

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

Résumé : Le but de ce projet est la simulation multi-échelle des transistors à nanotubes de carbone. Les compétences des partenaires couvrent toutes les échelles de simulation, du détail atomistique jusqu'aux fonctions électroniques impliquant quelques transistors. Un enjeu important est d'établir des passerelles entre ces techniques complémentaires. Les méthodologies de simulation les plus fines sont utilisées pour étudier les effets quantiques liés aux dimensions nanométriques, le rôle des contacts métalliques, le couplage électron-phonon, ainsi que la modification des caractéristiques des transistors sous l'effet d'impuretés ou de molécules greffées. Les simulations sont confrontées aux expériences réalisées dans les laboratoires du CEA, et elles servent de base à l'élaboration de modèles compacts de dispositifs. Certains modèles sont ensuite intégrés dans un logiciel commercial de simulation de circuits. Ceci permettra d'évaluer le potentiel réel des transistors à nanotubes pour diverses applications : circuits logiques et analogiques, capteurs chimiques.

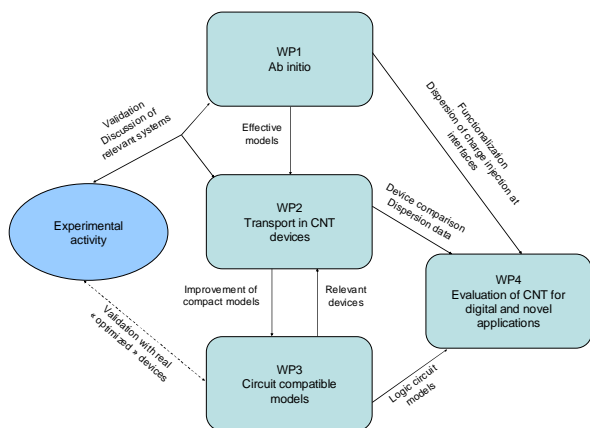
Partenaires et compétences pour le projet :

- LETI-MINATEC → **transport quantique dans les nanodispositifs**
F. Triozon (coordonnateur), S. Roche, G. Lecarval
- LPMCN (UCB Lyon I et CNRS) → **calculs ab initio**
X. Blase, C. Adessi
- IEF (CNRS et Univ. Paris Sud, Orsay) → **simulations Monte Carlo**
S. Retailleau, Ph. Dollfus
- IMS (CNRS Bordeaux) → **modèles analytiques et compacts**
C. Maneux, Th. Zimmer
- SILVACO DATA SYSTEMS → **simulation de circuits**
E. Guichard, B. Achard

Liens avec les groupes expérimentaux :

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

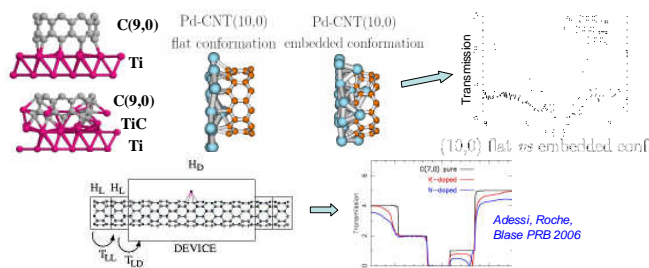
Diagramme des « work packages » :



Calculs ab initio

Les techniques *ab initio* basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) permettent de décrire la structure électronique de petits systèmes (quelques centaines d'atomes), en prenant en compte la complexité à l'échelle atomique. Les systèmes étudiés au LPMCN sont : des interfaces métal/nanotube, des dopants adsorbés ou substitutionnels, et des molécules greffées sur des nanotubes.

Partant d'un choix initial de positions atomiques, le code DFT SIESTA est utilisé pour relaxer la structure et calculer l'état fondamental. La localité de la base d'orbitales atomiques permet ensuite d'utiliser le formalisme des fonctions de Green pour calculer la transmission électronique (formalisme de Landauer-Büttiker).



