

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Mohammed Seddik Ben Yahia -Jijel-
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département d'Électronique

جامعة محمد الصديق بن يحيى - جيجل -
كلية العلوم والتكنولوجيا
قسم الإلكترونيك

Mémoire

En vue de l'obtention du diplôme de
Master II en Électronique

Option : Microélectronique

Thème

*Modélisation de la capacité quantique du
graphène mono et bicouche*

Encadré par :

Dr. FATES Rachid

Dr. REMMOUCHE Riad

Réalisé par :

Abdi Racim

Benchemam Mohamed Yacine

Promotion Juin 2021

Remerciements

Tout d'abord, nous exprimons nos remerciements à Allah, le tout puissant, de nous avoir donné de la force, la patience, le courage et la volonté à surmonter toutes les difficultés afin d'accomplir ce travail.

*Au terme de la réalisation de ce travail, nous avons l'honneur et le plaisir d'exprimer notre profonde gratitude et nos sincères remerciements à **D^r. FATES Rachid et D^r. REMMOUCHE Riad** non seulement d'avoir accepté l'encadrement de ce travail, mais aussi pour leurs aides, leurs conseils avisés, leurs gentillesse et leurs disponibilités à toute épreuve. Nous sommes très reconnaissants pour leurs grandes contributions.*

*On tient à remercier chaleureusement les membres de jury **D^r. HAOUES Hakim et M^r. BENKEDIDAH Toufik** d'avoir accepté de juger et d'examiner ce travail.*

Nous exprimons aussi notre gratitude à tous les enseignants rencontrés lors de notre cycle universitaire.

A toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

Racim et M^{ed} Yacine

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à :

*À mes **très chers parents**, qui m'ont tout donné sans rien en retour, m'encouragé et me soutenu durant toutes mes études, pour leurs conseils qui ont toujours guidé mes pas vers la réussite. Aucune dédicace ne saurait exprimer mon grand amour, mon estime, ma vive gratitude, et ma profonde affection. Qu'ALLAH vous protège.*

*À ma chère sœur **Tinhinane**, pour sa présence constante dans tous les moments difficiles, sa patience, je n'oublierais jamais ton encouragement et ton soutien le long de mes études, je te souhaite beaucoup de succès, de prospérité et une vie pleine de joie et de bonheur.*

*À **Nouraima**, merci de m'avoir remonté le moral, encouragé, et soutenu jusqu'à la dernière minute, je n'oublierais jamais votre bonté et votre aide.*

*À **tous mes amis**, en particulier mon binôme **Yacine**, qui a partagé avec moi tous les moments pour réaliser ce travail.*

Je remercie toutes les personnes, qui m'ont encouragé et soutenu dans les moments difficiles.

Merci à tous

Abdi Racim

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

Je dédie un remerciement particulier à tous les professeurs qui nous ont accompagnés ces dernières années et qui se sont attelés à la tâche de nous transmettre tout le savoir nécessaire à notre formation.

Sans oublier nos encadreurs qui ont toujours répondu présents pour nous guider dans notre travail.

Et enfin, ma famille qui m'a accompagné tout au long en m'apportant un univers de soutien et d'encouragement.

Benchemam M^{ed} Yacine

Liste des figures

Figure I.1. Structure 2D du graphène.....	4
Figure I.2. Le graphène à partir du graphite.....	5
Figure I.3. Réseaux réel et réciproque du graphène.....	6
Figure I.4. Illustration des différentes orbitales. (A) Symétrie sphérique pour l'orbitale S. (B) Symétrie axiale pour l'orbitale P.	7
Figure I.5. Représentation des orbitales "Px", "Py" et "Pz".....	7
Figure I.6. Illustration de l'hybridation du l'orbitale SP ²	8
Figure I.7. Liaison « π » dans le graphène.	8
Figure I.8. Illustration de la liaison σ	9
Figure I.9. Représentation schématique des liaisons σ et les liaisons π	9
Figure I.10. Structure de bande d'énergie du graphène.	10
Figure I.11. Illustration du graphène monocouche.	12
Figure I.12. Mode d'empilement AA et AB du graphène bicouche.....	13
Figure I.13. Représentation des relations de dispersion aux voisinages du point de Dirac dans le graphène : (a) monocouche, (b) bicouche, et (c) tricouche.	14
Figure I.14. Microscope optique.	14
Figure I.15. Microscope électronique à balayage.	15
Figure I.16. Spectre Raman typique du graphène (a) monocouche (b) bicouche.	16
Figure I.17. Schéma du transfert de graphène par exfoliation.	18
Figure I.18. Illustration des polytypes de SiC les plus couramment utilisé en épitaxie. ...	19
Figure I.19. Schéma et photographie d'une chambre CVD.	20
Figure I.20. Illustration des différentes utilisations du graphène et des matériaux apparentés (GRM) pour les applications électroniques et photoniques.	21
Figure I.21. Illustration des différentes utilisations du graphène et des matériaux connexes (GRM) pour les applications de stockage et de production d'énergie.	22
Figure I.22. Illustration des applications du graphène	23

Figure II.1. Image topographique d'un échantillon de graphène obtenue par STM..... 32

Figure II.2. Effet du dopage du graphène par des atomes de potassium sur la dépendance de la conductivité en fonction de la tension de grille..... 33

Figure II.3. Dispositif de graphène monocouche. Schéma de l'appareil de mesure de capacité quantique. 35

Figure II.4. La relation entre (a) la capacité du graphène et (b) le potentiel de grille. 36

Figure II.5. Dépendance de la capacité quantique en fonction du potentiel du graphène (V_{ch}). Ajustement de la capacité mesurée (points bleus points) avec la théorie (ligne rouge)..... 38

Figure II.6. (a) Configuration expérimentale du graphène à grille. (b) Structure de bande à $k \simeq 0$. Le diagramme d'énergie pour (c) $U=0$, (d) $U < 0$ et (e) $U > 0$ 41

Figure III.1. Vue schématique du graphène bicouche dans l'empilement de Bernal (a) et des bandes de faible énergie du graphène bicouche parfait (b). 46

Figure III.2. Dépendance en température de la capacité quantique en fonction du niveau de Fermi pour un dispositif à base de graphène monocouche. 50

Figure III.3. Dépendance en température de la capacité quantique simulée en fonction d' E_F 51

Figure III.4. Dépendance de la capacité quantique en fonction de E_F à la vitesse de Fermi : (a) $T=300K$, (b) $T=200K$, (c) $T=77K$, et (d) $T=4.2K$ 52

Liste des tableaux

Tableau I.1. Propriétés principales du graphène..... 12

Liste des abréviations

°C : degré Celsius.

2D : Bidimensionnel.

2DEG : états des gaz d'électrons bidimensionnel.

3C-SiC : Carbonate de silicium cubique.

3D : tridimensionnel.

CVD : dépôt chimique en phase vapeur.

4H-SiC : Carbonate de silicium en forme hexagonales.

6H-SiC : Carbonate de silicium forme hexagonales.

Å : Unité de longueur (Ångström).

AFM : Microscopie à force atomique.

Au : Or.

BC : bande de conduction.

BMIM-PF6 : Hexafluorophosphate de 1-butyl-3-méthylimidazolium.

BV : bande de valence.

C : carbone.

CH₄ : gaz du méthane.

Ci : capacité double couche du liquide ionique.

Co : cobalt.

C_{ox} : la capacité d'oxyde supérieur par unité de surface.

C_Q : la capacité quantique.

Cr : Chrome.

Cu : cuivre.

d : distance.

DOS : la théorie de la densité d'états.

E₀ : Énergie au point Dirac.

E_F : énergie Fermi (eV).

GPa : Gigapascal.

GRM : matériaux apparentés au graphène.

h : la constante de Planck réduite.

H_2 : gaz de l'Hydrogène.

I_D : courant de drain (Ampère).

I_G : courant de grille (Ampère).

Ir : iridium.

k_B : Constante de Boltzmann ($J.K^{-1}$).

l : nombre quantique azimutal.

LIB : batterie au lithium-ion.

MEB : microscopie électronique à balayage.

MOSFET : Transistor Métal/Oxyde/Semiconducteur à Effet de champ.

Ni : nickel.

OLED : diode électroluminescente organique.

P3HT : Poly (3-hexylthiophène).

PANI : polyaniline.

PEDOT : Poly (3,4-éthylènedioxythiophène).

pH : Potentiel hydrogène.

PSS : Poly (styrène sulfonate) de sodium.

Pt : platine.

PVDF : polyfluorure de vinylidène.

RLB : batterie au lithium rechargeable.

Si : silicium.

SiO_2 : dioxyde de silicium.

STM : microscopie à effet tunnel.

T : Température (Kelvin).

TPa : Térapascal.

V_b : La tension de grille arrière (Volt).

V_{CH} : la chute de tension aux bornes de la capacité quantique (Volt).

V_d : Le potentiel du contact de drain (Volt).

V_{DS} : Tension drain – source (Volt).

v_F : la vitesse de Fermi (m /s).

V_g : La tension de grille supérieure (Volt).

Sommaire

Liste des figuresi
Liste des tableauxii
Liste des abréviationsiii
Introduction générale.....	.1

CHAPITRE I — Etat d’art sur le graphène

1. Introduction	3
2. Graphène	3
2.1. Historique.....	3
2.2. Qu’est-ce que le graphène ?.....	4
3. Du carbone au graphène.....	5
4. Structures cristalline et électronique du graphène.....	5
4.1. Structure cristalline	5
4.1.1. Liaison pi	8
4.1.2. Liaison σ	9
4.2. Structure électronique du graphène	10
5. Propriétés du graphène	11
5.1. Propriétés électriques.....	11
5.2. Propriétés optiques.....	11
5.3. Propriétés mécaniques	11
5.4. Propriétés thermiques	11
6. Variantes du graphène	12
6.1. Graphène monocouche	12
6.2. Graphène bicouche	13
6.3. Graphène tricouche	13
7. Méthodes de caractérisation du graphène	14
7.1. Microscopie optique	14
7.2. Microscopie électronique.....	15
7.3. Spectroscopie Raman.....	15
7.4. Microscopie STM	17
8. Méthodes de synthèse du graphène	17
8.1. Exfoliation	17

8.2. Epitaxie	18
8.3. Exfoliation chimique.....	19
8.4. Dépôt chimique en phase vapeur	19
9. Applications	20
9.1. Équipement électronique	20
9.2. Stockage d'énergie.....	21
9.3. Capteurs	23
9.4. Application biomédicales	23
10. Avantages	24
11. Conclusion.....	24

CHAPITRE II — Théorie du graphène

1. Introduction	25
2. Notion de transport dans le graphène	25
2.1. Modèle de Kubo-Greenwood	25
2.2. Équation fondamentale du transport	28
2.3. Variations de l'énergie de Fermi	29
2.4. Détermination de la mobilité par effet de champ	30
2.5. Résistance finie au point de Dirac	30
2.6. Influence du désordre sur le transport	32
2.7. Rôle des impuretés chargées.....	33
2.8. Impuretés ponctuelles	34
3. Modèles de capacité quantique C_Q	34
3.1. Présentation de modèle de Xia	34
3.2. Présentation de modèle de Cheremisin	40
3.3. Présentation de modèle de Khaledian	41
4. Capacité d'oxyde C_{ox}	42
5. Conclusion	43

CHAPITRE III : MODÉLISATION DE LA CAPACITE QUANTIQUE DU GRAPHENE.

1. Introduction	44
2. Capacité quantique	45
3. Influence de la capacité quantique	45
4. Développement du modèle	45
4.1. La relation de dispersion du graphène monocouche	45
4.2. La relation de dispersion du graphène bicouche.....	46
4.3. La densité d'états du graphène	47
4.4. Expressions du la capacité quantique	48
5. Résultats et discussion	50
6. Conclusion	53
Conclusion générale	55
Références bibliographiques	56

Introduction générale

Aujourd'hui, l'industrie de la microélectronique cherche à répondre à la demande du marché, qui nécessite de plus en plus de composants à haut rendement, une faible consommation d'énergie et des coûts compétitifs. Cela pose un défi de taille pour surmonter les limites techniques actuelles, la recherche de nouveaux matériaux pour l'électronique devient un défi majeur.

Depuis longtemps, on connaît les matériaux carbonés sous la forme la plus courante, comme le graphite, le diamant ou même le charbon. À la fin du XXe siècle, avec les avancées technologiques dans l'observation des matériaux, notamment à l'échelle nanométrique, de nouvelles formes de carbone ont suscité l'intérêt de la communauté scientifique : les fullerènes, les nanotubes de carbone et enfin le graphène.

