice  $\tau$ . Le couplage de la zone active à la source est modélisé par la matrice  $\tau_1$  et le couplage au drain est modélisé par la matrice  $\tau_2$ .  
Repris de [Datta1].

#### II.2.4.2. Fonction de corrélation électronique

De la même manière qu'en (2.25) et (2.26), on définit les fonctions spectrales et les matrices d'élargissement spectral par

$$A_S = i[G_S - G_S^\dagger] = G_C \Gamma_S G_C^\dagger \text{ et } A_D = i[G_D - G_D^\dagger] = G_C \Gamma_D G_C^\dagger, \quad (2.35)$$

$$\Gamma_S = \tau_S A_S \tau_S^\dagger \text{ et } \Gamma_D = \tau_D A_D \tau_D^\dagger. \quad (2.36)$$

En suivant le même raisonnement que dans la section II.2.3.3 pour calculer la matrice densité,

$$\begin{aligned}
[\rho] &= \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu) \langle \psi_{\alpha}| = \sum_{\alpha} G_C |S\rangle f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu) \langle S| G_C^{\dagger} \\
&= \sum_{\alpha} G_C \left[ \sum_{i,j=S,D} \tau_i |\phi_{\alpha}^i\rangle f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu_i) \langle \phi_{\alpha}^j| \tau_j^{\dagger} \right] G_C^{\dagger},
\end{aligned} \tag{2.37}$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
[\rho] &= \sum_{\alpha} \left[ G_C \tau_S |\phi_{\alpha}^S\rangle f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu_S) \langle \phi_{\alpha}^S| \tau_S^{\dagger} G_C^{\dagger} \right] \\
&\quad + \left[ G_C \tau_D |\phi_{\alpha}^D\rangle f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu_D) \langle \phi_{\alpha}^D| \tau_D^{\dagger} G_C^{\dagger} \right].
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Pour le passage de (2.37) à (2.38), nous avons utilisé le fait que, les fonctions  $|\phi_{\alpha}^S\rangle$  et  $|\phi_{\alpha}^D\rangle$  étant localisées dans deux endroits spatialement et physiquement disjoints, les termes ‘croisés’ de (2.37) s’annulent. On voit d’après (2.38) que la matrice densité se ‘factorise’ comme deux dispositifs superposés constitué chacun d’un réservoir ayant sa propre distribution de Fermi et couplé à la région active. On peut alors adopter la même démarche que dans la section II.2.3.3 et réécrire (2.38) sous la forme

$$\begin{aligned}
[\rho] &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \left[ \left[ f_0(E - \mu_S) G_C \{ \tau_S A_S \tau_S^{\dagger} \} G_C^{\dagger} \right] + \left[ f_0(E - \mu_D) G_C \{ \tau_D A_D \tau_D^{\dagger} \} G_C^{\dagger} \right] \right] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \left[ \left[ f_S G_C \Gamma_S G_C^{\dagger} \right] + \left[ f_D G_C \Gamma_D G_C^{\dagger} \right] \right] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} G_C^n(E),
\end{aligned} \tag{2.39}$$

avec  $f_S$  (respectivement  $f_D$ ) la fonction de Fermi ayant pour potentiel chimique celui de la source (drain) et où la fonction de corrélation de la région active C considérée comme système ouvert est donnée par

$$G_C^n = G_C \Sigma^{in} G_C^{\dagger}, \tag{2.40}$$

$$\text{avec } \Sigma^{in} = \Gamma_S f_S + \Gamma_D f_D \tag{2.41}$$

### II.2.4.3. Courant dans un dispositif à deux terminaux dans le formalisme NEGF – Formule de Landauer

Comme nous l’avons expliqué dans la section II.2.2, le courant dans ce type de dispositifs est dû à la compétition entre la source et le drain – tous deux supposés en équilibre thermodynamique – qui veulent chacun voir le canal en équilibre avec leur distribution de Fermi respective. Pour calculer ce courant, il faut d’après (2.6-7) évaluer les flux entrants et sortants

dans/de S et D et les multiplier la charge de l'électron  $e$ . Pour ce faire, nous partons du Hamiltonien (2.30) pour évaluer la variation de la densité de probabilité associée à une fonction d'onde de la source  $\psi_S^\alpha$  induite par un état propre du réservoir de source  $\phi_S^\alpha$  – que nous noterons ici simplement  $\psi$  et  $\phi_S$  pour alléger les notations – au voisinage du contact de source. Ainsi,

$$\begin{aligned} I &= e \frac{d}{dt} |\psi|^2 = I_{in} - I_{out}, \\ I_{in} &= \frac{e}{i\hbar} \text{Tr} [\psi^\dagger \tau_S \phi_S - \phi_S^\dagger \tau_S^\dagger \psi], \\ I_{out} &= \frac{e}{i\hbar} \text{Tr} [\chi_S^\dagger \tau_S^\dagger \psi - \psi^\dagger \tau_S \chi_S]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

La conservation de la charge nous autorise, en régime stationnaire, à choisir l'endroit où l'on veut calculer la densité de courant. En utilisant (2.30) et (2.34) ainsi que les notations de la section précédente, on a  $|\psi\rangle = G_C |S\rangle$  et  $|S_S\rangle = \tau_S |\phi\rangle_S$ . Le flux entrant s'écrit alors

$$\begin{aligned} I_{in} &= \frac{e}{i\hbar} \text{Tr} [S^\dagger G_C^\dagger S_S - S_S^\dagger G_C \Psi] = \frac{e}{i\hbar} \text{Tr} [S_S S_S^\dagger A_C] \\ &= \frac{e}{i\hbar} \text{Tr} [\tau_S \phi_S \phi_S^\dagger \tau_S^\dagger A_C]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

En effet, les produits mixtes de  $S_S$  et  $S_D$  sont nuls pour les mêmes raisons que celles invoquées en II.2.2. En sommant sur tous les états propres  $\alpha$  de la source avec les probabilités d'occupation correspondantes et en transformant la somme en intégrale de façon similaire à celle opérée dans la section II-4.2, on obtient l'expression

$$I_{in} = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_S(E) \text{Tr} [\Gamma_S A_C]. \quad (2.44)$$

En remarquant que, par définition,  $|\chi_S\rangle = \tau_S^\dagger |\psi\rangle$ , et en effectuant le même traitement pour le flux sortant, il vient que, pour un état sortant  $\alpha$  donné,

$$I_{out} = \frac{e}{i\hbar} \text{Tr} [\psi \psi^\dagger \Gamma_S]. \quad (2.45)$$

En sommant sur tous les états de manière similaire, il vient

$$I_{out} = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \text{Tr} [\Gamma_S G_C^n]. \quad (2.46)$$

En utilisant (2.41) et en remarquant que  $A = A_S + A_D$ , on obtient finalement

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) [f_S(E) - f_D(E)], \quad (2.47)$$

avec

$$\begin{aligned} T(E) &= \text{Tr}[\Gamma_S A_D] = \text{Tr}[\Gamma_D A_S] \\ &= \text{Tr}[\Gamma_S G \Gamma_D G^\dagger] = \text{Tr}[\Gamma_D G \Gamma_S G^\dagger]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

L'expression (2.47) est la formule de Landauer dans la limite du transport balistique et la quantité  $T(E)$  de la formulé (2.48) est appelée fonction de transmission. Le préfacteur 2 de (2.47) provient de l'existence de deux canaux de spin.

### ***II.2.5. Fonction de Green hors équilibre pour les dispositifs en graphène 1D et 2D dans le cadre du modèle des liaisons fortes***

Nous avons montré dans la section précédente comment résoudre l'équation de Schrödinger à un électron à l'aide du formalisme NEGF et comment calculer le courant et les densités de charge dans un dispositif à deux terminaux. Nous avons vu que cette méthode requiert, pour chaque énergie, l'inversion d'une matrice ayant la même dimension que le Hamiltonien. Si on appelle  $N_x$  le nombre de couches dans la direction du transport, et  $N_y$  le nombre d'atomes dans chacune des  $N_x$  couche, on voit bien que quand on augmente la taille totale du système  $N = N_x \times N_y$  (et donc du Hamiltonien  $H$ ) que le problème devient vite difficile à résoudre. En effet, on a vu que le calcul de la fonction de Green nécessite l'inversion d'une matrice qui a la même taille que  $H$ . Or, le temps que nécessitent les méthodes actuelles d'inversion des matrices est proportionnel à  $N^3$  pour une seule inversion. Nous allons montrer que dans le cadre du modèle des liaisons fortes, le Hamiltonien d'un GNR se ramène dans l'espace réel à une matrice tri-diagonale par bloc. On peut alors utiliser une méthode récursive permet de réduire le temps de calcul à une quantité proportionnelle à  $N_x \times (N_y)^2$  [Anantram\_Proc\_IEEE\_2008]. Nous verrons ensuite comment ramener l'étude d'une structure infinie mais périodique dans la direction transverse au transport à l'étude d'un nanoruban dans la première zone de Brillouin.

#### **II.2.5.1. Application du formalisme aux nanorubans**

##### *a) Décomposition de la structure en couches*

La figure [Fig. 5] montre un exemple de décomposition en mailles élémentaires (ME) d'un GNR de type 'armchair' de  $M = 14$  dimères, infini dans la direction du transport qu'on notera ' $x$ '. Alors que le détail de la décomposition en ME dans la région active importe peu, celle dans les contacts doit être au moins identique à la plus petite ME permettant la reproduction du GNR à l'infini. Nous allons adopter cette ME dans tout ce qui suit.

Le Hamiltonien du système s'écrit dans la représentation dans l'espace réel choisie

$$H = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} H_{n,n} + H_{n,n\pm 1} + U_n, \quad (2.49)$$

où les matrices  $H_{n,n}$  et  $H_{n,n\pm 1}$  sont des matrices  $2M \times 2M$ . On peut choisir par exemple la représentation suivante pour ces trois matrices:

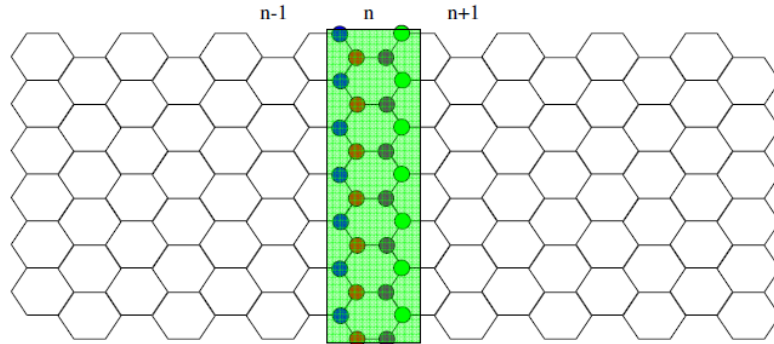
$$H_{n,n} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}; H_{n,n+1} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } H_{n,n-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

avec

$$\alpha_{i,j} = -(\delta_{j,i+1} + \delta_{i,j+1})t; \beta_{i,j} = -\frac{1+(-1)^i}{2}\delta_{i,j}t; \gamma_{i,j} = -\frac{1+(-1)^{i+1}}{2}\delta_{i,j}t \quad (2.51)$$

et  $U_{i,j}^n = \delta_{i,j} U_i^n$ ,

qui sont des matrices  $M \times M$  où  $i$  et  $j$  sont des entiers strictement positifs et inférieurs à  $M$ ,  $M$  étant le nombre de dimères. La matrice  $U_n$  est une matrice diagonale, dont chaque élément diagonal 'i' est le potentiel électrostatique sur le site  $i$  de la couche  $n$ . Dans le but d'alléger le formalisme, nous allons absorber  $U_n$  dans  $H_n$ . Les matrices  $H_n$  contiennent donc sur chacun de leurs éléments diagonaux  $i$  le potentiel sur ce site  $i$ .



**Fig.5 : Vision schématique d'un GNR de type 'armchair' de quatorze dimères ( $M = 14$ ). La maille élémentaire d'un GNR est représentée en vert.**

Le Hamiltonien est donc tri-diagonal par blocs dans notre représentation, chaque bloc étant une matrice  $(2M \times 2M)$ , et possède la forme générale suivante :



$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & \dots & \dots & & \\ \ddots & H_{0,0}^S & H_{0,1}^S & \ddots & & & \\ 0 & H_{1,0}^C & \begin{pmatrix} H_{1,1}^C & H_{1,2}^C & 0 & \dots & 0 \\ H_{2,1}^C & H_{2,2}^C & H_{2,3}^C & \ddots & \vdots \\ 0 & H_{3,2}^C & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & H_{N-1,N}^C \\ 0 & \dots & 0 & H_{N,N-1}^C & H_{N,N}^C \end{pmatrix} & 0 & \vdots \\ \vdots & & & & & & \\ 0 & \dots & \dots & 0 & H_{N+1,N}^D & H_{N+1,N+1}^D & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

La matrice au centre de  $H$  est la matrice du canal pris comme système ouvert et les autres matrices présentes à gauche et à droite de cette matrice centrale sont les blocs tri-diagonaux des contacts, respectivement de source et de drain.

*b) Calcul des selfs-énergies*

Conformément à ce que nous avons vu dans la section II.2.4, ce système peut être transformé en un système ouvert, de  $N$  mailles élémentaires, satisfaisant à une équation similaire à (2.44). Le Hamiltonien est réduit à un Hamiltonien similaire à celui entre parenthèse dans (2.53) où l'effet du contact avec  $S$  et  $D$  est pris en compte à travers les  $SE$   $\Sigma^S$  et  $\Sigma^D$  à la première et la  $N$ ème couche respectivement, c'est-à-dire

$$H = \begin{pmatrix} H_{1,1}^C - \Sigma^S & H_{1,2}^C & 0 & \dots & 0 \\ H_{2,1}^C & H_{2,2}^C & H_{2,3}^C & \ddots & \vdots \\ 0 & H_{3,2}^C & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & H_{N-1,N}^C \\ 0 & \dots & 0 & H_{N,N-1}^C & H_{N,N}^C - \Sigma^D \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

Il faut remarquer que dans la représentation dans l'espace réel,  $S$  et  $C$  ne sont couplés qu'au niveau des  $M$  premiers atomes de  $C$  en contact direct avec les  $M$  derniers atomes de  $S$ . En identifiant (2.52) avec (2.29), on voit que  $\tau_S^\dagger$  et  $\tau_S$  se résument respectivement à  $H_{0,1}^S$  et  $H_{1,0}^C$  et sont nulles partout ailleurs. La relation (2.31) est alors modifiée en

$$\Sigma_S = H_{1,0}^C g_0^S H_{0,1}^S \text{ et } \Sigma_D = H_{N,N+1}^C g_0^D H_{N+1,N}^D, \quad (2.54)$$

où  $g_S$  et  $g_D$  sont appelées fonctions de Green de surface (SGF) et sont par conséquent de dimension  $(2M \times 2M)$ . Il résulte d'après cette même équation que  $\Sigma^S$  est aussi de dimension  $(2M \times 2M)$  et est rajoutée uniquement à  $H_{1,1}^C$ . Le même raisonnement conduit à rajouter  $\Sigma^D$

directement à  $H_{N,N}^C$ . Nous allons voir maintenant comment fait-on pour calculer les fonctions de Green de surface (SGF).

D'après la définition de la fonction de Green du contact, c'est-à-dire  $[EI - H + i0^+]G = I$ , et d'après l'équation de Dyson [Anantram\_IEEE\_Proc\_2008], il vient que la fonction de Green de surface du contact S est définie par

$$g_{n,n}^S = [EI + i0^+ - H_{n,n}^S - H_{n,n-1}^S g_{n-1,n-1}^S H_{n-1,n}^S]. \quad (2.55)$$

Nous allons faire maintenant une supposition importante : **les contacts sont semi-infinis**. On a donc  $H_0^S = H_{0,-1}^S = \dots = H_{n-1,n-1}^S$ ,  $H_{n,n-1}^S = \dots = H_{-1,-2}^S = H_{0,-1}^S$  et  $H_{n-1,n}^S = \dots = H_{-1,0}^S$ , et par conséquent  $g_{n,n}^S = g_{n-1,n-1}^S = \dots = g_{0,0}^S = g_0^S$ , avec

$$g_0^S = [EI + i0^+ - H_0^S - H_{0,-1}^S g_0^S H_{-1,0}^S]. \quad (2.56)$$

La résolution de cette équation est une question centrale dans le formalisme NEGF. Elle nécessite une résolution auto-cohérente et est donc coûteuse en temps de calcul. Heureusement, il existe des algorithmes récursifs pour la résoudre [Sancho-Lopez], et on peut trouver une implémentation détaillée de cette méthode dans [VH-Nguyen\_Thèse]. La SGF côté D est obtenue par la même méthode.

### c) Calcul du courant et des densités de charges

On a vu dans la section II.2.2 que nous n'avons besoin, pour le calcul de la LDOS et par conséquent de la densité électronique, que des éléments diagonaux  $G_{i,i}^n$  et  $G_{i,i}^p$  des fonctions de corrélation électroniques et de la fonction de corrélation des trous. Comme les self-énergies  $\Sigma^{S,D}$  sont de dimension  $(2M \times 2M)$ , on voit d'après l'expression (2.40) qu'on n'a besoin que des blocs  $G_{i,1}$ ,  $G_{1,i}^\dagger$  et  $G_{i,N}$ ,  $G_{N,i}^\dagger$  pour calculer les fonctions de corrélation ( $N$  étant le nombre total de couches considérées la zone active). La même remarque concernant les dimensions des self-énergies montrent qu'on n'a besoin que de  $G_{1,1}$  pour calculer la fonction de transmission, définie dans (2.48). Il existe pour ce faire un algorithmes récursif qui évite le calcul de toute la fonction de Green, et qui ne calcule que les éléments  $G_{i,1}$ ,  $G_{1,i}^\dagger$  et  $G_{i,N}$ ,  $G_{N,i}^\dagger$ . Cet algorithme est présenté en détail dans la référence [Anantram\_Proc\_IEEE\_2008] et montre comment calculer les fonctions de corrélations des trous.

### II.2.5.2. Extension aux structures 2D

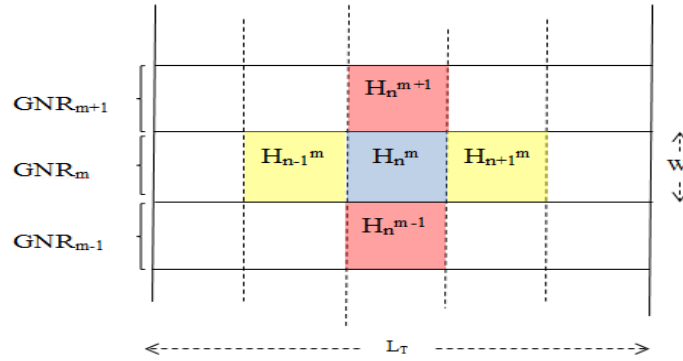
La Fig. 6 montre un exemple d'une structure périodique dans la direction transverse au transport et l'équation suivante (2.57) son Hamiltonien :

$$H = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} H_{n,n\pm 1}^m + H_n^m + H_n^{m,m\pm 1}. \quad (2.57)$$

Ce Hamiltonien possède, dans sa représentation dans l'espace réel, deux sommations infinies, ce qui le rend très difficile à résoudre. C'est pourquoi il est plus commode de le transformer dans l'espace réciproque par la transformation suivante [Nguyen-VH\_Nanotech\_2012]:

$$\alpha_m = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{k_y \in B.Z} \alpha_{k_y} e^{i.m.k_y.W} \quad (2.58)$$

Où B.Z signifie "zone de Brillouin" et  $\alpha_m$  pouvant représenter aussi bien les opérateurs  $a_m$  que  $b_m$  figurant dans l'équation (2.1).



**Fig.6 : Vision schématique d'une structure de graphène infinie dans la direction transverse au transport 'y'. L'invariance par une translation de 'W' le long de cette direction du Hamiltonien permet d'effectuer une transformée de fourrier de cet Hamiltonien et de ramener les calculs de toutes les grandeurs à un seul ruban élémentaire de largeur W (on calcule alors les densités des grandeurs par unité de largeur)**

La transformation (2.58) permet de découpler le Hamiltonien de la façon suivante :

$$\begin{aligned} H &= \sum_{K_y} H(k_y) = \sum_{K_y \in B.Z} \left[ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \tilde{H}_{n,n}(k_y) + H_{n,n\pm 1} \right] \\ &= \sum_{K_y} \left[ \tilde{H}_{1,1}^C(k_y) + \Sigma^S(k_y) + H_{1,2} + \sum_{n=2}^{N-1} \tilde{H}_{n,n}(k_y) + H_{n,n\pm 1} \right. \\ &\quad \left. + \tilde{H}_{N,N}^C(k_y) + \Sigma^D(k_y) + H_{N,N-1} \right], \end{aligned} \quad (2.59)$$

où  $\tilde{H}_{n,n\pm 1} = H_{n,n\pm 1}$  défini en (2.50). En conservant les mêmes notations que (2.51), on obtient

$$H_{n,n}(k_y) = \begin{pmatrix} \alpha'(k_y) & \beta \\ \beta & \alpha'(k_y) \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

avec  $\alpha'_{i,j}(k_y) = \alpha_{i,j} - t \left[ \delta_{i,1} \delta_{j,M} e^{+ik_y W} + \delta_{j,1} \delta_{i,M} e^{-ik_y W} \right]$ .

Soit

$$\alpha' = \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & \dots & 0 & -t.e^{+ik_y W} \\ -t & 0 & -t & \ddots & & 0 \\ 0 & -t & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & -t \\ -t.e^{-ik_y W} & 0 & \dots & 0 & -t & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Les SE  $\Sigma^{S,D}(k_y)$  dans (2.59) sont calculées pour chaque  $k_y$  par la formule (2.54). Les fonctions de Green de surface intervenant dans (2.54) sont également calculées pour chaque  $k_y$  par la formule (2.56). Les formules (2.39) et (2.47), donnant respectivement la charge et le courant dans l'espace réel, se transforment dans l'espace réciproque comme suit :

$$[\rho] = \underbrace{\frac{1}{\pi a_x} \int_{k_y \in B.Z} dk_y \int_{-\infty}^{NP} \frac{dE}{2\pi} G_C^p(E, k_y)}_{\text{Densité de trous } (p)} - \underbrace{\frac{1}{\pi a_x} \int_{k_y \in B.Z} dk_y \int_{NP}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} G_C^n(E, k_y)}_{\text{Densité d'électrons } (n)} \quad (2.62)$$

$$I = \frac{q}{\pi \hbar} \int_{k_y \in B.Z} dk_y \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E, k_y) [f_S(E) - f_D(E)] \quad (2.63)$$

où NP désigne le point de neutralité sur chaque site du dispositif. Notons qu'on a transformé la somme sur la composante transverse du vecteur d'onde dans (2.59) en intégrale dans la zone de Brillouin, et qu'on a effectué une sommation sur les deux canaux de spin.

### II.3. Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre comment le formalisme NEGF permet de ramener l'étude du transport balistique et cohérent dans un nano-dispositif, composé d'une zone active (canal) couplée à deux réservoirs infinis appelés (source et drain), à l'étude de la zone active uniquement, moyennant l'introduction de quantités appelées self-énergies. La partie imaginaire de ces self-énergies est toujours positive et mesure, à  $1/\hbar$  près, la durée de vie des électrons dans les

contacts après la mise en contact avec le canal. En effet, la self-énergie traduit le fait que les états stationnaires (donc de durée de vie infinie) dans le contact acquièrent une durée de vie finie dans car ils ont tendance à quitter le contact pour aller occuper les nouveaux modes qui leurs sont offerts au sein du canal. C'est le phénomène d'injection. On a vu que l'absence de causalité entre la source et le drain entraîne que les taux d'injections restent les mêmes à chaque extrémité du dispositif.

Nous avons vu que la circulation du courant dans le dispositif provient du fait que les contacts, qui sont constamment en équilibre thermodynamique, veulent voir leurs fonctions d'occupations de Fermi respectées en leur voisinage. Ainsi la source va continuellement injecter des électrons pour compenser les électrons dont le taux d'extraction du dispositif – côté drain – aura augmenté du fait de l'abaissement du potentiel chimique du drain par application d'une tension positive. Le canal est alors le siège d'un phénomène hors-équilibre, qui s'accompagne de la circulation d'un courant électrique dans le dispositif. Nous avons ensuite défini la fonction de Green hors-équilibre (NEGF) du dispositif et vu comment calculer, en utilisant cette fonction et les grandeurs qui lui sont reliées (comme les fonctions de corrélations, la fonction de transmission, etc...), le courant et la distribution de charge dans le dispositif qui résultent de ce phénomène hors-équilibre.

Nous sommes ensuite passés à l'application de ce formalisme au cas des dispositifs basés sur le graphène. Nous avons montré comment subdiviser le dispositif, dans l'espace réel, en mailles élémentaires afin de calculer les self-énergies, la charge et le courant de manière récursive. Nous avons également vu comment ces grandeurs sont calculées par le formalisme NEGF quand on passe dans l'espace des modes (également appelé espace réciproque). Le passage dans l'espace réciproque est nécessaire pour l'étude des dispositifs présentant une périodicité dans la direction transverse au transport. On va se baser sur ces formules, déduites en section II.2.5, pour l'étude du transport de charges dans tous les dispositifs que l'on va rencontrer dans le reste de cette thèse.

## Chapitre III

# Etude du transistor à effet de champ à base de graphène pristine 2D (GFET)

### III.1. Etat de l'art de l'électronique graphène "Haute Fréquence"

#### III.1.1. Il était une fois, avant le h-BN...

Depuis la découverte du graphène par Geim et Novoselov [Novoselov\_Science\_2004], ce matériau ne cesse d'attirer l'intérêt de la communauté scientifique aussi bien pour les perspectives qu'il offre en recherche fondamentale [Geim\_NatMat\_2007] [Katsnelson\_NatPhys\_2007], qu'en physique appliquée [Schwierz\_NatNano\_2010] [Avouris\_NanoLett\_2010].

Si l'absence de BI dans la structure de bande du graphène [Novoselov\_Science\_2005] constitue un sérieux frein pour le développement des applications numériques à base de ce matériau, il n'en est pas tout à fait de même pour les applications analogiques. Dès les premières mesures en 2004 sur ce matériau, la très haute mobilité dans le monocouche de graphène (« SLG », pour Single Layer Graphene) – d'environ  $20000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  à basse température – publiée par le groupe de Manchester a laissé entrevoir la possibilité d'une électronique analogique très rapide avec ce matériau, grâce à un temps de transit très court des porteurs.

Les premiers GFET ont été réalisés sur des substrats de silice [Fig. 1] et le même groupe [Morozov\_PRL\_2008] a cherché à déterminer les limitations du transport par ce substrat et à en déduire les performances intrinsèques du graphène en termes de transport de charge. Une composante  $\rho_s$  de la résistivité a été identifiée, qui est indépendante de  $V_{GS}$  et représente l'effet du désordre à courte portée. Cette composante a été associée à la présence d'ondulations de la SLG une fois déposée sur le SiO<sub>2</sub>. On en a conclu que la mobilité intrinsèque du graphène, limitée par les interactions à longue portée, pouvait être gigantesque et atteindre à température ambiante  $40000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  pour une densité d'électrons de  $3 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$  et 10 fois plus pour une densité d'électrons de  $3 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$ . D'autres études ont mis en évidence le rôle de l'interface SiO<sub>2</sub>/SLG dans la dégradation du transport dans la couche de graphène. C'est ainsi qu'on a

identifié une autre contribution à la réduction de la mobilité à la diffusion par les états de surface chargés et à la faible énergie d'activation des phonons optiques de surface sur ce matériau [Meric\_Nature\_Nano\_2008] (59 meV à température ambiante), et que la diffusion par les impuretés présentes à la surface du SiO<sub>2</sub> ont été jugées responsables de l'absence de saturation du courant à fort V<sub>DS</sub> dans les GFET à faible longueur de grilles sur SiO<sub>2</sub> [Meric\_NanoLett\_2011], puisque les caractéristiques I<sub>D</sub>-V<sub>DS</sub> en mesures pulsées montrent une bonne saturation. Cette dernière propriété constitue un sérieux obstacle à l'exploitation des GFET dans les circuits analogiques.

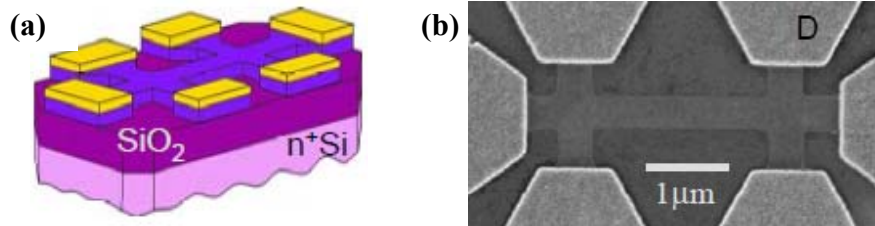


Fig 1 : (a) 1<sup>er</sup> GFET réalisé [Novoselov\_Science\_2004]. (b) image AFM Correspondante

En effet, si la fréquence de coupure – qui est la fréquence à laquelle le gain en courant en court-circuit redescend à 1 – est un critère de performance important d'un dispositif HF, il demeure loins des conditions réelles de fonctionnement d'un amplificateur HF ou la charge n'a pas toujours une impédance nulle. C'est pourquoi on considère que  $f_{\max}$  – qui est la fréquence à laquelle le gain unilatéral en puissance dans un circuit adapté en impédance retombe à 1 – est une estimation certes optimiste mais plus fiable que  $f_T$  de la fréquence maximale à laquelle peut fonctionner le dispositif. Contrairement à  $f_T$  qui ne dépend que de la transconductance  $g_m$  à travers l'expression

$$f_T = \frac{g_m}{2\pi C_g} \text{ avec } g_m = \frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} \text{ et } C_g = \frac{\partial Q}{\partial V_G}, \quad (3.1)$$

la fréquence maximale d'oscillation dépend – en plus de  $f_T$ , de la résistance d'accès de la grille  $R_G$  et de la résistance de contact  $R_S$  – également de la conductance  $g_d$  [Guo\_NanoLett\_2013]:

$$f_{\max} = \frac{f_T}{2\sqrt{g_D(R_G + R_S) + 2\pi f_T R_G C_{GD}}}, \quad (3.2)$$

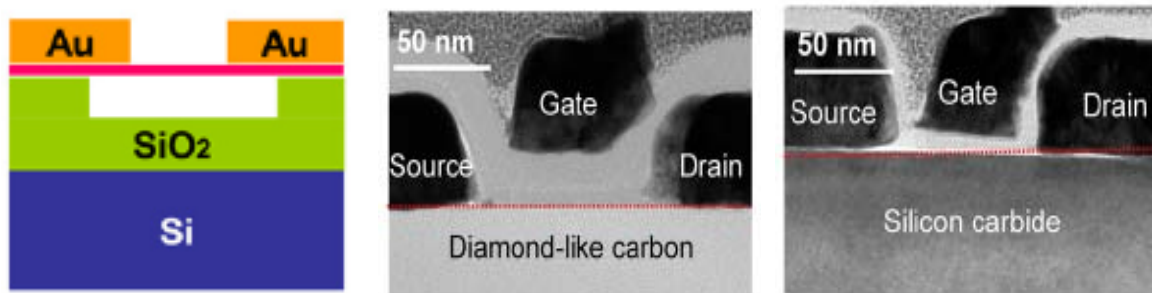
avec

$$g_d = \frac{\partial I_D}{\partial V_{DS}}. \quad (3.3)$$

On voit donc qu'une mauvaise saturation entraîne une conductance de sortie trop grande et entraîne un effondrement des performances HF. En effet, la mauvaise saturation dans les GFET à faible  $L_G$  [Meric\_NanoLett\_2011] entraîne un rapport de  $f_{\max} \approx \frac{f_T}{10}$  [Meric\_IEEE\_Proc\_2013] ce qui sera en grande partie confirmé et analysé par notre étude.

L'inadéquation du  $\text{SiO}_2$  comme substrat des GFET pour les hautes performances a été confirmée lorsqu'on a pu mesurer une mobilité de  $200\,000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  à  $n = 2 \cdot 10^{11}\text{ cm}^{-2}$  et à basse température sur du graphène suspendu sur [Fig. 2.a]  $\text{SiO}_2$  [Bolotin\_SolidStateComm\_2008]. Mais ce n'était tout de même pas la solution qui pouvait donner au GFET un essor économique car en plus de la difficulté technologique de réaliser des composants suspendus et fiables, le graphène était positionné à 150 nm du  $\text{SiO}_2$  ce qui rendait le contrôle de la barrière – initialement difficile dans les GFET [Cheng\_PNAS\_2012] [Alarcon\_IEEE\_TED\_2013] – encore moins efficace.

Toutes ces raisons ont amené les expérimentateurs à se tourner vers de nouveaux substrats. C'est ainsi qu'en 2010 le record de  $f_T$  a été porté à 100 GHz pour un transistor d'une longueur de grille  $L_G = 240\text{ nm}$  en graphène épitaxié sur la face Silicium 4H du Carbure de Silicium (SiC) [Lin-Y.M.\_Science\_2010]. Puis, un  $f_T = 155\text{ GHz}$  a été obtenu en 2011 [Wu\_Nature\_2011], pour du graphène que l'on a fait croître par PE-CVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) puis que l'on a transféré par du PMMA sur du carbone en structure diamant (DLC), et ce pour une longueur de grille  $L_G = 40\text{ nm}$ . Malgré une mobilité n'excédant pas  $\mu = 2000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  à température ambiante, les auteurs ont expliqué ces performances bien supérieures à celles sur substrat  $\text{SiO}_2$  [Schwierz\_NatNano\_2010] par de plus hautes énergies d'activation des phonons optiques de surface dans ces deux matériaux, respectivement de 115 et 165 meV pour le SiC et le DLC [Wu\_Nature\_2011] [Meric\_IEEE\_Proc\_2013], ainsi que par une faible quantité de pièges dans ces substrats.



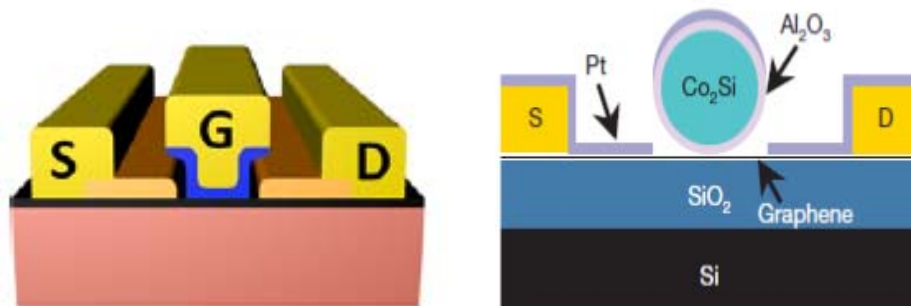
**Fig 2 : (a) GFET avec graphène suspendu [Bolotin\_SolidStateComm\_2008] (b) GFET sur DLC avec de l'alumine ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) comme oxyde de grille et (c) GFET sur SiC avec du nitrure de silicium ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) comme isolant de grille [Wu\_Nature\_2011].**

Il est important d'analyser le contenu physique de (3.2) afin d'expliquer les records actuels en performances HF. Cette équation montre qu'il existe une multitude de façons d'optimiser



$f_{\max}$ , aussi bien en améliorant les propriétés physiques du graphène, que la technologie de fabrication des GFET. Un exemple d'optimisation technologique est illustré dans [Wu\_NanoLett\_2012], où l'amélioration de l'auto-alignement, qui conduit à la diminution de la résistance d'accès  $R_{DS}$ , a permis de multiplier par deux  $f_T$  et  $f_{\max}$  pour les GFET sur DLC du papier [Wu\_Nature\_2011] à celui-ci [Wu\_NanoLett\_2012] en faisant passer la longueur du canal non contrôlée par la grille de 20 à 10 nm (surtout dans les GFET à canal court où la plus importante limitation du transport réside dans la qualité des contacts). Un exemple de record obtenu grâce à l'amélioration des deux aspects est bien illustré par le  $f_{\max} = 74$  GHz pour  $L_G = 100$  nm publié dans [Guo\_NanoLett\_2013]. Cette performance a été rendue possible grâce à l'utilisation de la face C du SiC comme substrat (ce qui a eu pour effet de multiplier par 4 la mobilité habituelle sur la face Si qui est de  $\mu = 2000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ), et par l'utilisation de grilles en « T » [fig. 3a] en dual gate [Fig. 4a] très bien auto-alignées, ce qui diminue les résistances d'accès.

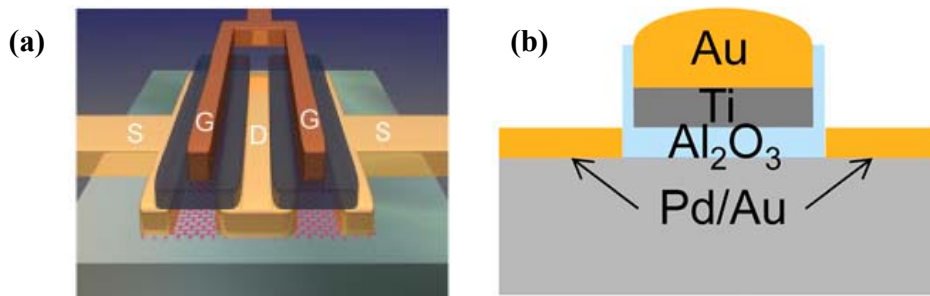
A ce propos, il est également important de mentionner qu'il se cache derrière l'utilisation de ces nouveaux substrats une motivation industrielle car la solution du graphène exfolié micro-mécaniquement puis transféré sur du  $\text{SiO}_2$  n'est pas viable et constitue un sérieux frein pour une industrialisation à grande échelle.



**Fig 3 : (a) GFET avec une grille en T sur substrat SiC [Guo\_NanoLett\_2013] ( $L_G = 100$  nm) (b) GFET avec une grille de auto-alignée constituée d'un nano-fil cœur-coquille de  $\text{Co}_2\text{Si-Al}_2\text{O}_3$ . [Liao\_Nature\_2010] ( $L_G = 140$  nm).**

Si ces substrats ont permis d'améliorer considérablement les performances des GFET à travers des mobilités plus élevées que celles constatées dans la silice, les oxydes de grille *high- $\kappa$*  conventionnels constituent un problème de taille pour l'exploitation de tout le potentiel HF du graphène. L'oxyde de grille le plus utilisé auparavant était l'alumine ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). Avant le dépôt de cette couche d'oxyde – souvent par la technique du dépôt de couche atomique (ALD), une étape de dépôt d'une couche d'Aluminium – souvent par une évaporation par faisceau électronique (Electron-Beam Evaporation) – qu'on laisse ensuite s'oxyder à l'air libre [Kim\_APL\_2009] est nécessaire pour améliorer l'adhérence de l'alumine. L'utilisation d'une grille auto-alignée constituée d'un nano-fil cœur-coquille [Fig. 3b] de  $\text{Co}_2\text{Si-Al}_2\text{O}_3$  [Liao\_Nature\_2010] a permis de doubler le  $f_T$  de l'époque en le faisant passer à 300 GHz pour un GFET ayant plus au moins la même longueur de grille – d'environ 140 nm – et sur substrat

silicium [Schwierz\_Nat\_Nano\_2010]. Cette technologie qui ne nécessite aucunement le dépôt de la couche d'adhérence d'aluminium montre clairement l'effet néfaste que peut avoir celle-ci sur le transport de charge dans le graphène (causé souvent par un dopage extrinsèque, de la diffusion par les rugosités, charges piégées dans l'oxyde...).



