



# Soutenance de Thèse

Le 02 décembre 2016 à 10h30  
salle P. Grivet Rdc pièce 44

**Mai Chung NGUYEN**

Etude théorique de nanodispositifs électroniques et thermoélectriques à base de jonctions contraintes de graphène

\*\*\*\*\*

Theoretical study of electronic and thermoelectronic nanodevices based on strained graphene junctions

## Membres du jury :

Mme. Mireille MOUIS, Directrice de Recherche, CNRS, IMEP-LAHC, Grenoble, Rapporteur  
M. Nicolas CAVASSILAS, Maître de Conférence, Université d'Aix-Marseille, IM2NP, Rapporteur

M. Henri HAPPY, Professeur, Université de Lille 1, IEMN, Examineur

M. Viet Hung NGUYEN, Chercheur, Institute of Physics Hanoi, Examineur

M. Huy-Viet NGUYEN, Chercheur, Institute of Physics Hanoi, Co-directeur de thèse

M. Philippe DOLLFUS, Directeur de Recherche, CNRS, C2N, Orsay, Directeur de thèse

## Résumé FR:

De par ses extraordinaires propriétés physiques, on s'attend à ce que le graphène devienne un matériau de nouvelle génération, susceptible de compléter les semiconducteurs traditionnels dans les technologies de dispositifs électroniques. Depuis sa découverte expérimentale en 2004, de nombreux travaux ont cherché à en évaluer les potentialités. Toutefois, en vue d'applications en électronique, le graphène souffre d'un inconvénient majeur: l'absence de bande interdite dans sa structure de bandes. Ainsi, il est très difficile de moduler et couper le courant dans un transistor de graphène, ce qui restreint considérablement son champ d'applications. Du point de vue des propriétés thermoélectriques, l'absence de bande interdite empêche la séparation des contributions opposées des électrons et des trous au coefficient Seebeck, qui reste donc faible dans le graphène parfait. Aussi, l'ouverture d'une bande interdite (gap) dans le graphène est une nécessité pour contourner les inconvénients de ce matériau et bénéficier pleinement de ses excellentes propriétés de conduction. Il a été montré que de nombreuses approches de nanostructuration peuvent être utilisées dans ce but: découpage de nanorubans de graphène, bicouche de graphène avec application d'un champ électrique transverse, percement d'un réseau périodique de nano-trous (nanomesh), structures mixtes de graphène et de nitrure de bore, donage du graphène à l'azote. Cependant toutes ces approches ont leurs propres

difficultés de fabrication et/ou restent encore à confirmer expérimentalement. Dans ce travail, je me suis focalisée sur une autre approche : l'ingénierie de contrainte, qui offre un large éventail de possibilités pour moduler les propriétés électroniques des nanostructures de graphène. Pour ce travail théorique, tous les calculs ont été faits en utilisant essentiellement deux méthodes: un modèle atomistique de Hamiltonien de liaisons fortes pour décrire les propriétés électroniques du matériau et l'approche des fonctions de Green hors-équilibre pour le calcul du transport quantique. Après une introduction du contexte général de ce travail et des techniques de calcul développées dans ce but, j'ai d'abord analysé les effets de contrainte. En fait, une contrainte d'amplitude supérieure à 23% est nécessaire pour ouvrir un gap dans la structure de bande du graphène. Mais je montre qu'avec une contrainte de quelques pourcents, le décalage du point de Dirac induit par la contrainte peut suffire à ouvrir un gap de conduction très significatif (500 meV ou plus) dans des hétérostructures de graphène constituées de jonctions graphène contraint / graphène non contraint, alors que chacun des matériaux reste semi-métallique. Après l'analyse détaillée de cette propriété en fonction de l'amplitude de la contrainte, de sa direction et de la direction du transport, j'exploite cet effet dans des jonctions appropriées pour améliorer le comportement et les performances de différents types de dispositifs. En particulier, je montre qu'avec une contrainte de seulement 5% il est possible de couper efficacement le courant dans les transistors, de sorte que le rapport ON/OFF peut atteindre  $10^5$ , ce qui constitue une très forte amélioration par rapport aux transistors de graphène pristine où ce rapport ne peut pas excéder 10. Puis, nous montrons qu'en combinant ingénieries de contrainte et de dopage dans de telles jonctions, le coefficient Seebeck peut atteindre des valeurs aussi fortes que 1.4 mV/K, ce qui est 17 fois plus élevé que dans le graphène sans gap. Cela peut contribuer à faire du graphène un excellent matériau thermoélectrique. Enfin, j'ai étudié l'effet de conductance différentielle négative (CDE) dans des diodes de graphène, constituées soit d'une simple-barrière contrainte contrôlée par une grille, soit d'une jonction PN. Je montre qu'une ingénierie de contrainte appropriée peut induire de forts effets de CDE, avec un rapport pic/vallée de quelques centaines à température ambiante.