Le graphène est un matériau de carbone bidimensionnel (2D) ayant une structure unique et des propriétés optiques, mécaniques, thermiques et chimiques exceptionnelles. En effet le graphène présente des structures chimiques intéressantes, faisant de lui un matériau d'intérêt comme électrode photoactive dans les cellules photovoltaïques, dans les transistors MOSFET (dans des parties sensibles) et d'autres composants électroniques. Des feuilles de graphène ont été séparées par Andre Geim et Kanstantine Novoslov, ce qui a dirigé la science vers de nouvelles études et de diverses recherches qui ont conduit par la suite à des améliorations et inventions dans l'électronique d'aujourd'hui.

Dans ce mémoire nous nous penchons sur la capacité quantique qui caractérise l'ensemble des dispositifs à base de graphène. L'étude de la capacité quantique reste très importante, pour caractériser l'influence du dopage du graphène par les oxydes qui l'entourent dans différents dispositifs et différentes architectures.

Ce mémoire est structuré comme suit :

Le premier chapitre comporte un état d'art sur le graphène, ou nous commençons par décrire de façon générale les matériaux carbonés et d'une façon plus spécifique le graphène. Nous verrons la description de ce matériau, ses méthodes de caractérisation, ses propriétés, ses techniques d'élaboration actuellement connues ainsi que les applications.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons une vue d'ensemble sur la théorie du graphène et sur la capacité quantique.

Dans le troisième et dernier chapitre, nous allons présenter un modèle complet permettant de simuler la capacité quantique en fonction de l'énergie de Fermi pour le graphène monocouche et bicouche. Nous verrons entre autres l'influence de la température et la vitesse de Fermi.

CHAPITRE I : État d'art sur le graphène

1. Introduction

Le graphène est un matériau qui prend peu à peu de la place dans l'univers de l'électronique. La recherche expérimentale et théorique du graphène et graphite bidimensionnel (2D) est un domaine en plein essor et son développement vise à exploiter les propriétés afin d'améliorer divers produits numériques et technologiques.

Dans ce chapitre nous allons présenter le graphène sur toutes ses coutures, de la structure de bandes à ses applications. Nous parcourrons les propriétés et la particularité des porteurs de charges dans ce matériau. Qu'il soit bicouche ou monocouche, leurs propriétés électroniques sont à la fois fondamentales et uniques. Par ailleurs, nous présenterons les variantes du graphène, les méthodes de caractérisation du graphène et les méthodes de synthèse du graphène.

2. Graphène

2.1. Historique

D'un point de vue théorique le graphène est étudié depuis soixante ans, les premières études sur les propriétés du graphite ont été publiées entre 1947 et 1958 et sont toujours considérés comme une référence pour décrire les propriétés de divers matériaux à base de carbone. Ces études ont révélé l'unique structure de bande électronique du graphène qui confère des propriétés mécaniques et électroniques exceptionnelles à ce matériau [1,2].

Auparavant, entre 1935 et 1937, deux articles fondamentaux ont été publiés, basés sur des considérations théoriques, ces deux articles ont fait valoir que les cristaux strictement 2D étaient thermodynamiquement instables et ne pouvaient pas exister [3,4].

Par ailleurs, en 1968, N. D. Mermin a corroboré et a étendu l'argument d'instabilité de croissance du cristal 2D suite à de nombreuses observations. Néanmoins, il y a eu plusieurs tentatives pour extraire des feuilles simples de graphène [5].

Le graphène a été observé pour la première fois à la fin des années 60 comme une structure désordonnée sur des surfaces en platine chauffé sous ultraviolette [6]. En 1999, Ruoff et ses collègues ont commencé par la voie de l'exfoliation micromécanique du graphite, pour synthétiser une couche unique cristaux de carbone [7]. En 2004, le premier dépôt monocouche

de graphène a été présenté par le groupe de Manchester ouvrant la voie à la validation expérimentale des prédictions théoriques [8].

2.2. Qu'est-ce que le graphène ?

Le graphène est un matériau composé d'une seule couche d'atomes de carbone organisée en une structure de nid d'abeille. Le graphène est la pierre angulaire à partir de laquelle de nombreux matériaux sont formés, certains connus depuis très longtemps comme le graphite, d'autres découverts plus récemment comme les nanotubes de carbone ou les fullerènes. Bien que ces structures n'aient aucune pertinence par rapport à leur synthèse, le graphène permet de néanmoins de décrire de manière simple les propriétés physiques des matériaux constitués à partir de sa structure de référence. La structure de bande électronique du graphène a été théoriquement étudiée bien avant que le graphène puisse être étudié expérimentalement [1]. La figure I.1 illustre la structure 2D du graphène.

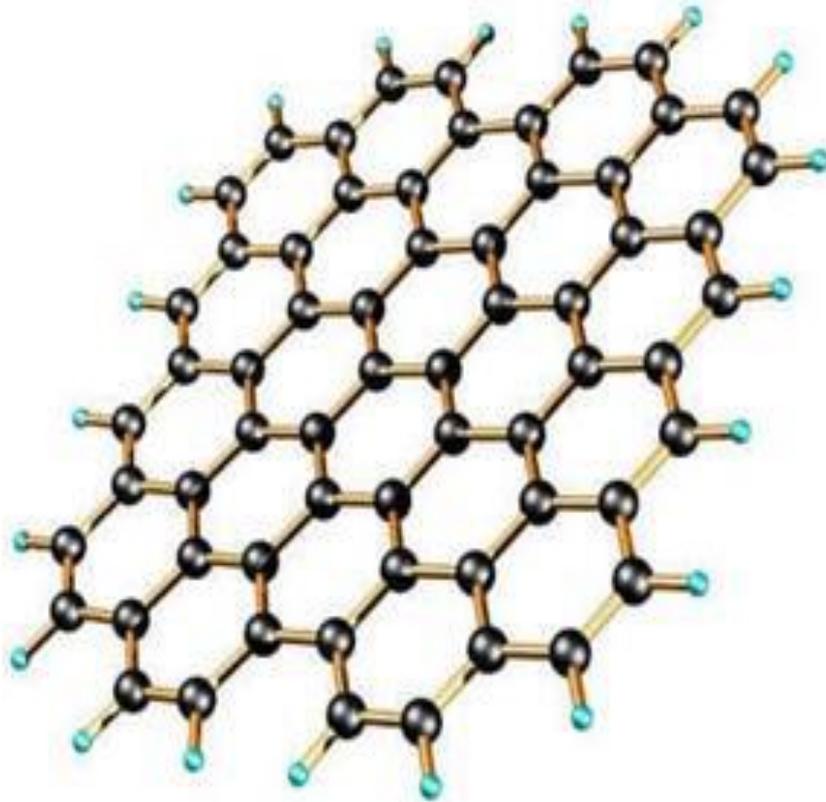


Figure I.1. Structure 2D du graphène [9].

3. Du carbone au graphène

Le carbone est connu de l'humanité depuis l'antiquité, il se trouve dans la nature sur toutes les formes connues. Son caractère unique se manifeste dans de nombreux allotropes. Le même élément se présente sous différentes formes, du graphite utilisé dans les mines de crayon, au diamant qui est plus dur et plus couteux. Ses autres allotropes comprennent le carbone amorphe, carbone vitreux, fullerènes et nanotubes. La formation de ces structures est possible grâce à la propriété de caténation du carbone qui est d'une importance vitale car elle permet aux atomes de se lier à d'autres atomes de carbone dans différentes configurations [10]. La figure I.2 présente une feuille de graphène extraite du graphite.

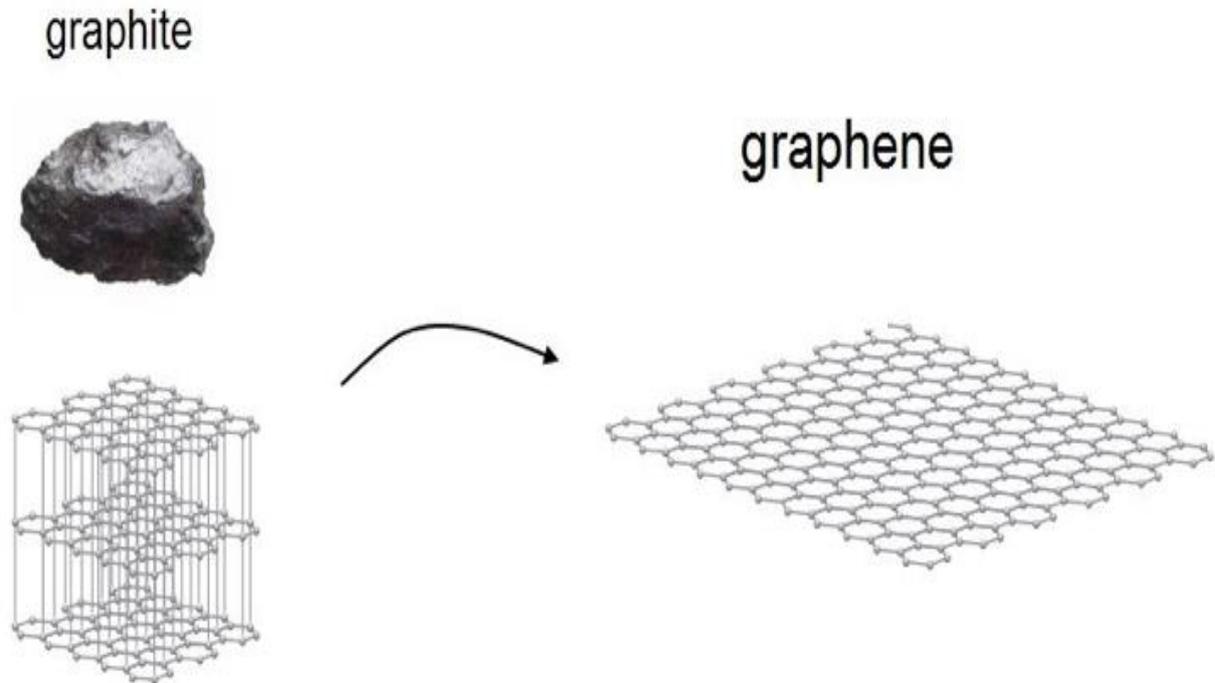


Figure I.2. Le graphène à partir du graphite [10].

4. Structures cristalline et électronique du graphène

4.1. Structure cristalline

Le graphène est un matériau cristallin bidimensionnel constitué de carbone et disposé sur une structure en nid d'abeille constituée d'hexagones. Il peut également être considéré comme un composé du cycle benzénique (sans atome d'hydrogène). Les atomes de carbone sont séparés les uns des autres par une distance 'd' être $1,42 \text{ \AA}$ [16].

Les vecteurs de base dans l'espace réel sont définis comme suit :

$$\vec{a}_1 = \left(\left(\frac{3}{2} \right) a, \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right) a \right) \quad (1.1)$$

$$\vec{a}_2 = \left(\left(\frac{3}{2} \right) a, \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \right) a \right) \quad (1.2)$$

Dans l'espace réciproque, on définit les vecteurs de base \vec{b}_1 et \vec{b}_2 comme suit :

$$\vec{b}_1 = \left(\left(\frac{2\pi}{3a} \right), \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right) \right) \quad (1.3)$$

$$\vec{b}_2 = \left(\left(\frac{2\pi}{3a} \right), \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right) \right) \quad (1.4)$$

Ces quatre vecteurs sont représentés dans le réseau réel et le réseau réciproque sur la figure I.3. L'existence de deux atomes dans chaque unité de base conduit à l'existence de deux points non équivalents K et K', qui sont situés à l'extrémité de la zone de Brillouin. Leurs coordonnées dans l'espace réciproque sont :

$$k = \left(\left(\frac{2\pi}{3a} \right), \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \right) \quad (1.5)$$

$$k' = \left(\left(\frac{2\pi}{3a} \right), \left(-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \right) \quad (1.6)$$

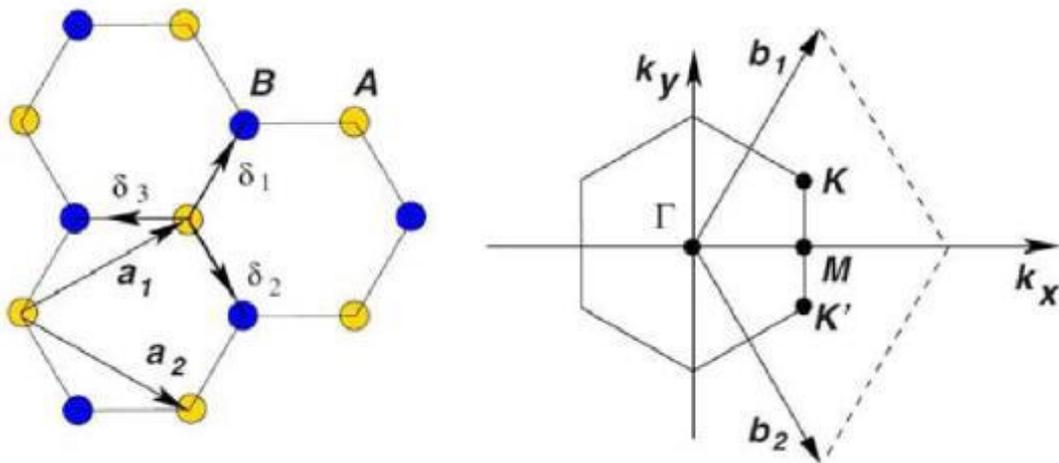


Figure I.3. Réseaux réel et réciproque du graphène [17].