**Fig 4 :** (a) Vision schématique des GFET, en technologie ‘dual-gate’ avec des grilles en « T », réalisé sur des substrats DLC et SiC [Wu\_Nature\_2011] ( $L_G \approx 40$  nm). (b) Vision schématique des GFET réalisés sur de la silice dans [Cheng\_PNAS\_2012].

Cependant, on ne peut malheureusement que constater l'inaptitude de ces grilles à nano-fils à donner au graphène ce que l'on pourrait espérer de ses performances intrinsèques. En effet, la faible dimensionnalité du nano-fil lui confère une faible capacité comparée à celle induite par les capacités parasites des contacts, et si une fréquence de coupure a été déduite après un de-embedding "délicat", comme le décrivent les auteurs, les effets des capacités parasites, mais aussi des régions mal contrôlées par la grille, constituent un sérieux handicap pour arriver à un  $f_{\max}$  – qui, rappelons-le, est le critère essentiel aux HF – compétitif vis-à-vis des autres technologies.

### ***III.1.2. Etat de l'art et les promesses du graphène pour l'électronique HF***

Nous avons vu dans la section précédente que la silice ne se prête pas bien aux applications HF du graphène car elle dégrade les performances intrinsèques de celui-ci. Nous avons vu que l'utilisation d'autres substrats – dans l'optique d'une production à grande échelle de GFET sur une même puce – a conduit à une amélioration considérable de la mobilité des porteurs dans la SLG qui est déposée dessus. Nous avons vu que les améliorations technologiques en termes de réduction de la longueur de grille et de l'épaisseur de son isolant, des résistances et capacités parasites peuvent conduire à des performances en termes de fréquence de transition atteignant les 427 GHz [Cheng\_PNAS\_2012], ce qui est comparable à celles obtenues avec des Transistors à semi-conducteurs classiques dits ‘bulks’ [Krithivasan\_EDL\_2006]. Cette  $f_T$  est la plus haute jamais atteinte avec un GFET et le graphène en question a été exfolié et déposé sur un substrat Si/SiO<sub>2</sub>. En ce qui concerne les autres substrats, les fréquences de transition record à ce jour sont de 300 GHz sur DLC et de 350 GHz sur SiC [Fig. 4a] [Wu\_NanoLett\_2012]. Cependant, ces fréquences sont loin d'être accessibles en pratique, dans le régime d'amplification de puissance, à cause de l'absence de saturation dans les GFET à canal court, de défauts de substrats et de l'existence de capacités et résistances parasites. Pour ces raisons,  $f_{\max}$  n'excède pas les 80 GHz dans le meilleur des cas [Fig. 3a] sur ces substrats [Guo\_NanoLett\_2013] et le rapport  $f_{\max}/f_T$

se situe en général aux alentours de 10% sur la silice, ce qui reste très faible. Nous avons également vu que les performances en termes de mobilité restent tout de même loin de celles du graphène suspendu – qui n’est pas une solution viable – et donc isolé de son environnement. Cela incite donc à chercher des substrats qui pourraient isoler le graphène de son environnement pour accroître les performances des GFET. Nous allons voir dans le paragraphe III.1.3 que le Nitrure de Bore hexagonal (h-BN) est un bon représentant de cette classe de substrats et qu’il suscite beaucoup d’espoirs pour donner un véritable essor au GFET.

Il est tout de même important de souligner que [Cheng\_PNAS\_2012] soulève une question importante. Cet article rapporte la fabrication de transistors auto-alignés, ayant un  $f_T = 212$  GHz pour  $L_G = 46$  nm, par une technique prometteuse pour la production de masse. Elle consiste à définir plusieurs grilles par lithographie électronique puis de les transférer sur le graphène. Le graphène en question est fabriqué par CVD sur cuivre puis transféré sur du Si/SiO<sub>2</sub>. Il n’en demeure pas moins que les GFET fabriqués par le même procédé mais avec du graphène exfolié présentent des propriétés bien supérieures ( $f_T = 427$  GHz) à des longueurs plus grandes ( $L_G = 67$  nm), ce qui montre l’importance que revêt la recherche de méthodes efficaces de croissances du graphène et de techniques de transfert ‘non-invasives’.

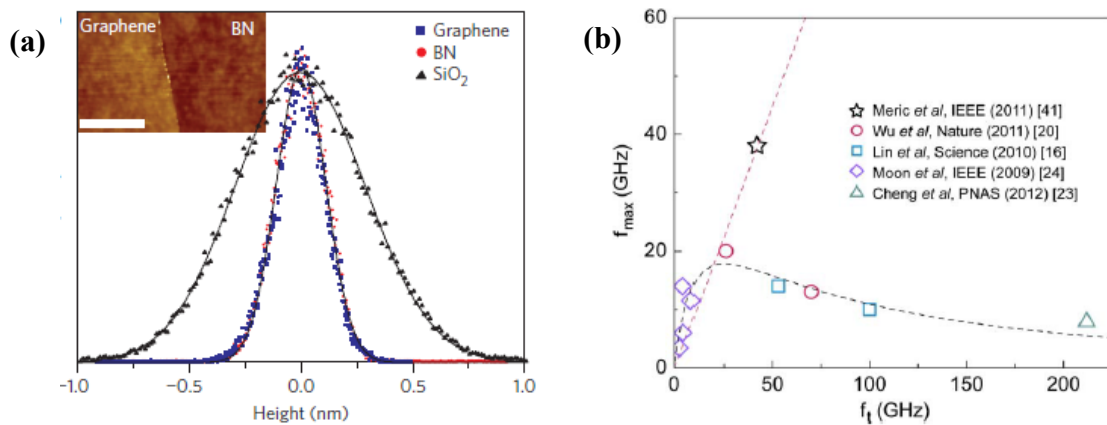
Nous allons maintenant procéder à une présentation du h-BN axée sur son apport en tant que substrat pour le graphène, de l’état de l’art des GFET sur ce substrat – et oxyde de grille également – ainsi que des perspectives qu’il offre pour ce type de composants.

### **III.1.3. La technologie GFET sur h-BN**

Le h-BN est un solide possédant une structure en nid d’abeilles [Taniguchi\_JCrysGrow\_2007], similaire à celle du graphène avec un faible désaccord de maille de 1,7% [Giovannetti\_PRB\_2007]. Les sous-réseaux A et B, occupés par des atomes de nature différente, sont inéquivalents – en termes d’énergie de site (on-site energy) – lui conférant ainsi une large bande interdite de 5,79 eV [Watanabe\_Nature\_Mat\_2004] qui fait de lui un isolant. La permittivité relative de cet isolant se situe autour de 3,5 et le champ maximal qu’il peut supporter – champ de claquage – est de 0,7 Vnm<sup>-1</sup> [Ohba\_PRB\_2001]. Ces deux valeurs sont du même ordre que celles que fournit la silice, mais la plus grande énergie des phonons optiques – autour de 120 meV – et la similarité de la maille cristalline qu’offre le h-BN pour le GFET en font un bien meilleur substrat et isolant de grille.

Ceci a été confirmé dès le premier stade de l’utilisation du diélectrique en question. Une mobilité record de 140 000 cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> à basse température et au voisinage du point de Dirac a été mesurée dans un GFET avec du Graphène sur 14 nm de h-BN, tous les deux exfolié mécaniquement [Dean\_Nature\_Nano\_2010]. On constatait également dans ce même travail que le pic de résistivité était bien plus étroit et la rugosité 3 fois moindre que ce que l’on observait pour du graphène sur SiO<sub>2</sub> [Fig. 5a], ce qui fournissait des explications rationnelles à ces performances en termes de moindre dopage résiduel et moindres ondulations. Des images

récentes réalisées grâce à la microscopie à effet tunnel [Xue\_Nature\_Mat\_2011] [Decker\_NanoLett\_2011] ont permis de mettre en évidence une rugosité quasi-nulle – pouvant descendre à 0.02 angström par endroit – comparée à celle observée sur de la silice par exemple (1,5 – 2 angström), ainsi qu’une meilleure stabilité du graphène sur ce substrat et une meilleure homogénéité de charge. Ces images montrent également des moirés qui indiquent une petite rotation du Graphène par rapport au réseau du h-BN, Mais cette rotation est malheureusement suffisante pour empêcher l’ouverture d’une bande interdite dans le graphène comme prédit dans le cas d’un empilement parfait, dit Bernal [Giovannetti\_PRB\_2007] [Kan\_JPhysChemC\_2012].



**Fig. 5 :** (a) Hauteur de la feuille de graphène par rapport aux substrats h-BN et SiO<sub>2</sub> sur lequel elle est déposée [Dean\_Nature\_Nano\_2010] (b) Evolution du  $f_{max}$  en fonction de  $f_T$  pour les différentes technologies de GFET réalisé sur les substrats autres que le h-BN, Etoile noire :  $f_T$  et  $f_{max}$  d’un GFET sur h-BN de 600 nm de long.

On a pu atteindre récemment des mobilités de l’ordre de  $125\,000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  à température ambiante pour une densité de porteurs de  $2 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$  sur du h-BN commercial [Zomer\_APL\_2011]. Un GFET avec des mobilités similaires et où le graphène est ‘encapsulé’ dans du h-BN a été rapporté dans [Mayorov\_NanoLett\_2011]. La mesure d’une « Bend resistance » négative dans ce même dispositif a permis de montrer que le transport y est hautement balistique, que le libre parcours moyen est de l’ordre du micron et qu’il pourrait atteindre  $1,5\ \mu\text{m}$  à température ambiante si on arrivait à fabriquer des GFET suffisamment larges (une largeur de 3 à 5 microns serait suffisante). Ceci montre que le substrat h-BN dégrade très peu les performances du graphène intrinsèque, et qu’il parvient à bien l’isoler de son environnement.

Les performances fréquentielles des GFET sur h-BN sont excellentes quand elles sont comparées aux GFET réalisés sur d’autres substrats pour les mêmes longueurs de grille. On a pu mesurer un  $f_T$  de 44 GHz et un  $f_{max}$  de 34 GHz pour un transistor de 600 nm de longueur de grille [Meric\_IEDM\_2011]. Le rapport  $f_{max}/f_T$  est de 86%, ce qui témoigne d’une bonne suppression des capacités et des résistances parasites [Meric\_IEEE\_Proc\_2013]. On peut espérer obtenir des  $f_{max}$  bien plus grands si on réduit les longueurs de grille, à condition que les effets de canal court ne deviennent pas très importants.

Toutes ces raisons nous ont amené à opter pour le h-BN comme substrat pour tous les dispositifs à base de graphène que nous avons simulés durant cette thèse, pour placer le graphène dans un environnement diélectrique permettant un assez bon contrôle de la charge sans altérer les bonnes performances intrinsèques du graphène.

## III.2. Modèle et simulation d'un GFET à canal court sur substrat de nitrure de bore hexagonal

Nous avons vu dans la section précédente que l'encapsulation du graphène dans du h-BN permet aux porteurs de charges d'un GFET – ayant pour épaisseur d'isolant une dizaine de nanomètres – d'être balistiques sur des longueurs de l'ordre du micron même à température ambiante [Mayorov\_NanoLett\_2011]. Cette technologie permet donc d'isoler les porteurs de leur environnement, leur permettant ainsi d'atteindre des mobilités très proches [Zomer\_APL\_2011] de celle qu'offre le graphène suspendu à 150 nm du substrat utilisé comme grille arrière [Bolotin\_SolidStateComm\_2008]. Nous avons également insisté sur le fait que le h-BN offre, en plus de sa permittivité relative plus grande que celle du vide, la possibilité de rapprocher la grille beaucoup plus de la feuille de graphène que dans le cas du graphène suspendu, permettant ainsi un meilleur contrôle de la densité de porteurs. Le passage en revue des records en termes de fréquence de coupure intrinsèques ( $f_T$ ) – à des longueurs de grilles comparables – pour des GFET réalisés sur d'autres substrats permet de conclure que le « h-BN GFET » leur est bien supérieur. Cependant, Les fréquences maximales d'oscillation, quant à elles, sont encore loin de ce qui se fait dans d'autres technologies de fabrication de MOSFET.

Nous allons voir dans cette section que ce « défaut » de fonctionnement est dû à la similarité comportementale existante entre les excitations de basses énergies dans le graphène et les fermions de Dirac sans masse [Castro\_Neto\_2009] [Das\_Sarma\_RevModPhys\_2011]. En effet, l'existence du tunnel Chiral de Klein dans le graphène permet aux porteurs de charge ayant une incidence normale – ou presque – de passer sans rétrodiffusion à travers une barrière de potentiel. Nous allons montrer que ce phénomène entraîne une forte conductance de sortie  $g_d$  – et donc un faible  $f_{\max}$  – et permet d'expliquer en grande partie le fort DIBL qui existe dans le graphène et l'absence de saturation dans les GFET.

### III.2.1. Description de la géométrie du transistor

La figure 6 ci-dessous montre un schéma typique des GFET que l'on va étudier dans cette section. On suppose que le graphène est déposé sur un substrat h-BN, et que la partie centrale du dispositif est recouverte d'une couche de h-BN de 2 nm d'épaisseur et de  $L_G$  (nm) de long (direction  $x$ ), qui sera ensuite contactée électriquement pour former la grille du transistor. On suppose que le graphène est contacté à 25 nm (sauf quand on le précisera) de part et d'autre des extrémités du canal pour former les source et drain du GFET. Les deux régions d'accès, qui séparent alors les contacts du canal, sont supposées dopées N à  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  par une grille arrière (qu'on ne voit pas sur ce schéma).

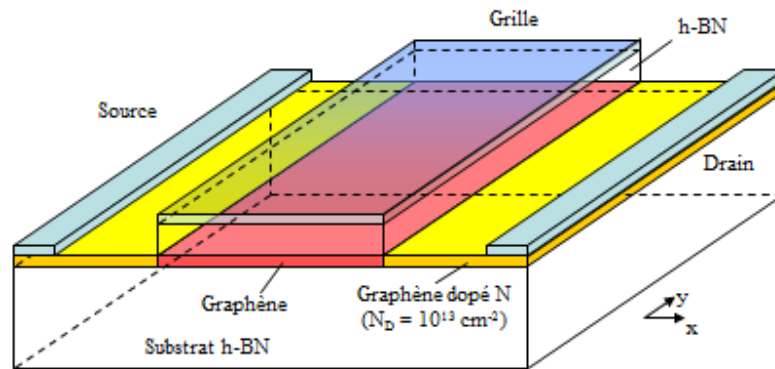


Fig. 6 : Schéma du GFET considéré dans cette étude.

### III.2.2. Modèle physique du transistor

Comme nous l'avons mentionné dans la section I-3, L'expérience montre que le transport est balistique pour  $L_G \approx 1\mu\text{m}$  dans les GFET où le graphène est encapsulé dans du h-BN [Mayorov\_NanoLett\_2011], et que les porteurs n'interagissent presque pas avec ce dernier [Decker\_NanoLett\_2011] [Xue\_Nature\_Mat\_2011]. Les grandes lignes du modèle que nous avons utilisé pour nos simulations et qui intègre ces données expérimentales sont :

- Pour les longueurs de grilles – inférieures à la centaine de nanomètres – que nous considérons dans ce travail, l'utilisation du h-BN comme substrat et isolant de grille est prise en compte lorsqu'on suppose que le transport de charges est balistique sur la feuille de graphène et lorsqu'on prend comme permittivité du milieu entourant celle-ci  $\epsilon_r = 3.5$  qui est la moyenne des permittivités relatives du h-BN qu'on trouve dans la littérature (entre 3 et 4)
- Le Hamiltonien considéré est donc un Hamiltonien de type liaisons fortes (1.5) où les électrons ont la possibilité de « sauter » d'un atome de carbone à un autre mais jamais vers un atome de B ou N du substrat. En effet, le h-BN est un isolant et nous avons négligé toute interaction des porteurs de charges dans le graphène avec le substrat et l'isolant de grille comme le suggère l'expérience.
- Les calculs sont effectués dans l'espace réciproque pour tenir compte de la périodicité de notre structure dans la direction transverse. Nous utiliserons donc la représentation du Hamiltonien dans l'espace des modes de la formule (2.59).
- Dans le cadre de l'Approximation du Transport Balistique (ATB) et la représentation dans l'espace réciproque, la charge en chaque point du dispositif et le courant de drain sont calculés respectivement par les formules (2.62) et (2.63) pour la fonction de transmission (2.48) présente dans la formule de Landauer (2.63) est calculée par la même formule, mais pour chaque vecteur d'onde transverse  $K_y$ .
- L'interaction coulombienne des porteurs est modélisée par un champ moyen. En d'autres termes, ceci veut dire que qu'on fait le choix de négliger le détail du couplage entre chaque paire d'électrons et de supposer que chaque porteur subit à une position

donnée l'effet du potentiel créé par l'ensemble des porteurs en cette même position. La charge calculée par la formule (2.62) et constitue le terme de source dans l'équation de Poisson et le potentiel qui en ressort est le champ moyen en question.

### ***III.2.3. Description du Code utilisé dans nos simulations : GRAPHENATOR (GRAPHEne NANodevices simulaTOR)***

GRAPHENATOR : GRAPHEne NANodevices simulaTOR est le nom que nous avons choisi pour le simulateur s'appuyant sur le modèle physique décrit plus haut. J'ai tiré profit de l'existence d'un code réalisé dans l'équipe par un ancien doctorant de l'équipe, F. Mazzamuto, pour réaliser un simulateur de transistors ayant pour canal une nanostructure en graphène. Le code était conçu pour la simulation du transport de phonons dans des nano-rubans, il était non auto-cohérent et la partie « transport électronique » était non récursive. Cependant, le code était complet en ce qui concerne la génération de la structure atomistique du canal, ce qui a considérablement facilité ma tâche.

J'ai donc d'abord intégré dans ce code le calcul récursif des blocs diagonaux de la fonction de Green [Anantram\_IEEE\_Proc\_2008] puis généré des Hamiltoniens 2D en m'appuyant sur les Hamiltonien 1D précédemment mis en place par mon prédécesseur. Les deux sont intimement liés comme le montre la formule (2.59) : la résolution numérique de (2.62) et (2.63) impose la discrétisation des  $K_y$  de la zone de Brillouin en  $M$  valeurs et le découplage mis en évidence dans (2.59) montre que ce calcul équivaut à simuler  $M$  rubans où dans chaque ruban tous les porteurs ont un même vecteurs d'onde  $+K_y$  et son opposé  $-K_y$  (2.61). Les grandeurs physiques sont calculées en effectuant alors la somme – pondérée par la densité des  $K_y$  dans l'espace réciproque – des contributions de chaque ruban (c'est-à-dire des porteurs ayant  $\pm K_y$  pour vecteur d'onde transverse).

Nous avons ensuite mis en place un solveur 3D de l'équation de Poisson, mais qui ne la résout que dans le plan du graphène en tenant compte de l'électrostatique de l'environnement (Permittivité du h-BN, quasi-neutralité aux zones d'accès et conditions aux limites de Dirichlet sur la grille et de Neumann sur le reste des bords). Nous avons ensuite développé une résolution auto-cohérente des deux équations couplées par une méthode appelée « Globally convergent Method » qu'on trouve dans [Numerical\_recipies]. C'est une variante de la méthode Newton-Raphson et nous avons accordé une importance particulière au choix du Jacobien (A.3), comme nous allons l'expliquer dans l'annexe A. La figure 7 est un schéma simplifié de l'architecture de ce simulateur auto-cohérent que nous avons développé dans l'équipe.

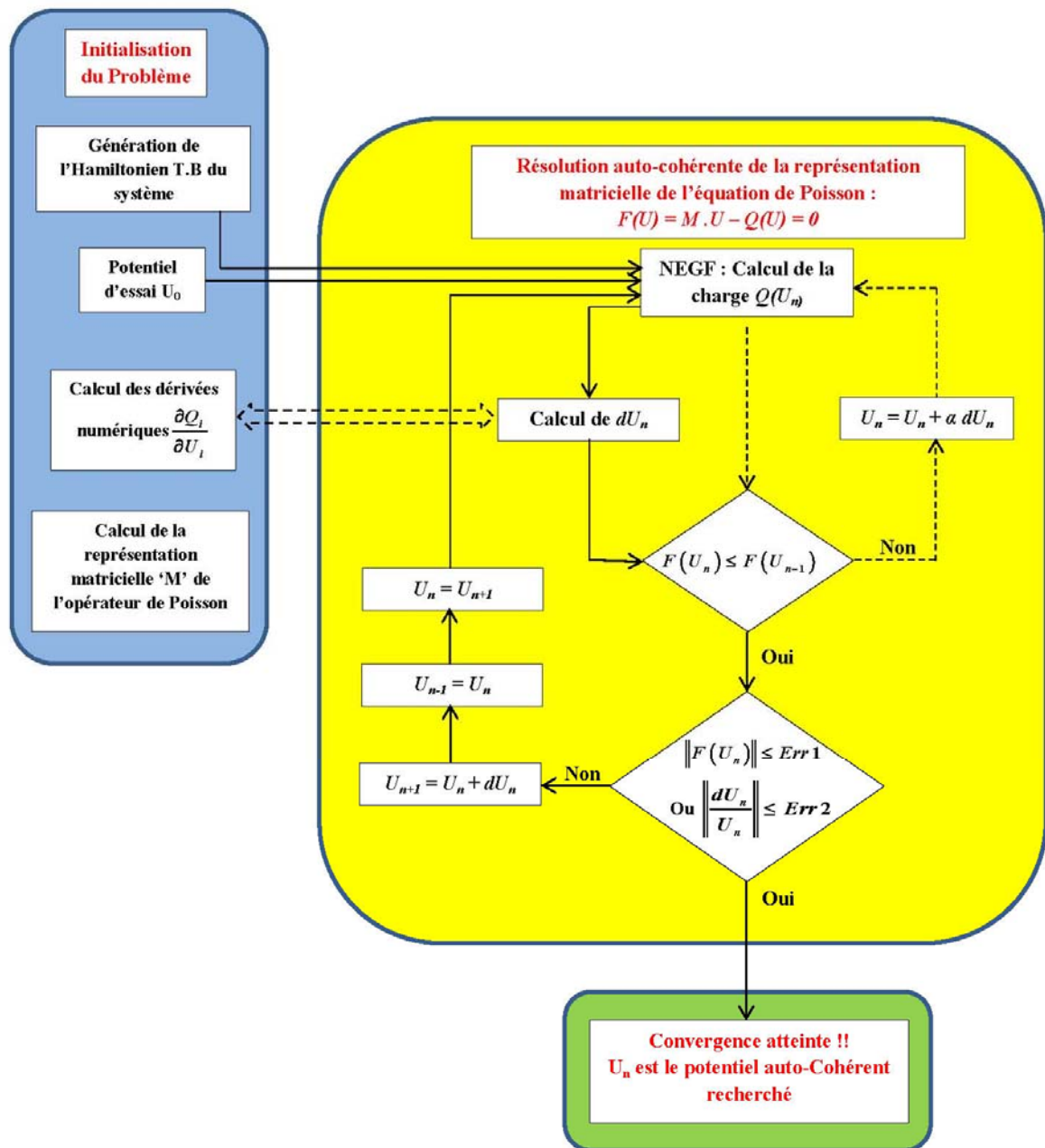


Fig. 7 : Schéma résumant l'architecture de notre simulateur auto-cohérent : GRAPHENATOR (GRAPHENE NANodevices simulaTOR). Pour les notations, se reporter à l'annexe A.

### III.2.4. Régimes de transport et pseudo gap dans un GFET

Dans le but de bien identifier les différents régimes de conduction dans le graphène, nous considérons d'abord un GFET sur substrat h-BN avec une longueur de grille de 50 nm, dans lequel nous avons supposé que le graphène présentait une BI de 100 meV [Kharch\_NanoLett\_2011]. L'existence de cette BI exacerbe la séparation entre les différents régimes, ce qui facilite les explications.



La [Fig. 8a] montre la LDOS dans ce dispositif, sur laquelle nous avons superposé le profil de potentiel auto-cohérent (trait noir continu) du point de neutralité (NP) et les positions des niveaux de fermi des zones d'accès. Les zones en bleu présentes sur cette figure représentent des zones de très faible densité d'états. Ces zones ayant une extension en énergie de 100 meV, correspondent bien à la BI dont on a supposé l'existence sur le feuillet de graphène.

Dans la [Fig. 8b] nous montrons le spectre de courant correspondant. On peut constater qu'il n'y pas de courant qui circule dans les régions où la BI est appréciable de part et d'autre – en énergie – du point de neutralité local, c'est-à-dire dans les zones d'accès et au sommet de la barrière. La BI dans les différentes zones permet de séparer clairement trois contributions distinctes au courant :

- Thermoïonique (TC) : Ce courant est dû aux porteurs ayant une énergie supérieure à la hauteur de la barrière
- Tunnel Chiral (CT): ce courant est le résultat du passage des porteurs à travers la barrière – située énergétiquement entre le NP côté source et le NP au sommet de la barrière – par effet tunnel chiral, i.e. à travers les états de trous présents sous la barrière et qui se manifestent sur la [Fig. 8a] par les niveaux résonnants en rouge [Nguyen-VH\_APL\_2009].
- Tunnel bande-à-bande (BTBT): Il est le résultat du passage par effet tunnel bande à bande des trous émis par la source – particules d'énergie inférieure à celle représentée par le NP côté source – vers les états électroniques côté drain, i.e. particules d'énergie supérieure à celle représentée par le NP côté Drain.

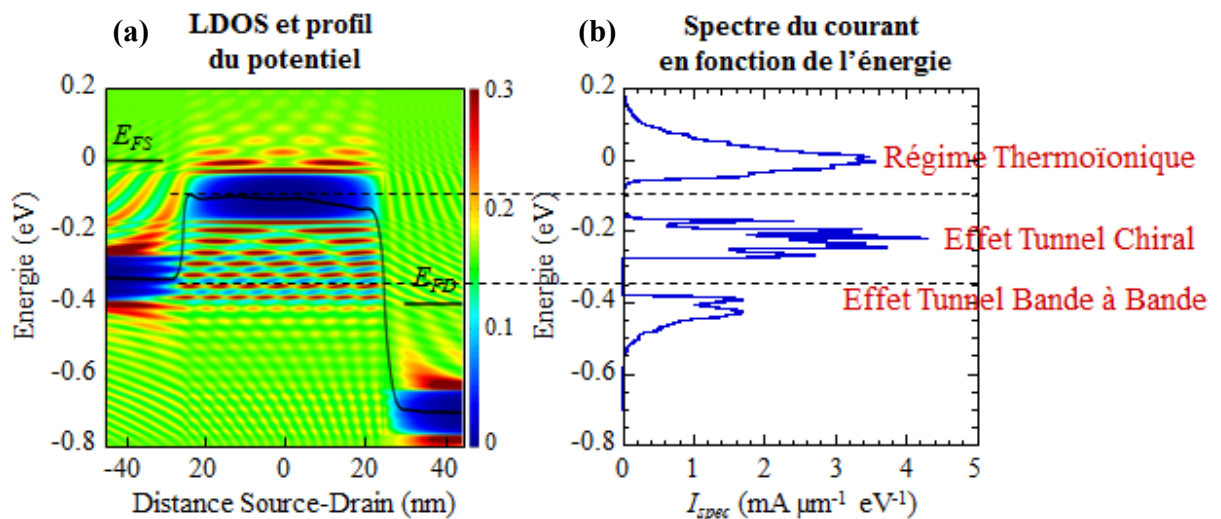


Fig. 8: (a) LDOS et profil de potentiel  $q_y = K_y^{DP} + 6.4 \cdot 10^7 m^{-1}$  (b) spectre de courant correspondant. Caractéristiques du GFET considéré :  $L_G = 50$  nm ;  $V_G = -0,5$  V ;  $V_{DS} = 0,4$  V et le dopage des accès est de type N à  $10^{13} cm^{-2}$ . Il faut noter que le graphène en question présente ici une bande interdite de 100 meV.

Il faut noter que les effets tunnel, CT et BTBT sont particulièrement efficaces dans le graphène à cause du bon accord entre les fonctions d'ondes Dans la BC et la BV [Castro\_Neto\_2009]. La présence des états résonants sous la barrière en est une manifestation.

Il est important de noter que même dans le graphène intrinsèque (PG, pour Pristine Graphène) – donc à largeur de BI nulle, on remarque – comme le montre [Fig. 9a] – l'apparition d'un pseudo gap dès qu'on s'éloigne un peu de la valeur du  $K_y$  du point de Dirac selon la formule [Castro\_Neto\_2009] :

$$E_G(K_y) = 2t \left| 1 - 2 \cos \left( \frac{\sqrt{3} a_c K_y}{2} \right) \right|. \quad (3.4)$$

On peut remarquer sur [Fig. 9b] que cette bande interdite est opaque dans les zones d'accès, mais qu'à la différence d'une vraie BI, elle ne fait qu'atténuer le transport à travers le sommet de la barrière, sans le supprimer complètement (transmission non nulle dans la gamme d'énergie en question)

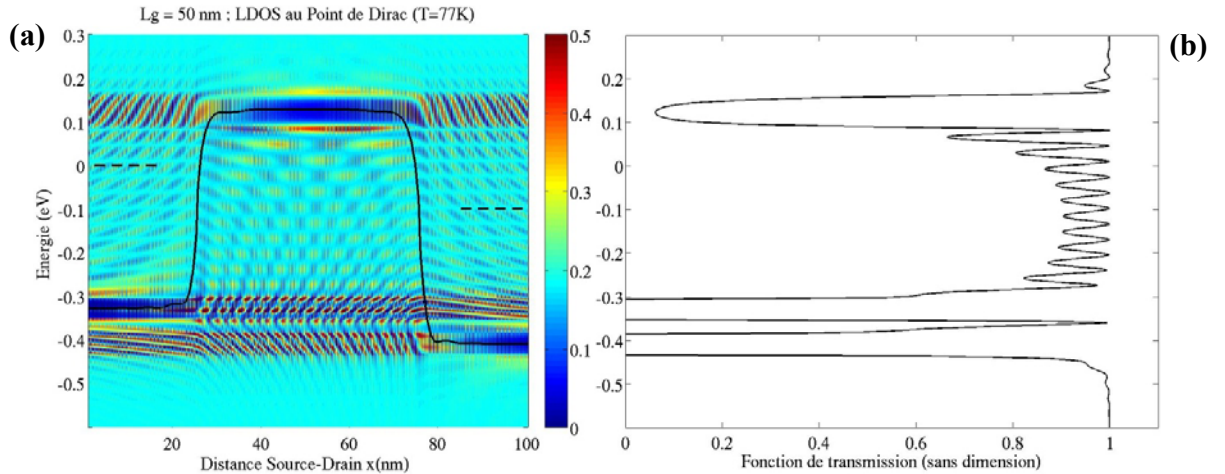


Fig. 9: (a) LDOS à  $q_y = K_y^{DP} - 4.25 \cdot 10^7 m^{-1}$  et profil de potentiel à  $V_G = -0,5$  V et  $V_{DS} = 0,1$  V (b) Fonction de transmission correspondante. Caractéristiques du GFET considéré :  $L_G = 50$  nm et le dopage des accès est de type N à  $10^{13} cm^{-2}$ . Ici le graphène a une largeur de bande interdite nulle.

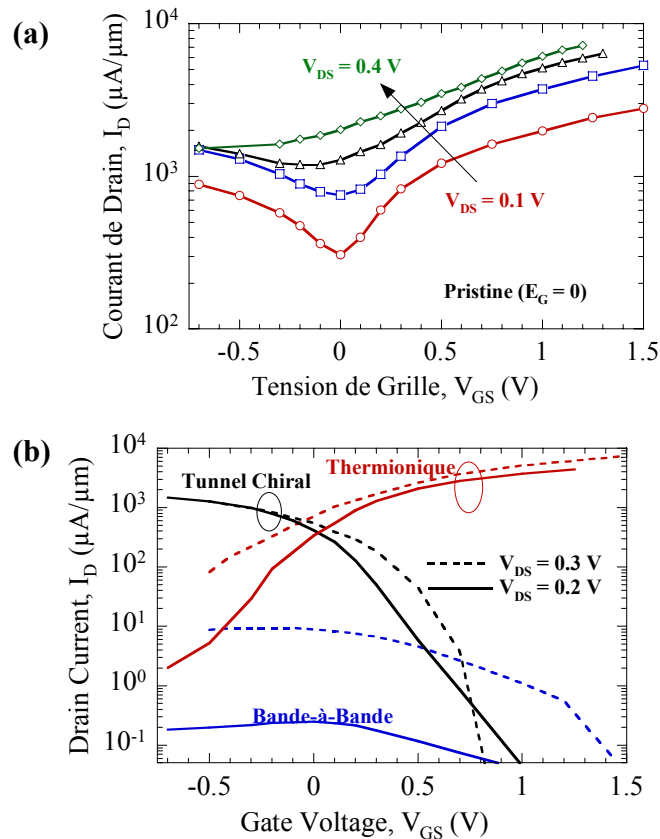
### III.3. Résultats

#### III.3.1. Origines du Point de Dirac, de son évolution en fonction de $V_{DS}$ et de l'asymétrie entre la branche P et la branche N

La [fig. 10a] montre un exemple typique d'une caractéristique  $I_D-V_{GS}$  d'un GFET. Il s'agit en l'occurrence d'une simulation auto-cohérente à température ambiante d'un GFET de longueur de grille de 25 nm avec des zones d'accès de 15 nm dopées à  $10^{13} cm^{-2}$ .

On remarque pour chaque tension  $V_{DS}$  l'existence d'un point appelé point de Dirac (DP) où le courant présente un minimum. On remarque que ce point se décale vers les  $V_{GS}$  négatifs quand  $V_{DS}$  augmente. On remarque également que les GFET présentent un caractère ambipolaire. La branche se trouvant à droite du DP est appelée branche N et celle à gauche du DP est appelée branche P.

On remarque que le courant dans la branche P est plus faible que celui dans la branche N et que le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  est inférieur à 10. On définira tout au long de ce travail le  $I_{On}$  par le courant à  $V_{GS} = 1,5$  V, qui est la tension de grille pouvant créer un champ comparable à celui du claquage du h-BN (qui est pour rappel de  $E_B = 0,7$  V nm<sup>-1</sup>) pour l'épaisseur d'isolant de grille de 2 nm considérée tout au long de ce travail. Nous restons loin de cette limite comme nous allons le voir car une partie de la chute de tension est absorbée par le graphène.



**Fig. 10:** (a) d'une caractéristique  $I$ - $V_{GS}$  d'un GFET de  $L_G = 30$  nm et  $L_S = L_D = 15$  nm pour  $V_{DS}$  allant de 0,1 à 0,4 V (b) Contribution des 3 composantes du courant en fonction de la tension de grille appliquée pour  $V_{DS} = 0,2$  et 0,3 V.

La [fig. 10b] montre la contribution des trois régimes de transport aux caractéristiques  $I_D$ - $V_{GS}$  pour  $V_{DS} = 0,2$  et 0,3 V du même transistor décrit plus haut. On en tire les conclusions suivantes :

- a) L'augmentation de  $V_{DS}$  entraîne une augmentation de toutes les contributions

- b) L'augmentation du BTBT (Cf. 3) en fonction de  $V_{DS}$  est importante, mais reste négligeable devant celle du CT et TC pour les tensions de drains considérées. Il vient alors que le point de Dirac résulte d'un 'équilibre' entre le CT et le TC
- c) L'augmentation de la composante TC est la plus importante quand on augmente  $V_{DS}$ .

Quand on augmente  $V_{DS}$ , on augmente la plage d'énergie où a lieu le BTBT tout en diminuant l'injection côté drain. Ceci a pour effet immédiat d'augmenter le BTBT.

La différence des 'taux' d'augmentation du CT et TC s'explique par le phénomène de DIBL (Drain Induced Barrier Lowering) que nous allons développer dans la section III.4. Une augmentation de  $\Delta V_{DS}$  de la tension source-drain entraîne un abaissement du haut de la barrière

d'à peu près  $\frac{\Delta V_{DS}}{2}$  [Alarcon\_IIEEE\_TED\_2013]. Ceci apporte ainsi un décalage d'environ  $-\frac{\Delta V_{DS}}{2}$  à la courbe du TC – c'est-à-dire vers les  $V_{GS}$  négatifs – donnant ainsi lieu à une partie de

l'augmentation du courant à un  $V_{GS}$  donné, l'autre partie s'expliquant par la diminution des facteurs d'occupation  $f_R$  – initialement faibles dans la gamme du thermoïonique. Si l'augmentation du CT est due à la diminution de  $f_R$ , cette augmentation est limitée par l'abaissement de la barrière qui réduit la gamme en énergie où se produit le CT. Cette limitation par le DIBL du CT est moins importante aux  $V_{GS}$  très négatifs, i.e. quand le sommet de la barrière est loin des niveaux de Fermi, et devient dominante quand on se rapproche du DP par  $V_{GS}$  croissants.

Si le courant thermoïonique existe dans les MOSFET à semi-conducteurs conventionnels et est responsable de leur régime passant, l'existence du CT dans les GFET et non dans les MOSFET conventionnels explique le faible  $I_{On}/I_{Off}$  dont souffrent les GFET.

Quant à l'asymétrie entre les branches P et N du GFET, elle s'explique comme suit : quand on se place à un  $V_{DS}$  donné, qu'on soit d'un côté ou de l'autre du point de Dirac, la Fenêtre de Fermi (FF) reste la même [fig. 11]. Ce qui change, c'est que dans la branche P, la barrière est bien plus haute que dans la branche N, et la proportion des électrons qui doivent traverser la barrière par effet tunnel chirale est plus grande. Si la barrière est complètement transparente - transmission uniformément égale à 1 sous la barrière - pour les électrons ayant un vecteur d'onde normal à la barrière, elle l'est beaucoup moins au fur et à mesure qu'on s'écarte de l'incidence normale. La transmission ne se fait alors que via des niveaux résonants qui deviennent de plus en plus étroits et dont le nombre diminue au fur et à mesure que la norme de la composante transverse du vecteur d'onde augmente (à cause de l'élargissement du pseudo-gap au sommet de la barrière et aux contacts). Dans la branche P, il y a donc une proportion importante des électrons qui, n'ayant pas une incidence normale, sont réfléchis, ce qui explique un courant global plus faible que dans la branche N.