## **Abstract :**

Due to its outstanding physical properties, graphene is expected to become a new generation material, able to replace or complement traditional semiconductors in device technology. Hence, many studies have been led to explore the potential of this material immediately after the successful fabrication of a single layer of graphene in 2004. However, applications of graphene in electronic devices are still questionable due to the gapless character of this material. In particular, regarding electronic applications, the absence of energy bandgap in the band structure makes it difficult to switch off the current in graphene devices like transistors. Regarding thermoelectric properties, the gapless character is also a strong drawback since it prevents the separation of the opposite contributions of electrons and holes to the Seebeck coefficient. Thus, a sizable band gap in graphene is a requirement to overcome the disadvantages of graphene and to fully benefit from its excellent conduction properties. It has been shown that many nanostructuring techniques can be used to open such a bandgap in graphene, e.g., graphene nanoribbons, graphene bilayer with a perpendicular electric field, graphene nanomesh lattices, channels based on vertical stack of graphene layers, mixed graphene/hexagonal boron nitride structures, nitrogen doped graphene, and so on. However, each of these methods has its own fabrication issues and/or need to be further confirmed by experiments. In this work, we focus on strain engineering, which offers a wide range of opportunities for modulating the electronic properties of graphene nanostructures. For this theoretical work, all calculations were performed using essentially two main methods. i.e., an atomistic tight binding Hamilto-

nian model to describe the electronic structure and the non-equilibrium Green's function approach of quantum transport. The main aim is to analyze in details the strain effects in graphene and to provide strategies of strain engineering to improve the performance of both electronic (transistors and diodes) and thermoelectric devices.

After introducing the general context of this work and the numerical techniques developed for this purpose, we first analyze the only effect of strain. Actually, if uniformly applied, a strain of large amplitude ( $> 23\%$ ) is required to open a bandgap in the band structure of graphene. However, we show that with a strain of only a few percent, the strain-induced shift of the Dirac point in k-space may be enough to open a sizable conduction gap (500 meV or more) in graphene heterojunctions made of unstrained/strained junctions, though the strained material remains gapless. After analyzing in details this property according to the amplitude and direction of strain and the direction of transport, we exploit this effect using appropriate strain junctions to improve the behavior and performance of several types of devices. In particular, we show that with a strain of only 5%, it is possible to switch-off transistors efficiently, so that the ON/OFF current ratio can reach  $10^5$ , which is a strong improvement with respect to pristine graphene transistors where this ratio cannot exceed 10. Then we show that by combining strain and doping engineering in such strain junctions the Seebeck coefficient can reach values higher than 1.4 mV/K, which is 17 times higher than in gapless pristine graphene. It can contribute to make graphene an excellent thermoelectric material. Finally, we study the effect of negative differential conductance (NDC) in graphene diodes made of either as single gate-induced strained barrier or a p-n junction. We show that appropriate strain engineering in these devices can lead to very strong NDC effects with peak-to-valley ratios of a few hundred at room temperature.

**Mots clés :** Électroniques et thermoélectriques, nanodispositifs, l'ingénierie de contrainte, jonctions graphène contraint /graphène non contraint, gap de conduction.

**Keywords:** Electronic and thermoelectronic, nanodevices, strain engineering, unstrained/strained graphene junctions, conduction gap.

Vous êtes cordialement invités au pot qui suivra cette soutenance