Un atome de carbone contient six électrons, qui correspondent à l'orbitale $1s^2 2s^2 2p^2$. Les orbitales $2s^2$ et $2p^2$ sont des orbitales de valence [18], qui sont les plus éloignées du noyau et qui sont utilisées pour établir des liaisons chimiques. Ces liaisons sont importantes car elles sont à l'origine des propriétés mécaniques et électriques du matériau.

La structure cristalline du graphène comprend la présence de liaisons π , qui confèrent aux porteurs des charges une mobilité très élevée. En fonction de sa structure électronique, le carbone a 4 électrons de valence, et leurs niveaux d'énergie sont les mêmes. Ce qui distingue la géométrie orbitale est le nombre quantique azimutal " l " [19]. Lorsque $l = 0$, l'orbite est sphérique symétrique et lorsque $l = 1$, l'orbite est axisymétrique, comme le montre la figure I.4.

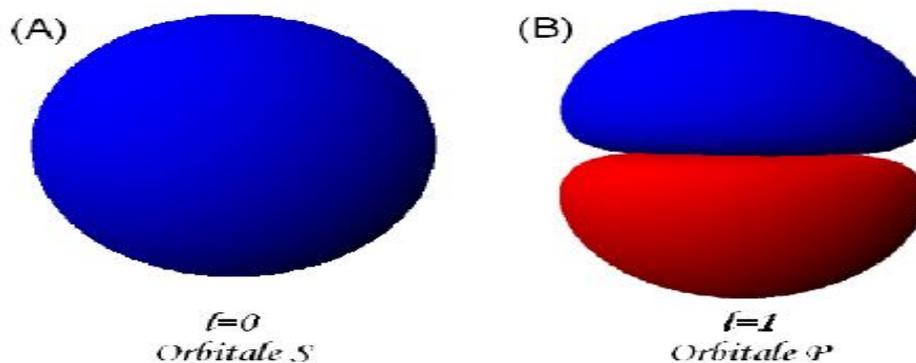


Figure I.4. Illustration des différentes orbitales. (A) Symétrie sphérique pour l'orbitale S. (B) Symétrie axiale pour l'orbitale P [20].

L'orbitale "P" a plusieurs directions possibles, définies par le nombre quantique magnétique " m ". On utilise 3 directions possibles, $m = [-1, 0, +1]$, pour représenter " P_x ", " P_y " et " P_z ", comme le montre la figure I.5.

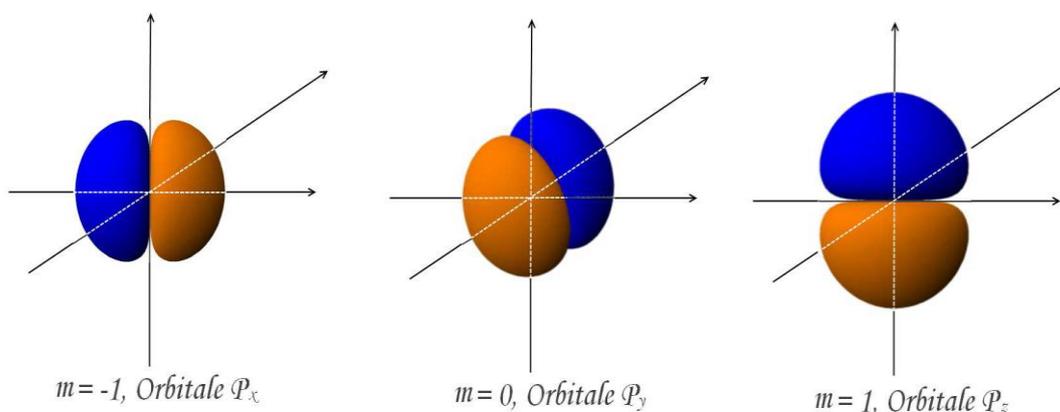


Figure I.5. Représentation des orbitales " P_x ", " P_y " et " P_z " [20].

Par ailleurs, la liaison covalente entre les atomes de carbone est une liaison du type SP^2 . Une représentation de cette liaison est illustrée sur la figure I.6.

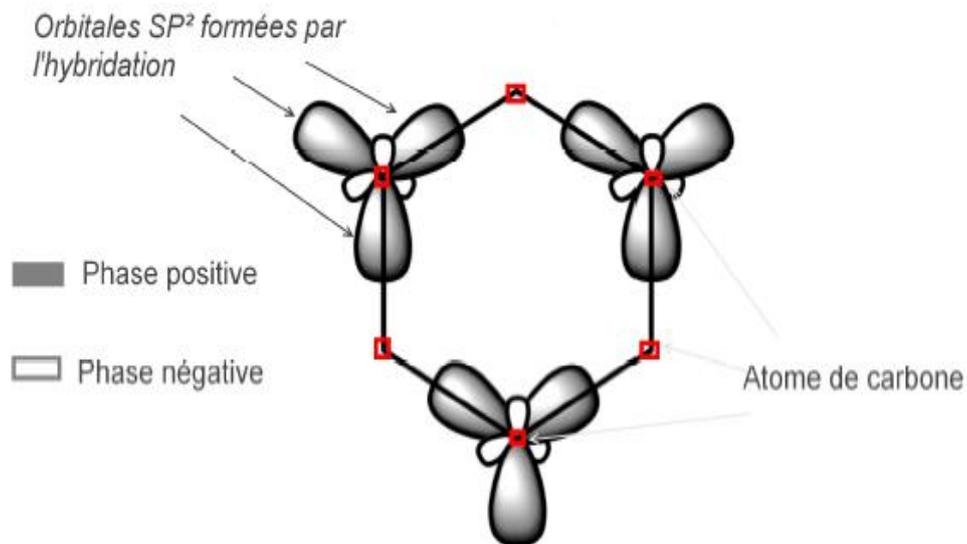


Figure I.6. Illustration de l'hybridation de l'orbitale SP^2 [20].

4.1.1. Liaisons π

Cette liaison est le point de départ pour former des liaisons entre des atomes de carbone pour construire des matériaux tels que le graphène multicouche ou encore introduire des nanotubes. Par rapport aux liaisons « σ », l'énergie de chevauchement des liaisons « π » est plus faible (~ 250 kJ/mol), ce qui les rend plus faciles à rompre. C'est précisément à cause de ce phénomène que le graphène possède des électrons presque libres [19]. Une représentation 3D des liaisons π est illustrée sur la figure I.7.

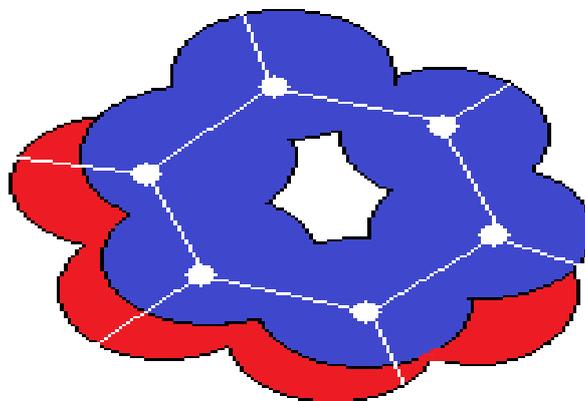


Figure I.7. Liaison « π » dans le graphène [19].

4.1.2. Liaison σ

Lorsque deux atomes fournissent une paire d'électrons, ils forment une liaison « σ ». La liaison « σ » est le chevauchement axial des orbitales atomiques de chaque atome en maintenant la même direction que l'atome d'origine. Ce sont des liaisons très énergétiques (>348 kJ/mol). La distribution des électrons se fait symétriquement dans un cylindre formé d'orbital [19], comme le montre la figure I.8.

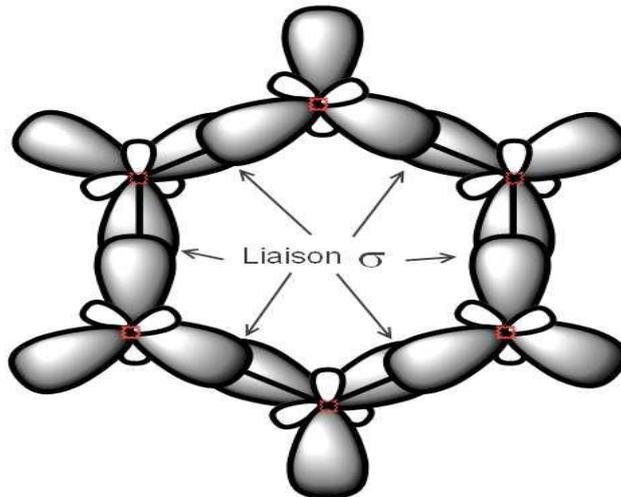


Figure I.8. Illustration de la liaison σ [19].

Une représentation 3D des liaisons σ et π dans un hexagone de graphène sont illustrée sur la figure I.9.

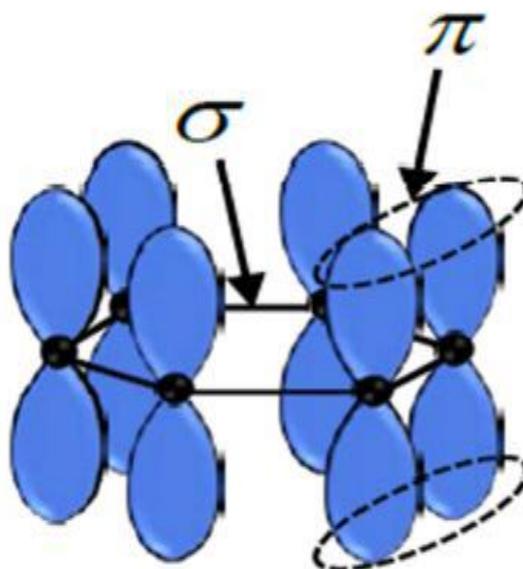


Figure I.9. Représentation schématique des liaisons σ et les liaisons π [20].

4.2. Structure électronique du graphène

Le modèle de liaison forte est utilisé pour calculer et représenter la relation de dispersion du graphène, comme le montre la figure I.10. Nous observons six points de Dirac, dont seuls deux points K et K' ne sont pas égaux. La relation de dispersion se compose de deux bandes, la bande rouge inférieure et la bande bleue supérieure. Le niveau de Fermi est situé au point dit de Dirac où les deux bandes se chevauchent [21].

Le point de Dirac est spécial, et en grossissant la dispersion d'énergie autour des points K et K', on peut constater que la relation de dispersion d'énergie des quasi-particules est linéaire à proximité de ces points. C'est pourquoi l'équation de Dirac est utilisée à la place de l'équation de Schrödinger pour décrire le mouvement des porteurs dans le graphène [21].

Dans le graphène, l'énergie est la vitesse multipliée par l'élan. L'élan n'est pas une masse, mais une particule de lumière. Dans le graphène non dopé, l'énergie de Fermi est exactement au point de Dirac, et cette dispersion spéciale n'est efficace que pour les basses énergies [21].