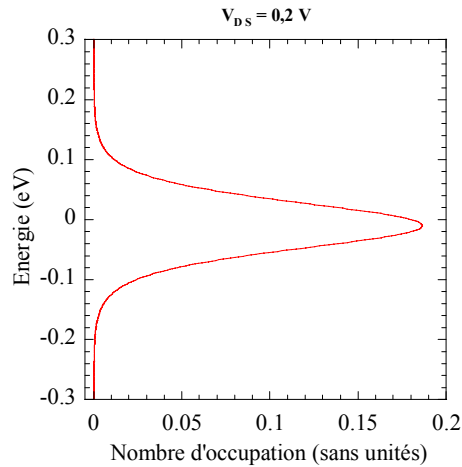


Fig. 11: Différence entre les fonctions d'occupation de la source  $f_S$  et du drain  $f_D$ , que nous appelons dans le texte Fenêtre de Fermi (FF), pour  $V_{DS} = 0,2$  V.

### III.3.2. Influence de la longueur de grille et de la température sur les caractéristiques $I-V_{GS}$

#### III.3.2.1. Caractéristiques $I-V_{GS}$ , Point de Dirac

La [fig. 12] montre les caractéristiques  $I_D-V_{GS}$  de transistors ayant différentes longueurs de grilles – 10, 30 et 50 nm – à  $V_{DS} = 0.1$  et  $0.2$  V. Nous constatons pour tous les dispositifs la dissymétrie signalée dans (4.2) entre les branches N et P d'un transistor et qui est due à la quantification des niveaux dans la barrière.

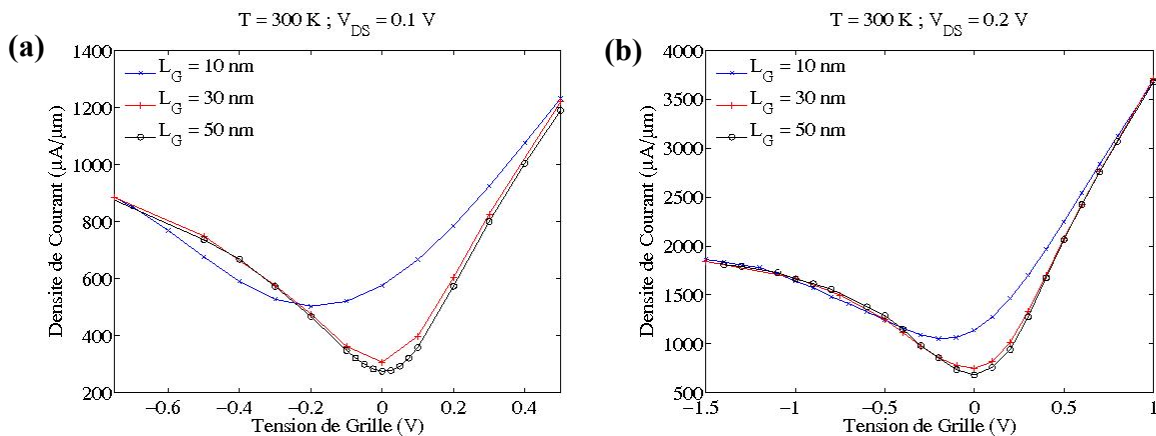
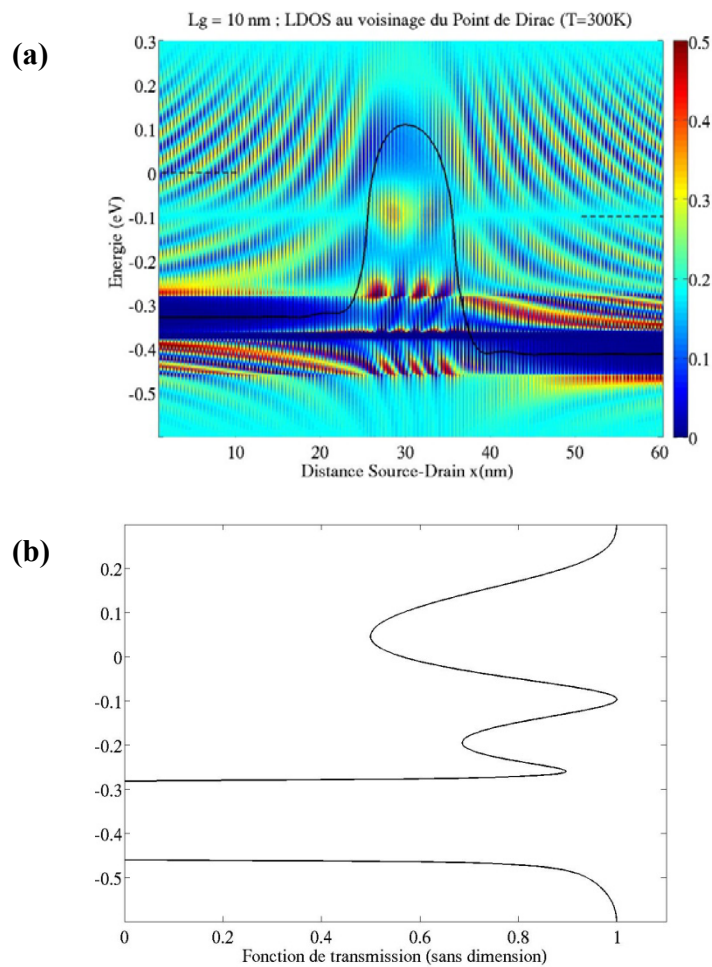
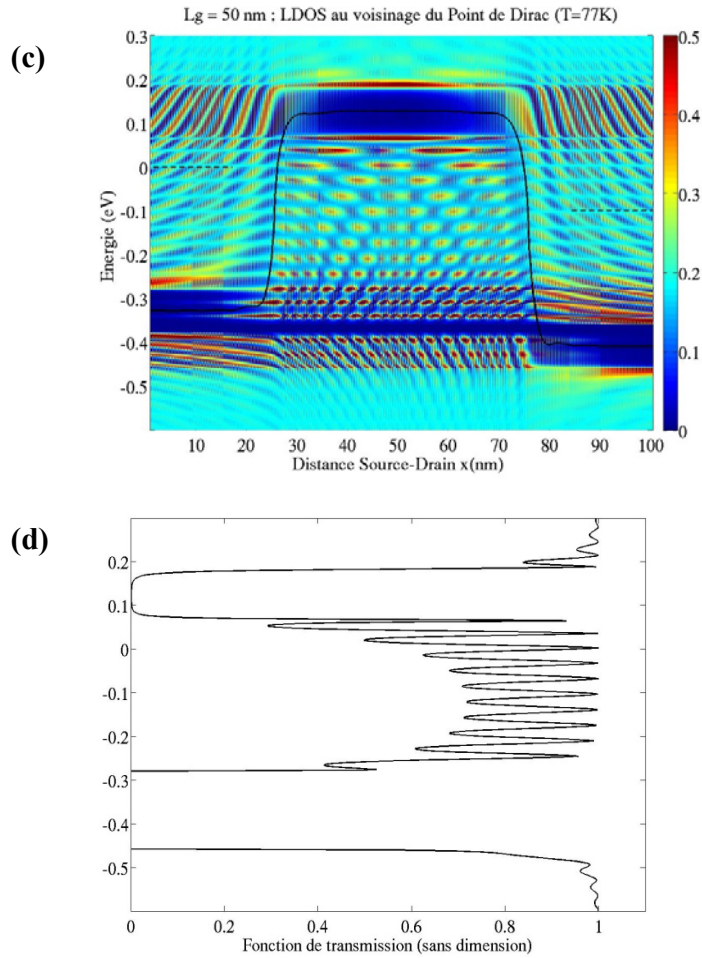


Fig. 12: Caractéristiques  $I-V_{GS}$  de GFET ayant des longueurs de grilles 10, 30 et 50 nm à température ambiante (a)  $V_{DS} = 0,1$  V (b)  $V_{DS} = 0,2$  V

Nous constatons dans ces courbes que les trois composants se comportent à peu près de manière similaire aux  $V_{GS}$  très positifs et très négatifs. On assiste cependant à un comportement différent dans le régime intermédiaire, caractérisé par la présence du point de Dirac. En effet, on remarque qu'au fur et à mesure que la longueur de grille diminue, le courant  $I_{Off}$  devient de plus en plus important dans le GFET et que le DP devient de plus en plus aplati et se décale vers les  $V_{GS}$  négatifs.

La comparaison des profils de potentiels et des LDOS des dispositifs de 10 et 50 nm [Fig. 13] permet d'expliquer ces comportements au voisinage du point de Dirac. La plus grande valeur du  $I_{off}$  pour  $L_G = 10 \text{ nm}$  s'explique, comme on peut le voir sur les transmissions, par la plus grande transparence de la barrière. Ceci a pour effet, comme on l'a expliqué précédemment, d'augmenter le CT, c'est-à-dire une des deux composantes du courant qui décident de la position du DP. Quant au déplacement du DP, c'est un effet de canal court car il est nécessaire d'appliquer une tension de grille plus négative pour pousser les électrons hors du canal. Cet effet devient de plus en plus important au fur et à mesure que l'on augmente l'épaisseur d'oxyde et a donc été observé dans ces conditions [Han\_EDL\_2011].



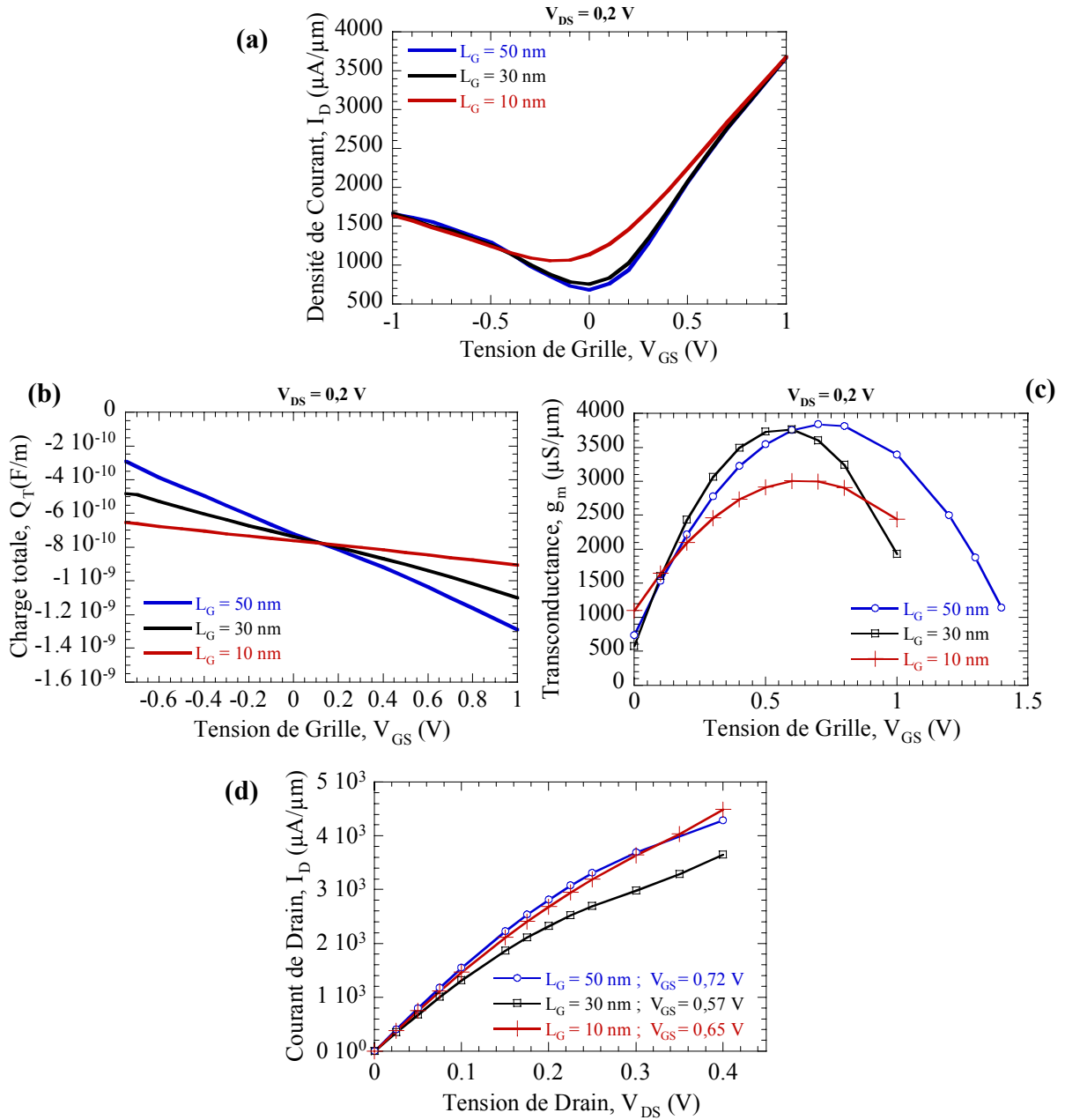


**Fig. 13:** LDOS à  $q_y = K_y^{DP} + 8,51 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  et profil de potentiel à  $V_{GS} = -0,5 \text{ V}$  et  $V_{DS} = 0,1 \text{ V}$  et  $T = 77 \text{ K}$  pour (a)  $L_G = 10 \text{ nm}$  et (c)  $L_G = 50 \text{ nm}$  et fonction de transmission correspondantes (b) et (d) respectivement

### III.3.2.2. Performances fréquentielles

Nous allons étudier dans cette section le comportement fréquentiel des GFET – de taille nanométrique – réalisés sur un substrat h-BN et supposés balistiques. Nous étudierons l'évolution de ces performances en fonction de la longueur de grille et identifierons les facteurs limitant leur fonctionnement aux hautes fréquences.

La figure [fig. 14a] montre les caractéristique  $I-V_{GS}$  à  $V_{DS} = 0,2 \text{ V}$  pour des GFET de 10, 30 et 50 nm de longueurs de grille et la figure [fig. 14b] montre l'évolution de la charge correspondante. On remarque sur cette dernière que le contrôle de la charge dans le GFET s'améliore au fur et à mesure que l'on augmente la longueur de la grille. Les valeurs des différentes composantes de la capacité de la grille, et qui appuient ce dernier constat, sont présentées dans le [tab. 1]. Ceci s'explique par une meilleure commande de la hauteur de barrière par la grille au fur et à mesure qu'on augmente la longueur de cette dernière.

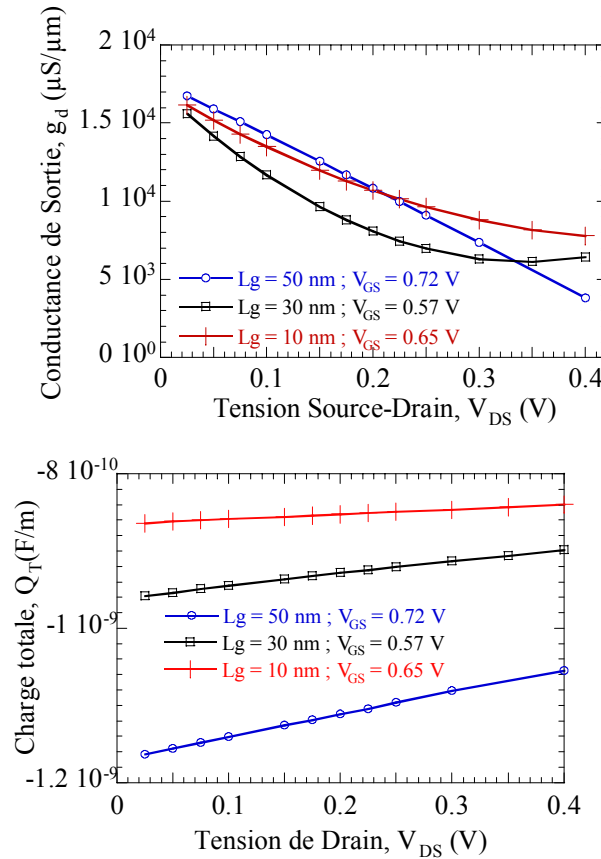


**Fig. 14:** (a) Caractéristiques  $I_D$ - $V_{GS}$  de GFET ayant des longueurs de grilles 10, 30 et 50 nm à  $V_{DS} = 0,2$  (b) Evolution correspondante de la charge totale dans les dispositifs en question (c) Evolution de la transconductance  $g_m$  des 3 dispositifs à  $V_{DS} = 0,2$  (d) Courbes  $I_D$ - $V_{DS}$  de chaque dispositif à la tension de grille où  $g_m$  atteint son maximum.

Nous avons déduit à partir de la caractéristique  $I_D$ - $V_{GS}$  [fig. 14.a] la transconductance  $g_m$  (3.1) dans les 3 dispositifs étudiés et les résultats sont présentés sur la figure [fig. 14c]. Comme on pouvait s'y attendre, on voit que le maximum de la transconductance  $g_m$  tend à diminuer aux courtes longueurs de grille [Tableau 2]. En utilisant la formule (3.1), nous avons calculé la fréquence de coupure intrinsèque  $f_T$  des trois dispositifs aux tensions de grille où  $g_m$  présente



son maximum, et les résultats sont donnés dans le [Tableau 2]. On voit que les trois GFET ont des fréquences de coupures intrinsèques supérieures à 1THz pour des longueurs de grille de moins de 50 nm, et que  $f_T$  augmente au fur et à mesure que l'on diminue la longueur de la grille. Les courbes  $I_D-V_{DS}$ , réalisées pour chaque dispositif à la tension de grille où  $g_m$  présente son maximum, sont présentées sur la figure [fig. 14.d]. Nous remarquons que la saturation est très mauvaise dans les trois dispositifs, ce qui se traduit par des conductances de sortie  $g_D$  de l'ordre de  $10^4 \mu\text{S}/\mu\text{m}$ , comme le montre la [fig 15a].



**Fig. 15: (a) Conductance de sortie  $g_d$  des GFET pour des longueurs de grilles 10, 30 et 50 nm. Pour chaque dispositif,  $g_d$  est calculée au  $V_{GS}$  où  $g_m$  atteint son maximum à  $V_{DS} = 0,2$  (b) Evolution de la charge totale dans les 3 dispositifs en fonction de la tension de drain appliquée, pour la tension de grille ou la transconductance de chaque dispositif atteint son maximum.**

Pour mesurer l'impact de cette très haute conductance de sortie sur les performances fréquentielles, nous avons calculé la fréquence maximale d'oscillation par la formule (3.2) et les résultats sont présentés dans le [tab. 2]. L'approche que nous utilisons dans notre simulation ne nous permet pas de calculer la résistance d'accès à la grille  $R_G$  ainsi que la résistance de contact  $R_S$ . Nous avons donc considéré des valeurs expérimentales disponibles dans la littérature et avons pris une résistance de grille de  $20 \Omega$  [Xia\_NatNano\_2011] – réalisable pour des transistors de 20 microns de large – et une résistance de contact de  $100 \Omega \mu\text{m}$  [Farmer\_APL\_2012]. Quant à la capacité Grille-Drain  $C_{GD}$ , nous l'avons déduite de la figure [fig 15b]. On voit donc que le

rapport  $\frac{f_{\max}}{f_T}$  ne dépasse pas les 25% pour tous les GFET considérés, ce qui est signe d'une dégradation évidente des performances fréquentielles en régime d'amplification de puissance. L'analyse des contributions au dénominateur de (3.2) montre que le terme  $g_D (R_S + R_G)$  est un ordre de grandeur supérieur à  $2\pi f_T R_G C_{GD}$ . On peut donc affirmer que la dégradation des performances fréquentielles des GFET est directement liée à la conductance de sortie très élevée.

Dans la section suivante, nous allons montrer que l'absence de gap combinée à la présence du "Klein tunneling" dans le GFET est responsable d'un DIBL important dans ce dernier, entraînant inévitablement une forte conductance de sortie.

$L_G$ (nm)	$C_{\text{Tot}}$ (pF/m)	$C_{\text{Tot}}$ ( $10^{-3}$ F/m <sup>2</sup> )	$C_{\text{Ins}}$ ( $10^{-3}$ F/m <sup>2</sup> )	$C_Q$ ( $10^{-3}$ F/m <sup>2</sup> )
10	142,21	14,22	15,49	173,07
30	345,17	11,50	15,49	44,69
50	571,96	11,43	15,49	43,7

Tab. 1 : Différentes contribution à la capacité totale des GFET ayant des longueurs de grilles 10, 30 et 50 nm à  $V_{DS} = 0,2$  V.

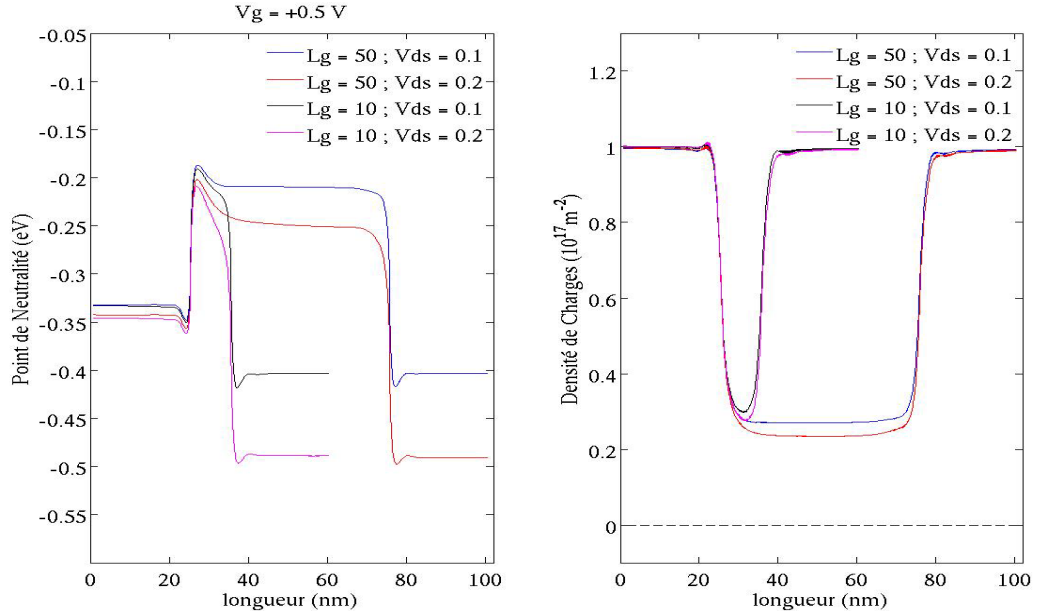
$L_G$ (nm)	$g_m$ max ( $\mu\text{S}/\mu\text{m}$ )	$V_{GS}$ à $g_m$ max	$f_T$ (THz)	$g_d$ ( $\mu\text{S}/\mu\text{m}$ )	$C_{gd}$ (pF/m)	$f_{\max}$ (THz)	$f_{\max}/f_T$ (%)
10	3 014	0.65	3,37	10702	62,347	0,694	20,62
30	3 799	0.57	1,75	8074	162,41	0,401	22,93
50	3 846	0.72	1,07	10841	293,77	0,214	20,06

Tab. 2 : Performances fréquentielles des GFET ayant des longueurs de grilles 10, 30 et 50 nm à  $V_{DS} = 0,2$  V.

### III.4. Abaissement de la barrière induite par la tension de drain (DIBL) dans les GFET

#### III.4.1. Résultats des simulations

Les figures [fig. 16a] et [fig. 16b] montrent l'évolution des profils de potentiel et de charges pour deux GFET de 10 et 50 nm, quand la tension  $V_{DS}$  passe de 0,1 à 0,2 V, et ce pour une tension de grille de +0,5 V (Branche N). On remarque pour les deux transistors que la hauteur de barrière diminue quand augmente la tension de drain. C'est un effet connu dans les nano-transistors à semi-conducteurs classiques et qui porte en anglais le nom de « Drain-Induced Barrier Lowering » (DIBL), et qui pourrait être traduit en français par « Abaissement de la barrière induit par la tension de drain ». Mais cet effet est bien plus important dans les nano-GFET à cause de l'absence de gap. Nous allons maintenant nous baser sur la discussion de la section II.2.4.2 du deuxième chapitre ainsi que sur la conclusion du même chapitre pour proposer un scénario permettant d'expliquer et éventuellement de quantifier ce phénomène. Une étude ultérieure devra être menée pour en confirmer le bien-fondé.



**Fig. 16: (a) Profils de potentiels (points de neutralité) pour deux transistors de  $L_G = 10$  nm et  $L_G = 50$  nm et pour deux tensions de drain  $V_{DS} = 0,1$  V et  $V_{DS} = 0,2$  V à  $V_{GS} = 0,5$  V. (b) Profils de charges correspondants.**

### III.4.2. Modèle proposé pour expliquer le DIBL dans les GFET

Nous avons vu dans la section II.2.4.2 du deuxième chapitre qu'une interprétation de la formule (2.38) est que le dispositif peut être vu comme la superposition de deux dispositifs : (contact de gauche + zone active) et (zone active + contact de droite), la zone active étant composée de (zone d'accès côté source + canal + zone d'accès côté drain). Dans le premier dispositif, c'est-à-dire (contact de gauche + zone active), le contact de gauche émet des électrons avec un vecteur d'onde  $+k_x$  qui vont essayer de se mouvoir jusqu'au drain. Le premier dispositif possède donc son propre niveau de Fermi  $E_{FS}$  et sa propre distribution de charge  $\rho_s$ , qui résulte de l'ajustement du potentiel dans ce premier dispositif, qu'on appellera  $U_s$ , à son propre niveau de Fermi  $E_{FS}$ . Cet ajustement doit se faire de manière à satisfaire les conditions aux limites (dopage fixe et champ nul aux extrémités des deux zones d'accès). Nous reviendrons sur cet ajustement. De manière similaire, le deuxième dispositif (zone active + contact de droite), possède aussi son propre niveau de Fermi  $E_{FD} = E_{FS} - eV_{DS}$ , et sa propre distribution de charges  $\rho_D$ , qui résulte de l'ajustement du potentiel dans ce deuxième dispositif, qu'on appellera  $U_D$ , à son propre niveau de Fermi  $E_{FD} = E_{FS} - eV_{DS}$  de manière à satisfaire les mêmes conditions aux limites. Le potentiel  $U$  et la charge  $\rho$  dans tout le dispositif peuvent être vus comme de simples sommes algébriques de leur deux composantes et qui viennent des contributions de chaque « sous-dispositif »:

$$U = U_s + U_D \text{ et } \rho = \rho_s + \rho_D. \quad (3.5)$$

Dans l'état actuel de notre simulateur, nous n'avons accès qu'au potentiel et la charge totale dans le dispositif. Cependant, Nous allons nous baser sur des arguments physiques pour imaginer comment se décomposent le potentiel et la charge dans un GFET quand il fonctionne dans la branche N. Cette expérience de pensée est représentée dans la figure 17.

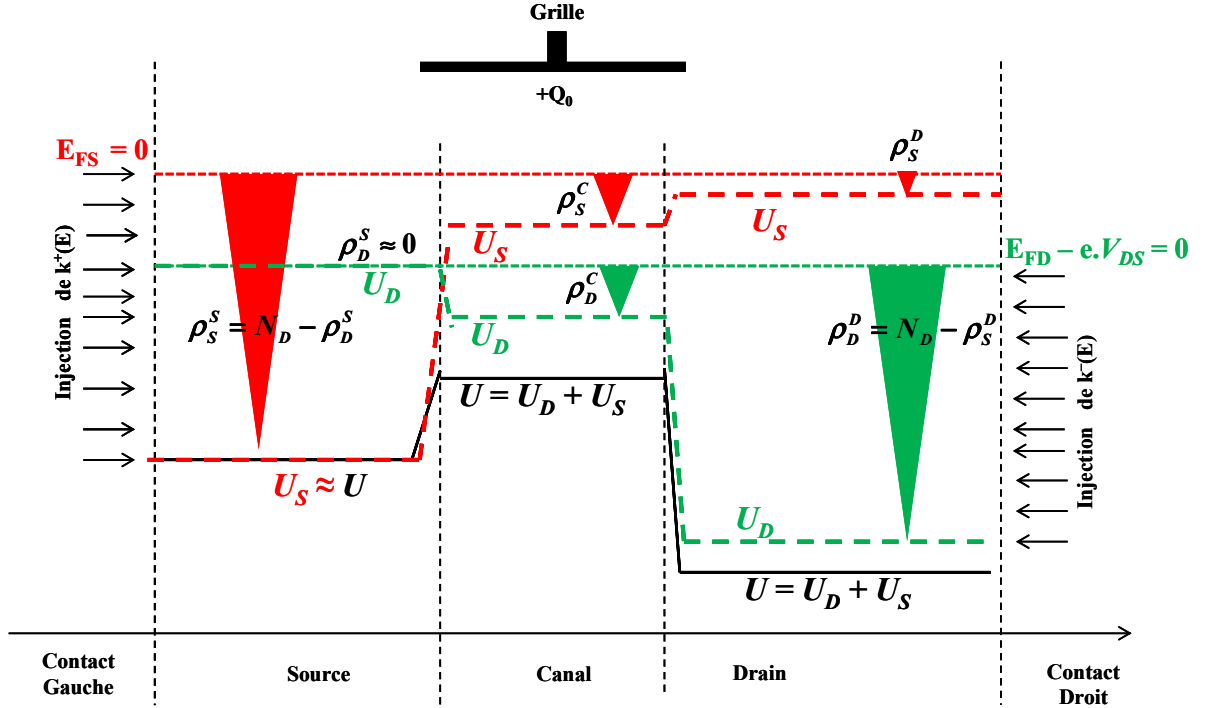


Fig. 17: Modèle proposé du DIBL dans les GFET, qui se base sur la décomposition (3.5) de la charge et du potentiel dans le dispositif. Les indices S ou D des charges et des potentiel indiquent s'ils proviennent du contact côté Source (S) ou côté Drain (D). Les exposants indiquent la région où ces grandeurs sont calculées, le Canal étant désigné par (C). Les triangles montrent le remplissage par les électrons des cônes de Dirac, quantifié par la distance énergétique entre les potentiel  $U_S$  et  $U_D$  et leurs niveaux de Fermi respectifs. Un cône vert implique un remplissage par des électrons en provenance du drain, alors qu'un cône rouge indique un remplissage par des électrons en provenance de la source. Les niveaux de Fermi  $E_{FS}$  et  $E_{FD}$  sont tracés en pointillés à travers toute la structure à titre indicatif.

Revenons maintenant aux ajustements des potentiels. Nous nous placerons tout au long de cette discussion dans la branche N et dans l'hypothèse que les accès possèdent le même dopage  $N_D$ . Commençons par le premier dispositif. Dans la première zone d'accès, côté source (S),  $U_S$  doit s'ajuster à  $E_{FS} = 0$  (que nous prendrons comme référence des énergies dans nos schémas) de manière à injecter une densité de porteurs  $\rho_S^S$  pour compenser la charge positive  $+eN_D$  (atomes ionisés pour fournir le dopage  $N_D$ ), diminuée de la charge  $-e\rho_D^S$  des électrons avec  $-k_x$  émis depuis le drain et qui sont parvenus à la source [fig. 17] :

$$\rho_S^S = -e(N_D - \rho_D^S) \quad (3.6)$$

Comme le canal est non dopé, il est initialement fortement résistif en absence d'une tension de grille. Donc initialement,  $U_S$  et  $E_{FS}$  sont quasiment superposés dans cette région et on a par conséquent une haute barrière pour les électrons. L'application d'une tension de grille positive (dans la branche  $N$ ) tend à abaisser cette barrière et à permettre ainsi la diffusion des porteurs  $+k_x$  depuis la source vers le canal et ensuite le drain. Soit  $\rho_S^{C+D}$  la densité de charges qui franchissent l'interface source-canal. La position du niveau de Fermi côté drain  $E_{FD}$  détermine la portion  $\rho_S^D$  des électrons  $\rho_S^{C+D}$  émis dans le canal depuis la source qui sont ensuite collectés dans le drain, et la partie  $\rho_S^C$  de cette charge qui reste « piégée » dans le canal. On définira la quantité  $\rho_S^{C+D}$  comme la densité d'électrons qui provient de la source et qui franchit l'interface source-canal au sommet de la barrière  $U_S$  dans le canal par

$$\rho_S^{C+D} = \rho_S^C + \rho_S^D \quad (3.7)$$

Il faut tenir compte dans le calcul de  $\rho_S^C$  d'un abaissement supplémentaire de cette barrière dans le canal, et qui provient du champ moyen  $U_D$  créé dans le canal par les porteurs émis depuis le drain dans le canal (comme on le verra un peu plus bas). En tenant compte de tous ces paramètres,  $U_S$  s'ajuste par rapport à  $E_{FS}$  pour avoir  $\rho_S^C$  dans le canal et  $\rho_S^D$  dans le drain [fig. 17].

Dans le deuxième dispositif (zone active + contact de droite),  $U_D$  se place relativement à  $E_{FD} = E_{FS} - eV_{DS}$  de manière à injecter une densité de porteurs  $\rho_D^D$ , de vecteur d'onde  $-k_x$ , pour compenser la charge positive  $+eN_D$ , diminuée de la charge  $-e\rho_S^D$  des électrons de vecteur d'onde  $+k_x$  émis depuis la source et arrivés au drain :

$$\rho_D^D = -e(N_D - \rho_S^D) \quad (3.8)$$

De façon similaire, suite à l'abaissement de la barrière par la tension de grille et par la présence d'un « dopage »  $\rho_S^C$  venue de la source, on a une densité  $\rho_D^C$ , de vecteur d'onde  $-k_x$ , injectée depuis le drain dans le canal. Le point de neutralité  $U_D$  dans le canal doit s'ajuster à  $E_{FD}$  pour avoir la densité  $\rho_D^C$  dans le canal. Pour simplifier la discussion, on se place à une tension  $V_{DS}$  qui engendre une grande différence des niveaux de Fermi. Par conséquent la densité de charges émise depuis le drain et qui arrive à la source  $\rho_D^S$  est nulle. Ceci résulte de la très forte occupation des états énergétiques occupés par les électrons constituant la densité  $\rho_D^C$ . La charge  $\rho_D^C$  reste de ce fait piégée dans le canal, et ce, indépendamment de  $V_{DS}$ , dans le régime des forts  $V_{DS}$ . Comme  $\rho_D^S$  est nulle et que le dopage est une constante du problème, il vient d'après (3.6) et la discussion précédente que  $U_S$  reste constant à l'interface (contact de gauche)-source. Comme la valeur de

$U_S$  à cette interface détermine la valeur de la self-énergie, dont la partie imaginaire détermine le taux d'injection, il vient que le taux d'injection du côté de la source reste constant même si on augmente encore plus  $V_{DS}$  (dans le régime des forts  $V_{DS}$ ). On peut alors supposer qu'à tension  $V_{GS}$  fixe, en première approximation, que la densité  $\rho_S^{C+D}$  reste au plus à peu près constante quand on augmente  $V_{DS}$ . Elle devrait même diminuer globalement à cause du dépeuplement des niveaux en face, dans le drain, du fait de l'abaissement de  $E_{FD} = E_{FS} - eV_{DS}$ . En effet, l'augmentation de  $V_{DS}$  augmente le taux d'extraction des électrons après le plus haut point de la barrière (comme dans le modèle de la source virtuelle [Wang\_IEEE\_TED\_2003]) par rapport au  $V_{DS}$  précédent. En prenant une photo à une tranche horizontale donnée du canal, on y verrait moins d'électrons par rapport au plus faible  $V_{DS}$  précédent (c'est le phénomène qui conduit au pincement du canal dans les MOSFET à semi-conducteurs conventionnels). Mais supposons pour simplifier que  $\rho_S^{C+D}$  reste constant.

Comme on vient de le souligner, l'augmentation de  $V_{DS}$  abaisse  $E_{FD}$ . Ceci a pour conséquence de vider plus d'états (initialement faiblement occupés) côté drain autour de l'énergie  $E_{FS}$ , ce qui d'après [fig. 17] augmente la portion  $\rho_S^D$  de  $\rho_S^{C+D}$  qui arrive au drain, et diminue la portion  $\rho_S^C$  qui reste dans le canal. La charge totale dans le canal est donnée par  $\rho_C = \rho_S^C + \rho_D^C$  [fig. 17], et comme on va le montrer un peu plus bas,  $\rho_D^C$  dans le canal ne varie pas quand on augmente  $V_{DS}$ . La diminution de  $\rho_S^C$  suite à l'augmentation de  $V_{DS}$  entraîne donc une diminution de la charge totale dans le canal. C'est un phénomène qu'on voit bien dans les profils de charges [fig.16b] pour les deux dispositifs simulés ( $L_G = 10$  nm et  $L_G = 50$  nm). Cette diminution de la charge dans le canal se traduit par une augmentation du potentiel  $U_S$  dans cette région du dispositif, potentiel qui se rapproche ainsi du niveau de Fermi  $E_{FS}$  pour être cohérent avec l'état de charge. Ceci a donc pour effet d'augmenter la barrière  $U$  dans le canal.

Pendant, il faut noter que cette augmentation de la barrière n'est pas très importante. Ceci est dû au fait que  $V_{DS}$  a vidé des états déjà peu occupés autour de  $E_{FS}$  (là où on accumule vraiment des électrons dans le cône  $\rho_S^D$  [fig. 17]). En revanche, l'augmentation de  $V_{DS}$ , et donc l'abaissement de  $E_{FD}$ , réduirait très fortement  $\rho_D^C$  si  $U_D$  restait à la même énergie [fig. 17]. Or cette augmentation de la tension n'a rien changé à la nature du contact de droite (réservoir semi-infini, donc 'imposant' par sa taille et sa constante distribution à l'équilibre) et donc n'a rien changé à son injection (à un décalage près, vers le bas, de la plage d'énergie d'injection de ses électrons). De plus, les électrons injectés dans le canal depuis le drain ne peuvent pas s'échapper vers la source à cause de l'occupation totale des états dans cette région. Par conséquent,  $\rho_D^C$  doit rester à peu près constante quand on augmente  $V_{DS}$ . Le potentiel  $U_D$  doit donc s'abaisser d'à peu près  $-eV_{DS}$  pour retrouver la distance à son niveau de Fermi qui lui permet d'injecter  $\rho_D^C$  dans le canal.

La petite augmentation de  $U_S$  dans le canal et la forte baisse de  $U_D$  dans la même région fait en sorte que la nouvelle hauteur de barrière  $U$  dans le canal doit se retrouver quelque part entre  $U$  et  $U - eV_{DS}$  (mais plutôt vers  $U - eV_{DS}$ ).

Voici donc notre explication du fort DIBL dans les GFET.