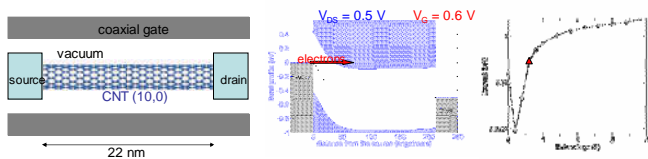
La DFT permet aussi de calculer les modes de phonons et le couplage electron-phonon, important pour le transport.

Des méthodologies sont en cours de développement pour transférer toutes ces données ab initio vers la simulation de dispositifs. Actuellement, l'effort principal porte sur le transfert des données fines pour les contacts métal/nanotube (collaboration LPMCN-CEA-IEF).

Simulation « NEGF » et Monte Carlo des transistors à nanotube

Le CEA développe un code de simulation quantique des nano-dispositifs, basé sur le formalisme des fonctions de Green hors-équilibre (NEGF). Le nanotube constituant le canal du transistor est décrit par un modèle de liaisons fortes, ce qui facilite le couplage avec les méthodes *ab initio*.

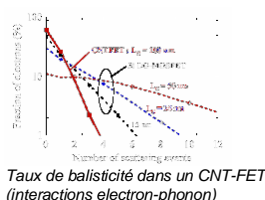
Le formalisme NEGF est bien adapté pour décrire les phénomènes de confinement quantique et d'effet tunnel aux interfaces (contacts Schottky).



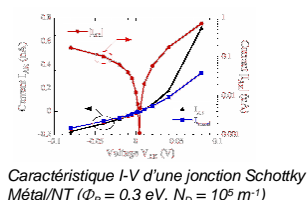
Simulation NEGF d'un CNT-FET à contacts Schottky idéaux

L'IEF développe le code MONACO pour la simulation Monte-Carlo des dispositifs. Un modèle semi-classique adapté aux nanotubes a été élaboré, en prenant en compte les interactions électron-phonon. Cela permet de simuler des transistors à contacts ohmiques et de valider/améliorer le modèle compact élaboré par l'IMS. Plus récemment, une modélisation du courant tunnel à travers des contacts Schottky a été mise au point et elle est en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Les techniques Monte Carlo sont bien adaptées à la prise en compte des interactions (phonons ou impuretés), et donnent aussi accès au comportement fréquentiel du dispositif.



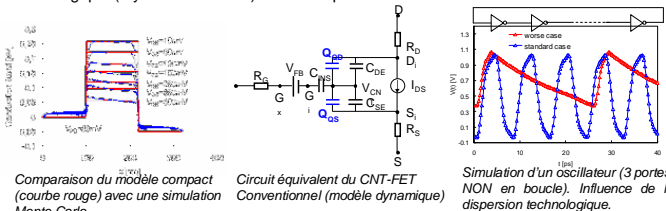
Taux de balisticité dans un CNT-FET (interactions electron-phonon)



Caractéristique I-V d'une jonction Schottky Métal/NT ($\phi_b = 0.3$ eV, $N_D = 10^{20}$ m⁻³)

Modèles compacts Simulation de circuits

L'IMS élabore des modèles compacts de CNT-FETs. Un premier modèle compact a été mis au point pour les transistors à contacts ohmiques. Ce modèle a été appelé ACSOM (Analytical Charge Solution Model). Les hypothèses physiques du modèle ont été validées par les simulations Monte Carlo de l'IEF. Ce modèle a permis de simuler un oscillateur réalisé expérimentalement par IBM (Z. Chen et al., Science 2006). L'effet de la dispersion technologique (rayon du nanotube) sur le comportement du circuit a été évalué.



Simulation d'un oscillateur (3 portes NON en boucle). Influence de la dispersion technologique.

L'IMS et la société SILVACO collaborent pour utiliser les modèles compacts de CNT-FETs dans le logiciel Smartspice, développé et commercialisé par SILVACO. Cela permettra la simulation de circuits utilisant le CNT-FET comme dispositif de base, ou de circuits hybrides combinant les technologies silicium et nanotube. Le modèle compact ACSOM a été fourni en langage comportemental « Verilog-A » à SILVACO, qui a validé sa bonne intégration dans le logiciel. L'intégration des modèles par SILVACO permettra d'exploiter au mieux les résultats obtenus par tous les partenaires du projet en évaluant les performances des nanotubes pour les applications en électronique.