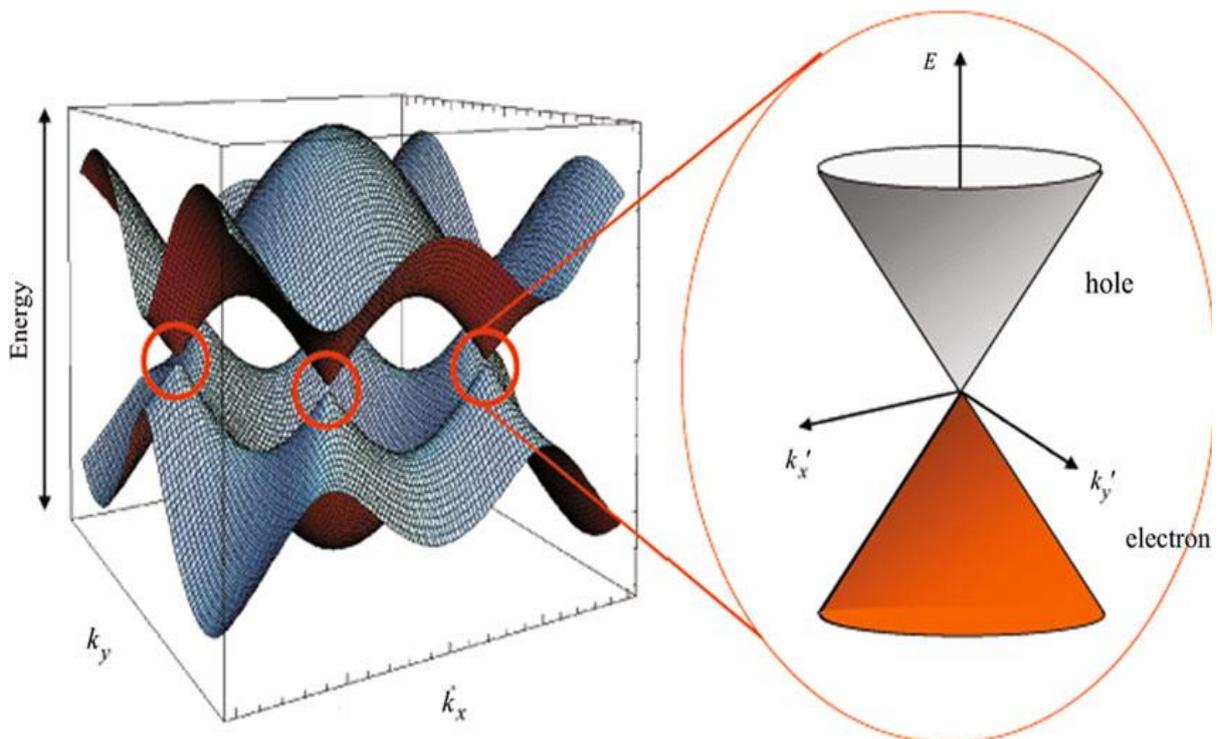


Figure I.10. Structure de bande d'énergie du graphène [22].

5. Propriétés du graphène

5.1. Propriétés électriques

Des études ont montré que la résistivité du graphène à température ambiante est de $10 \text{ n}\Omega\cdot\text{m}$, tandis que la résistivité de l'argent, le meilleur matériau à ce jour, est de $15,8 \text{ n}\Omega\cdot\text{m}$. Cela représente donc une amélioration d'environ 35% [11].

5.2. Propriétés optiques

Les propriétés optiques du graphène sont aussi fascinantes que les propriétés électroniques, car bien qu'ils répondent très bien aux lois fondamentales, ils conservent également le potentiel de découverte de nouveaux phénomènes. En revanche, l'interaction lumière-matière dans le graphène est suffisamment forte pour distinguer l'épaisseur d'une couche d'atomes à l'œil nu [12].

5.3. Propriétés mécaniques

On utilise généralement un microscope à force atomique pour mesurer les propriétés mécaniques d'une feuille de graphène en suspension par nanoindentation. Des travaux de recherche ont estimé que le module d'Young du graphène est de 1.0 TPa , soit environ 5 fois celui de l'acier. La résistance à la traction du graphène est évaluée à 130 GPa [13].

5.4. Propriétés thermiques

La conductivité thermique du graphène monocouche exfolié est de $5300 \text{ W/m}\cdot\text{K}$. Le graphène monocouche obtenu par CVD sur cuivre est d'environ $2500 \text{ W / m}\cdot\text{K}$. En revanche, la conductivité thermique d'un seul nanotube de carbone à paroi unique est d'environ $3500 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ [14]. Le tableau I.1 résume les propriétés du graphène.

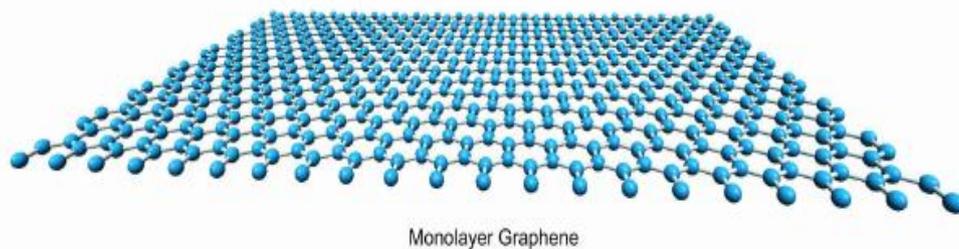
Tableau I.1. Propriétés principales du graphène [15].

Propriétés	Valeur
Dimensionnalité	2D
Module de Young	~1 (TPa)
Résistance mécanique	~130 (MPa)
Conductivité thermique	5.10³(W/ (m*K))
Conductivité électrique	6.10³ (S/cm)
Mobilité des charges	~2.10³ (cm² V⁻¹ s⁻¹)
Surface spécifique	2600 (m²/g)
Perméabilité aux gaz	Imperméable

6. Variantes du graphène

6.1. Graphène monocouche

Le graphène monocouche constitue la forme la plus pure et présente des propriétés particulières, ce qui en fait un matériau attractif pour un grand nombre d'applications. Le graphène monocouche est un système électronique bidimensionnel composé d'une seule couche atomique (2D), et le mouvement des porteurs est donc limité à uniquement deux dimensions du système, comme le montre la figure I.11. La structure cristalline du graphène ne correspond pas directement au réseau bidimensionnel de Bravais, c'est-à-dire à la disposition périodique des points dans le plan [17].

**Figure I.11.** Illustration du graphène monocouche [41].

6.2. Graphène bicouche

Le graphène double couche ou bicouche est composé d'une superposition de deux couches de graphène et de quatre atomes dans une maille élémentaire ; a_1 et b_1 sur la couche supérieure et a_2 et b_2 sur la couche inférieure. Il existe deux types d'empilement : AA direct où les couches sont les mêmes sur les côtés, et l'empilement AB d'origine ou Bernal d'origine où la distance entre les couches est similaire à celle du graphite [16]. La figure I.12 illustre les empilements AA et AB du graphène bicouche.

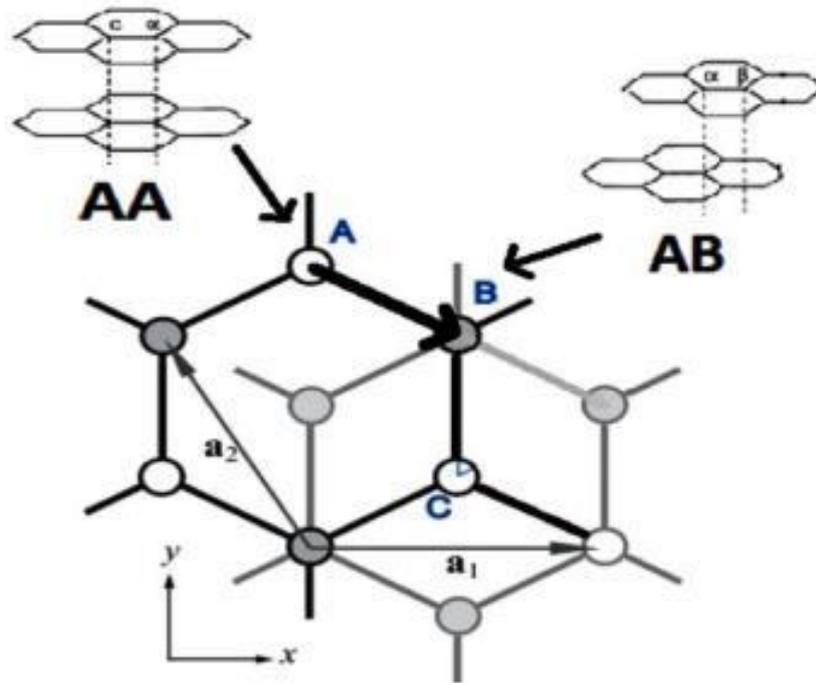


Figure I.12. Mode d'empilement AA et AB du graphène bicouche [23].

6.3. Graphène tricouche

Le cas de la structure de bande électronique du graphène tricouche est très intéressant car on y retrouve le cône des électrons sans masse du graphène monocouche mêlé cette fois à deux autres courbes paraboliques de la structure bicouche au voisinage des points K et K' [24,25], comme le montre la figure I.13. Par empilements successifs la structure de bande du graphène tricouche adoptera une forme de plus en plus proche de celle du graphite.

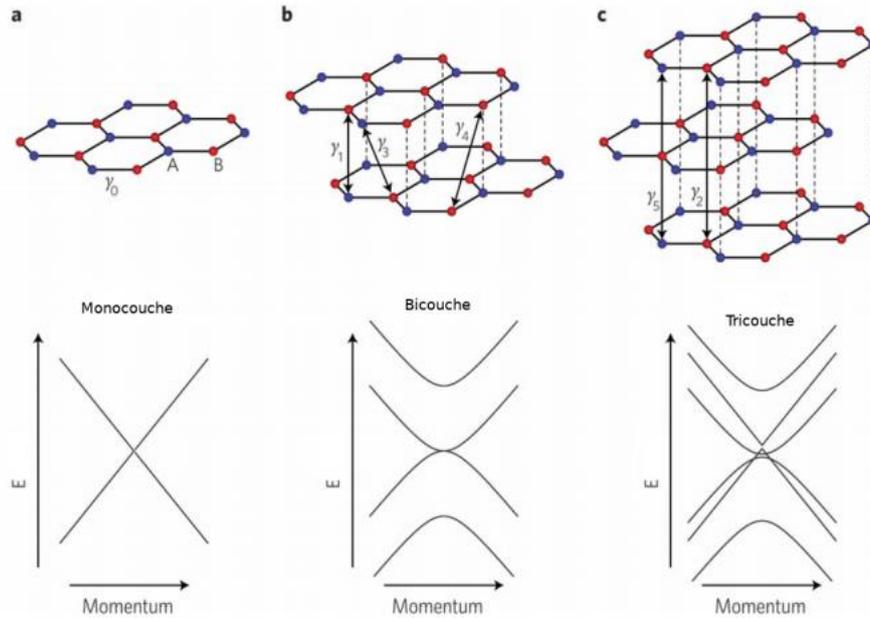


Figure I.13. Représentation des relations de dispersion aux voisinages du point de Dirac dans le graphène : (a) monocouche, (b) bicouche, et (c) tricouche [26].

7. Méthodes de caractérisation du graphène

7.1. Microscopie optique

Le graphène monocouche est un matériau transparent qui peut absorber jusqu'à 3% de la lumière. Cependant, pour le voir au microscope optique (figure I.14), on a généralement recours à l'effet du contraste produit par l'oxyde. Afin de compenser les obstacles de la microscopie optique, il peut être caractérisé par microscopie électronique à balayage (MEB) [12].



Figure I.14. Microscope optique [27].

7.2. Microscopie électronique

La microscopie électronique à balayage est largement utilisée pour caractériser rapidement et efficacement les structures de surface, telles que les substrats de catalyseurs métalliques pour la synthèse du graphène, le graphène après dépôt et les dispositifs après fabrication [27]. Une image du microscope électronique à balayage est illustrée sur la figure I.15.