Pour décrire la « dynamique » du DIBL de manière quantitative, il faudrait, à la lumière de la discussion précédente, résoudre de manière auto-cohérente deux systèmes d'équations NEGF-Poisson, où chaque système NEGF-Poisson décrit un des sous-dispositifs. A chaque itération, le potentiel auto-cohérent du premier système est injecté comme « onsite-energy » du deuxième système et la distribution de charge auto-cohérente du premier système considéré comme condition aux limites (en plus du dopage des accès) du deuxième système. Puis on résout le deuxième système NEGF-Poisson de manière cohérente. Les résultats de cette résolution sont utilisés comme entrée pour la résolution du premier système NEGF-Poisson et ainsi de suite.

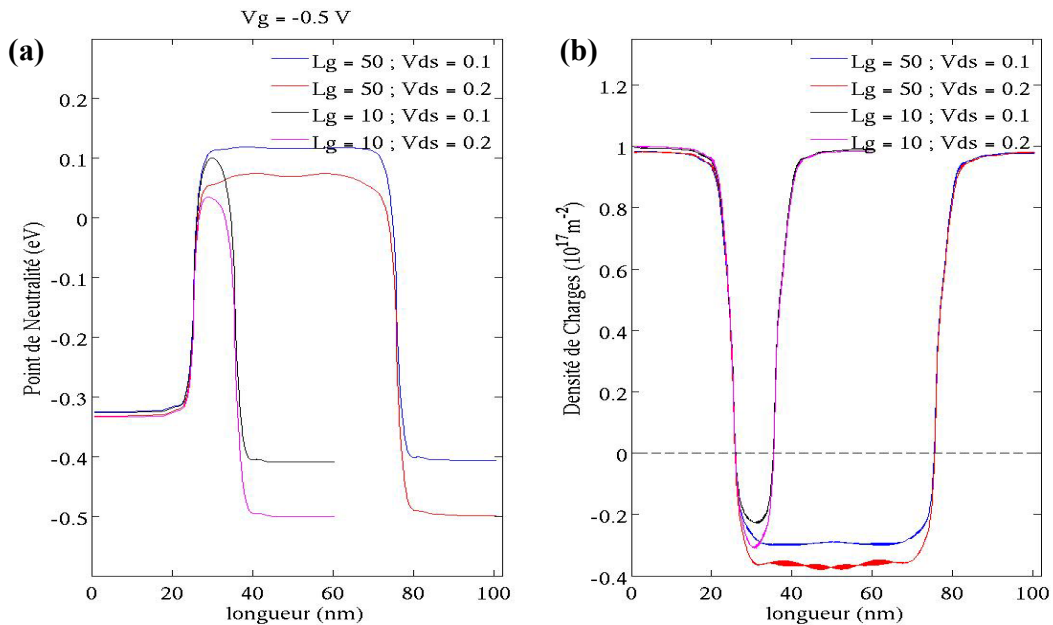
Avant de finir cette discussion, notons qu'elle reste tout à fait valable dans la branche P. Il suffit d'avoir en tête les choses suivantes [fig. IV-16] :

- la tension de grille négative fait passer  $U_S$  et  $U_D$  au-dessus des niveaux de Fermi respectifs des régions considérées,
- les électrons en provenance de la source et du drain passent, sous la barrière, via les états de trous par effet tunnel de Klein,
- la densité de trous due à chaque réservoir sous la barrière est en fait fixée par la distance énergétique entre  $U_S$  et  $U_D$ , les plus hauts niveaux occupés par leurs électrons respectifs  $\rho_S^C$  et  $\rho_D^C$ .

L'augmentation de  $V_{DS}$  et la diminution de  $E_{FD}$  qui l'accompagne ont alors les mêmes effets, c'est-à-dire :

- évacuation de plus de charge vers le drain par effet tunnel chiral, et donc augmentation de la densité de trous sous la barrière quand on augmente  $V_{DS}$ . C'est ce qu'on observe sur [fig. 18b]
- réduction drastique de  $\rho_D^C$  sous le canal. Le DIBL [fig. 18a] vient alors rétablir l'injection initiale depuis le drain.

Le scénario que nous proposons a le mérite de fournir une explication cohérente du comportement électrostatique et du courant dans les deux branches 'n' et 'p' et de concilier deux phénomènes paradoxaux en apparence. En effet, dans les schémas que l'on rencontre généralement dans la littérature, le sommet du cône de Dirac est "ancré" au potentiel total dans le dispositif, et, dans le canal, la position de ce sommet par rapport au niveau de Fermi de la source détermine la charge totale présente dans le canal. Donc, d'après ces schémas classiques, le DIBL devrait s'accompagner d'une augmentation de la charge totale dans le canal quand on augmente  $V_{DS}$ , et non d'une diminution de la charge comme le montrent toutes nos simulations.



**Fig. 18: (a) Profils de potentiels (points de neutralité) pour deux transistors de  $L_G = 10$  nm et  $L_G = 50$  nm et pour deux tensions de drain  $V_{DS} = 0,1$  V et  $V_{DS} = 0,2$  V à  $V_{GS} = -0,5$  V (b) Profils de charges correspondants. Les densités positives sont celles des électrons et les densités négatives sont les densités de trous.**

On peut d'ores et déjà prédire, d'après notre modèle, que la présence d'une bande interdite dans le canal doit permettre de réduire fortement le DIBL dans la branche 'n', et son maintien dans la branche 'p'. Ces prédictions seront validées lors de notre étude du GNMFET et nous expliquerons pourquoi.

### III.5. Conclusion

Nous avons montré dans ce chapitre que l'utilisation du h-BN comme substrat pour les GFET permettait d'améliorer très considérablement le transport des fermions de Dirac dans le graphène. L'influence de ce substrat sur le transport dans le graphène est tellement faible qu'on obtient dans les GFET sur h-BN, des mobilités de porteurs très proches de celles qu'on obtient dans du graphène suspendu, et un libre parcours moyen dépassant  $1\mu\text{m}$ . La conséquence du transport fortement balistique est que les GFET sur h-BN présentent, à longueur de grille égale, des fréquences de coupures bien supérieures à celles que l'on obtient en utilisant d'autres types de substrats comme la silice, le carbone en structure diamant ou encore du carbure de silicium. Cependant, les GFET sur h-BN réalisés jusqu'ici ont des longueurs de grilles de quelques centaines de nanomètres, ou moins. C'est pourquoi nous avons développé un code auto-cohérent, dans le cadre du formalisme NEGF-équation de poisson, pour prédire les performances fréquentielles des GFET sur h-BN quand la longueur de grille ne dépasse pas quelques dizaines de nanomètres. L'utilisation du h-BN comme substrat et isolant de grille dans le GFET est prise en compte en considérant que la monocouche de graphène baigne dans un milieu dont la permittivité est celle du h-BN, et en supposant tout comme le montre l'expérience, que le transport de charge est fortement balistique dans le graphène.



Nos simulations montrent que les GFET sur h-BN ayant une longueur de grille inférieure à 50 nm présentent des fréquences de coupures supérieures à 1 THz. Cependant, nos calculs montrent que l'absence d'une bande interdite, combinée avec l'apparition de l'effet tunnel de Klein, a pour effet de dégrader considérablement le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  des GFET, et de causer un fort abaissement de la barrière de potentiel dans le canal (DIBL) empêchant ainsi toute saturation du courant dans les caractéristiques  $I-V_{DS}$  aux forts  $V_{GS}$ , c'est-à-dire là où se trouve le maximum de la transconductance. La forte conduction de sortie qui en résulte dégrade fortement la fréquence maximale d'oscillation, ce qui constitue un sérieux inconvénient pour les applications à très hautes fréquences.

Nous avons introduit, dans la dernière partie, un modèle qui permet d'expliquer le DIBL dans les transistors à base de graphène. Ce modèle prédit que la présence d'une bande interdite dans le canal doit permettre, en plus de l'amélioration du rapport  $I_{On}/I_{Off}$ , de réduire fortement le DIBL dans la branche 'n', et d'augmenter donc fortement la fréquence maximale d'oscillation. C'est donc dans ce contexte que nous nous sommes proposés d'étudier le GNM-FET sur h-BN. C'est cette étude que nous allons présenter dans le chapitre suivant.

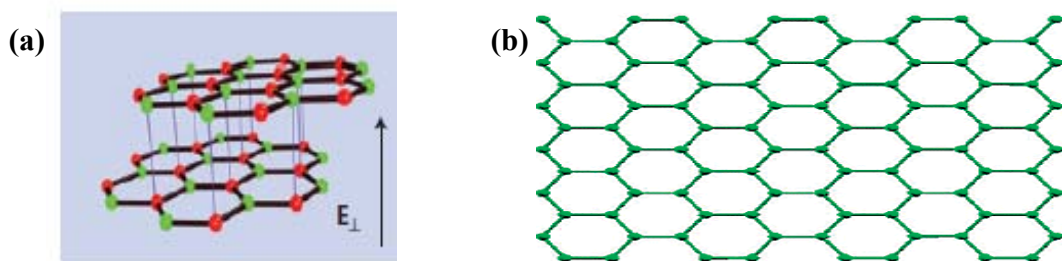
## Chapitre IV

# Etude du transistor GNMFET (Graphene NanoMesh Field Effect Transistor)

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les GFET conventionnels, basés sur l'utilisation d'un mono-feuillet de Graphène Pristine (PG) comme canal du transistor, présentaient d'excellentes performances fréquentielles pouvant atteindre quelques tera-Hertz en termes de fréquence de coupure. Mais on a vu que l'absence d'une Bande d'énergie Interdite (BI) et la présence de l'Effet Tunnel Chiral (CT) engendrait une conductance de sortie trop importante, empêchant ainsi la saturation du transistor. Ceci a pour effet de dégrader le gain en tension, la fréquence maximale d'oscillation et le Rapport  $I_{On}/I_{Off}$  (ROO). Pour pallier ces problèmes, d'autres concepts novateurs de transistors utilisant le pristine graphène comme canal et ayant de grands ROO ont été proposés dans la littérature. On a proposé l'utilisation d'un transistor à hétérostructure verticale [Britnell\_Science\_2012], un transistor à « hétéro-contrainte » [Nguyen\_Nanotech\_2014], un transistor à barrière Schottky commandée par une grille [Yang\_Science\_2012], un transistor à électrons chauds [Vaziri\_NanoLett\_2013] ou encore un transistor à gap physique réalisé sur une structure MOS [Mun\_APL\_2012]. Malheureusement, ces transistors reposent dans leur fonctionnement sur l'effet tunnel, et ont donc l'inconvénient de conduire des densités de courant trop faibles même à l'état passant. Cependant, l'ouverture d'une BI ou d'un « gap de conduction » reste un moyen privilégié pour améliorer les performances des GFET, même au prix d'une réduction de mobilité, et plusieurs méthodes ont été proposées dans la littérature pour aller dans ce sens.

Une des méthodes consiste à utiliser des nanorubans de graphène [Fig. 1a] (GNR, pour Graphene NanoRibbon) où l'ouverture de la BI est le résultat du confinement latéral des porteurs [Han\_PRL\_2007]. Bien que l'on puisse atteindre de grands ROO pour des GNR-FET [Kato\_NatNanotech\_2012] [Solis-Fernandez\_AdvMat\_2013], et que l'on prévoit de très bonnes performances pour les GNR-FET de largeur en-dessous de 3 nm [Guo\_NanoScale\_2012], la réalisation de GNR de cette largeur reste très difficile technologiquement car les problèmes de reproductibilité et de sensibilité au désordre des bords sont posés [Querlioz\_APL\_2008] [Han-MY\_PRL\_2010]. Même au cas où ces deux derniers problèmes seraient surmontés, le courant

délivré par (ou que peuvent supporter) de tels dispositifs serait faible à cause de leur faible largeur. Un autre moyen d'ouvrir une BI dans un dispositif à base graphène consiste à utiliser non pas une monocouche de graphène, comme au chapitre précédent, mais de considérer une Bicouche de Graphène ou « Bilayer Graphene » (BG) comme canal du FET [Fig. 1b]. En effet, l'application d'un champ électrique perpendiculaire au plan du BG induit un gradient de champ entre les deux couches qui la composent. Ceci engendre une asymétrie entre les deux couches et permet de créer une BI de largeur modulable par les grilles [McCann\_PRB\_2006] [Min-HK\_PRB\_2007]. C'est ainsi qu'une BI de 250 meV a pu être ouverte dans un BG en utilisant un double grille [Zhang\_NatureLett\_2009] et que des GFET ayant des ROO de 100 à température ambiante ont pu être fabriqués [Xia-F\_NanoLett\_2010] avec des caractéristiques de fonctionnement (notamment des gains en tensions) meilleurs que celles du graphène [Szafranek\_NanoLett\_2012]. Cependant,  $E_G = \gamma = 250 \text{ meV}$  est la valeur limite de la largeur de la BI que l'on peut obtenir avec le bicouche de graphène [McCann\_RepProgPhys\_2013], qui est fixée par la constante de couplage  $\gamma$  entre les deux couches de graphène.



**Fig. 1 : Représentation schématique de (a) bilayer graphène (b) Nano-ruban**

Il est aussi possible d'ouvrir une BI dans le graphène en utilisant certains types de substrats dans des configurations bien déterminées. C'est ainsi un gap de 260 meV a été mesuré pour du graphène epitaxié sur SiC [Zhou\_NatMat\_2007]. Il est possible d'ouvrir théoriquement une bande interdite dans du graphène dans l'hypothèse d'un empilement Bernal du graphène sur un substrat de Nitrure de Bore hexagonal (h-BN), et des largeurs de BI de 53 et 100 meV pourraient être atteintes [Giovannetti\_PRB\_2007] [Kharche\_NanoLett\_2011]. Cependant, ces prédictions théoriques n'ont pas encore pu être testées à cause de la difficulté technologique de réaliser l'empilement Bernal en question. Il est également possible, théoriquement, d'ouvrir un gap sur du graphène grâce à l'adsorption préférentielle d'atomes d'azote sur un des sous-réseaux du graphène [Lherbier\_NanoLett\_2013]. L'adsorption préférentielle d'atomes d'azote sur un des sous-réseaux a déjà été observée expérimentalement [Zhao-L\_Science\_2011] [Lv-R\_SciRep\_2012].

Une des techniques prometteuses qui permettent d'ouvrir une BI dans le graphène consiste à réaliser des nanostructures périodiques dans ce matériau, soit en y adsorbant des domaines périodiques d'atomes [Balog\_NatMat\_2010], soit en « prélevant » périodiquement un motif bien défini d'atomes de carbones sur la feuille de graphène [Bai\_NatNanotech\_2010]. On appellera AntiDots (AD) ces motifs d'atomes de carbone prélevés afin d'éviter la confusion avec les trous,

porteurs d'une charge électrique positive. La première solution [Balog\_NatMat\_2010] a permis d'atteindre une résolution entre les motifs de 2 nm et d'ouvrir une BI avoisinant les 450 meV, mais la technique souffrait d'un problème de transfert du substrat d'Iridium sur lequel le PG a été épitaxié vers un substrat isolant. Le deuxième type de nanostructuration périodique, appelé Graphene NanoMesh (GNM) dans la littérature [Bai\_NatNanotech\_2010], a fait l'objet de beaucoup de travaux aussi bien théoriques qu'expérimentaux, tous portant à croire que le GNM-FET pourrait s'avérer une bonne alternative au GFET conventionnel. C'est pourquoi, en m'appuyant sur les connaissances acquises lors de l'étude des GFET conventionnels, j'ai consacré une grande partie de ma thèse à l'étude du transport dans ce nouveau type dispositifs. Je présenterai à la fin de ce chapitre et pour la première fois, des résultats de simulation auto-cohérente [Berrada\_APL\_2013]. Les résultats que nous avons obtenus seront présentés tout au long de ce chapitre.

Nous commencerons, dans la première partie, par un exposé (certainement non exhaustif), des différentes techniques utilisées de nos jours pour fabriquer des GNM, de leurs limites en termes de résolution, ainsi que des performances des GNM-FET à l'état de l'art. La deuxième partie sera consacrée aux études théoriques menées sur les GNM, et plus spécialement leur structure de bande, pour tenter de comprendre l'origine de l'apparition de la BI. Nous présenterons dans la troisième partie les caractéristiques des GNM que nous avons choisis d'étudier durant cette thèse ainsi que le modèle du GNM-FET dans lequel elles constitueraient le canal. Les quatrième et cinquième parties seront dédiées à présenter les résultats obtenus, par la résolution auto-cohérente des équations de Poisson et de la fonction de Green hors équilibre (NEGF), pour les structures présentées en quatrième partie en termes de caractéristiques courant-tensions, du ratio On/Off et des performances fréquentielles en régime faibles signaux.

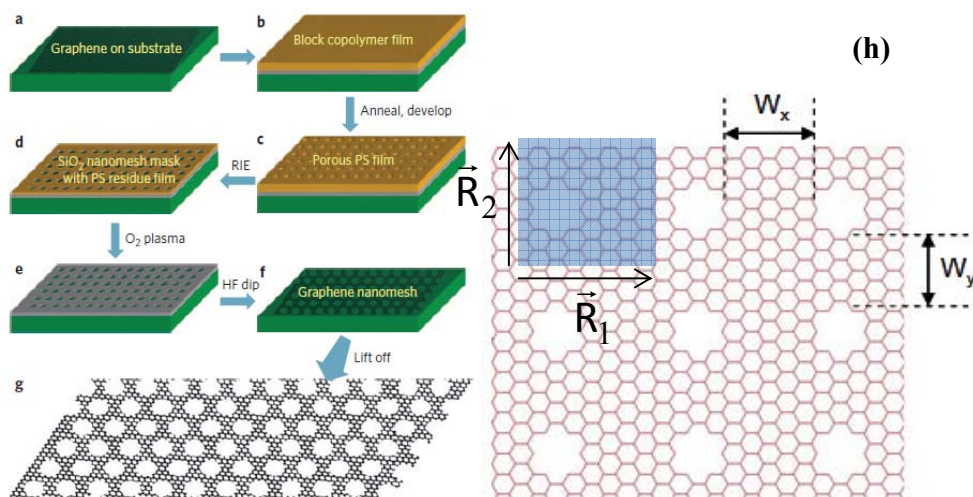
## **IV.1. Réalisations expérimentales de Graphene NanoMesh (GNM)**

Une des premières réalisations expérimentales de GNM date de 2010 [Bai\_NatNanotech\_2010]. Le procédé technologique utilisé est décrit dans la figure 2 tirée du même article. Le graphène utilisé a été d'abord exfolié mécaniquement puis reporté sur un substrat de silice [Fig.2a]. Une couche de SiO<sub>2</sub> de 10 nm d'épaisseur est ensuite déposée sur le graphène puis recouverte d'une couche de « Poly (StyreneBlock-Methyl MethAcrylate) (P(S-B-MMA)) block copolymer réalisée par « spin-coating » [Fig.2b]. Après chauffage, le PMMA du (P(S-b-MMA)) block copolymer se regroupe sous forme de cylindres orientés perpendiculairement au plan du graphène. Ces cylindres de PMMA sont ensuite développés – par exposition aux UV puis rinçage par le l'acide acétique – et le film poreux de PS [Fig.2c] qui en résulte sert de masque pour graver la silice en dessous par la technique du « Reactive Ion Etching » (RIE) utilisant du CHF<sub>3</sub> [Fig.2d]. L'oxyde SiO<sub>2</sub> est ensuite utilisé comme masque pour réaliser les trous dans la couche de graphène par la gravure par un plasma d'Oxygène [Fig.2e]. Le GNM, encore recouvert par la couche poreuse de SiO<sub>2</sub>, est ensuite rincé à l'acide fluoridrique

pour éliminer la silice [Fig.2f]. Le GNM ainsi réalisé peut être reporté sur un autre substrat comme du h-BN par exemple [Fig.2g].

La figure [Fig.2h] offre une vision schématique d'un GNM. Ce dernier est caractérisé dans la littérature par cinq paramètres importants :

- ✓ La Super-Cellule (SC) : représentée par le carré transparent bleu. Comme nous allons le voir plus tard, les orientations  $\vec{R}_1$  et  $\vec{R}_2$  – ou chiralités, notion que l'on précisera un peu plus loin – des deux bords adjacents de la SC jouent un rôle très important dans l'ouverture de la Bande Interdite (BI) dans les GNM avec des trous exempts de rugosité [Dvorak\_SciRep\_2014].



**Fig.2 : (a-g) Réalisation des GNM par la technique du 'Block copolymère' [Bai-NatNano\_2010]. (b) Vision schématique d'un GNM a super-cellule carrée ,  $W_x$  et  $W_y$  sont appelés 'NeckWidth' (NW) et valent dans cet exemple 1,1 et 0,9 nm respectivement.**

- ✓ La forme des Anti-Dots (AD) : plusieurs formes d'AD peuvent être envisagées théoriquement : circulaire, triangulaire, carrée... Cependant, l'état de la technologie ne permet pas d'avoir une résolution suffisante à l'échelle nanométrique sur la forme de l'AD.
- ✓ NeckWidth (NW) : est appelée ainsi la distance séparant les bords des trous. Les travaux théoriques montrent que le gap est inversement proportionnel à cette quantité [Oswald\_PRB\_2012] [Nguyen\_JAP\_2013]. L'origine du gap de conductance n'étant pas une question tranchée dans les travaux expérimentaux (confinement latéral, états localisés...), ces derniers semblent cependant confirmer cette hypothèse [Bai\_NatNanotech\_2010] [Liang\_NanoLett\_2010].
- ✓ Anti-Filling Factor (AFF) : en plus de leur forme géométrique [Sahin\_PRB\_2011], le rapport du nombre des atomes de carbones manquants dans une SC – ou définissant l'AD – à ceux initialement présents dans la SC est appelé « Anti-Filling Factor » et

détermine grandement la largeur de la BI quand les chiralités des bords permettent son ouverture [Pedersen\_PRL\_2008] [Oswald\_PRB\_2012] [Ouyang\_ACSNano\_2011].

- ✓ Rugosité des bords des antidots: les travaux théoriques montre qu'elle joue un rôle important dans l'ouverture d'une BI pour les GNM semiconducteurs Cette rugosité s'accompagne également par une apparition d'états localisés et une dégradation du transport [Nguyen\_JAP\_2013].

Dans ce travail précurseur [Bai\_NatNanotech\_2010], les auteurs ont également étudié les performances de transistors à effet de champ à canal en GNM. Nous appellerons par la suite ce type de transistor « GNM-FET » pour Graphene NanoMesh Field Effect Transistor. Les transistors en question sont réalisés avec une grille arrière en silicium dopée p+ avec une couche de SiO<sub>2</sub> de 300 nm comme épaisseur de grille. Les longueurs et largeurs de grilles sont comprises entre 2 et 3 μm, ce qui nous place dans un régime de transport diffusif. Le NW des GNM est modulé en faisant varier le temps de gravure par le plasma d'oxygène [fig.3a].

On a pu mesurer pour les GNM-FET ayant des NW de  $7 \pm 2$  nm des rapports On/Off de l'ordre de 100, ce qui représente une amélioration d'au moins un ordre de grandeur du Rapport On/Off (ROO) par rapport à celui mesuré dans les GFET conventionnels [Schwierz\_NatNano\_2010]. Pour des GNM-FET ayant un NW de  $W = 10 \pm 2$  nm, un rapport On/Off de 10 a été mesuré, ce qui correspond à un ROO d'un GNR de largeur  $W$  mesuré dans la littérature, mais le courant débité par le GNM-FET était entre 50 à 100 fois celui que peut fournir un GNR individuel de largeur  $W$  [Jiao-L\_Nature\_2009] [Bai\_NanoLett\_2009].

Les performances des GNM-FET démontrées dans ce travail restent à ma connaissance les meilleures jamais obtenues à ce jour. Cependant, nombre d'autres travaux expérimentaux ont porté sur des techniques alternatives de réalisation des GNM et des GNM-FET.

On pourrait citer comme exemple de travaux sur les GNM celui de Liang [Liang\_NanoLett\_2010] [fig. 3a] où les GNM ont été fabriqués par la technique de lithographie par nanoimpression (ou « nanoimprint lithography »). Le block-copolymère est d'abord étalé sur le graphène par « spin-coating » puis les motifs des antidots, qui vont être gravés sur le graphène par le plasma d'oxygène, sont réalisés par nanoimpression. Les résultats obtenus par cette technique figurent parmi les meilleurs de l'état de l'art : Rapport On/Off de l'ordre de 100 et observation de plateaux dans les courbes  $I_{DS}-V_{GS}$  [fig. 3b]. On peut citer également le travail [Sinitskii\_JACS\_2010] où une couche de nanosphères auto-assemblées, déposée sur un premier masque « sacrificiel » et qui joue le rôle d'un tampon protecteur entre les nanosphères et le graphène, est utilisée pour déposer un deuxième masque poreux qui lui contiendra – après que l'on aura éliminé les nanosphères par sonication – les motifs qui vont être par la suite reportés sur le graphène par RIE et donc pour aboutir au GNM.

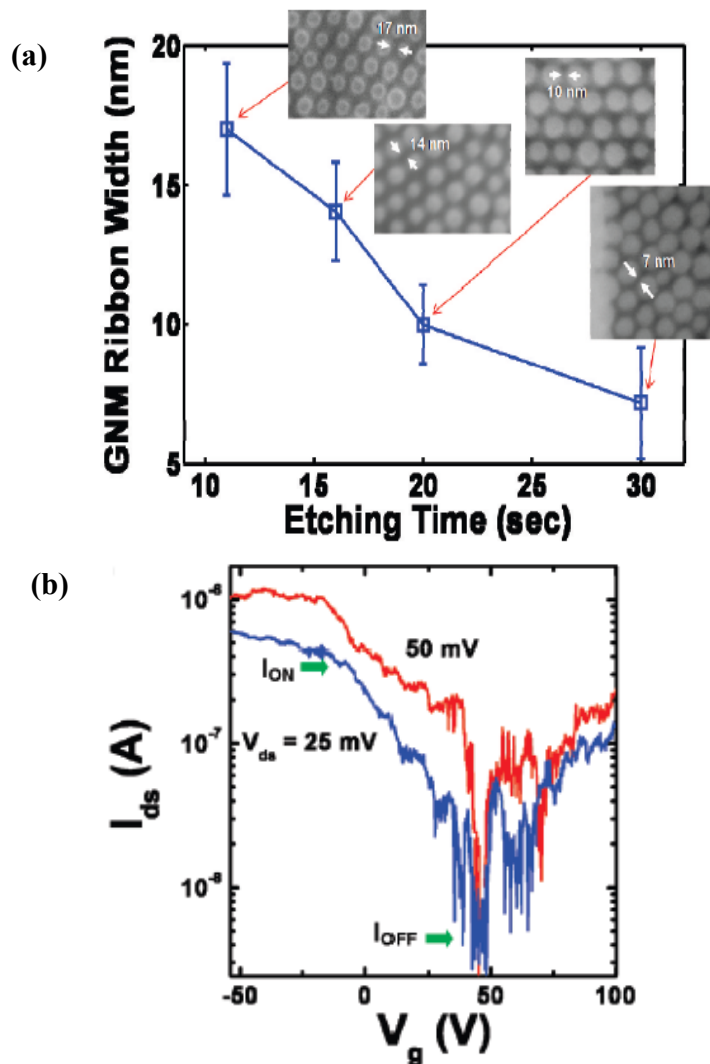


Fig. 3 : (a) Image AFM de la variation des NeckWidth des GNM en fonction du temps de gravure plasma. (b) Courbe  $I_{DS}$ - $V_{GS}$  à  $V_{DS} = 25$  mV pour un GNM-FET à grille arrière ayant une épaisseur d'oxyde de silice de 300nm, une longueur de grille de 1,5  $\mu$ m et une largeur de grille de 2 $\mu$ m. le GNM de ce transistor possède un NeckWidth de  $W=7\pm 2$  nm, et les plateaux qu'on voit sur cette courbe peuvent être le résultat de l'apparition de sous-bandes dans le canal qui sont dues au confinement latéral. Le rapport On/Off de ce transistor se situe autour de 80. Ces deux images sont tirées de [Liang\_NanoLett\_2010].

On peut trouver d'autres travaux expérimentaux dans la littérature utilisant des variantes de la technique de « block-copolymer lithography » : [Kim-M\_NanoLett\_2010] [Kim\_AcsNano\_2012], de la gravure par RIE à travers un masque poreux : [Zhang-Z\_AdvMat\_2012], définition des antidots par photocatalyse à la pointe d'un motif de nanopoutres en contact avec une feuille de graphène oxydé [Akhavan\_AcsNano\_2010], ou encore l'utilisation d'une approche bottom-up consistant à faire croître du graphène par CVD sur un substrat de cuivre contenant des plots de  $Al_2O_3$  qui définiront les contours des antidots du GNM lors de la croissance [Safron\_AdvMat\_2012].

## IV.2. Travaux théoriques sur les GNM

Nous avons vu au paragraphe précédent qu'il existe désormais plusieurs techniques de réalisation des GNM. Historiquement, les publications théoriques sur les GNM ont précédé leurs réalisations expérimentales. Nous allons voir que bien que les premières aient considéré des GNM parfaits en terme de périodicité des AD et de rugosité de bords (contrairement à ce que l'on est capable de fabriquer), l'accord entre les deux reste assez satisfaisant en termes d'influence du NW, de l'Anti-Filling Factor (AFF), et de la présence de défauts sur les performances des GNM-FET. Les résultats expérimentaux sur le graphène étant encourageants, les publications théoriques sur les GNM se sont multipliées. On a donc étudié la conductance des GNM [Rosales\_PRB\_2009], la possibilité d'effets de Résistance Différentielle Négative (RDN) dans les jonctions pn à base de GNM [Nguyen\_Semicon\_2012], leurs propriétés magnétiques éventuelles [Yang\_PRB\_2011] et la thermoélectricité des dispositifs en GNM [Gunst\_PRB\_2011] [Karamitaheri\_JAP\_2011] [Yan\_PhysLettA\_2012].

Naturellement, une grande partie des travaux a été cependant consacrée à l'étude théorique des structures de bandes [Pedersen\_PRL\_2008] [Liu\_PRB\_2009] [Ouyang\_ACSnano\_2011] [Zhang-A\_APL\_2011] [Sahin\_PRB\_2011] [Jippo\_PRB\_2011] [Oswald\_PRB\_2012]. Ces publications ont tenté d'établir un lien entre les cinq paramètres caractérisant les GNM que nous avons énoncés plus haut. Malgré le large éventail de GNM étudiés dans ces publications, la plus grande partie de ces travaux considérait des AD disposés selon les axes de haute symétrie du graphène, et aucune d'entre elles ne permettait d'expliquer, de manière simple et synthétique, l'apparition de BI dans ce type de nanostructures.

Dans cet esprit, un premier article paru en mars 2013 proposait très probablement pour la première fois (à ma connaissance), sur la base de calculs ab-initio, une règle de sélection entre les GNM semiconducteurs et semi-métalliques [Liu\_Small\_2013]. Ce travail considérait des GNM où la super-cellule pouvait avoir une symétrie différente de celle du PG. Les SC sont alors caractérisées par une chiralité  $\vec{R}$ , qui n'est rien que le vecteur de l'espace réel reliant deux AD voisins selon une direction donnée. Les GNM étudiées avaient de fait la forme d'un parallélogramme et la principale conclusion de cet article est que si  $\vec{R}$  avait pour expression  $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + m_1\vec{a}_2$ , seuls les GNM avec  $n_1 = m_1 [3]$  (Où les crochets désignent la congruence modulo 3) étaient semiconducteurs. Le même article proposait de généraliser ce résultat en suggérant que la même règle de sélection soit appliquée à l'autre vecteur de translation entre les AD. Ceci a été confirmé dans un travail paru très récemment [Dvorak\_SciRep\_2013] qui a en plus apporté une explication de l'ouverture de BI dans les GNM via un modèle très simple dont nous allons à présent reprendre les grandes lignes. Pour plus de détails concernant les calculs, le lecteur peut se référer au « supplementary material » du même article. La présence de défauts périodiques est modélisée par un potentiel périodique :

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + l_1\vec{R}_1 + l_2\vec{R}_2) \quad (4.1)$$



Où  $l_1$  et  $l_2$  sont des entiers et  $\vec{R}_1$  et  $\vec{R}_2$  sont les deux vecteurs du réseau réel qui définissent (éq. 2.1) :

$$\vec{R}_i = n_i \vec{a}_1 + m_i \vec{a}_2 \quad (4.2)$$

En prenant la transformée de Fourier de (4.1), il vient :

$$U(\vec{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} dx dy \quad (4.3)$$

En traitant ce potentiel comme une perturbation que subissent les électrons de l'orbitale  $p_z$  du graphène, on voit que l'on doit transformer l'Hamiltonien (2.12) de la manière suivante :

$$H_{\vec{k}} \rightarrow H_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} E_1(\vec{k}) & h(\vec{k}) + \lambda_1(\vec{k}) \\ h^*(\vec{k}) + \lambda_1^*(\vec{k}) & E_1(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Où :

$$E(\vec{k}) = \langle \phi_A | U(\vec{k}) | \phi_A \rangle = \langle \phi_B | U(\vec{k}) | \phi_B \rangle \quad (4.5)$$

$$\lambda_1(\vec{k}) \propto \langle \phi_A | U(\vec{k}) | \phi_B \rangle \quad (4.6)$$

On sait que la dégénérescence au point de Dirac pour le PG est due au fait que  $|h(\vec{K})| = |h(\vec{K}')| = 0$ . Donc le GNM peut lever la dégénérescence en ces points si  $\lambda_1(\vec{K}) = \lambda_1(\vec{K}') \neq 0$ , ce qui, d'après (4.6), revient à imposer comme condition pour l'ouverture d'une BI dans le graphène :

$$U(\vec{K}) \neq 0 \text{ et } U(\vec{K}') \neq 0 \quad (4.7)$$

Pour saisir les conséquences de cette condition, les auteurs ont considéré un seul défaut périodique par maille élémentaire (définie par  $\vec{R}_1$  et  $\vec{R}_2$ ) et l'ont modélisé par un potentiel périodique caractérisé par un potentiel d'amplitude  $g$  (localisé sur les défauts) et par la même périodicité. Le potentiel considéré a donc la forme :

$$U(\vec{r}) = \sum_{\alpha, \beta = -\infty}^{+\infty} g \delta(\vec{r} - \alpha \vec{R}_1 + \beta \vec{R}_2) \quad (4.8)$$

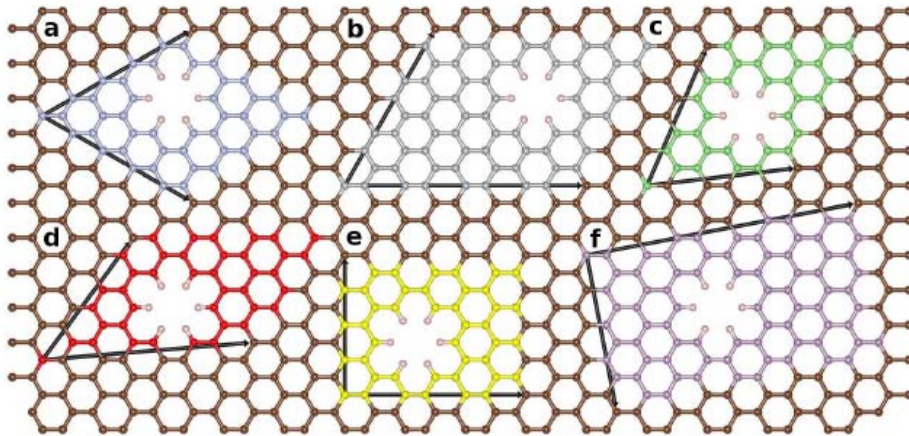
On peut aisément calculer la transformée de Fourier (4.3) du potentiel (4.8). Les calculs de la page 4 du « supplementary material » montrent que les points où cette transformée est non-nulle sont définis par les points d'intersection des deux familles de droites dans l'espace réciproque  $(k_x, k_y)$ :

$$\begin{cases} k_x x_1 + k_y y_1 = 2\pi\alpha \\ k_x x_2 + k_y y_2 = 2\pi\beta \end{cases} \quad (4.9)$$

Où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des entiers (4.8),  $x_i$  et  $y_i$  sont donnés par  $x_i = \frac{3}{2}(n_i + m_i)a_c$  et  $y_i = \frac{\sqrt{3}}{2}(n_i - m_i)a_c$  où  $(n_i, m_i)$  sont définis dans (4.2) et  $a_c$  est la distance entre deux atomes de carbone premiers proches voisins.