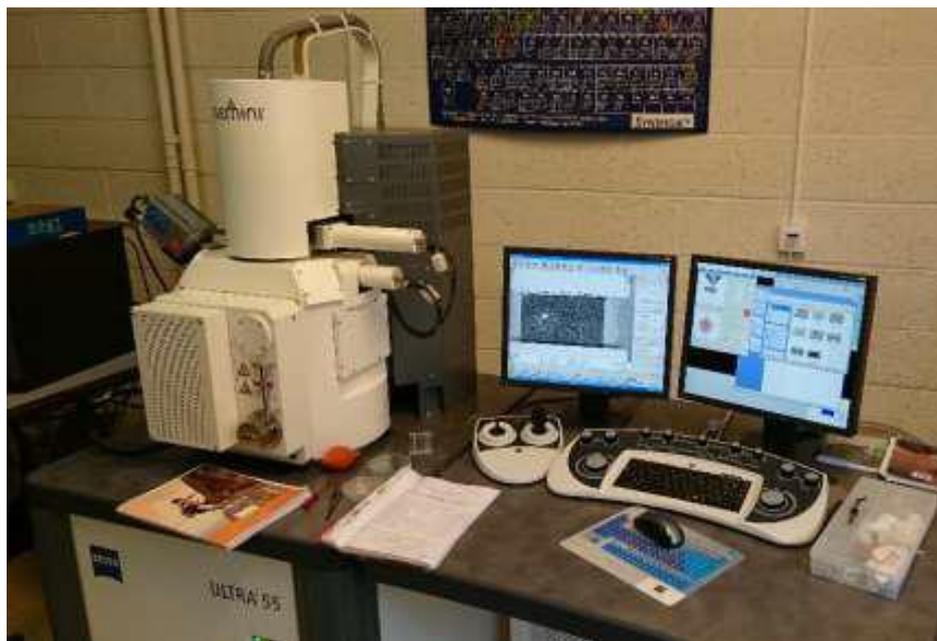


Figure I.15. Microscope électronique à balayage [27].

7.3. Spectroscopie Raman

La spectroscopie Raman est une méthode efficace pour déterminer le nombre de couches de graphène. Par rapport à, par exemple l'AFM, cette technique présente de nombreux avantages. Pour n'en nommer que quelques-uns : elle est sans perte, rapide et facile à mettre en œuvre [28].

Le spectre Raman du graphène monocouche et bicouche au graphite comporte de nombreux pics communs significatifs, comme le montre la figure I.16.

1. Pic G (1590 cm^{-1}) : C'est une caractéristique du signal de graphène qui est liée à la vibration plane des liaisons sp^2 des atomes de carbone. Il correspond au processus Raman du premier ordre. Il s'agit des phonons de symétrie E_{2G} , ce qui correspond au déplacement de cisaillement dans le plan de l'élément [29].

2. Pic 2D ou pic G' (2700 cm^{-1}) : Il correspond au processus Raman du second ordre. Dans cette configuration, la diffusion de deux phonons est provoqué, le premier passe par le même processus et l'inverse après que l'électron excité se disperse de la bande proche du point K à la bande proche du point K' [29].

3. Pic D (1350 cm^{-1}) : C'est un défaut ou une caractéristique irrégulière dans la couche de graphène qui est lié à des vibrations hors plan. Cela est dû au processus Raman du second ordre avec des phonons symétriques E_{2G} et aux défauts du système nécessaires pour activer le pic D [30]. D'une part, les électrons excités diffusent élastiquement de la bande proche du point K sur le défaut vers la bande proche du point K'. En revanche, la seconde diffusion produit l'émission de photons. Le graphène de haute qualité (tel que le graphène en feuilles) n'existe pas dans ce mode [31].

Le ratio des intensités des pics I_{2D}/I_G donne une estimation du nombre de couches dans la zone d'étude. Ainsi pour $I_{2D}/I_G > 1$, on a une monocouche de graphène (Figure I.16.a), tandis que pour $I_{2D}/I_G < 1$, on s'oriente vers des structures multicouches (Figure I.16.b). Ici il s'agit d'une zone constituée d'une structure bicouche de graphène.

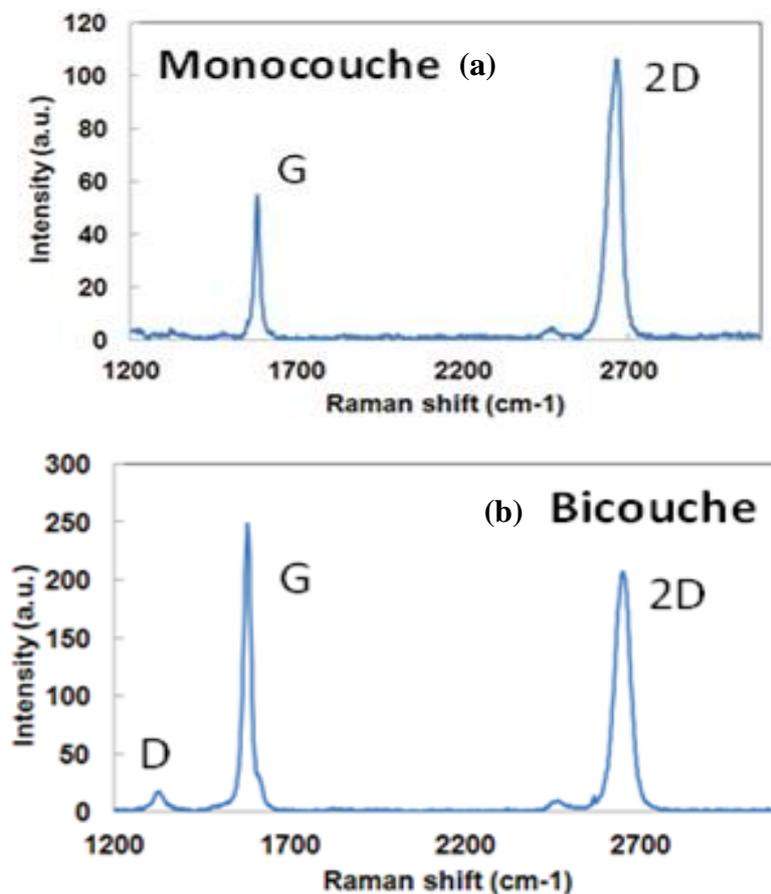


Figure I.16. Spectre Raman typique du graphène (a) monocouche (b) bicouche [29].

7.4. Microscopie STM

La microscopie à effet tunnel (Scanning Tunneling Microscopy ou STM en anglais) est une technique développée dans les laboratoires d'IBM à Zurich par Gerd Binnig et Heinrich Rohrer (Prix Nobel de Physique en 1986). Cette technique est basée sur un phénomène physique connu depuis les origines de la mécanique quantique, l'effet tunnel.

Le principe de l'expérience consiste à déplacer la pointe au-dessus de la surface du film en maintenant le courant tunnel constant par un dispositif d'asservissement. Ainsi la distance pointe-échantillon reste constante et l'enregistrement des déplacements verticaux de la pointe reproduit alors fidèlement la topographie de la surface.

8. Méthodes de synthèse du graphène

Actuellement, il existe plusieurs méthodes de production de graphène qui ont été développées, visant à le réaliser sous la forme d'une seule feuille ou sous la forme d'un certain nombre de nanofeuilles supportées par un substrat. Cependant, une connaissance scientifique claire et rigoureuse de ses différentes méthodes de synthèse est essentielle pour une compréhension optimale pour une grande variété d'applications. La taille et la qualité du graphène produit dépendent des techniques utilisées, et chacune présente ses avantages et ses inconvénients.

8.1. Exfoliation

Avant 2004, on disait que le graphène était thermodynamiquement instable à température ambiante. En 2004, la technique du graphène exfolié a été développée indépendamment par l'équipe d'Andre Geim de l'Université de Manchester. Cette technique a permis la séparation de la première feuille de graphène. Cette technique comprend l'obtention de graphène à partir de graphite et de ruban adhésif. On utilise du graphite naturel (sous forme de particules) et du ruban adhésif pour déchirer certains des plans de graphite. La force entre les plans de graphène est très faible. Ensuite, on colle le graphite déchiré sur la tranche de silicium oxydé plusieurs fois. Avec cette technique, nous pouvons obtenir des cristaux de graphène d'une taille allant jusqu'à 100 μm . L'avantage de cette méthode est évident ; elle ne requiert aucun matériel, elle est simple et rapide. La qualité du graphène obtenu dépend de la qualité initiale utilisée. Elle produit des feuillets de graphène avec très peu de défauts. Une simple méthode optique permet

la visualisation de l'échantillon. [32,33,34]. Le principe de cette technique est illustré sur la figure I.17.

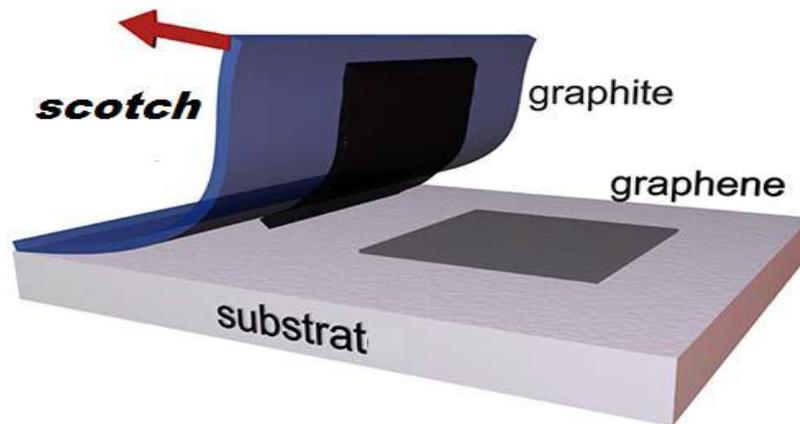


Figure I.17. Schéma du transfert de graphène par exfoliation [41].

8.2. Épitaxie

La synthèse du graphène par la technique de l'épitaxie a été développée par le groupe de recherche de Claire Berger d'Institut de Technologie de Géorgie de Grenoble. La méthode consiste à utiliser du carbure de silicium pour faire croître du graphène. Afin de réduire le carbure de silicium et d'évaporer par sublimation (décomposer thermiquement) les atomes de silicium dans la couche externe, le chauffage sous vide est effectué à une température très élevée, environ 1300°C [35,36,37].

Après un laps de temps défini, les atomes de carbone restants se réorganisent, formant une couche de graphène. La technique de l'épitaxie permet la croissance de graphène de haute qualité. Les limitations de cette méthode conduisent à une petite surface de graphène, et ne permettent pas de contrôler le nombre de couches [38]. Une image des polytypes de carbure de silicium utilisée pour la synthèse du graphène est illustrée sur la figure I.18.

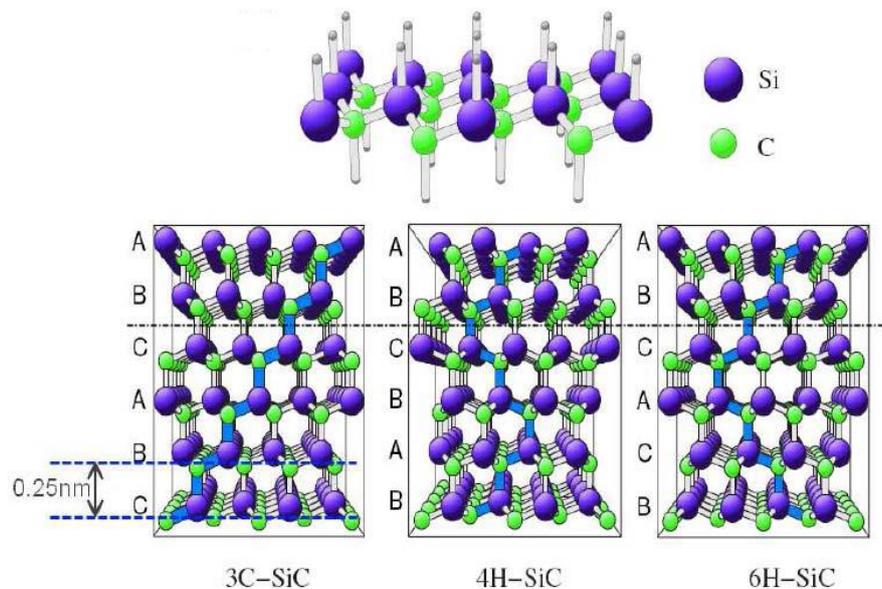


Figure I.18. Illustration des polytypes de SiC les plus couramment utilisés en épitaxie [41].

8.3. Exfoliation chimique

L'une des méthodes pour produire une grande quantité de graphène est l'exfoliation chimique de graphite. À partir de graphite qui est oxydé, pour devenir du graphite oxydé puis oxyde de graphène. La synthèse multiple a été développée depuis le 19^e siècle à partir de Brodie qui a su oxyder le graphite, puis Staudenmaier qui a amélioré la synthèse en réduisant l'étape d'oxydation, en faisant la réaction dans le même milieu. La dernière grande amélioration pour la synthèse d'oxyde de graphène a été développée par Hummers qui utilisaient du permanganate de potassium, qui est un oxydant puissant, et l'acide sulfurique au lieu de l'acide nitrique. D'autres ont apporté des modifications à cette technique de synthèse mais le mécanisme est le même [39].