Donc on peut dire grâce à la condition (4.7) que lorsque les deux familles de droites (4.9) se croisent au niveau des six coins de la zone de Brillouin du graphène pristine, nous assistons à une levée de dégénérescence aux points K et K' du PG, et à l'ouverture d'une bande d'énergie interdite entre la bande de conduction et la bande de valence du graphène. En substituant les coordonnées des points de Dirac (2.1-2) dans (4.6), on observe que l'on a ouverture d'une bande d'énergie interdite si est seulement si nous avons :

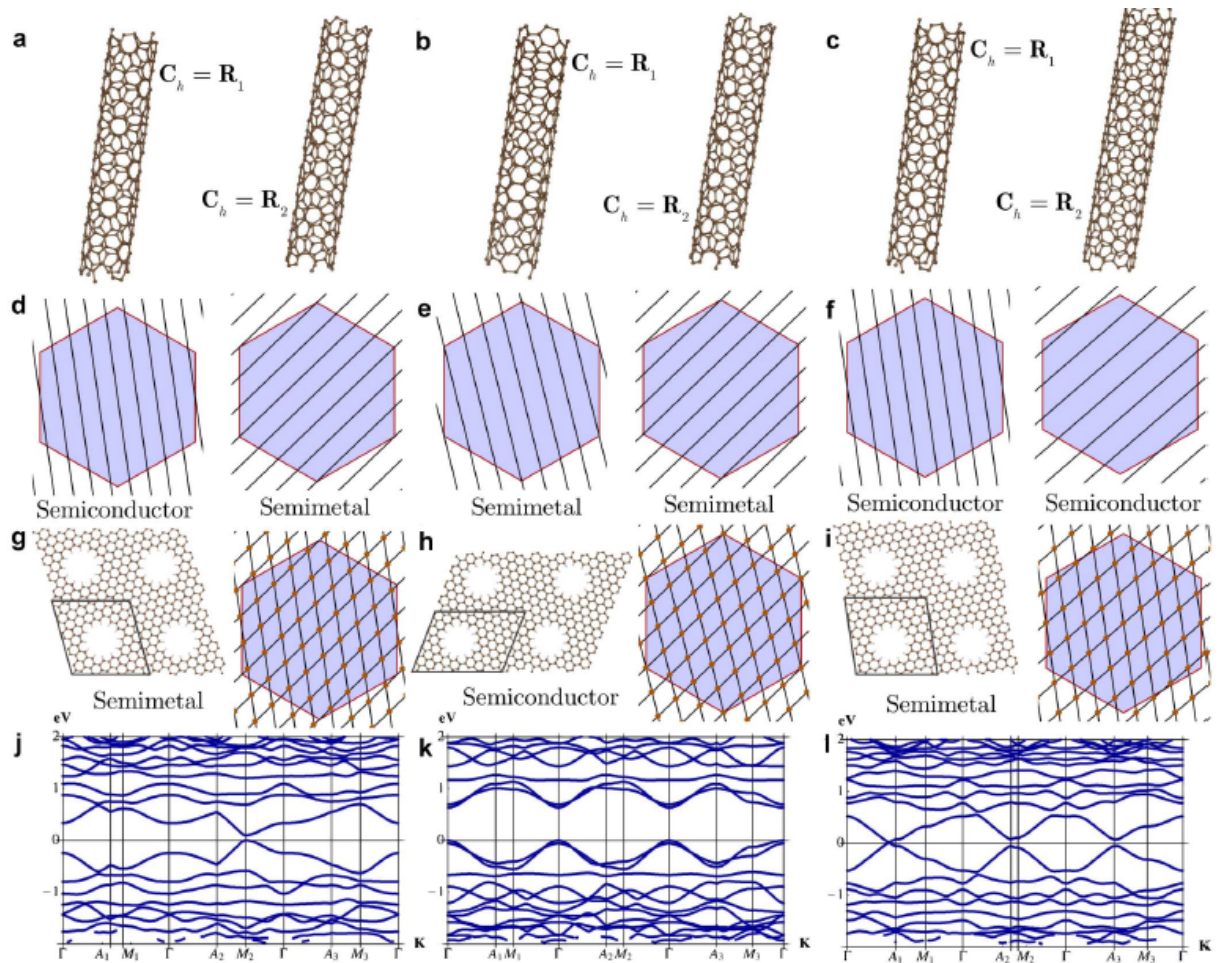
$$\begin{cases} n_1 = m_1 [3] \\ n_2 = m_2 [3] \end{cases} \quad (4.10)$$



**Fig. 4 : Différents types de Nanomesh que l'on peut obtenir en fonctions des chiralités choisies sur les bords des Super-Cellules**

Notons cependant que le modèle simple (4.8) affirme que seul un NanoMesh sur neuf est semiconducteur et que tous les autres sont semi-métalliques, ce qui est contraire à toutes les

observations expérimentales. Nous verrons un peu plus loin les raisons de ce désaccord. Entre temps, examinons à travers des schémas tirés du même article [Dvorak\_SciRep\_2013] les significations des résultats (4.9) et (4.10). On voit sur [fig. 4] qu'il existe – du moins théoriquement – pour une même forme d'antidot une multitude de forme de géométries de GNM se différenciant entre elle par la forme des bords des cellules élémentaires les constituant. On voit par exemple qu'il existe des GNM dont les deux bords sont zigzag [fig. 4a], armchair [fig. 4b], un bord armchair et l'autre zigzag [fig. 4e], ou de chiralité quelconque.

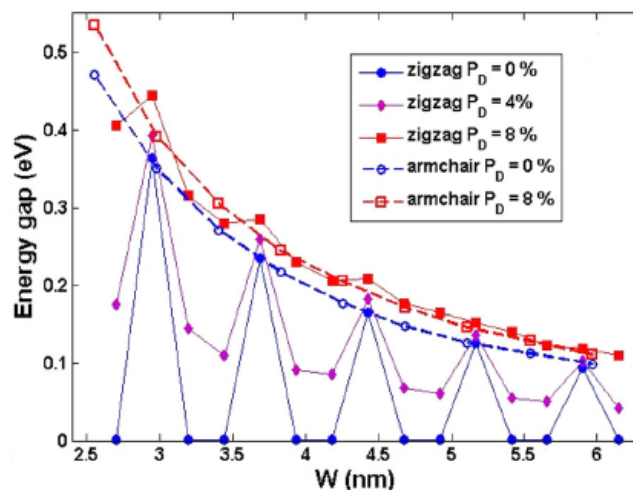


**Fig. 5: Conditions d'ouverture de la Bande Interdite. [Dvorak\_SciRep\_2013]**

On peut alors identifier une GNM par les deux NanoTubes de Carbone ou « Carbone Nanotube » en anglais (CNT) que l'on réussirait à former en enroulant le GNM suivant les deux directions de la super-cellule, directions appelées chiralités des CNT. On voit par exemple que les nanotubes [fig. 5a] qui correspondent au GNM [fig. 5g] engendrent dans l'espace réciproque deux familles de droites [fig. 5d] du type (4.9) dont les intersections ne coïncident pas avec les points de Dirac et ne devraient donc pas entraîner, comme le prédit le modèle simple présenté plus haut, l'ouverture d'une bande interdite. Cette prédiction est confirmée par les calculs DFT

[fig. 5j]. On voit par contre que pour le GNM [fig. 5h], semiconducteur d'après les calculs DFT le concernant, les familles de droites engendrées par les deux CNT [fig. 5b] qui lui correspondent se croisent bien aux points de Dirac [fig. 5h-droite].

Le modèle que nous avons présenté a l'avantage d'être simple, permet d'expliquer l'origine de l'ouverture BI dans les GNM et fourni une règle de sélection permettant de prédire si un GNM serait a priori semiconducteur ou pas. Cependant, il est important de noter les limites de ce modèle. Premièrement, le modèle s'appuie sur l'existence d'un défaut périodique unique dans la super-cellule pour déduire la règle de sélection. Or la super-cellule d'un GNM contient en général un ensemble de « défauts » agrégé en Anti-Dots. Ceci constitue en soi une limitation pour la règle de sélection car plusieurs études antérieures ont montré que la forme des trous joue un rôle très important dans la possibilité d'ouverture de la BI [Liu\_PRB\_2009] [Nguyen-VH\_JAP\_2013]. C'est pourquoi le modèle en question ne permet pas de déduire la largeur de la bande interdite d'énergie. Il serait généralement très compliqué de trouver une expression analytique pour le gap de tous les GNM, si toutefois il en existait une. Un autre point très important est qu'aucun GNM métallique n'a jamais été observé expérimentalement. Le travail de Nguyen et al. [Nguyen-VH\_JAP\_2013] apporte un élément de réponse intéressant. Bien que les GNM considérés dans ce travail ont les deux bords du même type, plus précisément soit tous les deux 'armchair' soit tous les deux zigzag, on voit sur [fig. 6] que l'introduction de défauts autour d'une densité de 8% a pour effet de rendre uniforme le comportement de la largeur de la BI indépendamment de la chiralité du GNM. Cette explication est cohérente avec les défauts observés sur les bords des antidots des réalisations expérimentales, présentés dans la deuxième partie, ainsi que l'imperfection des super-réseaux formés par les antidots.



**Fig. 6: Influence de la présence de défauts sur la valeur de la BI dans ces deux types de GNM. Repris de [Nguyen\_JAP\_2013]**

Insistons sur deux lois importantes concernant la largeur de la BI dans les GNM semiconducteurs, c'est-à-dire dès lors qu'on réussit à ouvrir un gap, et qui reviennent dans

pratiquement tous les articles théoriques traitant de la structure de bande des GNM [Pedersen\_PRL\_2008] [Liu\_PRB\_2009] [Ouyang\_ACSnano\_2011] [Zhang-A\_APL\_2011] [Shahin\_PRB\_2011] [Jippo\_PRB\_2011] [Oswald\_PRB\_2012] [Liu\_Small\_2013] [Nguyen-VH\_JAP\_2013] [Dvorak\_SciRep\_2013] et qui sont confirmées expérimentalement [Bai\_NatNanotech\_2010] [Liang\_NanoLett\_2010] :

a) Elle est inversement proportionnelle au neckwidth  $W$  :

$$\text{Erreur ! Des objets ne peuvent pas être créés à partir des codes de champs de mise en forme.} \quad (4.11)$$

b) Elle est proportionnelle au rapport du carré du nombre d'atomes enlevés  $N_{rem}$  de la super-cellule au nombre total d'atomes de carbone initialement présents dans celle-ci:

$$E_g \propto \frac{\sqrt{N_{rem}}}{N_{tot}} \quad (4.12)$$

### IV.3. Caractéristiques des transistors à canal en GNM (GNMFET) et modèle physique adopté

#### IV.3.1. Caractéristiques géométriques

Nous avons commencé à travailler sur ce sujet avant de disposer de règles de sélection susmentionnées. Nous avons donc calculé la structure de bande de GNM ayant différentes formes d'antidots et de super-cellules, et avons opté pour des GNM à Super-Cellule carrée avec des trous de forme circulaire. Des exemples de super-cellules des GNM en question, représentés par les atomes de carbone de couleur verte sont présentés [fig. 7]. La direction du transport, notée 'x' dans tout le reste de ce chapitre, est montrée sur [fig. 7a]. Nous appellerons dans la suite de ce travail Maille Élémentaire (ME) la tranche de graphène en bleu ciel de [fig. 7a] et dimère, le couple d'atomes de carbone de même ordonnée appartenant à la ME. Nous pouvons dire, par exemple, que le GNM de [fig. 7a] est un GNM de quatre ME et de douze dimères et celle de [fig. 7b] possède cinq ME et huit dimères. On peut remarquer que les GNM que nous avons considérés ont une chiralité  $R_1$  de type armchair suivant la direction de transport et de chiralité  $R_2$  du type zigzag dans la direction transverse.

Notons que pour ce type de GNM, le nombre de dimères doit impérativement être pair pour pouvoir reproduire la symétrie à l'infini dans la direction y. Pour faire varier le NW uniquement dans la direction transverse – et donc en gardant le nombre de mailles élémentaires constant – il fallait donc ajouter deux dimères à chaque fois. Nous avons remarqué également que seul un GNM sur trois était semiconducteur, ce qui est en accord avec les règles de sélections (4.10).

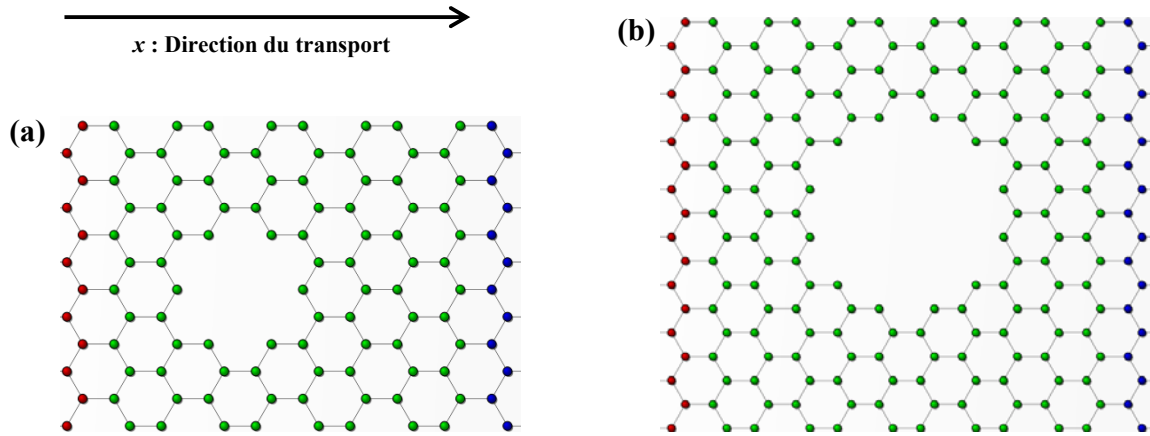


Fig. 7 : Exemples des GNM carrés étudiés dans ce travail. La super-cellule élémentaire est représentée en vert (a) GNM à  $E_G = 508$  meV du [tab. 1] (b) GNM à  $E_G = 553$  meV du [tab. 1]

### IV.3.2. Caractéristiques électroniques des GNM étudiées

Nous avons considéré durant ce travail trois GNM dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau [tab. 1]. Nous avons calculé la structure de bande dans le cadre du modèle des liaisons fortes dans l'espace réciproque [Nguyen-VH\_Nanotech\_2012]. Nous avons déjà montré au deuxième chapitre section II-5.2 comment transformer ce Hamiltonien quand ce dernier est invariant dans une direction. Le calcul de la structure de bande se ramène après transformation à chercher les valeurs propres du Hamiltonien pour chaque  $k_x$  et  $k_y$  de la zone de Brillouin.

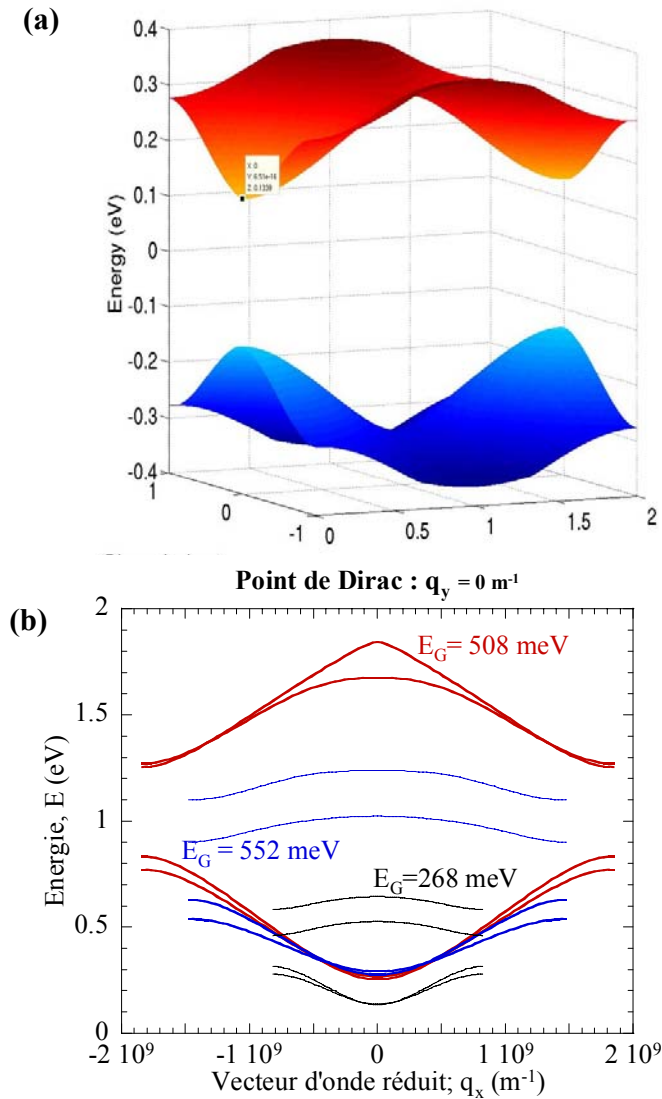
L'énergie sur chaque site est considérée comme étant nulle et les sites où les atomes de carbone qui ont été enlevés peuvent être modélisés de manière équivalente soit en considérant que l'énergie sur ces sites est positive et très grande, soit en considérant que le paramètre de saut entre ce type de sites et les autres est nul.

$N_{lay}$	$N_{dim}$	Atomes enlevés	AFF (%)	$W_x$ (nm)	$W_y$ (nm)	$E_G$ (meV)	$m^*$ ( $m_0$ )
4	12	6	6,25	1	1,1	508	0,064
5	18	24	13,3	1,1	1,2	553	0,113
9	30	45	10	2,3	1,3	268	0,074

Tab. 1 : Propriétés des trois GNM considérés. Signification des abréviations,  $N_{lay}$  : nombre de mailles élémentaires,  $N_{dim}$  : nombre de dimères,  $W_x$  : NW dans la direction du transport,  $W_y$  : NW dans la direction transverse au transport,  $E_G$  : largeur de la BI,  $m^*$  : masse effective calculée en bas de la bande de conduction.  $m_0$  est la masse de l'électron au repos.

On obtient donc, autant de valeurs propres que d'atomes initialement présents dans la super-cellule, et donc autant de sous-bandes. Cependant, beaucoup des valeurs propres sont dégénérées

et le nombre de sous-bandes est souvent très limité dans la gamme d'énergie intéressante pour le transport. Comme nous avons choisi de considérer nulles les énergies par site, le point de neutralité se trouve en  $E = 0$  eV, et les sous-bandes au-dessus de cette valeur sont des sous-bandes de la bande de conduction et celles au-dessous appartiennent à la bande de valence.



**Fig. 8 :** (a) Relation de dispersion de la première sous-bande de la bande de conduction de la GNM ayant une BI de 268 meV (b) Tracé des quatre premières sous-bandes dans la bande de conduction, au point de Dirac ( $q_y = 0$ ), des différents GNM étudiées en fonction du vecteur d'onde longitudinal réduit.

On peut voir un exemple de la première sous-bande de la BC et de la première sous-bande BV des différents GNM étudiés [fig. 8a]. On peut constater sur cette figure la symétrie électron-trou car le Hamiltonien obéit toujours à la symétrie par renversement du temps. Cependant, les structures de bandes ne sont pas isotropes dans les deux directions du plan à cause de la forme

des trous et de la différence des NW dans les deux directions. Nous nous sommes donc surtout intéressés à l'étude de la structure de bande en fonction du vecteur d'onde dans la direction 'x' du transport au point de Dirac (1.3-4). Les quatre premières sous-bandes de la bande de conduction sont présentées [fig. 8b], celles de la bande de valence étant symétrique par rapport au plan  $E = 0$  eV. Nous avons également évalué la masse effective au bas de la première sous-bande et les résultats obtenus sont présentés sur le [tab. 1]. On peut voir que malgré l'introduction des antidots, les masses effectives restent faibles et comparables à celles des semiconducteurs III-V.

### ***IV.3.3. Modèle du GNM-FET***

Le schéma du GNM-FET que nous proposons est présenté [fig. 9]. On suppose qu'un feuillet de graphène est reporté sur un substrat h-BN. On suppose que le GNM est réalisé dans la partie centrale du feuillet, de 30 nm de longueur, et qui formera le canal du transistor. Cette partie centrale est ensuite recouverte d'une couche mince de h-BN de 2 nm d'épaisseur qui sera ensuite contactée électriquement pour former la grille du transistor. On suppose que les contacts de la source et du drain sont déposés à 15 nm de part et d'autre des extrémités de la grille. La source et le drain sont donc en Graphène Pristine (PG) et sont supposés être dopés électriquement par une grille arrière (non représenté ici) à hauteur de  $10^{13}$  cm<sup>-2</sup>.

Le modèle physique est très similaire à celui présenté au deuxième paragraphe du troisième chapitre, à la différence près qu'il faut tenir compte de la présence des antidots sur le mono-feuillet de graphène. Pour ce faire, nous avons annulé dans notre modèle le paramètre de saut (ou de 'hopping' en anglais) entre les sites vacants et le reste du réseau. La méthode de résolution des équations couplées de poisson et NEGF reste la même que celle décrite dans l'annexe A.

Il est important de noter que dans la géométrie du transistor que nous proposons, le GNM n'est utilisé que dans le canal, alors que les accès de source et de drain, de 15 nm chacun, sont en pristine graphène. Comme le montre le [tab. 1], l'utilisation du GNM confère aux porteurs une masse effective non-nulle, ce qui a pour effet de dégrader le transport par rapport au PG. Donc cette géométrie de dispositif a pour avantage de limiter la dégradation du transport uniquement au canal, là où on cherche à supprimer l'effet Tunnel Chiral (CT).



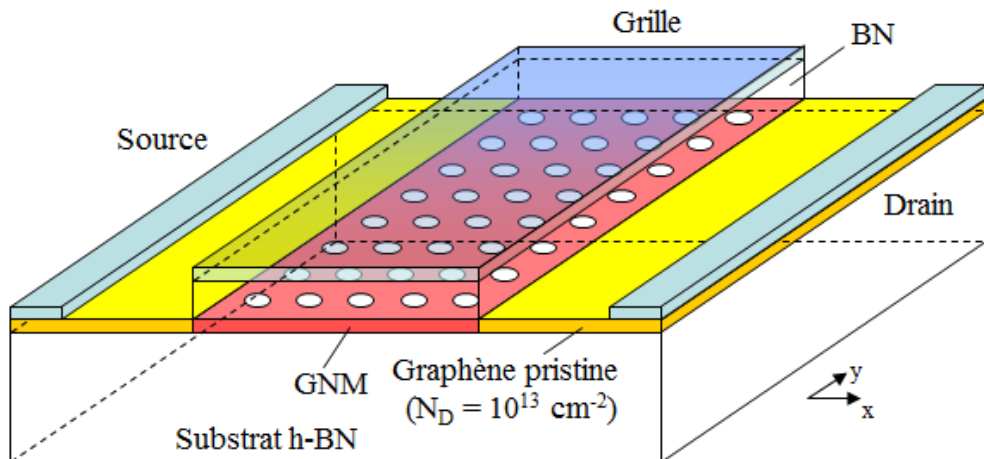
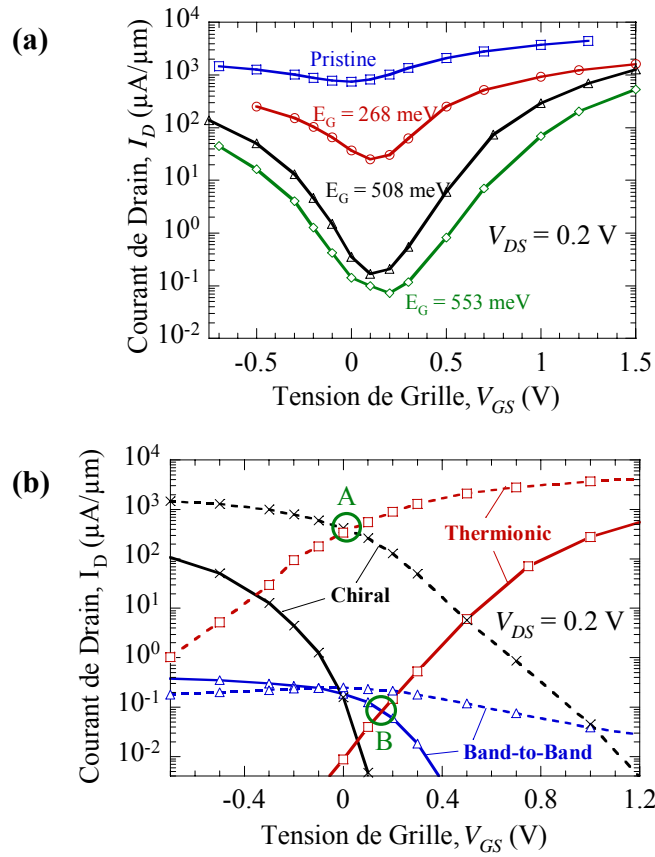


Fig. 9: (a) Vision schématique du GNM-FET

## IV.4. Caractéristiques courant-tension des GNM-FET

### IV.4.1. Amélioration du rapport On/off par rapport aux GFET

Les caractéristiques de transfert des trois GNM considérées durant ce travail, et que nous avons obtenu grâce à notre code auto-cohérent, sont présentées ici [fig. 10a]. Le premier constat est que l'introduction du GNM dans le canal du transistor améliore très nettement le rapport On/Off par rapport au GFET conventionnel. Cette amélioration peut atteindre trois ordres de grandeurs pour les GNM ayant une BI de plus de 500 meV [tab. 2]. Il est important de noter que nous utilisons la même définition du ROO que dans la chapitre précédent, c'est-à-dire que le  $I_{On}$  est calculé à  $V_{GS} = 1,5$  V et non à  $V_{GS} = V_{DS}$ . Le  $I_{Off}$  n'est rien d'autre que le courant au point de Dirac du transistor. Cette amélioration est comprise dès lors qu'on compare les différentes contributions au courant d'une part dans le Pristine Graphène (PG), tirets de [fig. 10b], et d'autre part dans le GNM à  $E_G=508$  meV par exemple, traits continus [fig. 10b]. On remarque sur les deux courbes que le courant dû à l'effet tunnel bande à bande (BTBT) est du même ordre de grandeur dans les deux dispositifs pour la tension de drain en question. On constate également que la composante du Courant Thermoïonique (TC) est plus faible dans le GNM-FET que dans le GFET. Ceci est fort probablement attribué à la dégradation du transport dans le canal suite à l'introduction du GNM dans cette région. Ceci explique le courant  $I_{On}$  sensiblement plus faible dans le GNM-FET par rapport au GFET. Cependant, on remarque que la composante due à l'effet Tunnel Chiral (CT) est très fortement atténuée dans le GNM-FET. Ceci entraîne un courant  $I_{Off}$  très inférieur à celui qu'on observe dans le GFET et explique cette très grande amélioration du ROO.



**Fig. 10 :** (a) Caractéristiques I- $V_{GS}$  à  $V_{DS} = 0,2$  V des GNM étudiées et comparaison avec la même caractéristique d'un GFET de même taille ayant les mêmes dopages aux accès. (b) Analyse des différentes contributions au courant, à la même tension source-drain  $V_{DS} = 0,2$  V, dans le même GFET et le GNM ayant une largeur de BI de 508 meV.

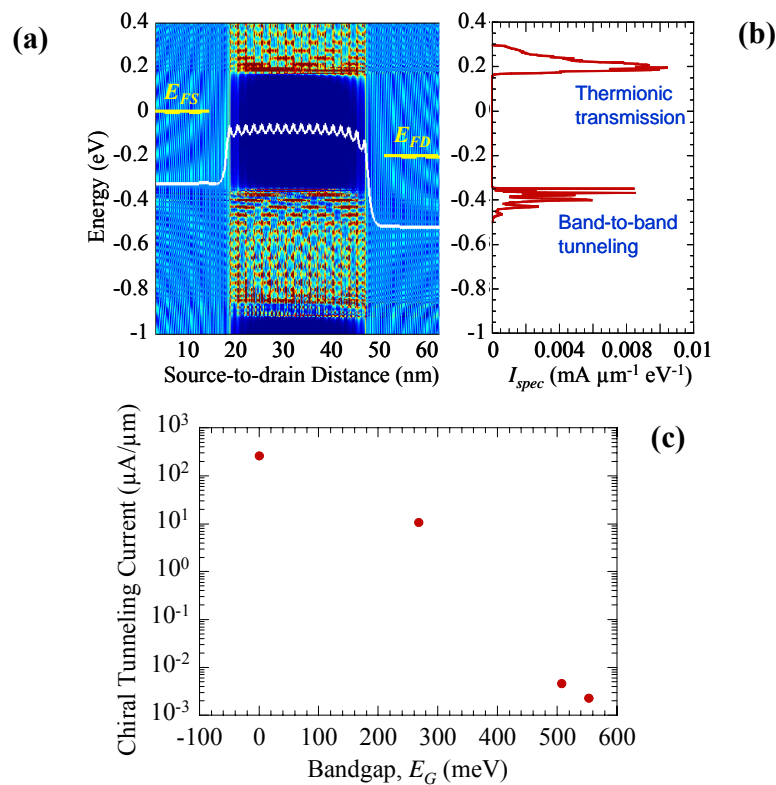
$E_G$ (meV)	$m^*$ ( $m_0$ )	Rapport On/Off	AFF (%)	$W_x$ (nm)	$W_y$ (nm)
508	0,064	7450	6,25	1	1,1
553	0,113	7400	13,3	1,1	1,2
268	0,074	65	10	2,3	1,3
0	0	6			

**Tab. 2 :** Résumé des rapports On/Off des différents GNM considérés dans ce travail à  $V_{DS} = 0.2$  V et comparaison avec le GFET.

#### IV.4.2. Suppression du courant dû à l'effet tunnel Chiral dans les GNMFET

En partant du  $I_{On}$  des deux dispositifs ( $V_{GS} = 1,5$  V), on peut voir qu'en diminuant la tension de grille, on diminue la composante TC dans les deux dispositifs mais que la composante CT

commence à prendre des valeurs significatives à des tensions bien plus grandes dans le GFET. Le point de Dirac dans le GFET est donc déterminé par un équilibre entre les composantes CT et TC du courant qui ont des valeurs significatives en ce point. Cependant, la présence de la BI dans le canal du GNMFET rend nécessaire l'application d'une tension beaucoup plus négative pour avoir une barrière suffisamment haute, qui permettra le passage de porteur sous celle-ci. Donc en diminuant la tension de grille à partir de  $I_{On}$ , on diminue les composantes TC dans les deux dispositifs qui deviennent très faibles autour des points de Dirac respectifs, mais alors qu'on arrive à créer une composante CT dans le GFET pour des tensions assez élevées, et qui va s'ajouter à la composante TC pour augmenter le  $I_{Off}$ , la présence de la BI dans le GNMFET ne rend possible l'apparition d'un courant CT que pour des tension de grille très faibles, là où le TC a presque complètement disparu. Le  $I_{Off}$ , ou point de Dirac, dans le GNMFET est donc déterminé par des valeurs « résiduelles » du courant BTBT et du courant TC.



**Fig. 11 : (a) LDOS de la GNM ayant une BI de 508 meV à  $V_{GS} = 0,1$  V et  $V_{DS} = 0,2$  V (b) Spectre de courant correspondant à (a). (c) Mise en évidence de l'atténuation du Courant par effet Tunnel Chiral en fonction de l'augmentation de la largeur de bande interdite.**

Plaçons nous au point de Dirac du GNMFET en question et analysons, pour un  $y$  donné, la LDOS au point de Dirac du graphène ( $k_y = 0$ ) en fonction de l'énergie et de la position  $x$  le long du canal [fig. 11a]. La BI est représentée par les régions en bleu à très faible densité d'états et le potentiel auto-cohérent est représenté par la courbe blanche. Les oscillations sur cette dernière sont dues à la présence des antidots. On constate alors qu'au DP du GNMFET, la BI se trouve au milieu de la fenêtre de Fermi, entraînant ainsi de faibles valeurs pour le TC et le BTBT, et

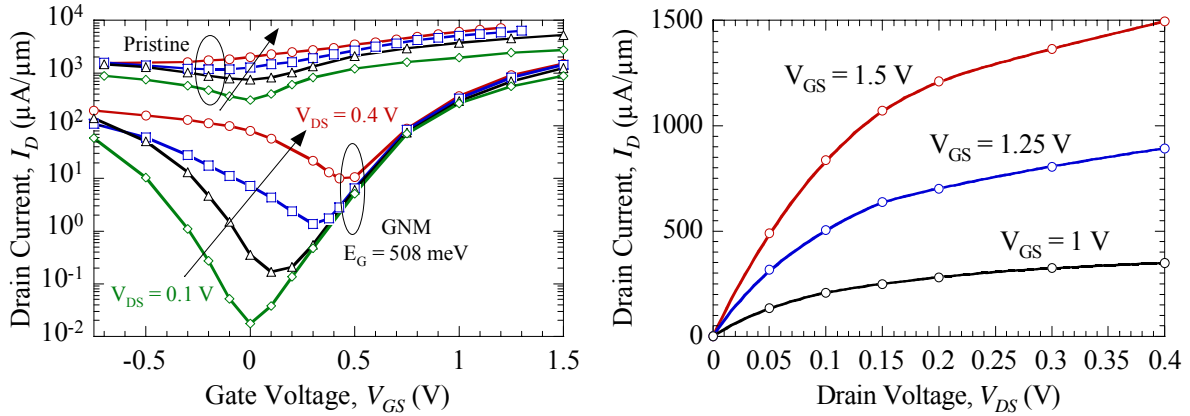
supprimant complètement le courant dû à l'effet tunnel chiral comme on peut le voir sur le spectre de courant [fig. 11b]. On voit que cet effet d'atténuation du courant CT existe dans tous les GNMFET étudiés et que plus large est la BI ouverte dans le GNM plus cette atténuation est importante [fig. 11c].

#### ***IV.4.3. Décalage du point de Dirac vers les tensions de grilles positives et saturation du courant***

Nous allons à présent comparer les caractéristiques de transfert du GFET avec celles du GNMFET pour  $V_{DS}$  allant de 0,1 à 0,4 V [fig. 12a]. On a montré précédemment qu'il existe un effet de pseudo-saturation, voir de résistance négative, dans la branche 'p' des GFET pour certaines plages de  $V_{DS}$  [Alarcon\_TED\_2013] [Grassi\_TED\_2013]. On observe sur [fig. 12a] un comportement similaire du GNMFET pour des valeurs très négatives de  $V_{GS}$ , ce qui constitue la seule similitude entre les caractéristiques  $I-V_{GS}$  du GNMFET et celles du GFET.

Passons maintenant aux différences entre ces caractéristiques. La première différence concerne le « déplacement » du point de Dirac quand on change  $V_{DS}$ . Comme nous l'avons expliqué plus haut, le courant du GNMFET est influencé fortement par le courant BTBT (et CT aussi) Pour des valeurs modérées de  $V_{GS}$  autour du point de Dirac du GNMFET. Comme le courant BTBT a tendance à augmenter quand on augmente  $V_{DS}$ , le point de Dirac est par conséquent décalé vers les valeurs positives de  $V_{GS}$  quand on augmente  $V_{DS}$ . Pour le GFET, le point de Dirac a tendance à être décalé vers les tensions de grilles négatives. En effet, la contribution du BTBT dans le GFET est négligeable – aux  $V_{DS}$  considérés – devant les contributions CT et TC. Or l'augmentation de  $V_{DS}$  entraîne une augmentation plus forte du CT comparée à l'augmentation du TC. Ceci s'explique par le fait que le CT est plus « sensible » à une variation des valeurs de  $(f_{Source}-f_{Drain})$ . En effet, le CT se passe à des énergies bien proches du niveau de fermi de la source alors que les énergies où se passe le TC en sont plus éloignées. Il vient que l'abaissement d'occupation des états où se passe le CT est bien plus importante que la baisse d'occupation des états où se passe le TC quand on augmente  $V_{DS}$ . Ceci se traduit par une plus forte augmentation du CT comparée à l'augmentation du TC, ce qui entraîne un décalage du point de Dirac vers les tensions de grille négatives [fig. 10b].

La deuxième grande différence entre le comportement des deux transistors est constatée en analysant la branche 'n' des deux transistors. Alors que l'augmentation de la tension de drain dans la branche 'n' du GFET entraîne une augmentation de courant à cause du DIBL [fig. III-16a], le courant devient faiblement dépendant de  $V_{DS}$  pour le GNMFET sur une large plage de  $V_{GS}$  positif, et on observe par conséquent une vraie saturation dans la branche 'n' du GNMFET [fig. 12b]. Cette très bonne saturation est le résultat, comme on le verra dans la section IV.6, de la suppression du DIBL dans le GNMFET dans la branche 'n' [fig. 14a], et qui est liée à la présence de la bande interdite induite par le GNM dans le canal [fig. 11a].



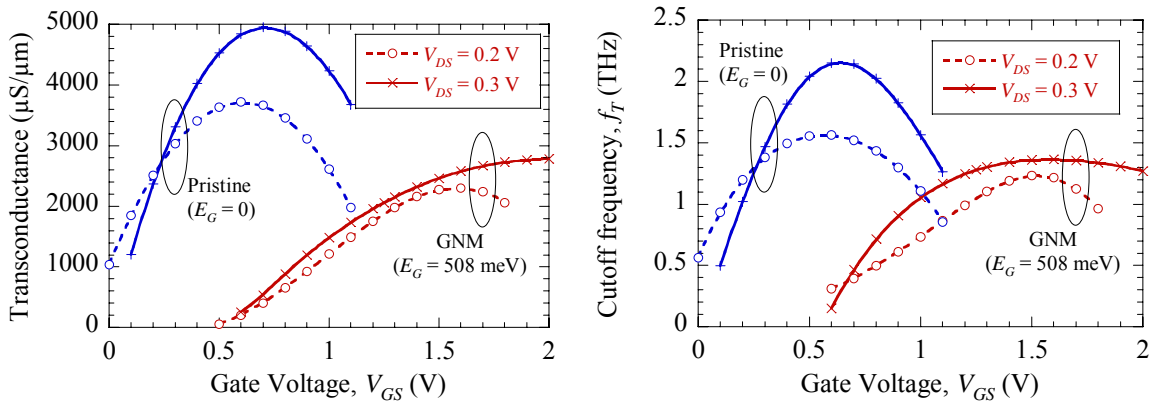
**Fig. 12:** Caractéristiques  $I_D$ - $V_{GS}$  du GNM ayant une BI de 508 meV pour  $V_{DS}$  allant de 0,1 V à  $V_{DS} = 0,4$  V et d'un GFET de mêmes dimensions pour les mêmes tensions (b) Caractéristiques  $I_D$ - $V_{GS}$  pour différents  $V_{GS}$

Il est important de noter que c'est un très bon comportement pour un transistor « à base de graphène » de moins de 50 nm de long. On a déjà observé de la saturation de courant dans un transistor à base de graphène [Szafranek\_NanoLett\_2013], mais le canal de ce dernier fait quatre microns de long et est constitué d'une bicouche de graphène où l'on a ouvert un gap par application d'un champ électrique perpendiculaire.

## IV.5. Performances fréquentielles de GNMFET

### IV.5.1. Dégradation de la transconductance et fréquence de coupure

Nous avons cherché ensuite à déterminer transconductance et fréquence de coupure des deux types de transistors, dans la branche 'n', pour  $V_{DS} = 0,2$  et  $V_{DS} = 0,3$  V. La fréquence de coupure est évaluée dans le cadre de l'approximation quasi-statique grâce à la formule (3.1). On remarque que les maxima de  $g_m$  et  $f_T$  sont plus élevés dans le GFET. Cependant, la dégradation que subissent ces deux grandeurs dans le GNMFET reste acceptable. En effet, la valeur maximale de  $g_m$  et  $f_T$  valent respectivement 2305  $\mu\text{S}/\mu\text{m}$  et 1,23 THz à  $V_{DS} = 0,2$  V, soit 62% et 79% des valeurs calculées pour le GFET. Ces rapports valent encore 56% et 63% à  $V_{DS} = 0,3$  V.