8.4. Dépôt chimique en phase vapeur

L'approche de dépôt chimique en phase vapeur (CVD) s'est avérée être de loin la technique la plus efficace pour produire du graphène de haute qualité à grande échelle qui peut être compatible et intégré dans les dispositifs. De plus, cette technique, se révèle être peu coûteuse [40].

Les métaux permettant la réalisation de cette technique ne sont pas nombreux ; il y a le cobalt (Co), l'iridium (Ir), le platine (Pt), le nickel (Ni) et le cuivre (Cu). Le métal le plus utilisé actuellement pour la qualité du graphène produit, le coût financier et les propriétés mécaniques est le cuivre. Pour synthétiser le graphène, il faut bombarder la surface du cuivre qui est

chauffée à haute température, environ 1000°C, à l'aide de gaz d'hydrocarbures qui vont se décomposer à la surface en atomes de carbone simple et un résidu gazeux dû à la décomposition du gaz. Plusieurs types de gaz sont utilisés pour cela, mais les plus courants sont le méthane, l'acétylène ou l'éthylène [40]. Le principe de la technique CVD est illustré sur la figure I.19.

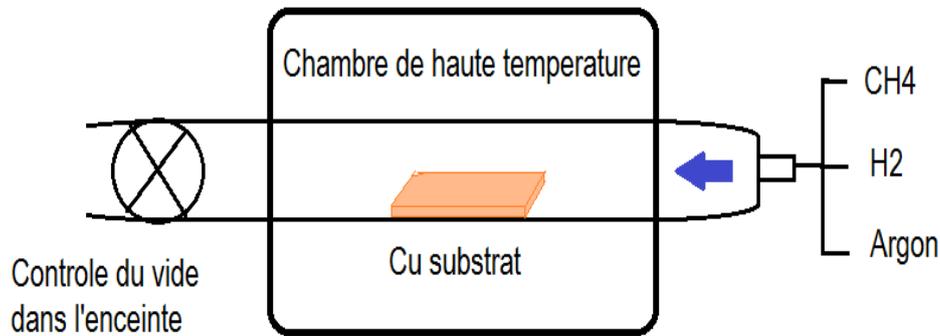


Figure I.19. Schéma et photographie d'une chambre CVD [41].

9. Applications

Voici un aperçu des applications techniques potentielles des composites à base de graphène :

9.1. Équipement électronique

Les nanocomposites de polymère de graphène ont une conductivité élevée, une mobilité élevée des porteurs et une transmittance de la lumière visible modérément élevée, et peuvent être utilisés comme électrodes pour les cellules solaires à colorant [42], ou comme électrodes organiques pour les cellules solaires [43], ou utilisées comme électrodes de colorant -des cellules solaires sensibilisées, diode électroluminescente organique (OLED) [44]. Ses films composites ont été testés pour des périphériques de stockage [45], des écrans tactiles [46] et des

transistors à effet de champ [47]. Les polymères conducteurs dopés au graphène (tels que PEDOT : PSS et P3HT) présentent une meilleure efficacité énergétique que les polymères non dopés utilisés comme électrodes pour les cellules solaires organiques [42,43].

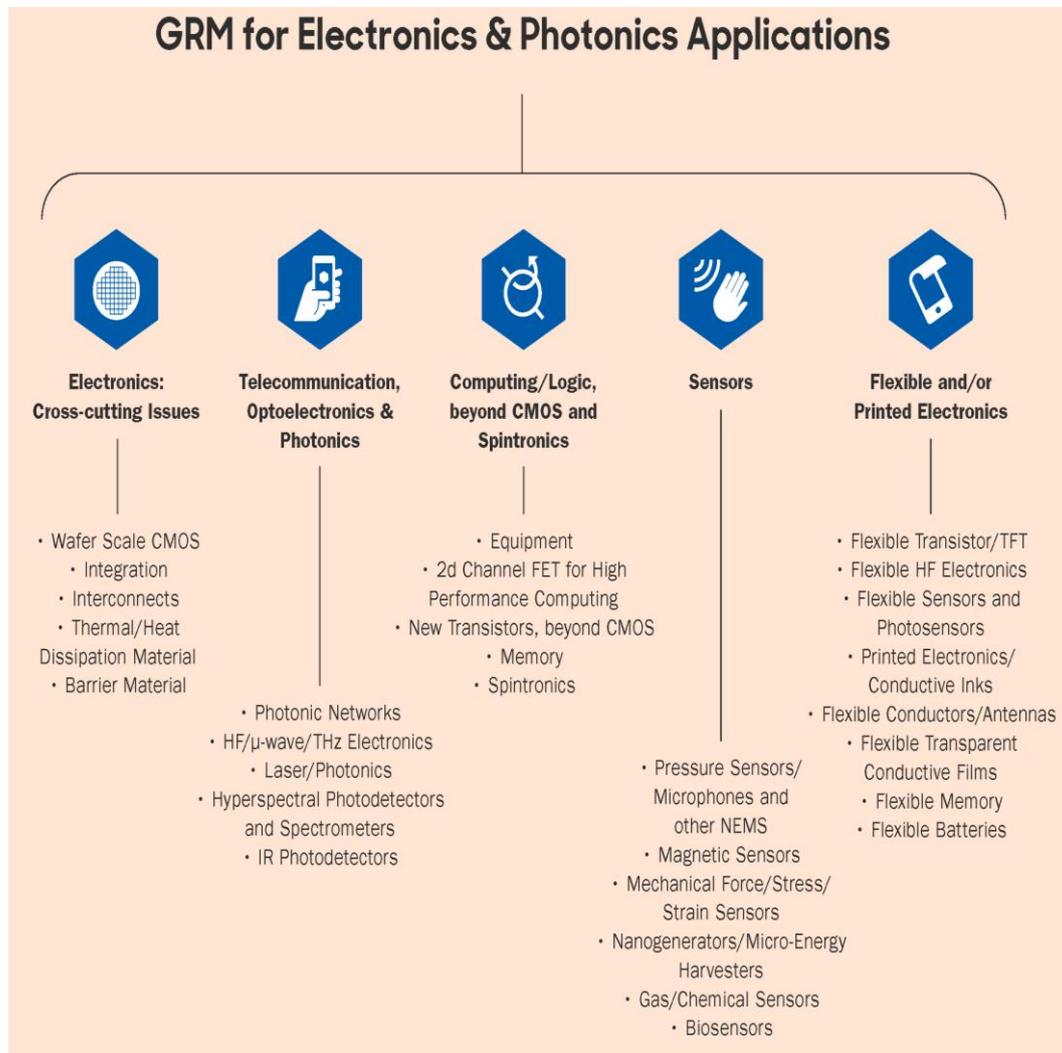


Figure I.20. Illustration des différentes utilisations du graphène et des matériaux apparentés (GRM) pour les applications électroniques et photoniques.

9.2. Stockage d'énergie

Les batteries au lithium-ion (LIB) sont considérées comme l'un des systèmes de stockage les plus prometteurs en raison de leur faible poids et de leur haute densité d'énergie. Des matériaux composites à base de graphène avec des polysulfures d'antraquinone et des polyimides ont également été préparés et appliqués aux batteries lithium-ion pour améliorer leurs performances dans les batteries au lithium rechargeables (RLB) [48].

Les supercondensateurs sont d'autres types de dispositifs de stockage d'énergie électrochimique qui, par rapport aux appareils alimentés par batterie, offrent une densité de puissance élevée, un temps de décharge plus court et une durée de vie plus longue. Combinez des dérivés du graphène et des précurseurs conducteurs (comme la polyaniline (PANI)) et utilisez-les comme supercondensateurs hybrides [49].

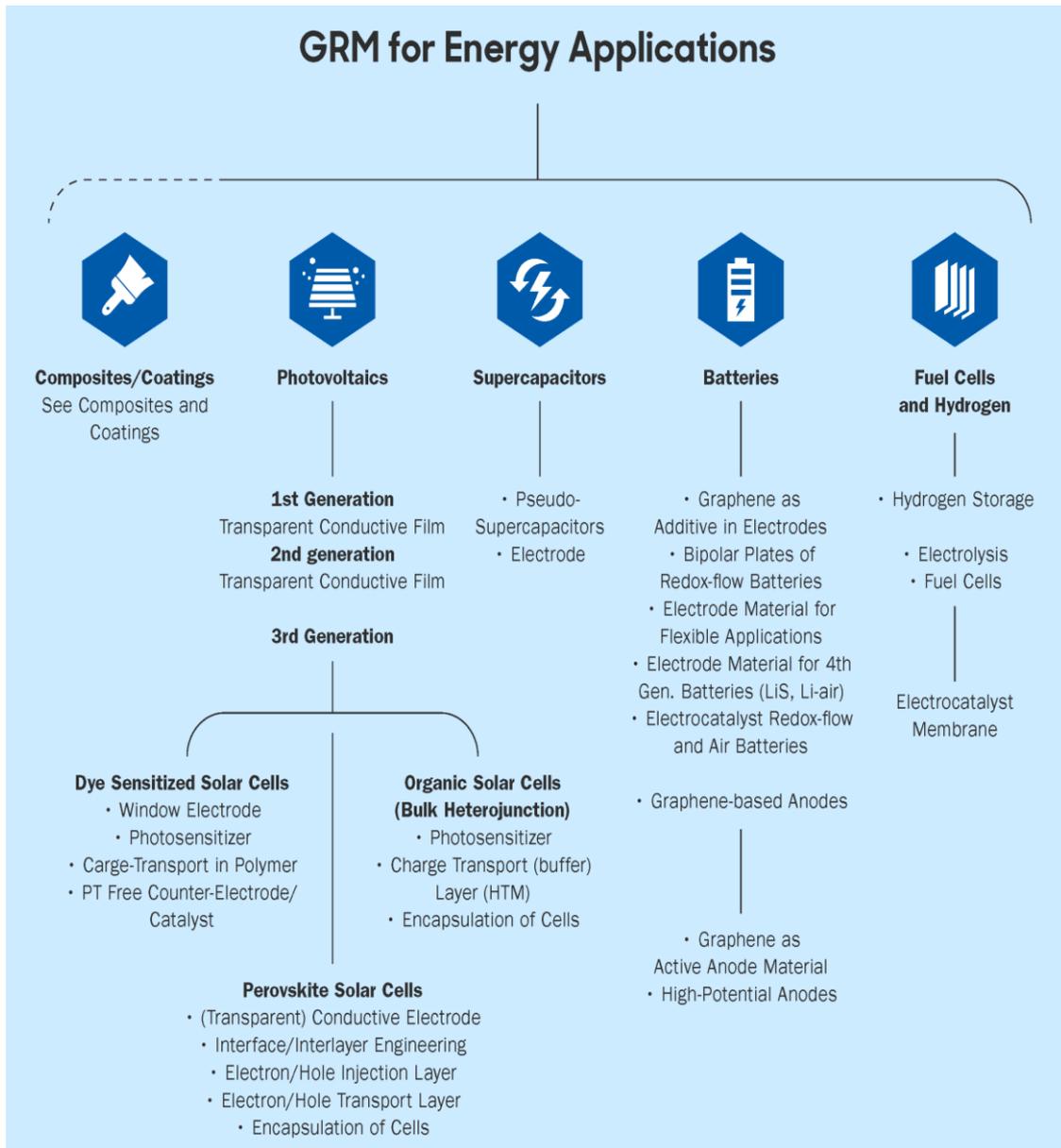


Figure I.21. Illustration des différentes utilisations du graphène et des matériaux connexes (GRM) pour les applications de stockage et de production d'énergie.

9.3. Capteurs

En raison de sa grande surface spécifique, le graphène s'est avéré être un candidat prometteur pour la détection de diverses molécules, telles que les gaz biomoléculaires. En outre, sa gamme d'application a également été étendue aux capteurs de pH, de pression et de température. Les nanocomposites polymères conducteurs présente généralement un coefficient de température positif, mais après l'introduction de graphène thermiquement réduit dans le polyfluorure de vinylidène (PVDF) [50], son comportement est inversé et conduit à un coefficient de température négatif. Par conséquent, il convient pour une utilisation en tant que capteur de température.

9.4. Applications biomédicales

L'excellente performance du graphène offre essentiellement des possibilités illimitées pour diverses applications. Le premier rapport sur les applications biomédicales du graphène a été publié en 2008, puis les nanomatériaux à base de graphène ont été utilisés dans des applications biologiques, telles que la nano médecine [51], la bio imagerie [52] et le potentiel thérapeutique du cancer [53].

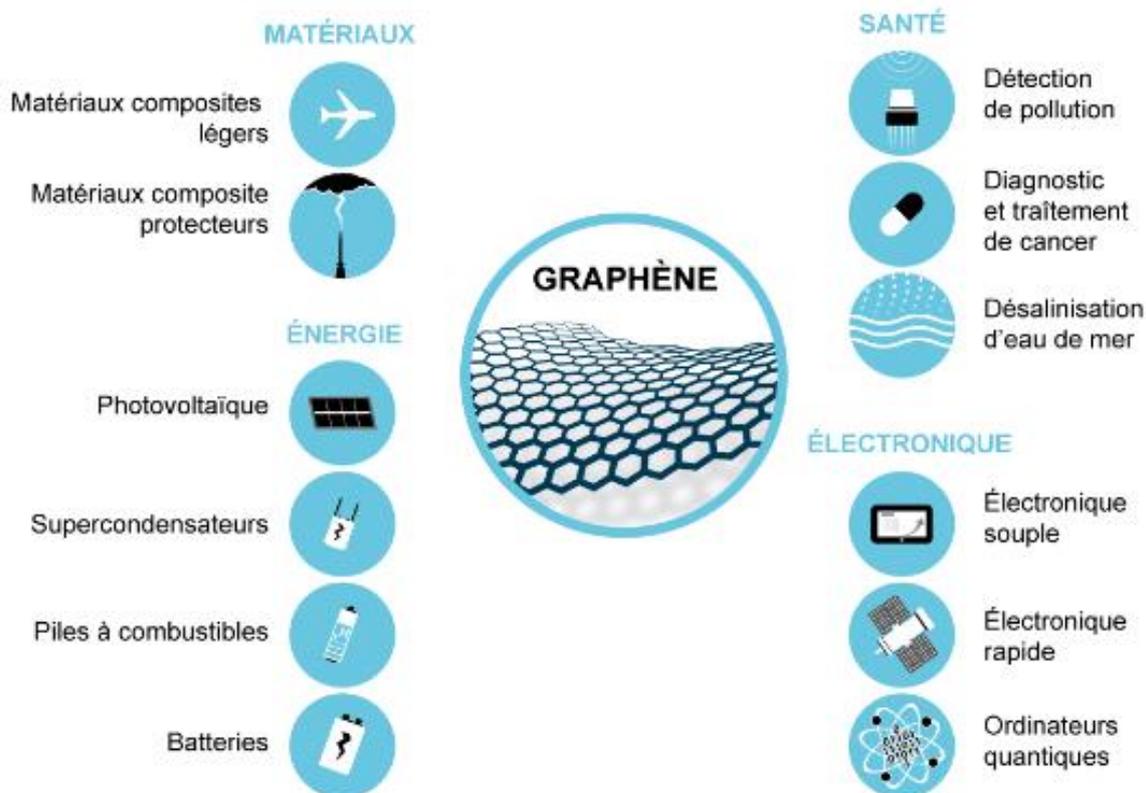


Figure I.22. Illustration des applications du graphène.

10. Avantages

Le graphène contient des avantages qui cela permet de le choisir parmi d'autres éléments, tel que :

- La densité de courant supportée par un fil de cuivre ;
- Plus résistant que l'acier ;
- Plus conducteur de chaleur que le cuivre ;
- La vitesse des électrons plus rapide que dans le Silicium ;
- 1 m² du Graphène pèse seulement 0,77mg et peut supporter le poids d'un 4kg.

11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit le graphène comme le matériau principal dans les applications électroniques. Le graphène a des propriétés si importantes que ses performances dépassent de loin les matériaux similaires à la fois 2D et 3D. De plus, nous avons rapporté l'intérêt de ce matériau dans divers domaines d'application et, en raison de ses propriétés physiques inédites et uniques, il est le matériau le plus étudié de la communauté scientifique pour remplacer le silicium dans le futur.

Chapitre II : Théorie sur le graphène

1. Introduction

La particularité du graphène ne s'arrête pas à ses propriétés. La relation de dispersion des électrons du graphène est linéaire, et non parabolique comme dans le cas des métaux classiques, rappelant celle de particules sans masse comme les photons. L'analogie peut être poussée plus loin car l'évolution des fonctions d'ondes électroniques du graphène est gouvernée par un Hamiltonien de Dirac, introduit originellement dans le cadre de la physique des particules pour décrire le comportement de Fermions relativistes. Ce constat permet de tisser des liens entre deux pans actuels de la physique a priori distinct : la physique des particules et la physique de la matière condensée. Le graphène est donc un matériau prometteur d'une nouvelle physique, liée à sa structure électronique unique, ce qui explique l'engouement des nombreux groupes et équipes qui travaillent sur le sujet.

Dans ce chapitre, nous allons présenter la théorie du graphène. Nous commencerons par présenter les notions du transport électronique dans le graphène ; comme équation fondamentale du transport, le modèle du Kubo-Greenwood, et d'autres notions que nous décrirons. Ensuite on décrira la capacité quantique vue dans plusieurs travaux de la littérature.

2. Notion de transport dans le graphène

2.1. Modèle de Kubo-Greenwood

La formule de Kubo-Greenwood exprime avec précision la conductivité du système à n'importe quelle température. La conductivité électrique est obtenue sur la base de la théorie de la réponse du système aux petites perturbations, qui dépend des caractéristiques du système en équilibre thermique [54].

Grâce à Kubo [54] et Mott [55], nous donnons ici les principales étapes d'une démonstration assez simple de la formule de Kubo-Greenwood, la méthode de Mott consiste à calculer la puissance moyenne absorbée par le système sous l'action d'un champ électrique sinusoïdal. Le champ électrique est considéré comme une petite perturbation de l'hamiltonien, qui provoque la transition entre les états électroniques. La probabilité de transition est calculée sur la base de la perturbation du premier ordre, et nous pouvons en déduire l'énergie obtenue par le système par unité de temps [55].

On suppose qu'il existe un champ électrique macroscopique pulsé de ω dans tout le système, dont l'amplitude est E_0 , et il est orienté selon l'axe (OX) [56] :

$$E(x) = E_0 \cos(\omega t) u_x \quad (2.1)$$

Où u_x est le vecteur unitaire de l'axe des x.

Dans la jauge de Coulomb ($\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$), donc :

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (2.2)$$

Où le vecteur potentiel A est donné par :

$$A(t) = -\frac{E_0}{2i\omega} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) u_x \quad (2.3)$$

On obtient la perturbation de l'hamiltonien H par l'inférence du premier ordre d' E_0 :

$$\delta \hat{H}(t) = \frac{2eP \hat{A}(t)}{2m} = eV \hat{A}(t) = -\frac{E_0}{2i\omega} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \hat{V}_x \quad (2.4)$$

Où \hat{V}_x est l'opérateur vitesse le long de la direction x, et $\delta \hat{H}(t)$ est la conversion entre les états propres de l'hamiltonien H.

Le premier ordre, la probabilité de transition du statut $P_{n,m}$ d'état propre $|\Psi_n\rangle$ au temps 0 à l'état propre $|\Psi_m\rangle$ au temps t est [56] :

$$P_{n,m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \Psi_m \left| \delta \hat{H} \right| \Psi_n \right\rangle \right|^2 [\delta(E_m - E_n + \hbar\omega) + \delta(E_m - E_n - \hbar\omega)] \quad (2.5)$$

Où E_n et E_m sont les valeurs propres combinées avec les $|\Psi_n\rangle$ et $|\Psi_m\rangle$ appropriés. Ainsi, on a deux types de transition, correspondant à la perte ou au gain d'énergie $\hbar\omega$.

On remplace $\delta \hat{H}$ par son expression et on obtient [56] :

$$P_{n,m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{2\omega} \right)^2 \left| \left\langle \Psi_m \left| V \right| \Psi_n \right\rangle \right|^2 [\delta(E_m - E_n + \hbar\omega) + \delta(E_m - E_n - \hbar\omega)] \quad (2.6)$$

Le premier terme $\frac{eE_0}{2i\omega} e^{-it\omega}$ dans l'expression de $\delta \hat{H}$ induit des transitions avec absorption de la quantité d'énergie $\hbar\omega$, alors que la perturbation $\frac{eE_0}{2i\omega} e^{it\omega}$ provoque l'émission de $\hbar\omega$. Puisque la perturbation doit être réelle, on réalise la somme des deux termes d'absorption et d'émission, mais le choix des états initiaux et finals doit être considéré. Si l'état initial est l'état fondamental, le terme d'émission disparaît de l'expression de la probabilité transition. Ainsi seulement le terme d'absorption doit être considéré en discutant le spectre optique d'excitation d'un cristal à l'état fondamental. Le terme d'émission dans l'expression précédente est approprié en discutant l'émission radiative due aux électrons qui sont initialement excités. Donc nous négligeons l'émission en mettant le signe approprié dans l'argument de delta. L'expression devient :

$$P_{n,m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{2\omega} \right)^2 \left| \left\langle \Psi_m | \hat{V} | \Psi_n \right\rangle \right|^2 [\delta(E_m - E_n - \hbar\omega)] \quad (2.7)$$

Pour calculer la puissance totale P absorbée par le système, on réalise la somme de la contribution de toutes les transitions possibles, en tenant compte des taux d'occupation des états de départ et arrivée, donnés par la fonction de distribution de Fermi-Dirac f . On ajoute aussi un facteur 2 dû à la dégénérescence de spin, comme suit :

$$P = \frac{\pi e^2 E_0^2}{\hbar \omega^2} \left(\frac{eE_0}{2\omega} \right) \left[\hbar \omega \sum_{n,m} (f(E_n) - f(E_m)) \left| \left\langle \Psi_m | \hat{V}_x | \Psi_n \right\rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \right] \quad (2.8)$$

Après une permutation d'indices dans la première somme, on obtient :

$$P = \pi e^2 \hbar E_0^2 \sum_{n,m} \frac{f(E_n) - f(E_m)}{\hbar \omega} \left| \left\langle \Psi_m | \hat{V}_x | \Psi_n \right\rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \quad (2.9)$$

La partie réelle de la conductivité $\sigma(\omega)$ est obtenue en divisant cette puissance par le volume V du système et par la valeur moyenne $\frac{E_0^2}{2} d^3E^2(t)$. On obtient finalement la formule de Kubo- Greenwood [56] :

$$\sigma(\omega, k) = \frac{2\pi e^2 \hbar}{V} \sum_{n,m} \frac{f(E_n) - f(E_m)}{\hbar \omega} \left| \left\langle \Psi_m | \hat{V}_x | \Psi_n \right\rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \quad (2.10)$$

$$\sigma(\omega) = \sum_k \sigma(\omega, k) \cdot W(k) \quad (2.11)$$

Avec $W(k)$ est le poids associé à la zone de Brillouin.

2.2. Équation fondamentale du transport

Du point de vue de la physique classique statistique, l'évolution des porteurs de charges dans les systèmes est décrite par la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ qui détermine la probabilité de trouver des particules à la position \vec{r} avec l'impulsion \vec{p} au temps t . Cette fonction est régie par l'équation de Boltzmann [57] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}(\vec{k}) \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \left. \frac{df}{dt} \right|_{\text{collision}} \quad (2.12)$$

Où F désigne les forces extérieures appliquées aux particules, $\vec{v}(\vec{k})$ la vitesse du groupe des ondes de Bloch qui décrivent le comportement électronique des électrons soumis à un potentiel cristallin périodique, \vec{k} est le vecteur d'onde associé et $\left. \frac{df}{dt} \right|_{\text{collision}}$ est le terme de collision.

La vitesse du groupe est déniée alors par :

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*} \quad (2.13)$$

Où m^* est la masse effective de l'électron, \hbar est la constante de Planck et E l'énergie électronique.