**Fig. 13:** (a) Transconductance (b) et fréquence de coupure pour le GFET et le GNMFET à  $E_G = 508$  meV

### IV.5.2. Amélioration du gain en tension et de la fréquence maximale d'oscillation

Nous avons ensuite cherché à comparer les gains en tensions ainsi que les fréquences maximales d'oscillation, toujours dans le cadre de l'approximation quasi-statique. Le gain en tension n'est rien que  $g_m/g_d$ , où  $g_d$  est la conductance de sortie (3.3). Le gain en tension que nous avons calculé à  $V_{DS} = 0,3$  V pour  $V_{GS} = 1$  V vaut 0,32 pour le GFET alors qu'il monte à 4,5 pour le GNMFET au même point de polarisation, ce qui constitue une bonne performance pour un transistor aussi petit. L'expression de la fréquence maximale d'oscillation  $f_{Max}$  est donnée par :

$$f_{max} \approx f_T / \sqrt{\alpha + \beta f_T} \quad (4.13)$$

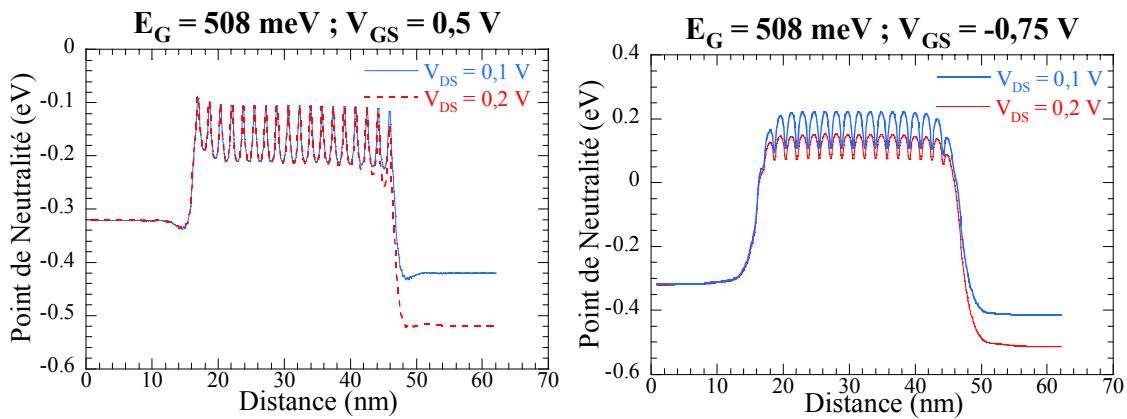
Où  $\alpha = 4g_D(R_S + R_G)$ ,  $\beta = 8\pi C_{GD}R_G$  et  $C_{GD}$  est la capacité grille-drain. Comme notre modèle ne fournit pas les résistances des contacts de source et drain  $R_S$  et  $R_D$ , nous avons considéré des valeurs expérimentales disponibles dans la littérature. Nous avons pris une résistance de grille de 20  $\Omega$  [Xia\_NatNano\_2011] – réalisable pour des transistors de 20 microns de large – et une résistance de contact de 100  $\Omega$   $\mu\text{m}$  [Farmer\_APL\_2012]. Nous avons obtenu pour le GNMFET  $g_D = 336 \mu\text{S}/\mu\text{m}$  et  $C_{GD} = 0.152 \text{ fF}/\mu\text{m}$  à  $V_{GS} = 1\text{V}$  et  $V_{DS} = 0.3$  V, là où  $f_T = 1.365$  THz. On voit alors que  $\alpha = 0.672$  et  $\beta = 0.382 \text{ THz}^{-1}$ , impliquant que  $\beta f_T = 0.521$  et le dénominateur de (4.13) qui fait office de correction à la fréquence de coupure vaut 1,193. La situation est très différente dans le cas du GFET. La très grande conductance de sortie, qui vaut  $g_D = 13360 \mu\text{S}/\mu\text{m}$ , fait que le facteur dominant dans (4.13) est  $\alpha$  (qui vaut 26,7). La fréquence d'oscillation du GFET s'effondre de 2,16 THz (fréquence de coupure) pour atteindre 0,41 THz, ce qui est très en dessous du  $f_{Max}$  GNMFET qui vaut 1,25. C'est un résultat important qui montre que l'introduction du GNM dans le canal n'améliore pas seulement le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  des GFET, mais améliore aussi très considérablement les performances fréquentielles de ces derniers. Voici un tableau qui résume l'ensemble de ces performances fréquentielles.

Dispositif	$g_m$ ( $\mu\text{S}/\mu\text{m}$ )	$f_T$ (THz)	$A_v$	$g_d$ ( $\mu\text{S}/\mu\text{m}$ )	$f_T$ (THz)	$f_{Max}$ (THz)
GNMFET	2305	1,23	4,5	336	1,365	1,25
GFET	3717	1,55	0,32	13360	2,16	0,41
$V_{DS}$ (V)	0,2			0,3		

Tab. 3: Tableau comparant le gain en tension et les performances fréquentielles entre le GNMFET et le GFET

## IV.6. Stabilité de la barrière de potentiel dans la branche thermoïnique et saturation du courant

Nous avons vu que le GNMFET où la BI est de  $E_G = 508$  meV possède, contrairement au GFET, une très bonne saturation dans la branche ‘n’ [fig. 12b]. Cette bonne saturation lui permet d’atteindre de très grandes fréquences maximales d’oscillation qui sont supérieures à 1 THz [tab. 3]. Ceci s’explique par la très bonne stabilité de la barrière de potentiel dans la branche ‘n’ [fig. 14a], contrairement à ce que l’on observe dans la même branche pour un GFET conventionnel [fig III-16a]. En effet, une barrière qui reste stable quand on augmente  $V_{DS}$ , limite considérablement l’augmentation du courant liée à l’augmentation de la tension source-drain, et conduit donc à une bonne saturation.



**Fig. 14:** (a) Profils de potentiel à  $V_{GS} = 0,5$  V, dans le GNMFET où règne une bande interdite de 508 meV dans le canal, pour les tensions de drain  $V_{DS} = 0,1$  V et  $V_{DS} = 0,2$  V. (b) Profils de potentiel à  $V_{GS} = -0,75$  V dans le même GNMFET et pour les mêmes tensions source-drain. Pour tous les dispositifs simulés, le niveau de Fermi de la source est pris comme référence en énergie ( $E_{FS} = 0$  eV) et le niveau de Fermi de drain est donné par  $E_{FD} = E_{FS} - eV_{DS}$ .

Le modèle que nous avons introduit dans la section III.4 pour expliquer la présence d’un fort DIBL dans les GFET permet également d’expliquer son absence dans la branche ‘n’ d’un GNMFET à large bande interdite. Nous allons utiliser notre modèle pour dresser une vision schématique de l’électrostatique dans la branche ‘n’ du GNMFET [fig. 15], possédant une BI de  $E_G = 508$  meV, à partir de ses profils de potentiels auto-cohérents calculés par notre code sous des tensions  $V_{GS} = 0,5$  V et  $V_{DS} = 0,1$  V [fig 14a]. Comme le point de neutralité est situé au milieu de la BI [fig 11a] qui vaut 508 meV, et que les niveaux de Fermi côté source et drain sont situés respectivement à 0 eV et -0,1 eV, on peut voir qu’à cette polarisation, la bande interdite recouvre entièrement non seulement toute la région entre  $E_{FD}$  et  $E_{FS}$  [fig 14a] (la plus susceptible d’être occupée par des charges) mais également entièrement les fenêtres énergétiques dédiées au CT et au BTBT. Ce recouvrement entier de la fenêtre énergétique dédiée au CT et au BTBT perdure même à  $V_{DS} = 0,2$  V comme le montre [fig. 10b] (courant CT et BTBT nuls à  $V_{GS} = 0,5$  V). On peut déduire de la nullité du courant BTBT à  $V_{DS} = 0,2$  V, qu’à  $V_{DS} = 0,1$  V et  $V_{DS} = 0,2$  V, aucune charge émise depuis le drain ne traverse l’interface drain-canal pour aller dans le canal

(à cause de l'absence d'états dans la région énergétique ou ça pourrait se faire). On en déduit que  $\rho_D^C = 0$ . En se rappelant que  $E_G$  vaut 508 meV, on voit d'après la position du point de neutralité [fig. 14a] qu'à cette tension de grille, la BI va dépasser légèrement  $E_{FS}$ . Le transport de charges pour  $V_{GS} = 0,5$  V, à ces deux tensions de drain, se fait alors uniquement via l'injection de porteurs depuis la 'queue' de la distribution de Fermi côté source ce qui résulte en un faible courant thermoïnique et donc une faible densité d'électrons  $\rho_S^C$  dans le canal. La [fig. 15], dans les notations de la section III.4, résume tout ce qu'on vient de dire. On voit d'après cette figure et en se basant sur la discussion de la section III.4, que le terme  $\rho_D^C$ , qui était responsable du DIBL dans le GFET, est maintenant nul et que le changement de  $V_{DS}$  ne l'affecte en rien (la variation de  $E_{FD}$  qui s'ensuit n'affecte pas  $\rho_D^C$  qui est de toute façon nul) et la barrière n'a pas 'besoin' de changer quand augmente  $V_{DS}$ . Ceci explique l'absence de DIBL dans le GNMFET. On pourrait penser, d'après la discussion de la section III.4, que la barrière pourrait monter à cause de la diminution de la charge  $\rho_S^C$ , mais ce n'est pas le cas pour une simple raison : la charge dans le canal est trop faible devant le dopage des accès ce qui garantit un grand « stock » de charge disponibles à l'interface source-canal. De plus, les électrons fournis depuis le contact de gauche traversent la source (en graphène pristine) à très grande vitesse (Fermions de Dirac sans masse effective ayant une vitesse  $v_F$ ) comparée à la vitesse des électrons dans le GNM qui eux ont une masse effective. Même si l'augmentation de  $V_{DS}$  facilite l'évacuation des électrons du GNM vers le drain, ceux-ci sont quasiment immédiatement remplacés depuis l'interface source-canal.

**Erreur ! Des objets ne peuvent pas être créés à partir des codes de champs de mise en forme.**

**Fig. 15: Modèle proposé pour expliquer l'absence de DIBL dans le GNMFET de  $E_G = 508$  meV (représenté par le rectangle hachuré) à  $V_{GS} = 0,5$  V et  $V_{DS} = 0,1$  V. Nous avons utilisé les mêmes notations que dans la figure 17 du chapitre 3, à deux différences près : la structure de bande est parabolique dans le canal et nous avons explicité l'effet de la température sur le remplissage des bandes.**

Cette propriété de très bonne saturation perdure même à fort  $V_{GS}$  [fig. 12b] grâce à la difficulté de charger le GNM (et donc de faire descendre la BI) liée à la présence d'antidots (surface non 'chargeable') et à la faible densité d'états dans le GNM. Ainsi, le scénario que nous venons de décrire [fig. 15] reste valable même pour de hauts  $V_{GS}$ .

On voit cependant sur la figure 14b, que le DIBL persiste dans la branche 'p' à  $V_{GS} = -0,75$  V, de manière similaire au GFET. Notre modèle permet de l'expliquer exactement de la même manière que l'on a expliqué le DIBL dans la branche 'p' du GFET, moyennant l'intégration dans le modèle de la BI dans le canal et des bandes paraboliques qui en résultent.

On voit donc que la modification de  $E_{FS}$  par  $V_{DS}$  réduit le nombre d'états résonnants occupés à travers lesquels s'effectue le tunnel de Klein depuis le drain vers le canal [fig. 16]. Ceci aura pour conséquent de diminuer  $\rho_D^C$  par rapport à la tension de drain d'avant l'augmentation. On a expliqué dans la section III.4 pourquoi cela n'est pas possible. Le potentiel  $U_D$  doit donc



s'abaisser pour rétablir la valeur antérieure de  $\rho_D^C$ , ce qui entraîne un abaissement de la barrière globale  $U$ . C'est ce qui explique le DIBL qu'on observe dans la figure 14b.

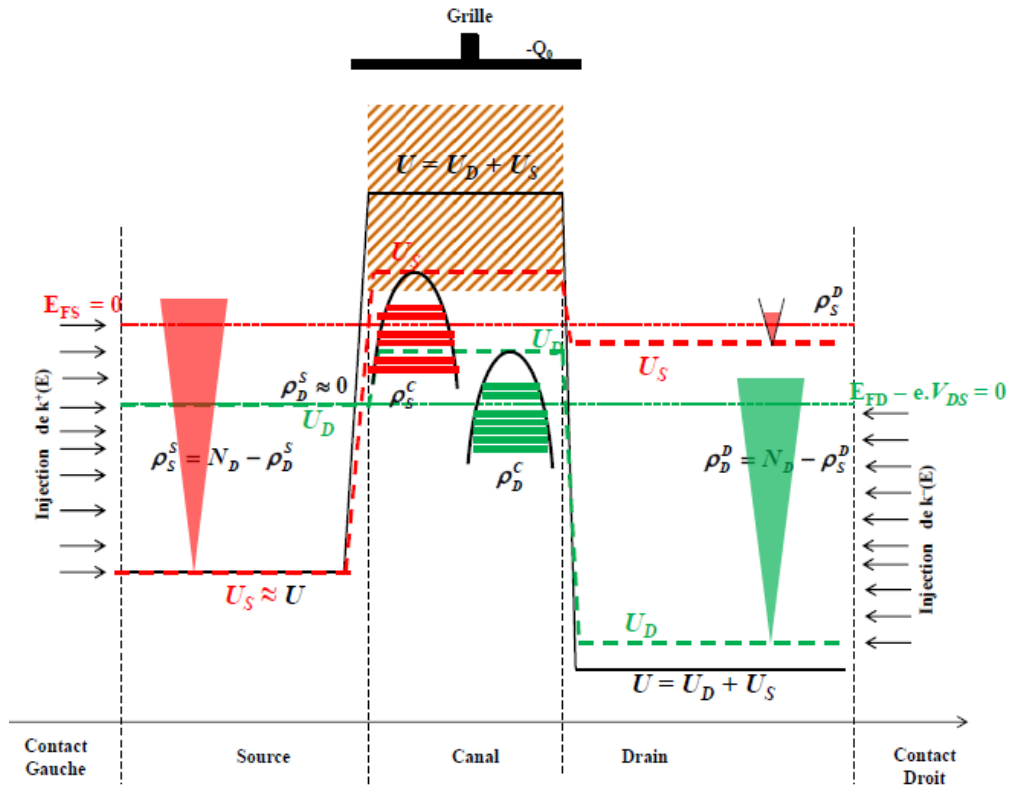


Fig. 16: Modèle proposé pour expliquer le DIBL dans le GNM-FET de  $E_G = 508$  meV (représenté par le rectangle hachuré) à  $V_{GS} = -0,75$  V et  $V_{DS} = 0,1$  V. Nous avons utilisé les mêmes notations que dans la [fig. III-17], à deux différences près : la structure de bande est parabolique dans le canal et nous avons explicité l'effet de la température sur le remplissage des bandes. Les états résonnants du tunnel de Klein dans la partie le GNM sont représentés par les traits sous les bandes paraboliques

## IV.6. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un nouveau concept de transistors à base de graphène, où l'on réalise un super-réseau périodique d'antidots dans la partie de la feuille de graphène qui va constituer le canal du transistor. Ces transistors sont appelés GNM-FET pour Graphene NanoMesh Field Effect Transistor. Nous avons également vu qu'il existe désormais une multitude de manières de les fabriquer avec une séparation entre les antidots qui peut atteindre cinq nanomètres parfois. Nous avons vu que ces derniers ont permis d'améliorer les rapports  $I_{On}/I_{Off}$  par rapport au GFET conventionnels d'un ordre de grandeurs. Nous nous sommes appuyés sur des simulations auto-cohérentes NEGF-Poisson pour comprendre l'origine de ces bonnes performances des GNM-FET et tenter de les optimiser. Nous avons montré que l'introduction des antidots dégrade légèrement le courant thermoïonique, et par conséquent le courant  $I_{On}$ , mais que la BI que permet d'ouvrir cette structure sous la grille du transistor atténue

très fortement la composante du courant due à l'effet tunnel chiral. Ceci a pour effet d'obtenir des rapports On/Off se rapprochant de  $10^4$  (pour des GNM bien dimensionnés) et d'obtenir une bonne saturation dans la branche 'n' des caractéristiques de transferts. Nous avons aussi montré que la présence de cette BI sous la grille réduisait le DIBL dans la branche 'n', entraînant par la même occasion une bonne saturation dans cette région des caractéristiques, là où se trouve le maximum de transconductance. Ceci a une conséquence très importante. Malgré la dégradation de la transconductance et de la fréquence de coupure dans le GNMFET à cause de la présence des antidots, la saturation du courant permet d'obtenir des gains en tension et des fréquences d'oscillation maximales bien supérieures dans ce type de transistor et dépassant même le 1 THz. Des GNMFET bien dimensionnés pourraient donc fonctionner dans la gamme Terahertz, que ce soit dans le régime analogique ou numérique.

Si ces performances sont très bonnes comparées à celles qu'on obtient actuellement sur les GFET conventionnels, il n'en demeure pas moins que les antidots dégradent quelque peu les propriétés de Fermions de Dirac en leur conférant une masse effective. Nous allons présenter dans le chapitre suivant un moyen de moduler le courant dans le GFET sans altérer les propriétés des porteurs dans le graphène.



## Chapitre V

# Etude du transistor à effet tunnel de Klein (KTFET)

Nous avons vu au premier chapitre que les électrons se comportent dans le graphène comme des fermions de Dirac de vitesse  $v_F = 10^6 \text{ m s}^{-1}$ . Il en résulte que les électrons dans le graphène peuvent passer à travers une barrière de potentiel – comme celle qui existe dans les transistors à effet de champ – par effet tunnel chiral (CT, pour « Chiral Tunneling »). Si cet effet, prédit initialement en 1929 par Oscar Klein, a finalement pu être observé expérimentalement [Young-A\_NatPhys\_2009] dans le graphène, il constitue un sérieux frein pour l'utilisation du graphène comme canal des transistors à effet de champs (FET, pour « Field Effect Transistors ») conventionnels. En effet, nous avons vu au troisième chapitre que le courant dû au CT est responsable du mauvais Rapport On/Off (ROO) dans les GFET conventionnels. Pour améliorer le ROO dans les dispositifs à base de graphène, il est d'usage d'essayer d'ouvrir une Bande Interdite (BI) dans le graphène pour réduire le courant dû au CT au point de Dirac [Szafranek\_NanoLett\_2012] [Kato\_NatNano\_2012] [Bai\_NatNanoLett\_2010]. L'ouverture de la BI se fait au prix d'une masse effective devenant non-nulle, comme dans un semi-conducteur classique (tab. 1 du chap. IV) et donc d'une dégradation des propriétés de transport (mobilité) et de la très haute fréquence de transit des porteurs dans les transistors en graphène.

Cependant, nous avons vu au même premier chapitre que les Fermions de Dirac se comportent à l'interface d'une jonction 'np' comme des photons de vitesse  $v_F$  qui passent d'un milieu optique conventionnel (d'indice de réfraction positif) à un méta-matériau, c'est-à-dire un milieu d'indice de réfraction négatif [Allain\_EPJB\_2011]. Or, comme l'indice de réfraction de chaque côté de la jonction dépend du dopage de chacune des deux régions, et que les dopages en question peuvent être modulés par effet de champ [Novoselov\_Science\_2004], l'utilisation d'une grille prismatique doit permettre de contrôler les angles de réfraction dans la double jonction 'pnp' qu'elle crée et de moduler ainsi le courant électrique en régime d'effet tunnel chiral balistique.

Nous présenterons donc dans ce chapitre un concept de transistor en graphène à grille triangulaire, que nous appellerons KTFET pour « Klein Tunneling Field Effect Transistor », qui

sur une idée initiale de Bernard Plaçais [communication privée] se base sur l'effet de réfraction anormale des Fermions de Dirac pour moduler le courant. On verra que les courants qui traversent le KTFET et le GFET conventionnel – que nous appellerons simplement GFET – sont similaires dans la branche 'p' et dans partie de la branche 'n' où la densité d'électrons  $n$  sous la grille est inférieure à la densité des trous  $p$  présente côtés source et drain, mais que le courant devient radicalement différent dès que  $n$  devient supérieur à  $p$ . Nous utiliserons dans un premier temps un modèle géométrique qui permet d'expliquer simplement cette différence de comportement en termes de réflexion totale interne qui s'établit dans le prisme à effet tunnel de Klein (KTP, pour « Klein Tunneling Prism ») dans ce régime ( $n \gg p$ ). Ce modèle simple ne tient pas compte des phénomènes ondulatoires, tels que la diffraction aux interfaces des jonctions et les interférences du type Fabry-Pérot sous la grille [Wu\_NanoLett\_2012-2], ni de l'injection de porteurs depuis les contacts. Nous avons donc développé un modèle dans le cadre du Formalisme des fonctions de Green (NEGF) permettant de tenir compte de ces effets de cohérence et d'avoir par conséquent des résultats plus précis et se rapprochant plus de la réalité du fonctionnement du KTFET quand il est mis sous tension.

On verra que les deux modèles prédisent l'obtention, dans le régime  $p > n$  que nous appellerons par la suite régime de « Réflexion Totale Interne » (RTI), d'un courant 'Off' dont la valeur est plus faible dans le KTFET que la valeur habituelle du courant 'Off' ( $I_{\text{Off}}$ ) dans un GFET de surface de grille équivalente – appelée point de Dirac – et qu'on retrouve également dans le KTFET.

Ce résultat important montre que l'on peut tirer profit du CT pour atténuer les impacts négatifs de l'absence de gap dans le graphène et améliorer le rapport On/Off dans les transistors en graphène, sans dégrader la très haute mobilité intrinsèque des Fermions de Dirac du graphène et la très haute fréquence de transit qui en résulte.

Le premier paragraphe sera dédié à la présentation du KTFET ainsi que du principe de son fonctionnement expliqué à travers le modèle géométrique qui a été développé dans l'équipe de Bernard Plaçais du Laboratoire Pierre Aigrain. Le deuxième paragraphe sera dédié à la présentation du modèle NEGF que nous avons développé pour modéliser le KTFET. Le troisième et avant dernier paragraphe sera dédié à la présentation et aux commentaires des résultats obtenus par les deux modèles avant de conclure dans le quatrième paragraphe.

## **V.1. Principe de fonctionnement KTFET : modèle optique**

### ***V.1.1 Trajectoire d'un Fermion de Dirac dans le prisme à effet tunnel de Klein (KTP)***

Dans le premier chapitre, nous avons vu dans la section 2.1 du quatrième paragraphe que les Fermions de Dirac (FD) en provenance d'une région dopée 'n' avec un angle d'incidence  $\varphi_i$ , et cherchant à passer dans une région dopée 'p', subissent une réfraction anormale à l'interface

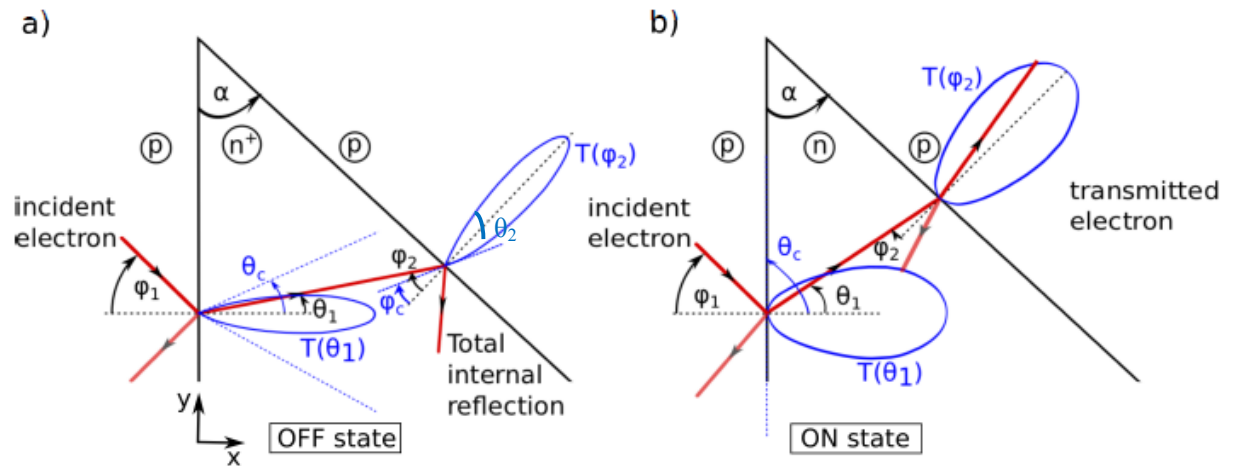
jonction 'pn', l'angle de réfraction  $\varphi_t$  étant lié à l'angle incident par une relation du type Snell-Descartes :

$$\text{Erreur ! Des objets ne peuvent pas être créés à partir des codes de champs de mise en forme.} \quad (5.1)$$

Où

$$v = \sqrt{\frac{n}{p}} \quad (5.2)$$

Les angles  $\varphi_i$  et  $\varphi_t$  étant définis par rapport à la normale de l'interface au point de franchissement du FD,  $p$  étant la densité de trous présents dans la zone dopée 'p' et  $n$  la densité d'électrons dans la zone dopée 'n'.



**Fig.1 : (a) KTP dans l'état bloqué ( $n \gg p$ ). (b) KTP dans l'état passant ( $n \approx p$ ). Sont représentés à chaque interface les lobes de la probabilité de transmission en fonction de l'angle de l'incidence du Fermion de Dirac, ainsi que les angles limites permis de réfraction à la première interface, et de transmission à la deuxième. Repris de [Wilmart\_2DMat\_2014]**

Considérons maintenant un mono-feuillet de graphène dopé p, sur lequel on a réalisé une grille triangulaire avec un angle  $\alpha$  au sommet. On appellera cette structure le prisme à effet tunnel de Klein (KTP, pour « Klein Tunneling Prism »). En appliquant une tension suffisamment positive sous la grille, on arrive à inverser le dopage sous la grille, créant ainsi deux jonctions 'p-n' et 'n-p' [fig 1a]. Un fermion de Dirac en provenance d'une zone dopée 'p' avec un angle d'incidence  $\varphi_1$  cherchant à passer dans la région dopée 'n' sera donc diffracté avec un angle  $\theta_1$  vérifiant la relation  $\sin \varphi_1 = -v \sin \theta_1$ . En faisant varier  $\varphi_1$  de  $-\pi/2$  à  $+\pi/2$ , on remarque que l'angle de réfraction  $\theta_1$  ne peut prendre que des valeurs comprises entre  $\pm\theta_c$  avec :

$$\theta_c = \arcsin(\nu^{-1}) \quad (5.3)$$

Le fermion qui aura traversé cette première jonction, arrivera sur la seconde avec un angle  $\varphi_2$ , relié au premier angle de réfraction  $\theta_1$  ainsi qu'à l'angle au sommet du triangle par la relation:

$$\varphi_2 = \alpha - \theta_1 \quad (5.4)$$

On peut voir, en faisant varier les valeurs possibles de l'angle de réfraction  $\theta_2$  (relié à  $\varphi_2$  par la relation  $\sin \varphi_2 = -\nu^{-1} \sin \theta_2$  [fig 1a]) à la deuxième interface de  $-\pi/2$  à  $+\pi/2$ , que le Fermion de Dirac ne franchira la deuxième interface que si la valeur absolue de son angle d'incidence  $\varphi_2$  sur cette dernière est inférieure à un angle de transmission limite  $\varphi_c$ , égal à  $\theta_c$  si les dopages côté sources et drain sont égaux à la même valeur  $p$ :

$$|\varphi_2| < \varphi_c = \theta_c \quad (5.5)$$

### ***V.1.2. Etats passant et bloqué du KTP : réflexion totale interne***

On peut voir d'après la formule (5.3) que plus  $n$  est supérieur à  $p$ , plus les angles limites de réfraction  $\theta_c$  et de transmission  $\varphi_c$  sont resserrés, et inversement. Les deux cas limites,  $n \gg p$  et  $n \approx p$ , sont représentés sur la figure 1. Sont également représentés sur ces figures les angles limites de réfraction à la première interface  $\theta_c$  et de transmission  $\varphi_c$  à la seconde interface ainsi que les lobes des probabilités de transmission correspondantes  $T(\theta_1)$  et  $T(\varphi_2)$ .

La figure 1a offre une vision schématique du cas  $n \gg p$ . On y voit que les deux angles  $\theta_c$  et  $\varphi_c$  sont très resserrés. Le premier FD qui aura été réfracté à travers la première interface, avec la probabilité  $T(\theta_1)$  d'avoir un vecteur d'onde d'angle  $\theta_1$  dans le prisme, pourrait subir une réflexion totale interne si  $\varphi_2 = \alpha - \theta_1$  ne tombe pas dans l'angle d'ouverture  $2\varphi_c = 2\theta_c$  pour des dopages égaux côté sources et drain. **On parle alors de Réflexion Totale Interne (RTI)**. Le FD rebrousse alors chemin vers la première interface où deux cas se présentent : soit le vecteur d'onde à cette interface tombe dans l'angle d'ouverture  $2\varphi_c$  et une partie de l'onde sera transmise vers la source avec une probabilité  $T(\varphi_2)$ , soit il subit une nouvelle réflexion totale interne.

La figure 1b offre une vision schématique du cas  $n \approx p$ , donc  $|\nu| \approx 1$ , qui est le cas limite de  $n \leq p$ . On peut voir que dans ce cas de figure ( $|\nu| \leq 1$ ) et d'après la formule (5.3) tous les angles de réfraction  $\theta_1$  et de transmission  $\varphi_2$  sont permis ( $\theta_c = \varphi_c = \arcsin(1) = \pi/2$ ), avec des probabilités de transmission différentes selon les angles mis en jeu, comme le montrent les lobes

de transmission. Il s'ensuit que le courant, qui est proportionnel à la probabilité de transmission intégrée sur tous les angles et les points d'incidence, est plus fort dans ce cas par rapport au cas  $n \gg p$ .

On voit donc que pour un dopage  $p$  fixé aux côtés source et drain, le courant peut être modulé dans ce dispositif en jouant sur deux paramètres :

- Le dopage de la zone 'n' sous la grille triangulaire pour changer la forme des lobes de transmission au interfaces
- L'angle  $\alpha$  au sommet de la grille triangulaire pour changer les conditions d'incidences des fermions de Dirac

### V.1.3. Géométrie du KTFET étudié

A la lumière de ce qui a été dit plus haut pour le prisme à effet tunnel de Klein, nous avons proposé une nouvelle géométrie de transistor, le transistor à effet tunnel de Klein (KTFET, pour « Klein Tunneling Field Effect Transistor ») [fig. 2]. Le canal de ce transistor est formé d'un mono-feuillet de graphène pristine (PG, pour « Pristine Graphène »). La grille de ce transistor est une grille en dent de scie qui peut être vue comme une multitude de KTP de largeur  $L$  et d'angle au sommet  $\pi - 2\alpha$  mis en parallèle. Cette géométrie possède un grand avantage. On souhaite avoir une grille large pour transporter beaucoup de courant dans l'état passant. Or dans ce cas, pour avoir une grille avec un angle au sommet assez resserré, il faudrait augmenter la longueur de la grille, au risque de perdre le transport balistique, et de réduire la fréquence de transit  $f_T$ . La géométrie de grille que nous proposons permet d'avoir une largeur suffisante pour transporter beaucoup de courant dans l'état passant tout en conservant la possibilité de réaliser des grilles aussi courtes que l'on veut avec des angles au sommet aussi resserrés que l'on veut, préservant ainsi le transport balistique sous la grille et offrant la possibilité d'avoir de très hauts  $f_T$ . Le dopage 'p' des accès peut être réalisé soit en choisissant des métaux ayant les bons travaux de sorties pour transférer des trous au graphène, soit en utilisant une grille arrière. La grille en dents de scie est chargée de moduler le dopage type 'n'.

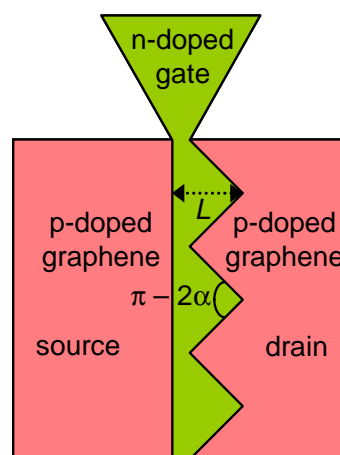


Fig.2 : Vision schématique du KTFET



### V.1.4. Modèle d'optique géométrique du KTFET

Le KTFET que nous avons présenté dans la section précédente peut être vu comme la répétition périodique dans la direction transverse  $y$  d'un motif élémentaire représenté dans la figure 3. Il est alors évident que la densité de courant est la même dans le KTFET que dans le motif élémentaire de la figure 3 et c'est pourquoi nous choisirons d'appeler cette dernière KTFET dans tout le reste de ce chapitre.

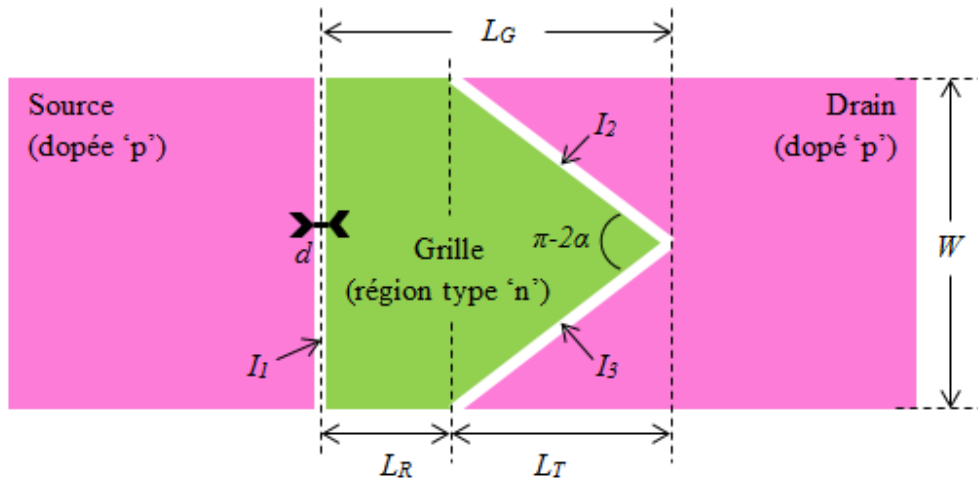


Fig.3 : Vision schématique de la brique élémentaire – dans la direction transverse au transport – du KTFET et qui servira au calcul de la densité de courant dans dernier.

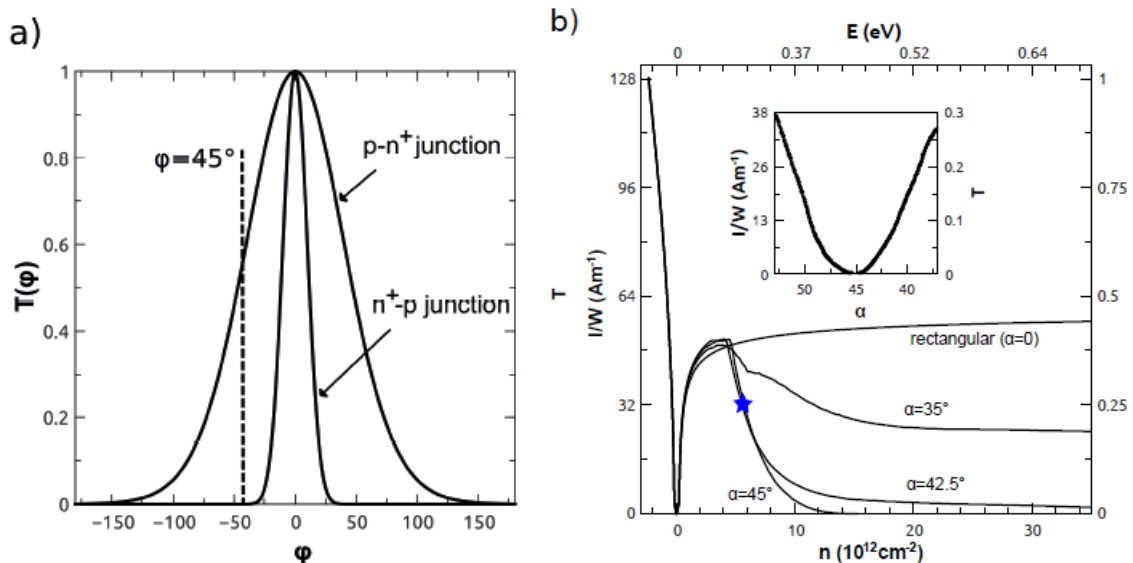
Le modèle optique a été développé dans l'équipe de Bernard Plaçais par David Torrin et Quentin Wilmart pour calculer la densité de courant délivré par le KTFET de la figure 3. Pour ce faire, la trajectoire des fermions de Dirac est calculée en tenant compte des réfractions et réflexions qui ont lieu aux interfaces  $I_1$ ,  $I_2$  et  $I_3$  des jonctions 'pn'. Après chaque réflexion sous la grille, l'intensité du faisceau dans le prisme dopé 'n' décroît alors que l'intensité dans la source ou le drain augmente en fonction de l'interface sur laquelle arrive le FD. C'est pourquoi le modèle s'arrête à la limite de vingt réflexions dans le prisme.

La probabilité de transmission totale  $T$  est la moyenne sur toutes les probabilités de transmission  $T(y, \varphi)$ , calculée en tout point d'incidence  $y$  sur la première interface  $I_1$  en prenant en compte tous les angles possibles ( $-\pi/2 < \varphi < \pi/2$ ). Le courant a été estimé par la formule de Landauer en tenant compte du nombre de modes disponibles pour ce FD dans un transistor de largeur  $W$  :

$$I = \frac{4e^2}{h} \frac{k_p W}{\pi} T V_{DS} \quad (5.6)$$

Où  $k_p$  est la norme du vecteur d'onde du fermion de Dirac au niveau de fermi dans la source. Il est important de noter que ce modèle optique peut traiter aussi bien des jonctions abruptes que graduelles sur une distance  $d$  [Cheianov\_Science\_2007][Cayssol\_PRB\_2009], représentée en

blanc au niveau des interfaces  $I_1$ ,  $I_2$  et  $I_3$  [fig. 3]. La transmission  $T(\varphi)$  en fonction de l'angle d'incidence  $\varphi$ , de deux jonction 'p-n<sup>+</sup>' et 'n<sup>+</sup>-p' prises séparément pour une forte asymétrie de dopage ( $n^+=6p$ ) et des jonctions graduelles avec  $d = 10$  nm, a été calculée [fig. 4a]. On peut voir que cette figure renseigne sur la transmission au premier ordre, c'est-à-dire sans tenir compte des réflexions multiples, à travers une double jonction p-n<sup>+</sup>-p, et donc d'un transistor GFET conventionnel possédant une grille rectangulaire. En effet, au premier ordre, la transmission serait juste le recouvrement des deux transmissions.



**Fig.4 : (a) Transmission de deux jonction 'p-n<sup>+</sup>' et 'n<sup>+</sup>-p' prises séparément pour une forte asymétrie de dopage ( $n^+=6p$ ) avec  $p = 2,3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . (b) Courant en fonction de la densité de charge présente sous la grille pour différents angles au sommet  $\alpha$ . Propriétés des transistors dans les notations de la fig. 3 :  $p = 2,3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ;  $W = 80$  nm ;  $L_R = 20$  nm ;  $d = 10$  nm.  $L_T$  est choisi en fonction de l'angle au sommet  $\alpha$  pour avoir des mêmes surfaces de grille.  $L_T = 40$  nm pour  $\alpha = 45^\circ$ . Intérieur figure (b) : courant 'minimal en fonction de l'angle au sommet du KTFET**

Cependant, l'enseignement important qu'on peut tirer de la figure 4a, c'est qu'en faisant varier l'angle au sommet, on décalerait la transmission de la deuxième jonction 'n<sup>+</sup>-p' (5.4), ce qui diminuerait le recouvrement des deux transmissions par rapport au cas de la grille rectangulaire. On doit donc s'attendre à ce que le courant dans les KTFET soit plus faible que dans le cas des grilles triangulaire pour les forts dopage 'n<sup>+</sup>', car une forte asymétrie de dopage rends encore plus étroite la transmission de la jonction 'n<sup>+</sup>-p'. Ceci est confirmé par les calculs plus complets qui tiennent compte de la géométrie de la figure 3 ainsi que des réflexions multiples sous le prisme. On voit sur la figure 4b que le courant 'Off' le plus faible est obtenu pour un KTFET avec  $\alpha = 45^\circ$ , là où on a le plus de contraste entre les transmissions des deux jonctions. On a aussi montré dans l'article [Wilmart\_2DMater\_2014] que le courant était plus faible dans le cas des jonctions abruptes, c'est pourquoi nous nous sommes placés, pour nos simulations NEGF du KTFET dans le cas des jonctions abruptes pour avoir une estimation la plus favorable possible de l'apport de ce type de transistors.

## V.2. Simulation NEGF du KTFET

### V.2.1. Dispositifs étudiés, modèle NEGF

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que l'utilisation d'une grille triangulaire permet d'utiliser les propriétés optiques des Fermions de Dirac pour moduler le courant dû au à l'effet tunnel de Klein. On a vu que plus on s'écarte de la géométrie de la grille rectangulaire conventionnelle, en diminuant l'angle au sommet (en augmentant  $\alpha$  [fig. 3]), plus la suppression de ce courant est forte. Nous avons vu également que cette suppression est maximale quand  $\alpha = 45^\circ$  et que la jonction est abrupte  $d = 0$  nm. Comme les résultats fournis par le modèle optique négligent les effets dus aux diffractions et aux interférences, nous nous sommes proposés de les valider par des simulations NEGF qui tiennent en compte ces effets quantiques.

Il faut noter que le KTFET à  $\alpha = 45^\circ$  par exemple qui a été simulé par le modèle optique fait  $W = 80$  nm de large et une longueur de grille  $L_G$  de 60 nm ( $L_R = 20$  nm et  $L_T = 40$  nm). La simulation de dispositifs avec de telles dimensions est très coûteuse quand elles sont faites par le formalisme NEGF. C'est pourquoi nous nous sommes focalisés uniquement, pour les simulations NEGF, sur ce dernier transistor du type KTFET et un GFET à grille rectangulaire de surface de grille équivalente ( $\alpha = 0^\circ$ ,  $L_R = 20$  nm et  $L_T = 20$  nm). Le calcul auto-cohérent du courant étant encore plus coûteux en temps de calcul, nous avons choisi d'étudier ce problème simplement en imposant une barrière de potentiel abrupte pour les fermions de Dirac et de calculer le courant qui la traverse, sans auto-cohérence. Néanmoins, nous avons tenu compte du phénomène d'abaissement de la hauteur de barrière dû à l'augmentation de la tension de Drain (DIBL). La barrière est ainsi abaissée de  $e\Delta V_{DS}/2$  quand  $V_{DS}$  est augmenté de  $\Delta V_{DS}$ .

Simuler une structure de 80 nm en NEGF est une tâche très difficile, même en utilisant un algorithme récursif pour calculer la fonction de Green [Anantram\_IEEE\_Proc\_2008]. C'est pourquoi nous avons fait quelques optimisations pour pouvoir étudier ce problème.

### V.2.2. Optimisation du temps de calcul

Nous avons considéré dans nos simulations des nanorubans (GNR, pour « Graphène NanoRibbons ») de 80 nm de large, et des surfaces de grilles de 3200 nm<sup>2</sup>, c'est-à-dire des grilles suffisamment grandes devant la longueur d'onde des FD pour que l'on puisse observer les phénomènes du type optiques géométriques. C'est donc des structures qui sont très gourmandes en temps de calcul, c'est pourquoi nous avons dû faire quelques optimisations. La figure 5 montre un schéma d'un GNR. Par définition, la maille élémentaire est une maille qui reproduit le cristal quand elle est répétée à l'infini. La maille élémentaire d'un GNR est constitué des atomes se trouve dans le rectangle vert. Dans les codes auto-cohérents utilisés pour la simulation des GFET et des GNMFET, nous prenons cette maille élémentaire comme tranche élémentaire pour le calcul récursif de la fonction de Green hors équilibre (NEGF). Le coût en temps de calcul de cet algorithme récursif est proportionnel à  $N_a^3 \times N_L$ , où  $N_a$  est le nombre d'atomes par couche et  $N_L$  est le nombre de couches dans la zone active. Comme la Zone Active (ZA) est une zone de

dimension finie l'utilisateur de l'algorithme récursif peut choisir comme il veut la façon de regrouper les atomes. Donc le choix de  $N_a$  et  $N_L$  est arbitraire, il suffit de « balayer » toute la structure. Supposons maintenant que  $N_a$  et  $N_L$  sont respectivement le nombre d'atomes par maille élémentaires et le nombre de mailles élémentaires dans la zone active d'un GNR. On voit que si on décompose chaque maille élémentaire en quatre couches [fig. 5] : une couche des atomes 'a' (en bleu), une couche des atomes 'b' (en rouge), une couche des atomes 'c' (en violet) et une couche des atomes 'd' (en vert). Le coût en temps de calcul passe de  $N_a^3 \times N_L$  à  $(N_a/4)^3 \times (4.N_L)$ , soit un gain en temps de calcul d'un facteur 16. Quand on sait qu'il faut plusieurs jours pour simuler un seul point de polarisation d'un KTFET de 80 nm quand on utilise un maillage élémentaire, on se rend compte que ce facteur 16 est en fait très intéressant. Nous avons également utilisé le compilateur « icc » d'Intel, qui permet de paralléliser les inversions des matrices des routines d'inversion de matrices de la bibliothèque 'LAPACK'.

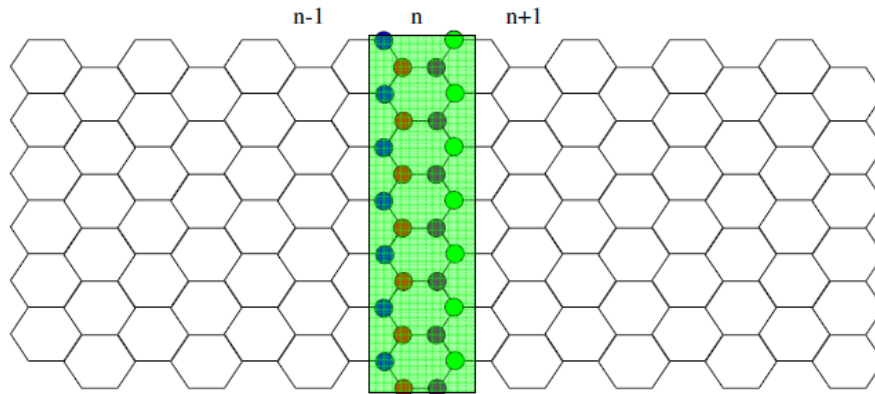


Fig.5 : Vision schématique d'un GNR armchair. La maille élémentaire d'un GNR, représenté en vert contient quatre rangées d'atomes : (a) en bleu, (b) en rouge, (c) en violet et (d) en vert clair. La maille élémentaire contient ici 14 dimères, et donc  $M$ , la moitié du nombre de dimères et qui représente également le nombre d'atomes par rangée, vaut  $M=7$ . D'après VH Nguyen [Communication privée].

Si la décomposition en couches en vue du calcul récursif de la fonction de Green reste un choix à la discrétion de l'utilisateur, il en est beaucoup moins quand il s'agit du calcul des self-énergies. En effet les contacts sont considérés comme semi-infinis, et l'on est donc obligé de prendre une maille élémentaire au moins comme celle de la figure 5. Cependant, quand le potentiel est invariant sur toute la largeur du GNR, on peut effectuer la transformée de fourrier du Hamiltonien et calculer la self-énergie analytiquement. Le Hamiltonien du contact s'écrit :

**Erreur ! Des objets ne peuvent pas être créés à partir des codes de champs de mise en forme.** (5.7)

Avec  $n$  le numéro de couche,  $m$  la position de l'atome dans la couche et h.c désigne le conjugué Hermitien de la somme. Quand le potentiel est invariant sur toute la largeur du GNR, et que le GNR est du type 'armchair', on peut transformer les opérateurs de création et d'annihilation de la manière suivante [Wakabayashi\_2010]:

$$\alpha_{nm} = \frac{2}{\sqrt{2M+1}} \begin{cases} \sum_{q=1,M} \sin(m\phi_q) \alpha_{nq} & \alpha = a, d \\ \sum_{q=1,M} \sin\left(\left(m - \frac{1}{2}\right)\phi_q\right) \alpha_{nq} & \alpha = b, c \end{cases} \quad (5.8)$$

avec :  $\phi_q = \frac{2\pi}{2M+1} q$

Où M est la moitié du nombre de dimères. Le Hamiltonien est alors réécrit :

$$\begin{aligned} H_{tb} = & \sum_{nm} \varepsilon_{a_n} a_{nq}^\dagger a_{nq} + \varepsilon_{b_n} b_{nq}^\dagger b_{nq} + \varepsilon_{c_n} c_{nq}^\dagger c_{nq} + \varepsilon_{d_n} d_{nq}^\dagger d_{nq} \\ & - t \sum_{nm} 2 \cos\left(\frac{\phi_q}{2}\right) a_{nq}^\dagger b_{nq} + b_{nq}^\dagger c_{nq} + 2 \cos\left(\frac{\phi_q}{2}\right) c_{nq}^\dagger d_{nq} + h.c \\ & - t \sum_{nm} a_{nq}^\dagger d_{n-1,q} + d_{nq}^\dagger a_{n+1,q} \end{aligned} \quad (5.9)$$

En notation matricielle, le Hamiltonien s'écrit :

$$H_{tb} = \begin{bmatrix} \ddots & & & & & & \\ \ddots & H_{n-1} & H_{n-1,n} & & & & \\ & H_{n,n-1} & H_n & H_{n,n+1} & & & \\ & & H_{n+1,n} & H_{n+1} & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}, H_n = \begin{bmatrix} \varepsilon_{a_n} & -t\alpha & & & \\ -t\alpha & \varepsilon_{b_n} & -t & & \\ & -t & \varepsilon_{c_n} & -t\alpha & \\ & & -t\alpha & \varepsilon_{d_n} & \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

$$H_{n,n+1} = H_{n,n-1}^{tr} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -t.I_M & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_{qj} = 2 \cos(\phi_q/2) \delta_{q,j} \quad (5.11)$$

Où  $tr$  désigne la transposée matricielle,  $I_M$  est la matrice identité des matrices  $M \times M$  et  $\delta$  est le symbole de Kronecker. Pour la self-énergie côté drain, on voit alors que les fonctions de green de surface obéissent à la relation récursive suivante :

$$\begin{aligned}
g_{a_0} &= \left[ E^+ - U_L - t^2 \alpha g_{b_0} \alpha \right]^{-1} \\
g_{b_0} &= \left[ E^+ - U_L - t^2 g_{c_0} \right]^{-1} \\
g_{c_0} &= \left[ E^+ - U_L - t^2 \alpha g_{d_0} \alpha \right]^{-1} \\
g_{d_0} &= \left[ E^+ - U_L - t^2 \alpha g_{a_1} \alpha \right]^{-1} \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Il vient alors, du fait de la symétrie de  $H_n$  (5.10)

$$\mathbf{Erreur ! Des objets ne peuvent pas être créés à partir des codes de champs de mise en forme.} \tag{5.13}$$

Comme  $\alpha$  est une matrice diagonale,  $g_{a_0}$  est également diagonale. L'équation (5.13) permet alors d'établir une équation algébrique pour tous éléments diagonaux de  $g_{a_0}$ , qu'on notera  $x = (g_{a_0})_{q,q}$ , donnée par

$$t^2 x^2 (E^+ - U_L) - \left[ (E^+ - U_L)^2 + t^2 - t^2 \alpha_q^2 \right] x + E^+ - U_L = 0 \tag{5.14}$$

On ne retient alors que la solution avec la partie imaginaire négative. La self-énergie dans cette représentation (q) est alors donnée par

$$\Sigma_S^{(q)} = t^2 g_{a_0} \tag{5.15}$$

Pour avoir la self-énergie en représentation ( $|\vec{r}\rangle$ ), qui servira pour le calcul de la fonction de Green dans la Zone active, on doit transformer (5.15) de la manière suivante

$$\Sigma_S^{(r)} = T \Sigma_S^{(q)} T^\dagger \tag{5.16}$$

où :

$$T_{m,q} = \frac{2}{\sqrt{2M+1}} \sin(m\phi_q) \tag{5.17}$$

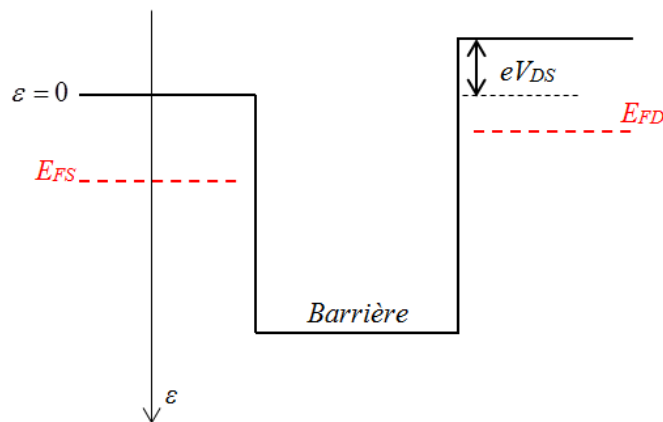
On peut utiliser la même méthode pour le calcul de la self-énergie côté drain. L'utilisation de cette méthode, justifiée pour un GNR du type 'armchair' où le potentiel est constant tout le long

de l'axe  $y$  aux régions source et drain, permet une très grande accélération du temps de calcul puisque l'on a plus à inverser de matrices.

### V.2.3. Résultats du modèle NEGF et comparaison avec le modèle optique

Nous avons calculé le courant dans le KTFET à  $\alpha = 45^\circ$  et le GFET correspondant pour  $V_{DS} = 10$  meV [fig. 7a] et  $V_{DS} = 200$  meV [fig. 7b]. La première tension source-drain permet de comparer les résultats obtenus par le modèle NEGF avec ceux obtenus par le modèle optique, tandis que la deuxième permet de se placer dans le cas d'un fonctionnement réel des deux transistors. Les traits pleins correspondent aux résultats des simulations NEGF, les traits en pointillés aux résultats du Modèle Optique (MO) correspondant, en considérant des jonctions abruptes ( $d = 0$  nm). La couleur bleue correspond au KTFET alors que la couleur rouge correspond au GFET conventionnel.

Notons que la référence en énergie est prise au niveau du point de neutralité de la source, c'est-à-dire le point à mi-distance entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction. Pour avoir des dopages du type 'p' aux accès avec  $p = 2,310^{12} \text{cm}^{-2}$ , nous avons placé les niveaux de Fermi à 150 meV des points de neutralité côtés source et drain. Les courants ont été calculés à température ambiante.



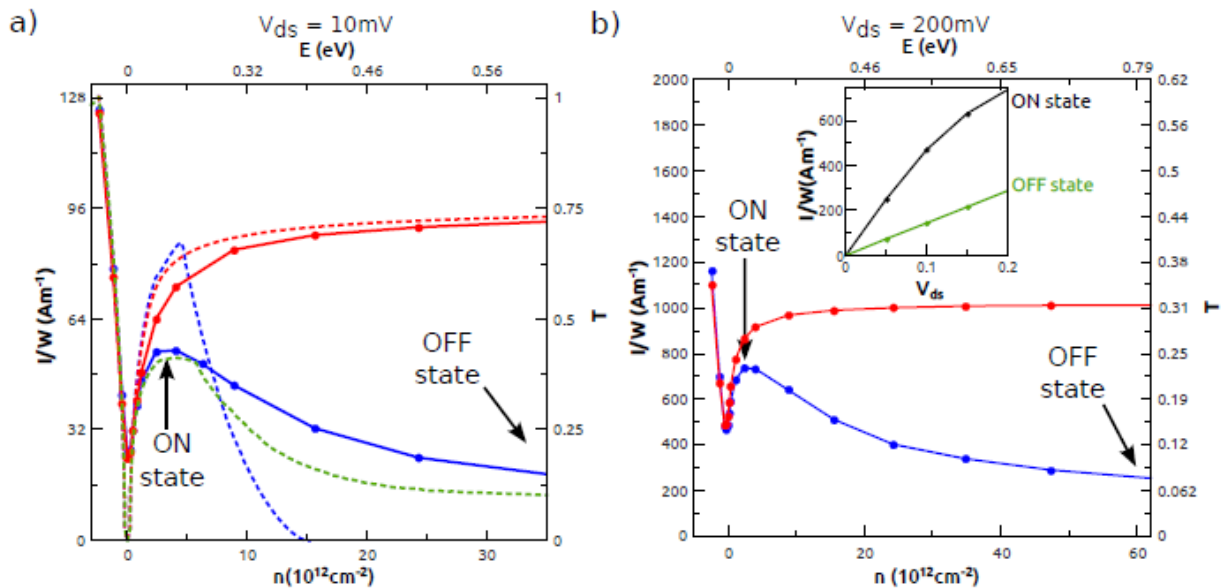
**Fig.6: Structure de bande le long d'un GFET ou un KTFET, pour un 'y' donné, dans le cadre du modèle NEGF. Le trait noir continu représente la position du point de neutralité (CNP, pour « Charge Neutrality Point ») dans toute la structure.**

On voit sur [fig. 7a] que les deux modèles sont en bon accord en ce qui concerne le GFET conventionnel. Pour le KTFET, l'accord est plus qualitatif entre les deux modèles dans le sens où les courants sont comparables tant que  $n$  n'est pas très supérieur à  $p$ , et qu'ils prédisent l'obtention d'un courant 'Off' plus faible que celui du point de Dirac. Cependant, alors que le modèle optique prédit une suppression totale de courant pour un très fort dopage sous le prisme ( $n \gg p$ ), la simulation NEGF prédit un courant 'Off' de valeur non nulle. Ce désaccord provient

comme nous l'avons mentionné plus haut, de l'absence de prise en compte des effets de diffraction dans le modèle optique.

Un bon accord entre les deux modèles est retrouvé dès que l'on tient compte de l'incertitude sur l'angle au sommet, qui est de l'ordre  $\Delta\alpha = (k_n L_G)^{-1} = 15\%$ , où  $k_n$  le vecteur d'onde des FD. En effet, on voit que la courbe verte en pointillés de la [fig. 6a], tracée pour une jonction graduelle de 10 nm et pour un angle au sommet de  $52^\circ = 1,15 \cdot 45^\circ$  donne relativement un bon accord avec les simulations NEGF.

Nous avons ensuite calculé le courant qui traverse le KTFET et le GFET à une tension source-drain  $V_{DS} = 200$  meV [fig. 7b]. Cette situation ne peut être traitée dans le cadre du modèle optique à cause de son incapacité à prendre en compte l'effet tunnel bande à bande entre la source et le drain qui devient important pour de telles tensions  $V_{DS}$ . On voit qu'on obtient dans ce cas aussi, quand on est à fort dopage de la zone prismatique, un courant 'Off' qui est plus bas que le courant au point de Dirac. On appelle branche 'n' la partie de la caractéristique où le dopage est de type 'n' sous la grille (rectangulaire et prismatique). On définira les courants 'On' et 'Off' respectivement comme le plus grand courant et le plus bas obtenus dans la branche 'n' du KTFET. Ils correspondent respectivement à des dopages sous la grille de  $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  et de  $n = 6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  (les accès sont dopés à  $p = 2,3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ).

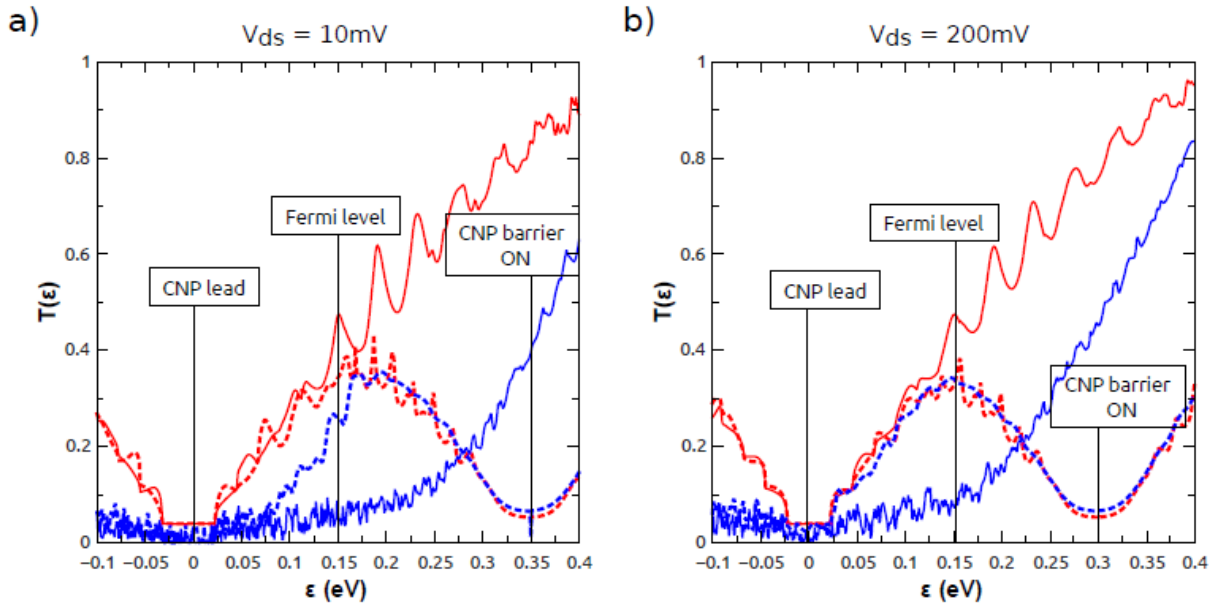


**Fig.7: Courant traversant le KTFET (en bleu) et le GFET (en rouge) pour (a)  $V_{DS} = 10$  meV et pour (b)  $V_{DS} = 200$  meV. Simulations NEGF : traits pleins, Modèle Optique : les traits en pointillés. Trait vert figure (a) : Modèle optique du KTFET avec  $\alpha = 52^\circ$  et  $d = 10$  nm.**

Afin de comprendre la différence de fonctionnement entre les deux types de transistors, nous nous sommes placés aux mêmes tensions source-drain  $V_{DS} = 10$  meV [fig. 8a] et  $V_{DS} = 200$  meV



[fig. 8b], et nous avons tracé la transmission en ces deux points pour le GFET (courbes en rouge) et le KTFET (courbes en bleu). Le niveau de neutralité et le niveau de Fermi du côté de la source sont montrés sur la figure à titre indicatif (noté « CNP lead » et « Fermi level » respectivement). La position du point de neutralité de la barrière [fig. 6] dans le cas  $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  est également montrée sur ces figures (désignée par « CNP Barrier On »). On peut voir qu'à  $V_{DS} = 200 \text{ meV}$  [fig. 8b], la transmission des deux FET est presque identique dans l'état 'On', c'est-à-dire  $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  (courbes en pointillés). L'augmentation du dopage 'n' pour arriver à  $n = 6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  – état 'Off' du KTFET – augmente la transmission à l'énergie correspondante au niveau de Fermi pour le GFET. Par conséquent, le courant délivré par le GFET augmente également pour cette densité de dopage. La situation est très différente pour le KTFET. L'augmentation du dopage 'n' sous la grille décale la transmission vers les plus hautes énergies. Ceci s'explique par la suppression des résonances Fabry-Pérot – visibles à travers les pics de la transmission du GFET pour  $n = 6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  – par la géométrie du KTFET. La transmission au voisinage du niveau de Fermi diminue donc dans le KTFET aux forts dopages et s'accompagne par une forte diminution du courant, qui donne lieu à un courant 'Off' plus faible que celui observé au point de Dirac des deux transistors. Les mêmes constatations restent vraies pour les deux transistors à  $V_{DS} = 10 \text{ meV}$  [fig. 8b].



**Fig.8:** Transmission du KTFET  $\alpha = 45^\circ$  (en bleu) et du GFET (en rouge) de même surface de grille pour (a)  $V_{DS} = 10 \text{ meV}$  et (b)  $V_{DS} = 200 \text{ meV}$  en fonction de l'énergie  $\epsilon$  des porteurs [fig. 6]. Les courbes en pointillées correspondent à l'état 'On' du KTFET soit pour  $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , et les traits pleins correspondent à l'état 'Off' du KTFET, soit  $n = 6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  [fig. 7]. Le niveau de neutralité et le niveau de Fermi côté source sont montrés sur la figure à titre indicatif (noté « CNP lead » et « Fermi level » respectivement). La position de la barrière [fig. 6] dans le cas  $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  est également montrée sur ces figures (désignée par « CNP Barrier On »).

### V.3. Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre qu'il est possible d'exploiter les propriétés du type « optique géométrique » des Fermions de Dirac pour moduler leur passage à travers une barrière de potentiel par effet tunnel de Klein. Nous avons vu, sur une idée originale de Bernard Plaçais, que l'utilisation d'une grille formée d'une série de prismes en parallèle, au lieu d'une grille rectangulaire, permet une modulation efficace du courant dû à l'effet tunnel de Klein. Nous avons montré qu'il est possible d'obtenir dans ce transistor à grille prismatique, que nous avons appelé « Klein Tunneling FET » (KTFET), un courant 'Off' plus faible que celui existant dans les GFET conventionnels et qui est déterminé par le point de Dirac. Le modèle optique, développé dans l'équipe de B. Plaçais, montre que cette suppression de courant est optimale quand l'angle au sommet du prisme est de  $90^\circ$  et s'explique par la haute probabilité de réflexion totale interne que subissent les porteurs sous le prisme quand le dopage sous la grille prismatique est très supérieur à celui dans les régions source et drain. Nous avons ensuite réalisé un code NEGF optimisé pour l'étude de KTFET de grandes dimensions afin de tenir compte des phénomènes quantiques inexistant dans le modèle optique. Nos simulations NEGF ont également montré que dans ce cas de forte asymétrie de dopage, les résonances Fabry-Pérot qui existent sous la grille conventionnelle d'un GFET, sont supprimées par l'utilisation d'une grille prismatique.

Bien qu'il soit nécessaire d'approfondir cette étude, en incluant une résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson et de la fonction de Green, et qu'il faille également explorer plus de géométries en faisant varier les paramètres du KTFET, cette étude offre la perspective d'une nouvelle approche de conception de dispositifs permettant d'exploiter pleinement le caractère de fermions de Dirac des porteurs de charges dans le graphène.



# Conclusion

Cette thèse montre que l'utilisation d'un substrat comme le h-BN, qui préserve les propriétés intrinsèques des porteurs de charges dans le graphène, permet d'améliorer considérablement les performances des transistors basés sur du graphène. Nos simulations montrent que les GFET sur h-BN ayant une longueur de grille inférieure à 50 nm possèdent des fréquences de coupures supérieures à 1 THz. Cependant, nos calculs montrent que l'absence d'une bande interdite, combinée avec l'apparition de l'effet tunnel de Klein, a pour effet de dégrader considérablement le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  des GFET, et de causer un fort abaissement de la barrière de potentiel dans le canal (DIBL), empêchant ainsi toute saturation du courant dans les caractéristiques  $I-V_{DS}$  aux forts  $V_{GS}$ , c'est-à-dire là où se trouve le maximum de la transconductance. La forte conduction de sortie qui en résulte dégrade fortement la fréquence maximale d'oscillation, ce qui constitue un sérieux inconvénient pour les applications très hautes fréquences. Nous avons également proposé un modèle qui permet d'expliquer ce DIBL dans le GFET. La force du modèle que nous proposons est qu'il permet d'expliquer deux phénomènes paradoxaux en apparence, c'est-à-dire un abaissement de la barrière de potentiel dans le canal et une diminution de la charge dans ce dernier.

Nous avons montré que l'utilisation des GNM, structure obtenue suite à la réalisation d'un super-réseau d'anti-dots dans la feuille de graphène, comme canal du transistor permet d'ouvrir une bande interdite dans cette région. La comparaison des résultats obtenus pour un GNMFET avec un GFET de mêmes dimensions permettent d'affirmer que l'on peut améliorer le rapport  $I_{On}/I_{Off}$  de trois ordres de grandeurs pour une taille et une périodicité adéquate des trous. Bien que l'introduction d'un réseau d'antidots réduise légèrement la fréquence de coupure intrinsèque, il est remarquable de constater d'après nos simulations que la bonne saturation du courant dans la branche N, qui résulte de la présence de la bande interdite dans le GNM, conduit à une fréquence maximale d'oscillation bien supérieure dans le GNMFET. Le gain en tension dans ce dernier est aussi amélioré d'un ordre de grandeur par rapport au GFET conventionnel. Nos simulations montrent que cette très bonne saturation du courant dans cette branche 'n' résulte de la bonne stabilité de la barrière de potentiel à fort  $V_{GS}$ . Le modèle que nous avons proposé pour expliquer le DIBL dans un GFET reste valable pour un GNMFET, à condition de tenir compte de la présence de la bande interdite et de la parabolicité des bandes dans le canal, et permet d'expliquer l'absence du DIBL dans la branche 'n' du GNMFET et sa présence dans la branche 'p'.

Bien que les résultats sur le GNM-FET soient très encourageants, la réalisation de GNM exempts de défaut sur les bords, avec une périodicité bien définie et des NeckWidth suffisamment faibles pour avoir de larges bandes interdites reste une tâche ardue dans l'état actuel de nos technologies. De plus, l'introduction d'une bande interdite dans la feuille de

graphène induit inévitablement une masse effective non nulle pour les porteurs, et donc une vitesse de groupe plus faible que dans le graphène intrinsèque.

C'est pourquoi, en complément de ce travail, nous avons exploré la possibilité de moduler le courant dans un GFET sans ouvrir de bande interdite dans le graphène. La solution que nous avons proposée consiste à utiliser une grille triangulaire à la place d'une grille rectangulaire. Cette solution exploite les propriétés du type « optique géométrique » des fermions de Dirac dans le graphène, qui sont inhérentes à leur nature « Chirale », pour moduler l'effet tunnel de Klein dans le transistor et bloquer plus efficacement le passage des porteurs dans la branche 'p' quand le dopage des sources et drains sont de type 'n'. C'est pourquoi nous avons choisi d'appeler ce transistor le « Klein Tunneling FET » (KTFET). Nous avons pu montrer que cette géométrie permettrait d'obtenir un courant  $I_{off}$  plus faible que celui qui est obtenu d'habitude, pour la même surface de grille, pour les GFET conventionnels. Cela offre la perspective d'une nouvelle approche de conception de dispositifs permettant d'exploiter pleinement le caractère de fermions de Dirac des porteurs de charges dans le graphène.

Bien qu'il soit nécessaire d'approfondir cette étude, en incluant une résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson et de la fonction de Green, et qu'il faille également explorer plus de géométries en faisant varier les paramètres du KTFET, cette étude offre la perspective d'une nouvelle approche de conception de dispositifs permettant d'exploiter pleinement le caractère de fermions de Dirac des porteurs de charges dans le graphène.

Bien que cette thèse apporte des éléments de réponses intéressants concernant des directions possibles pour la conception et l'amélioration des transistors basés sur le graphène, il n'en demeure pas moins qu'on pourrait la compléter en modifiant mon code de manière à ce que l'on puisse étudier par exemple des GNM avec des bords rugueux, comme c'est le cas expérimentalement, ou d'inclure l'auto-cohérence dans notre code NEGF du KTFET. Le modèle que nous proposons pour l'étude du DIBL dans les dispositifs à base de graphène est cohérent avec tout ce que l'on a observé dans les dispositifs étudiés jusque-là et mérite de ce fait d'être étudié en détail.

Nous avons également pris connaissance récemment de deux méthodes intéressantes pour l'amélioration des performances des transistors à base de graphène. La première consiste à utiliser un dopage substitutionnel, qui se fait préférentiellement sur un seul sous-réseau d'atomes de carbone de la monocouche de graphène, par des atomes d'azote pour ouvrir une bande interdite dans le graphène [Lherbier\_NanoLett\_2013]. Le transistor qui en résulterait peut être étudié aisément par notre code. La deuxième méthode consiste à utiliser le graphène contraint avec du graphène non-contraint pour ouvrir un gap de conduction dans la monocouche de graphène, ce qui permet d'obtenir une très bonne saturation du courant et de très bon rapport  $I_{on}/I_{off}$  [Nguyen\_Nanotech\_2014]. Cette méthode est plus intéressante, car elle n'ouvre pas une bande interdite qui dégrade les propriétés des Fermions de Dirac, et mérite donc à mon opinion d'être approfondie.

## Annexe A

# Résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson dans les dispositifs en graphène

Nous allons à présent décrire la méthode numérique que nous avons utilisée dans la section III.2.2 pour la résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson et de l'équation la charge dans le dispositif dans le cadre du formalisme NEGF [Fig. III.7]. Cette méthode s'appelle « Globally Convergent Method » (GCM) et qui est une variante de la méthode Newton-Raphson (NR) [Numerical\_recipies]. Bien que la référence que nous citons décrive très bien la méthode GCM et en fournit une implémentation en langage C, cette méthode possède des avantages importants par rapport à la méthode de NR, qui facilitent la convergence et qui méritent donc d'être soulignés. De plus, l'application de cette méthode aux dispositifs en graphène nécessite un choix adapté du Jacobien (qu'on va définir plus loin) de l'équation que nous cherchons à résoudre. Nous avons, sur la base d'une discussion avec Y. M. Niquet et F. Triozon, utilisé une nouvelle méthode pour calculer ce Jacobien [Niquet\_JAP\_2014]. Nous présenterons donc dans la première partie la méthode GCM et la méthode de calcul du Jacobien dans la deuxième partie.

### A.1. Résolution de l'équation de Poisson par la méthode « Globally convergent Method »

L'équation de Poisson s'écrit

$$f(U_{SC}) = \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left[ \varepsilon(\vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} U_{SC} \right] - (\rho_{n,SC} + \rho_{h,SC}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

où  $\varepsilon(\vec{r})$  est la permittivité du milieu en tout point  $\vec{r}$ ,  $U_{SC}$  désigne le vecteur contenant les potentiels auto-cohérents sur tous les sites  $i$ ,  $\rho_{n,SC}$  et  $\rho_{h,SC}$  sont des vecteurs contenant respectivement les densités auto-cohérentes d'électrons et de trous sur tous les sites  $i$  et sont calculées dans le cadre du formalisme NEGF par la formule (2.62). Pour résoudre numériquement l'équation (A.1), nous la discrétisons dans l'espace réel par la méthode des différences finies. Il vient que la résolution de l'équation (A.1) par une méthode itérative du type NR ou GCM, se ramène, à chaque itération  $k$ , à la résolution de l'équation algébrique

$$f(U_k) = M.U_k - (\rho_{n,k} + \rho_{h,k}) = 0 \quad (\text{A.2})$$

où  $M$  est la matrice représentant la discrétisation de l'opérateur  $\vec{\nabla}_{\vec{r}}\varepsilon(\vec{r})\vec{\nabla}_{\vec{r}}$ ,  $U_k$  est le vecteur des potentiels à l'itération  $k$ ,  $\rho_{n,k}$  le vecteur densité d'électrons à l'itération  $k$  et  $\rho_{h,k}$  le vecteur densité de trous à l'itération  $k$ .

La méthode NR calcule à chaque itération  $k$  la matrice Jacobienne  $J$ , dont les éléments sont donnés par

$$J_{ij} = \frac{\partial f(U_k^i)}{\partial U^j} = M - \frac{\partial}{\partial U^j} \left[ (\rho_n^i + \rho_p^i) \right], \quad (\text{A.3})$$

où  $U_k^i$ ,  $U^j$ ,  $\rho_{n,k}^i$  et  $\rho_{p,k}^i$  sont tous des scalaires qui représentent respectivement le potentiel sur le site  $i$  à l'itération  $k$ , le potentiel sur le site  $j$ , la densité d'électrons sur le site  $j$  à l'itération  $k$  et la densité de trous sur le site  $i$  à l'itération  $k$ .

Le vecteur « potentiel » de la prochaine itération  $k+1$  de la méthode NR est ensuite calculé à partir du potentiel de l'itération  $k$  en utilisant la formule

$$U_{k+1} = U_k - dU_k \quad (\text{A.4})$$

où

$$dU_k = J^{-1} \cdot f(U_k). \quad (\text{A.5})$$

On calcule ensuite les vecteurs  $\rho_{n,k+1}^i$  et  $\rho_{p,k+1}^i$  par la formule (2.62). On répète alors (A.3), (A.4) et (A.5) jusqu'à ce que  $f(U_k)$  s'annule.

Or, il se trouve que le Jacobien (A.3) de nos dispositifs ne peut être calculé de manière exacte car le nombre de degrés de liberté de nos système est beaucoup trop grand. On utilise donc des approximations pour calculer le Jacobien  $J$ . Il en résulte que la « direction de descente »  $dU_k$  donnée par (A.5) n'est pas optimale, et la convergence n'est donc pas assurée. C'est ce que nous avons constaté au début de cette thèse. C'est pourquoi nous nous sommes proposés d'utiliser une variante de la méthode NR qui assure une meilleure convergence. C'est la méthode GCM qui se base sur le constat suivant : la résolution auto-cohérente de (A.2) converge si, à chaque à chaque itération, la norme de la fonction  $f$  décroît.

Pour se rapprocher de la convergence à chaque itération de la méthode NR, on rajoute à chaque itération  $k$ , une deuxième boucle itérative dont le rôle est de calculer une direction de descente qui permet d'obtenir un potentiel  $U_{k+1}$  et une charge (calculée à partir de  $U_{k+1}$ ) qui réduisent bien la norme de  $f(U_{SC})$ .

Donc l'algorithme de cette deuxième boucle est le suivant. On calcule au début de cette boucle le pas de descente initial  $dU_k$  par les formules (A.3) et (A.5) puis on calcule  $U_{k+1}$  en utilisant la formule (A.4). Si

$$\|f(U_{k+1})\| < \|f(U_k)\|, \quad (\text{A.6})$$

la mise à jour (A.4) du potentiel est acceptée et on passe au calcul du Jacobien (A.3) de l'itération  $k+2$  afin de calculer  $U_{k+2}$  et continuer la simulation. Si l'équation (A.6) n'est pas satisfaite, on réduit le pas de descente initial  $dU_k$  en le multipliant par un scalaire  $\alpha_1$  inférieur à 1. Il vient

$$dU_k^1 = \alpha_1 \cdot dU_k, \quad (\text{A.7})$$

puis on calcule le nouveau potentiel

$$U_k^1 = U_k - dU_k^1 \quad (\text{A.8})$$

et les densités de charges qui lui correspondent. Ensuite on effectue le test suivant

$$\|f(U_k^1)\| < \|f(U_k)\|. \quad (\text{A.9})$$

Si cette condition est satisfaite on pose

$$U_{k+1} = U_k^1 \quad (\text{A.10})$$

et on passe au calcul du Jacobien (A.3) qui servira au calcul de  $U_{k+2}$  et ainsi de suite. Sinon on réduit encore plus le pas de descente initial  $dU_k$  en le multipliant par un scalaire  $\alpha_2$  inférieur à  $\alpha_1$  et on obtient un nouveau pas de descente

$$dU_k^2 = \alpha_2 \cdot dU_k, \quad (\text{A.11})$$

et on répète (A.8) et (A.9). Pour chaque itération  $k$  de la méthode, cette procédure peut être répétée autant de fois  $n$  que l'on veut [fig. III.7]. Le choix de  $n$  est laissé à la discrétion de l'utilisateur. Généralement, quand on n'arrive pas à satisfaire la condition (A.9) au bout de 3 itérations, c'est que soit  $dU_k$  est devenu trop faible et on aura atteint la convergence, soit que le potentiel d'essai a été mal choisi si la norme de  $dU_k$  est grande. C'est pourquoi on teste la



convergence sur les normes de  $f(U_k)$  et de  $dU_k$  simultanément [fig. III.7]. La méthode de calcul des coefficients  $\alpha_n$  est précisée dans [Numerical\_recipies].

Il est aussi clair que la méthode NR n'est rien qu'une GCM avec

$$\alpha_0 = 1 \text{ et } \alpha_n = 0 \text{ pour } n > 0. \quad (\text{A.12})$$

La méthode GCM permet d'assurer donc une amélioration considérable de convergence lors de la résolution de (A.2). On a pu constater cette amélioration lorsque les oscillations du courant, qui apparaissaient au-delà d'un certain nombre d'itérations  $k$  lors de la résolution de l'équation (A.2) par la méthode NR, ont complètement disparu suite à l'usage de la GCM. Bien que la méthode GCM nécessite plus de simulations NEGF, les simulations GCM mettent moins de temps à converger, et ce malgré que la GCM oblige à faire plus de calculs NEGF. Le nombre d'itérations nécessaires à la convergence de la méthode GCM est également plus faible, pour un même choix de Jacobien, comparé à la méthode NR. Ceci s'explique par un meilleur choix de la direction de descente vers le zéro de  $f$  (A.2).

## A.2. Choix du Jacobien

Nous avons vu dans la partie précédente que la direction de descente joue un rôle déterminant pour assurer la convergence et accroître sa rapidité. Il est clair qu'un bon choix de l'approximation du Jacobien améliore la précision du calcul et réduit le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence. C'est dans ce but qu'on a développé, suite à une discussion avec Y. M. Niquet et F. Triozon, une nouvelle méthode pour calculer le Jacobien (A.3) dans les dispositifs en graphène, et qui se base sur deux hypothèses importantes [Niquet\_JAP\_2014]:

- la charge sur chaque site  $i$  ne dépend que du potentiel  $U_i$  de ce site

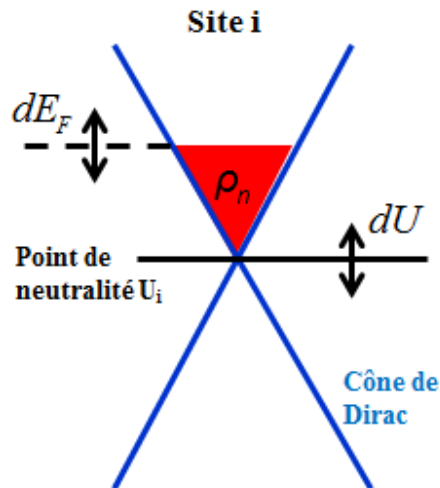
$$\left. \frac{\partial \rho_{n,h}}{\partial U_{j \neq i}} \right)_{E_F} = 0, \quad (\text{A.13})$$

- Sur chaque site  $i$ , la variation du niveau de Fermi  $E_F$  de  $\delta E$  à potentiel  $U_i$  fixé, induit la même variation de charge que si on fixe  $E_F$  et qu'on fasse varier  $U_i$  de  $-\delta E$  [Fig. 1]

$$\left. \frac{\partial \rho_{n,h}}{\partial U_i} \right)_{E_F} = - \left. \frac{\partial \rho_{n,h}}{\partial E_F} \right)_{U_i}. \quad (\text{A.14})$$

On se basant sur cette dernière formule, on commence la simulation par fixer le potentiel à zéro sur tout le dispositif et par calculer la LDOS sur une large gamme d'énergie pour tous les sites  $i$  du dispositif. La LDOS de chaque site  $i$  est ensuite stockée en mémoire. Ensuite, on choisit

un pas d'énergie  $\delta E$  avec lequel on va faire varier le niveau de Fermi à partir de  $E_F = 0$  meV, puis on calcule par une simple intégration, effectuée pour chaque valeur  $E_F$ , la valeur de la charge sur chaque site  $i$  (par la formule 2.62), et ce en se servant de la LDOS stockée en mémoire. On stocke alors en mémoire, pour chaque site et pour chaque  $E_F$ , la valeur de la charge ainsi que sa variation par rapport à l'ancienne valeur de  $E_F$ .



**Fig. 1 :** Schéma montrant l'équivalence, pour le calcul de la charge sur un site  $i$ , entre la variation du potentiel  $U_i$  à niveau de Fermi  $E_F$  fixe et la variation du niveau de Fermi  $E_F$  à potentiel  $U_i$  fixé.

On dispose donc, avant de commencer la simulation, c'est-à-dire avant de commencer à résoudre (A.2), d'un tableau à deux colonnes pour chaque site  $i$ . La première colonne contient les charges alors que la deuxième colonne contient leur variations, ou si l'on veut, la dérivée de la charge par rapport au potentiel par la méthode des différences finies de pas  $\delta E$ . Ces tableaux sont stockés en mémoire jusqu'à la fin de la simulation.

D'après les équations (A.3) et les hypothèses (A.13) et (A.14), on voit que le Jacobien que nous utilisons se calcule en rajoutant à l'élément diagonal  $i$  de la matrice  $M$ , la valeur de la dérivée de la charge sur le site  $i$  par rapport au potentiel  $U_i$ . Donc quand on a besoin d'évaluer les éléments du Jacobien (A.3) pendant la simulation, on se place sur chaque site  $i$ , on fait une recherche dichotomique sur la première colonne pour retrouver la valeur correspondante de la charge, puis on rajoute la valeur de sa dérivée à l'élément diagonal  $i$  de la matrice  $M$  (A.3). L'algorithme du code est résumé dans la figure [Fig. 7] du troisième chapitre.

Les tableaux des charges et de leurs dérivées sont une propriété physique du canal dispositif et sont calculés à tension d'alimentation nulle. Nous n'avons donc pas besoin de les recalculer quand on change la polarisation.

### A.3. Conclusion

Nous avons présenté ici une variante de la méthode Newton-Raphson, appelée « Globally Convergent Method », qui facilite la convergence de la résolution auto-cohérente de l'équation de

Poisson couplée au formalisme NEGF. Nous avons ensuite présenté une méthode rapide, efficace et facilement réutilisable pour le calcul du Jacobien de l'équation de Poisson. Comparée à la méthode classique de Gummel [Gummel64], cette méthode nous a permis de diviser par dix le nombre d'itérations nécessaires à la convergence.

# Abréviations

AD	Anti-Dot
AFF	‘Anti-Filling Factor’ ou rapport du nombre d’atomes manquants par rapport à au nombre d’atomes présents initialement dans la super-cellule
ATB	Approximation du Transport Balistique
BC	Bande de conduction
BI	Bande Interdite
BTBT	‘Band-To-Band Tunneling’ ou effet tunnel bande-à-bande
BV	Bande de Valence
C	Canal (notation du chapitre II)
CT	‘Chiral Tunneling’ ou effet tunnel chiral
D	Drain
DCP	Densité de Courant de Probabilité
DIBL	‘Drain Induced Barrier Lowering’ Ou abaissement de la barrière induit par la tension de Drain
ED	Equation de Dirac
$E_{FX}$	Niveau de Fermi dans la partie X du dispositif (Source ou Drain)
EKG	Equation de Klein-Gordon
EP	Equation de Poisson
ES	Equation de Schrödinger
FD	Fermion de Dirac
FF	Fenêtre de Fermi ( $f_L - f_R$ )

FG	Fonction de Green
GFET	‘Graphene Field Effect Transistor’ ou transistor à effet de champ en graphène
GNM	‘Graphene NanoMesh’ ou nanomesh de graphene
GNM-FET	Transistor à effet de champ en nanomesh de graphene
GNR	‘Graphene NanoRibbon’ ou nanoruban de graphène
h-BN	‘Hexagonal Boron Nitride’ ou nitrure de bore hexagonal
HF	Hautes Fréquences
KTFET	‘Klein Tunneling Field Effect Transistor’ ou transistor à effet tunnel de Klein
KTP	‘Klein Tunneling Prism’ ou prisme à effet tunnel
LPM	Libre Parcours Moyen
ME	Maille Elémentaire
NEGF	‘Non Equilibrium Green’s Function’ ou fonction de Green hors équilibre
NP	Pour ‘Neutrality Point’ ou point de neutralité
NW	‘Neck-Width’ ou distance séparant deux anti-dots
OSE	‘On-Site Energy’ ou énergie du site
PAC	Potentiel Auto-Cohérent
PE	‘Poisson Equation’ ou équation de Poisson
PG	‘Pristine Graphene’ ou graphène 2D exempt de tout défaut
R	Réservoir (notation du chapitre II)
RE	Ruban élémentaire
ROO	Rapport $I_{On}/I_{Off}$
RTI	Réflexion Totale Interne

S	Source
SC	Super-Cellule
SE	Self-énergie
SGF	‘Surface Green’s Function’ ou Fonction de Green de surface
SLG	‘Single Layer Graphene’ ou mono-couche de graphène
TC	‘Thermionic Current’ ou courant thermoïonique
VDG	Vitesse De Groupe
ZA	Zone Active



# Symboles

$e$	Valeur absolue de la charge de l'électron	$1,60217657 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
$q$	Charge (positive ou négative)	$C$
$\hbar$	Constante réduite de Planck	$6.5821191528 \cdot 10^{-19} \text{ eV.s}$
$\vec{p}$	Impulsion	$m^{-1}$
$\vec{v}$	Vitesse des porteurs	$m \text{ s}^{-1}$
$v_{SAT}$	Vitesse de saturation de porteurs à fort champ	$m \text{ s}^{-1}$
$f(\vec{r}, \vec{k}, t)$	Fonction de distribution	Sans unités
$n$	Densité des électrons	$cm^{-2}$
$p$	Densité des trous	$cm^{-2}$
$\rho$	Densité des porteurs de charges	$cm^{-2}$
$I$	Densité de courant	$A \text{ m}^{-1}$
$\vec{E}$	Champ électrique	$V \text{ cm}^{-1}$
$\mu_X$	Mobilité des porteurs de type X	$cm^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
$U$	Energie potentielle des électrons (bas de la bande de conduction)	$eV$
$V$	Tension électrique	$V$
$k$	Constante de Boltzmann	$8,61734315 \cdot 10^{-5} \text{ eV.K}^{-1}$
$T_c$	Température du milieu ambiant	$300 \text{ K}$
$\gamma$	Elargissement d'un niveau (scalaire)	$eV$
$DOS$	'Density Of States' : densité d'états	$eV^{-1}$
$LDOS_X$	'Local Density Of States' : densité d'états locales induite depuis X	$eV^{-1} \text{ m}^{-2}$
$a_c$	Distance entre 2 atomes de carbone proches voisins	$0.142 \text{ nm}$
$\Sigma$	Self-énergie	$eV$
$\Gamma$	Matrice d'élargissement	$eV$
$G$	Fonction de Green retardée	$eV^{-1}$
$G^\dagger$	Fonction de Green Avancée	$eV^{-1}$



$G^n$	<i>Fonction de corrélation des électrons</i>	$eV^1 m^{-2}$
$G^p$	<i>Fonction de corrélation des trous</i>	$eV^1 m^{-2}$
$A$	<i>Fonction spectrale</i>	$eV^1 m^{-2}$
$g_x$	<i>Fonction de Green de Surface au contact X</i>	$eV^1$
$[\rho]$	<i>Matrice densité</i>	$m^{-2}$
$T(E)$	<i>Fonction de transmission</i>	<i>Sans unités</i>
$f_T$	<i>Fréquence de coupure, i.e. fréquence à laquelle le gain en courant en circuit ouvert redescend à 1</i>	<i>THz</i>
$f_{\max}$	<i>Fréquence maximale d'oscillation, i.e. fréquence à laquelle le gain en puissance – en circuit adapté en impédance – redescend à 1</i>	<i>THz</i>
$g_m$	<i>Transconductance</i>	$\mu S/\mu m$
$v_F$	<i>Vitesse de Fermi des fermions de Dirac dans le graphène</i>	$10^6 m s^{-1}$
$\vec{k}$	<i>Vecteur d'onde (ou vecteur d'onde réduit)</i>	$m^{-1}$
$\vec{q}$	<i>Vecteur d'onde réduit, c'est-à-dire défini par rapport au point de Dirac (<math>\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}</math>)</i>	$m^{-1}$
$K_y^{DP}$	<i>Valeur de la composante transverse du vecteur d'onde au point de Dirac du graphène par rapport au point <math>\Gamma</math> (<math>\vec{q}_y = 0</math>)</i>	$8.5155 \cdot 10^9 m^{-1}$
$N_D$	<i>Densité du dopage du type 'n' au niveau des zones d'accès</i>	$nm^{-1}$
$W_x$	<i>Neck-Width dans la direction 'x'</i>	$nm$
$W_y$	<i>Neck-Width dans la direction 'y'</i>	$nm$
$E_G$	<i>Largeur de la bande interdite</i>	$meV$

## Références

[**Akhavan\_AcsNano\_2010**] N. D. Akhavan et al., “Graphene Nanomesh by ZnO Nanorod Photocatalysts”, ACS Nano, 2010, 4, 4174-4180.

[**Alarcon\_IEEE\_TED\_2013**] A. Alarcon et al., “Pseudosaturation and Negative Differential Conductance in Graphene Field-Effect Transistors”, Electron Devices, IEEE Transactions on, 2013, 60, 985 -991.

[**Allain\_EPJB\_2011**] PE Allain, “Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons”, The European Physical Journal B, 2011, 83, 301-317.

[**Anantram\_IEEE\_Proc\_2008**] M. Anantram et al., “Modeling of Nanoscale Devices”, Proceedings of the IEEE, 2008, 96, 1511 -1550.

[**Avouris\_NanoLett\_2010**] P. Avouris, “Graphene: Electronic and Photonic Properties and Devices”, Nano. Letters, 2010, 10, 4285-4294.

[**Bai\_NatNanotech\_2010**] J. Bai et al., “Graphene Nanomesh”, Nat. Nano, 2010, 5, 190-194.

[**Balog\_NatMat\_2010**] R. Balog et al., “Bandgap opening in graphene induced by patterned hydrogen adsorption”, Nat. Mater, 2010, 9, 315-319.

[**Berrada\_APL\_2013**] S. Berrada et al., “Graphene Nanomesh transistor with high on/off ratio and good saturation behavior”, Appl. Phys. Lett., 2013, 103, 183509.

[**Bolotin\_SolidStateComm\_2008**] K. Bolotin et al., “Ultrahigh electron mobility in suspended graphene”, Solid State Communications, 2008, 146, 351 – 35.

[**Britnell\_Science\_2012**] L. Britnell et al., “Field-Effect Tunneling Transistor Based on Vertical Graphene Heterostructures”, Science, 2012, 335, 947-950

[**Calogeracos\_ContempPhys\_1999**] A. Calogeracos et al., “History and physics of the Klein paradox”, Contemp. Physics, 1999, 40, 313-321.

[**Castro\_Neto\_2009**] E. V. Castro Neto et al., “The electronic properties of graphene”, Rev. Mod. Phys., 2009, 81, 109-162.

[**Cayssol\_PRB\_2009**] J. Cayssol et al., “Contact resistance and shot noise in graphene transistors”, Phys. Rev. B, 2009, 79, 075428.

[**Cheianov\_Science\_2007**] V. V. Cheianov et al., “The Focusing of Electron Flow and a Veselago Lens in Graphene p-n Junctions”, Science, 2007, 315, 1252-1255

**[Cohen-Tannoudji]** C. Cohen-Tannoudji , “Mécanique quantique : Tome I”, 1983, Hermann.

**[Cheng\_PNAS\_2012]** R. Cheng et al., “High-frequency self-aligned graphene transistors with transferred gate stacks”, Proceedings of the National Academy of Sciences, 2012.

**[Das\_Sarma\_RevModPhys\_2011]** S. Das Sarma et al., “Electronic transport in two-dimensional graphene”, Rev. Mod. Phys., 2011, 83, 407-470

**[Datta1]** S. Datta, “Quantum transport, atom to transistor”, 2005, Cambridge University Press.

**[Datta2]** S. Datta, “Electronic transport in mesoscopic systems”, 1995, Cambridge University Press.

**[Dean\_Nature\_Nano\_2010]** Y. Dean et al., “Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics”, Nat. Nano, 2010, 5, 722-726.

**[Decker\_NanoLett\_2011]** R. Decker et al., “Local Electronic Properties of Graphene on a BN Substrate via Scanning Tunneling Microscopy”, Nano Letters, 2011, 11, 2291-2295.

**[Dvorak\_SciRep\_2014]** M. Dvorak et al., “Bandgap Opening by Patterning Graphene”, Sci. Rep., 2013, 3, 2289.

**[Farmer\_APL\_2012]** D. Farmer et al., “Impact of gate resistance in graphene radio frequency transistors”, Appl. Phys. Lett., 2012, 101, 143503.

**[Freitag\_NatNano\_2008]** M. Freitag, “Graphene: Nanoelectronics goes flat out”, Nat. Nanotechnol., 2008, 3, 455-457.

**[Fuchs\_JN]** J.N. Fuchs et al., “Introduction to the Physical Properties of Graphene”, cours en ligne : [http://www.lps.u-psud.fr/IMG/pdf\\_CoursGraphene2008.pdf](http://www.lps.u-psud.fr/IMG/pdf_CoursGraphene2008.pdf).

**[Geim\_NatMat\_2007]** A. Geim et K. Novoselov, “The rise of grapheme”, Nat Mater, 2007, 6, 183-191.

**[Giovannetti\_PRB\_2007]** G. Giovannetti et al., “Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations”, Phys. Rev. B, 2007, 76, 073103.

**[Grassi\_TED\_2013]** R. Grassi et al., “Contact-induced negative differential resistance in short-channel graphene FETs”, Electron Devices, IEEE Transactions on, 2013, 60, 140 -146.

**[Gorbachev\_NanoLett\_2008]** R. V. Gorbachev et al., “Conductance of p-n-p Graphene Structures with “Air-Bridge” Top Gates”, Nano Lett., 2008, 8, 1995-1999.

**[Gummel64]** H. K. Gummel, “A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations”, IEEE Trans. Electron Devices, 1964, 11, 455.

**[Guo\_NanoLett\_2013]** Z. Guo et al., “Record Maximum Oscillation Frequency in C-Face Epitaxial Graphene Transistors”, Nano Letters, 2013, 13, 942-947

**[Guo\_NanoScale\_2012]** J. Guo et Al., « Modeling of graphene nanoribbon devices », Nanoscale, 2012, 4, 5538-5548.

**[Gunst\_PRB\_2011]** Gunst et al., “Thermoelectric properties of finite graphene antidot lattices”, Phys. Rev. B, 2011, 84, 155449.

**[Han\_PRL\_2007]** Han et al., “Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons”, Phys. Rev. Lett., 2007, 98, 206805.

**[Han\_EDL\_2011]** Han et al., “Channel-Length-Dependent Transport Behaviors of Graphene Field-Effect Transistors”, Electron Device Letters, 2011, 32, 812 -814.

**[Han-MY\_PRL\_2010]** Han et al., "Electron Transport in Disordered Graphene Nanoribbons", Phys. Rev. Lett. 2010, 104, 056801.

**[Jiao-L\_Nature\_2009]** Jiao-L et al., “Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes”, Nature, 2009, 458, 877-880.

**[Jippo\_PRB\_2011]** Jippo et al., “Theoretical study on electron transport properties of graphene sheets with two- and one-dimensional periodic nanoholes”, Phys. Rev. B, 2011, 84, 075467.

**[Kan\_JPhysChemC\_2012]** kan et al., “Why the Band Gap of Graphene Is Tunable on Hexagonal Boron Nitride”, The Journal of Physical Chemistry C, 2012, 116, 3142-3146.

**[Karamitaheri\_JAP\_2011]** Karamitaheri et al., “Geometrical Effects on the Thermoelectric Properties of Ballistic Graphene Antidot Lattices”, J. Appl. Phys., 2011, 110, 054506.

**[Kharch\_NanoLett\_2011]** Kharchetnayak, “Quasiparticle Band Gap Engineering of Graphene and Graphone on Hexagonal Boron Nitride Substrate”, Nano Letters, 2011, 11, 5274-5278.

**[Katsnelson\_NatPhys\_2007]** Katsnelson et al., “Chiral tunnelling and the Klein paradox in grapheme”, Nat. Phys, 2006, 2, 620-625.

**[Kato\_NatNanotech\_2012]** Kato, Hatakeyama et al., “Site- and alignment-controlled growth of graphene nanoribbons from nickel nanobars”, Nat. Nano, 2012, 651–656.

**[Kim-M\_NanoLett\_2010]** M. Kim et al., “Fabrication and Characterization of Large-Area, Semiconducting Nanoperforated Graphene Materials”, Nano Letters, 2010, 10, 1125-1131.

**[Kim\_AcsNano\_2012]** M. Kim et al., “Electronic Transport and Raman Scattering in Size-Controlled Nanoperforated Graphene”, ACS Nano, 2012, 6, 9846-9854.

**[Krithivasan\_EDL\_2006]** Krithivasan et al., “Half-terahertz operation of SiGe HBTs”, Electron Device Letters, 2006, 27, 567-569.

- [Lambert]** M. Lambert, “Relativité restreinte et électromagnétisme”, 2000, Ellipses.
- [Lherbier\_NanoLett\_2013]** A. Lherbier et al., “Electronic and Transport Properties of Unbalanced Sublattice N-Doping in Graphene”, *Nano Letters*, 2013, 13, 1446-1450.
- [Liang\_NanoLett\_2010]** Liang et al., “Formation of Bandgap and Subbands in Graphene Nanomeshes with Sub-10 nm Ribbon Width Fabricated via Nanoimprint Lithography”, *Nano Letters*, 2010, 10, 2454-2460.
- [Liao\_Nature\_2010]** X. Liao et al., “High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate”, *Nature*, 2010, 467, 305-308.
- [Lin-Y.M.\_Science\_2010]** Lin et al., “100-GHz Transistors from Wafer-Scale Epitaxial Graphene”, *Science*, 2010, 327, 662.
- [Liu\_PRB\_2009]** Liu et al., “Band-gap scaling of graphene nanohole superlattices”, *Phys. Rev. B*, American Physical Society, 2009, 80, 233405.
- [Liu\_Small\_2013]** Liu et al., “Universal Rule on Chirality-Dependent Bandgaps in Graphene Antidot Lattices”, *Small*, WILEY-VCH Verlag, 2013, 9, 1405-1410.
- [Lv-R\_SciRep\_2012]** R. Lv et al., “Nitrogen-doped graphene: beyond single substitution and enhanced molecular sensing”, *Sci. Rep.*, 2012, 2, -.
- [Mayorov\_NanoLett\_2011]** Mayorov et al., “Micrometer-Scale Ballistic Transport in Encapsulated Graphene at Room Temperature”, *Nano Letters*, 2011, 11, 2396-2399.
- [McCann\_PRB\_2006]** McCann et al., “Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene”, *Phys. Rev. B*, 2006, 74, 161403.
- [McCann\_RepProgPhys\_2013]** McCann, Koshino et al., “The electronic properties of bilayer graphene”, *Reports on Progress in Physics*, 2013, 76, 056503.
- [Meric\_Nature\_Nano\_2008]** I. Meric et al., “Current saturation in zero-bandgap, top-gated graphene field-effect transistors”, *Nature nano*, 2008.
- [Meric\_NanoLett\_2011]** Meric et al., “Channel Length Scaling in Graphene Field-Effect Transistors Studied with Pulsed Current-Voltage Measurements”, *Nano Letters*, 2011, 11, 1093-1097.
- [Meric\_IEEE\_Proc\_2013]** Meric et al., “Graphene Field-Effect Transistors Based on Boron-Nitride Dielectrics”, *Proceedings of the IEEE*, 2013, 101, 1609-1619.
- [Min-HK\_PRB\_2007]** Min, H.K. et al., “Ab initio theory of gate induced gaps in graphene bilayers”, *Phys. Rev. B*, 2007, 75, 155115.
- [Morozov\_PRL\_2008]** Morozov et al., “Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer”, *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, 2008, 100, 016602.

**[Mun\_APL\_2012]** Mun and Cho, "Physical-gap-channel graphene field effect transistor with high on/off current ratio for digital logic applications ", Appl. Phys. Lett., 2012, 101, 143102.

**[Nguyen-VH\_APL\_2009]** V. H. Nguyen et al., "Resonant tunneling and negative transconductance in single barrier bilayer graphene structure", Applied Physics Letters, AIP, 2009, 95, 232115.

**[Nguyen\_Nanotech\_2012]** V. H. Nguyen et al., "Graphene nanomesh-based devices exhibiting a strong negative differential conductance effect", Nanotechnology, 2012, 23, 065201.

**[Nguyen\_Semicon\_2012]** V. H. Nguyen et al., "Gate-controllable negative differential conductance in graphene tunneling transistors", Semiconductor Science and Technology, 2012, 27, 105018.

**[Nguyen\_JAP\_2013]** V. H. Nguyen et al., "Disorder effects on electronic bandgap and transport in graphene-nanomesh-based structures", Journal of Applied Physics, AIP, 2013, 113, 013702.

**[Nguyen\_JPD\_2014]** V. H. Nguyen et al., "On the non-linear effects in graphene devices", J. Phys. D: Appl. Phys, 2014, 47, 094007.

**[Nguyen\_Nanotech\_2014]** V. H. Nguyen et al., "Improved performance of graphene transistors by strain engineering", Nanotechnology, 2014, 25, 165201.

**[Nguyen\_Arxiv\_2014]** V. H. Nguyen et al., "Conduction gap in graphene strain junctions: direction dependence", arXiv:1403.5310.

**[Niquet\_JAP\_2014]** Y. M. Niquet et al., "Quantum calculations of the carrier mobility: Methodology, Matthiessen's rule, and comparison with semi-classical approaches", Journal of Applied Physics, 2014, 115, 054512.

**[Novoselov\_Science\_2004]** Novoselov et al., "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films", Science, 2004, 306, 666-669.

**[Novoselov\_Science\_2005]** Novoselov, "Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene", Nature, 2005, 438, 197-200.

**[Numerical\_recipies]** W. H. Press et al., "Numerical Recipes in C", Cambridge university press

**[Ohba\_PRB\_2001]** Ohba et al., "First-principles study on structural, dielectric, and dynamical properties for three BN polytypes", Phys. Rev. B, 2001, 63, 115207.

**[Oswald\_PRB\_2012]** Oswald et Wu, "Energy gaps in graphene nanomeshes", Phys. Rev. B, American Physical Society, 2012, 85, 115431.

**[Ouyang\_ACSNano\_2011]** Ouyang et al., "Bandgap Opening in Graphene Antidot Lattices: The Missing Half", ACS Nano, 2011, 5, 4023-4030.

**[Pedersen\_PRL\_2008]** Pedersen et al., “Graphene Antidot Lattices: Designed Defects and Spin Qubits”, Phys. Rev. Lett., 2008, 100, 136804.

**[Querlioz\_PRB\_2008]** Querlioz et al., "Wigner Monte Carlo simulation of phonon-induced electron decoherence in semiconductor nanodevices", Phys. Rev. B, 2008, 78, 165306.

**[Querlioz\_APL\_2008]** Querlioz et al., "Suppression of the orientation effects on bandgap in graphene nano-ribbons in the presence of edge disorder", Appl. Phys. Lett., 2008, 92, 042108.

**[Rosales\_PRB\_2009]** Rosales et al., “Transport properties of antidot superlattices of graphene nanoribbons », Phys. Rev. B, 2009, 80, 073402.

**[Schwierz\_NatNano\_2010]** Schwierz, “Graphene transistors », Nat Nano, Nature Publishing Group, 2010, 5, 487-496.

**[Safron\_AdvMat\_2012]** Safron et al., “Barrier-Guided Growth of Micro- and Nano-Structured Graphene”, Advanced Materials, 2012, 24, 1041-1045.

**[Sahin\_PRB\_2011]** SahinetCiraci, “Structural, mechanical, and electronic properties of defect-patterned graphene nanomeshes from first principles”, Phys. Rev. B, American Physical Society, 2011, 84, 035452.

**[Sinitskii\_JACS\_2010]** Sinitskii et al., “Patterning Graphene through the Self-Assembled Templates: Toward Periodic Two-Dimensional Graphene Nanostructures with Semiconductor Properties”, Journal of the American Chemical Society, 2010, 132, 14730-14732.

**[Solis-Fernandez\_AdvMat\_2013]** S. Fernandez et al., “Dense Arrays of Highly Aligned Graphene Nanoribbons Produced by Substrate-Controlled Metal-Assisted Etching of Graphene”, Advanced Materials, 2013, 25, 6562-6568.

**[Stander\_PRL\_2009]** Stander et al., “Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions”, Phys. Rev. Lett., American Physical Society, 2009, 102, 026807.

**[Szafranek\_NanoLett\_2012]** Szafranek et al., “Current Saturation and Voltage Gain in Bilayer Graphene Field Effect Transistors”, Nano Letters, 2012, 12, 1324-1328.

**[Taniguchi\_JCrysGrow\_2007]** Taniguchi et al., “Synthesis of high-purity boron nitride single crystals under high pressure by using Ba-BN solvent”, Journal of Crystal Growth, 2007, 303, 525-529.

**[Vaziri\_NanoLett\_2013]** Vaziri et al., “A Graphene-Based Hot Electron Transistor”, Nano Lett., 2013, 13, 1435–1439.

**[Wakabayashi\_2010]** K. Wakabayashi et al., “Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions”, Science and Technology of Advanced Materials, 2010, 11, 054504.

**[Wallace\_PR\_1947]** Wallace, “The Band Theory of Graphite”, Phys. Rev., 1947, 71, 622.

**[Wang\_IEEE\_TED\_2003]** J. Wang et al., “Ballistic transport in high electron mobility transistors”, Electron Devices, IEEE Transactions on, 2003, 50, 1604-1609.

**[Watanabe\_Nature\_Mat\_2004]** Watanabe et al., “Direct-bandgap properties and evidence for ultraviolet lasing of hexagonal boron nitride single crystal”, *Nat. Mater*, 2004, 3, 404-409.

**[Wilmart\_2DMater\_2014]** Q. Wilmart et al., “Klein-tunneling transistor with ballistic graphene”, accepté dans le journal “2D Materials”, sous presse.

**[Wu\_Nature\_2011]** Y. Wu et al., “High-frequency, scaled graphene transistors on diamond-like carbon”, *Nature*, Nature Publishing Group, a division of Macmillan Publishers Limited. All Rights Reserved., 2011, 472, 74-78.

**[Wu\_NanoLett\_2012]** Y. Wu et al., “State-of-the-Art Graphene High-Frequency Electronics”, *Nano Letters*, 2012, 12, 3062-3067.

**[Wu\_NanoLett\_2012-2]** Y. Wu et al., “Quantum Behavior of Graphene Transistors near the Scaling Limit”, 2012, *Nano Letters*, 2012, 12, 1417-1423.

**[Xia-F\_NanoLett\_2010]** Xia et F., “Graphene Field-Effect Transistors with High On/Off Current Ratio and Large Transport Band Gap at Room Temperature”, *Nano Letters*, 2010, 10, 715-718

**[Xia\_NatNano\_2011]** F. Xia et al., “The origins and limits of metal–graphene junction resistance”, *Nat. Nanotechnol.* 6, 179 (2011).

**[Xia\_NatNano\_2009]** Xia et al., « Ultrafast graphene photodetector », *Nat Nano*, Nature Publishing Group, 2009, 4, 839-843 .

**[Xia-F\_NanoLett\_2010]** Xia et al., “Graphene Field-Effect Transistors with High On/Off Current Ratio and Large Transport Band Gap at Room Temperature”, *Nano. Letters*, 2010, 10, 715-718.

**[Xue\_Nature\_Mat\_2011]** Xue et al., “Scanning tunnelling microscopy and spectroscopy of ultra-flat graphene on hexagonal boron nitride”, *Nat Mater*, Nature Publishing Group, 2011, 10, 282-285.

**[Yan\_PhysLettA\_2012]** Y. Yan, “Thermoelectric properties of one-dimensional graphene antidot arrays”, *Phys. Lett. A*, 2012, 35, 2425–2429.

**[Yang\_PRB\_2011]** Yang et al., “Inducing and optimizing magnetism in graphene nanomeshes”, *Phys. Rev. B*, 2011, 84, 214404.

**[Yang\_Science\_2012]** Yang et al., “Graphene Barristor, a Triode Device with a Gate-Controlled Schottky Barrier”, *Science*, 2012, 336, 1140-1143.

**[Young-A\_NatPhys\_2009]** Young, A. et al., “Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions”, *Nat. Phys*, Nature Publishing Group, 2009, 5, 222-226.

**[Zhao-L\_Science\_2011]** Zhao et al., “Visualizing Individual Nitrogen Dopants in Monolayer Graphene”, *Science*, 2011, 333, 999-1003.



**[Zhang\_NatureLett\_2009]** Zhang et al., "Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene", Nature, 2009, 459, 820-823

**[Zhang-A\_APL\_2011]** Zhang, A. et al., "Band gap engineering in graphene and hexagonal BN antidot lattices" A first principles study", Applied Physics Letters, AIP, 2011, 98, 023105.

**[Zhou\_NatMat\_2007]** Zhou et al., "Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene", Nat Mater, 2007, 6, 770-775.

**[Zomer\_APL\_2011]** Zomer et al., « A transfer technique for high mobility graphene devices on commercially available hexagonal boron nitride », Applied Physics Letters, 2011, 99, 232104.

# Bibliographie de l'auteur

## Articles de revues

- 1) **S. Berrada**, V. Hung Nguyen, A. Alarcón, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, C. Chassat and P. Dollfus, "Graphene Nanomesh Transistors with high on/off ratio and good current saturation", *Appl. Phys. Lett.* 103 (2013) 183509.
- 2) Q. Wilmart, **S. Berrada**, D. Torrin, V. H. Nguyen, G. Fève, J.-M. Berroir, P. Dollfus, and B. Plaçais, 'Klein-tunneling transistor with ballistic graphene', accepté à *2D Materials*, sous presse.
- 3) Alarcón A, Nguyen V Hung, **S. Berrada**, Querlioz D, Saint-Martin J, Bournel A et Dollfus P. "Pseudosaturation and Negative Differential Conductance in Graphene Field-Effect Transistors", *IEEE Trans. Electron Devices* 60 (2013) 985-991.
- 4) Viet Hung Nguyen, Alarcón A, **S. Berrada**, Do V N, Saint-Martin J, Querlioz D, Bournel A et Philippe Dollfus, "On the non-linear effects in graphene devices", *J. Phys. D: Appl. Phys* (2014) 094007.

## Conférences

### *Conférences invitées*

- 1) A. Bournel, V. Hung Nguyen, A. Alarcón, **S. Berrada**, D. Van Nam, J. Saint-Martin, D. Querlioz, P. Dollfus, présentation orale, "Non Linear Effects in Graphene devices", 2nd Ukrainian-French Seminar on SOI materials, devices and circuits, Kiev, Ukraine, Avril 8-11, 2013.
- 2) P. Dollfus, V. Hung Nguyen, **S. Berrada**, J. Saint-Martin, D. Querlioz, A. Bournel, S. Retailleau, "Carbon-based devices: a modelling viewpoint", 2nd International Semiconductor Conference Dresden-Grenoble (ISCDG 2013), Dresden, Germany, September 26-27, 2013.

### *Conférences avec acte*

- 3) **S. Berrada**, V. Hung Nguyen, A. Alarcón, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, C. Chassat, P. Dollfus, "Graphene Nanomesh Transistors with high on/off ratio and good current saturation", présentation orale à "16th International Workshop of Computational

Electronics (IWCE 2013)”, Nara, Japon, Juin 3-6, 2013. ISBN: 978-3-901578-26-7 (2013) 34-35.

4)**S. Berrada**, Q. Wilmart, V. Hung Nguyen, D. Torrini, G. Fève, J.-M. Berroir, P. Dollfus<sup>1</sup>, and B. Plaçais, “Graphene-based Klein tunneling transistor”, accepté pour présentation orale à “17th International Workshop of Computational Electronics (IWCE 2014)”, Paris, France.

5)**A. Alarcón**, V. Hung Nguyen, **S. Berrada**, J. Saint-Martin, A. Bournel, P. Dollfus, “Negative differential conductance and chiral effects in graphene field-effect transistors”, présentation orale à 15th “International Workshop on Computational Electronics (IWCE 2012)”, Madison, USA, Mai 22-25, 2012. ISBN: 978-1-4673-0705-5 (2012), IEEE Xplore (DOI: 10.1109/IWCE.2012.6242820).

### *Conférences sans actes*

6)**S. Berrada**, V. Hung Nguyen, A. Alarcón, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, C. Chassat and P. Dollfus, “Numerical simulation of Graphene Nanomesh Transistors With high On/off ratio”, présentation orale à “Graphene 2013”, Bilbao, Espagne, Avril 23-26, 2013.

7)**S. Berrada**, V. Hung Nguyen, A. Alarcón, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, C. Chassat and **P. Dollfus**, “ Numerical simulation of Graphene Nanomesh Transistors”, présentation orale à “Annual Meeting of GDR-I Graphene and Nanotubes (GNT 2013)”, Guidel-Plages, France, Avril 8-12, 2013.

8)**S. Berrada**, M. Chung Nguyen, V. Hung Nguyen, H. Viet Nguyen, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, C. Chassat and P. Dollfus. “Graphene Nanomesh, a new road towards high performance graphene transistors”, Poster à 3rd International Symposium on Graphene Devices (ISGD-3), Saint Aubin, France, Novembre 5-9, 2012.