Le terme de collision dans l'équation (2.12) ramène le système vers l'équilibre, et dépend des sources de diffusion et de dissipation. La nature ondulatoire des électrons est aussi prise en compte dans l'expression de collision [58]. Le modèle de Bloch-Boltzmann donne de très bons résultats si l'on décrit correctement le terme de collision. Une description sophistiquée peut être présentée en utilisant la densité de probabilité de transition $P_{kk'}$ entre un état $|\vec{k}\rangle$ et un état $|\vec{k}'\rangle$:

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_{\text{collision}} = \sum_{k'} f_{k'} (1 - f_k) P_{k'k} - \sum_k f_k (1 - f_{k'}) P_{kk'} \quad (2.14)$$

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_{\text{collision}} = \sum_{k'} (f_{k'} - f_k) P_{kk'} \quad (2.15)$$

Avec $f_{k,k'} = f(\vec{r}, (\vec{k}, \vec{k}'), t)$ la fonction de distribution des états \vec{k}' et \vec{k} respectivement.

L'équation (2.14) comprend deux termes de diffusion : le premier représente la diffusion des états $|\vec{k}'\rangle$ vers les états $|\vec{k}\rangle$, dans lequel la densité de probabilité par unité de temps est donnée par $P_{kk'}$. Le second terme désigne la contribution de la diffusion des états $|\vec{k}\rangle$ vers les états $|\vec{k}'\rangle$ (processus inverse du premier terme). Le facteur $(1-f)$ assure la vérification du principe d'exclusion de Pauli qui limite le nombre de transition aux états d'arrivée non occupés. La densité de probabilité $P_{kk'}$ de transition entre les états $|\vec{k}\rangle$ et les états $|\vec{k}'\rangle$ est décrite par la règle d'or de Fermi :

$$P_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k'|V|k\rangle|^2 \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) \quad (2.16)$$

Le terme $(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k)$ assure la conservation de l'énergie et le terme $|\langle k'|V|k\rangle|$ représente l'élément de matrice et V est le potentiel dans lequel sont plongés les électrons.

2.3. Variations de l'énergie de Fermi

Dans le graphène l'énergie de Fermi E_F est donnée par [59] :

$$E_F = \hbar v_F k_F \quad (2.17)$$

Dans un système bidimensionnel, le vecteur d'onde de Fermi est relié à la densité électronique n par :

$$k_F = \sqrt{\frac{4\pi n}{g_s g_v}} \quad (2.18)$$

Où g_s et g_v sont les facteurs de dégénérescence de spin et de vallée : dans le graphène $g_s = g_v = 2$.

Le nombre de porteurs de charges n est proportionnel à la tension de grille appliquée, de la même manière que dans les armatures d'un condensateur. Le coefficient de proportionnalité entre la densité de porteurs n et la tension de grille est donc égale à la capacité par unité de surface du diélectrique utilisé selon :

$$n = \alpha V_g, \text{ avec } \alpha = \frac{1}{e} \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{d} \quad (2.19)$$

Ainsi, on obtient l'ordre de grandeur de l'énergie de Fermi dans un échantillon de graphène en fonction de la tension de grille en Volts :

$$E_F (meV) = 31 \sqrt{V_g (V)} \quad (2.20)$$

Pour une mesure typique de transport dans le graphène, la tension de grille maximale est 50 V. Ainsi la densité électronique maximale n_{\max} est $3.6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{V}^{-1}$ et l'énergie de Fermi maximale E_{\max} est 0.22 eV [59].

2.4. Détermination de la mobilité par effet de champ

On peut relier la conductivité d'un échantillon à sa densité électronique à l'aide de la formule de Drude :

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu \quad (2.21)$$

Où l'on a introduit la mobilité $\mu = e\tau/m$ qui relie la vitesse moyenne de drift \vec{v}_d des porteurs de charges au champ électrique appliqué \vec{E} via $\langle \vec{v}_d \rangle = \mu\vec{E}$. Elle est proportionnelle à τ , le temps de libre parcours moyen des porteurs de charges. On peut donc écrire :

$$\sigma = \alpha eV_g\mu \quad (2.22)$$

En supposant une mobilité constante, on peut donc évaluer la mobilité d'un échantillon par effet de champ à l'aide de la formule (2.22). Les premières mesures d'effet de champ sur le graphène mirent en évidence un comportement quasi linéaire de la conductance en fonction de la grille. Ainsi, cette méthode de calcul de la mobilité est très répandue au sein de la communauté scientifique pour estimer la qualité des échantillons de graphène. Toutefois certains échantillons exhibent un comportement non linéaire qui rend l'hypothèse d'une mobilité constante critiquable. La formule précédente permet toutefois d'estimer grossièrement la mobilité des échantillons de graphène afin de quantifier leur qualité. Les mobilités typiques rencontrées dans la littérature pour du graphène exfolié sur un substrat de silicium sont comprises entre 500 et $20000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Dans le cas d'échantillon suspendu la mobilité peut gagner un ordre de grandeur et les valeurs obtenues sont typiquement $\mu \approx 10^5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [60].

2.5. Résistance finie au point de Dirac

Lorsque le niveau de Fermi est au point de Dirac, la densité de porteurs est nulle et la conductivité devrait également s'annuler. Elle reste pourtant finie, de l'ordre de $4e^2/h$ [61,62]. Face à cette évidence expérimentale, des théories basées sur le cristal parfait de graphène ont

tenté d'expliquer cette valeur. Ces théories reposent sur une conduction du courant par des états électroniques évanescent [63,64], et aboutissent à la prédiction universelle suivante : $\sigma \approx 4e^2/\pi h$.

Il a fallu attendre les premières études sur du graphène volontairement dopé par exposition à des ions hélium et néon [65] pour apporter une évidence claire que cette valeur dépendait de l'environnement du graphène, donc que la valeur de la résistance au point de Dirac n'est pas universelle. Ces résultats ont suscité une volonté de mieux connaître la morphologie du graphène au point de Dirac. Un résultat déterminant a été l'observation de poche (ou "puddle") d'électrons et de trous au sein d'un feuillet de graphène. Cette observation a d'abord été effectuée à l'aide d'un microscope utilisant le blocage de Coulomb [66] puis une meilleure résolution spatiale a été obtenue à l'aide d'un STM [67]. Les poches d'électrons et de trous résultent d'un potentiel électrostatique inhomogène au sein d'un échantillon de graphène. Les premières mesures [66] ont pu quantifier ces variations et trouvent que le potentiel de surface est compris dans un intervalle (-0.25V, 0.25V) correspondant à une variation de la densité électronique dans l'intervalle ($-1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). Cette plage de densité électronique correspond à une variation de la tension de grille d'environ 1.5V de part et d'autre du point de Dirac. Ceci est en bon accord avec les mesures de transport, qui montrent que la conductance d'un échantillon reste quasiment égale à sa valeur minimale sur une plage de tension de grille de l'ordre de 5V [62]. Il faut donc appliquer des tensions de grille plus élevées pour sortir du régime de poche d'électrons et de trous. Les mesures par STM ont apporté un autre ingrédient important : la taille des poches est de l'ordre de 30 nm, ce qui est largement supérieur à la taille latérale des fluctuations de hauteur de l'échantillon. Ce résultat discrédite donc un effet purement topographique. Il existe aujourd'hui un consensus sur le fait que ce sont des impuretés chargées adsorbées sur (ou sous) le graphène qui sont responsables de la formation de poche d'électrons et de trous.

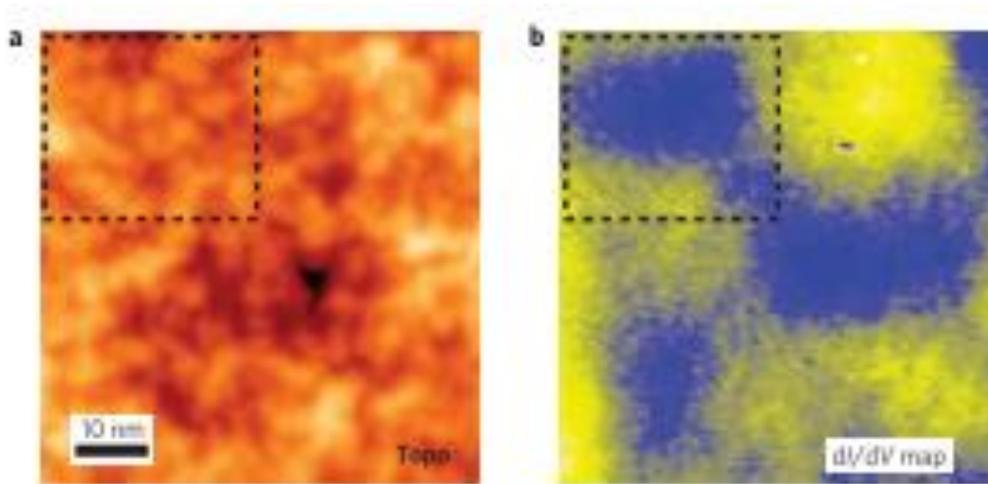


Figure II.1. Image topographique d'un échantillon de graphène obtenue par STM.

Les fluctuations de hauteur ont une extension spatiale de l'ordre de 5 nm. À droite : Carte de conductance tunnel obtenue en scannant la même surface. Les fluctuations de densité électronique apparaissent et leur taille latérale est de l'ordre de 30 nm [67].

2.6. Influence du désordre sur le transport

Les premières expériences de transport révélèrent également le fait que les échantillons obtenus par exfoliation peuvent présenter des mobilités différentes. Le comportement de la résistance en fonction de la grille n'apparaît pas non plus comme un résultat universel. De nombreux efforts expérimentaux et théoriques ont alors été menés afin d'éclaircir ce comportement. Les travaux tentent de répondre à la question suivante "Comment prédire la résistance du graphène à partir de sa structure microscopique ?", comme il est possible de modifier la densité électronique de ce matériau, les chercheurs se sont particulièrement concentrés sur la prédiction de la dépendance en tension de grille de la résistance du graphène.

Pour cela, il faut déterminer quelles formes de désordre sont prépondérantes dans le graphène et freinent le déplacement des porteurs de charges. Du côté théorique, ceci est effectué en établissant une théorie du transport dans le graphène dans laquelle on injecte des formes de désordre particulières afin d'en prédire les effets. Du côté expérimental, on peut modifier de manière maîtrisée l'environnement du graphène afin d'en observer directement l'impact sur la résistance. La comparaison entre théorie et expérience doit alors trancher sur la nature du désordre [68,69].

2.7. Rôle des impuretés chargées

La présence de poche d'électrons et de trous prouve la présence d'impuretés chargées au voisinage du graphène. Plusieurs travaux théoriques ont donc été effectués afin de déterminer l'impact de ces impuretés sur les propriétés de transport. Par exemple, Hwang et al. [70] et Ando [71] ont utilisé une approche semi-classique, et Nomura et al. Des simulations numériques basées sur le formalisme de Kubo-Greenwood [72]. Ses travaux aboutissent à une dépendance linéaire de la conductance en fonction de la tension de grille pour les impuretés chargées, de la forme :

$$\sigma \propto \left| \frac{n}{n_i} \right| = \left| \frac{\alpha V_g}{n_i} \right| \quad (2.23)$$

Où n_i est la densité d'impuretés chargées.

Une première série d'expériences sur des échantillons de graphène volontairement dopé grâce à des atomes de potassium confirma cette dépendance [73,74]. Le potassium est un métal alcalin qui agit comme un donneur d'électrons, ce qui résulte en une impureté chargée positivement adsorbée sur le graphène. Cette expérience montra que la mobilité dépend bien de la quantité d'impuretés chargées et que cette dépendance est de plus linéaire conformément à la théorie. Elle débouche sur une valeur $n_i \approx 5 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$ de la densité d'impuretés chargées intrinsèquement présentes sur le graphène, pour un échantillon ayant une mobilité intrinsèque de l'ordre de $10000 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Cette densité correspond à une distance entre impuretés de l'ordre de 20 nm. Il existe un autre moyen d'agir sur le rôle des impuretés chargées, sans doper volontairement le graphène : on peut modifier la force des interactions coulombiennes en changeant la constante diélectrique du graphène. Ceci peut être effectué en utilisant divers substrats de constant diélectrique différent, ou encore en immergeant l'échantillon dans un solvant possédant un constant diélectrique très différent de celle de l'air. Théoriquement la mobilité devrait être augmentée d'un facteur 10 en utilisant du glycérol. Une augmentation de la mobilité a bien été observée mais celle-ci était uniquement de l'ordre de 50% [75]. Ceci confirme la présence d'impuretés chargées mais montre qu'elles ne constituent pas le mécanisme de diffusion dominant dans le graphène.

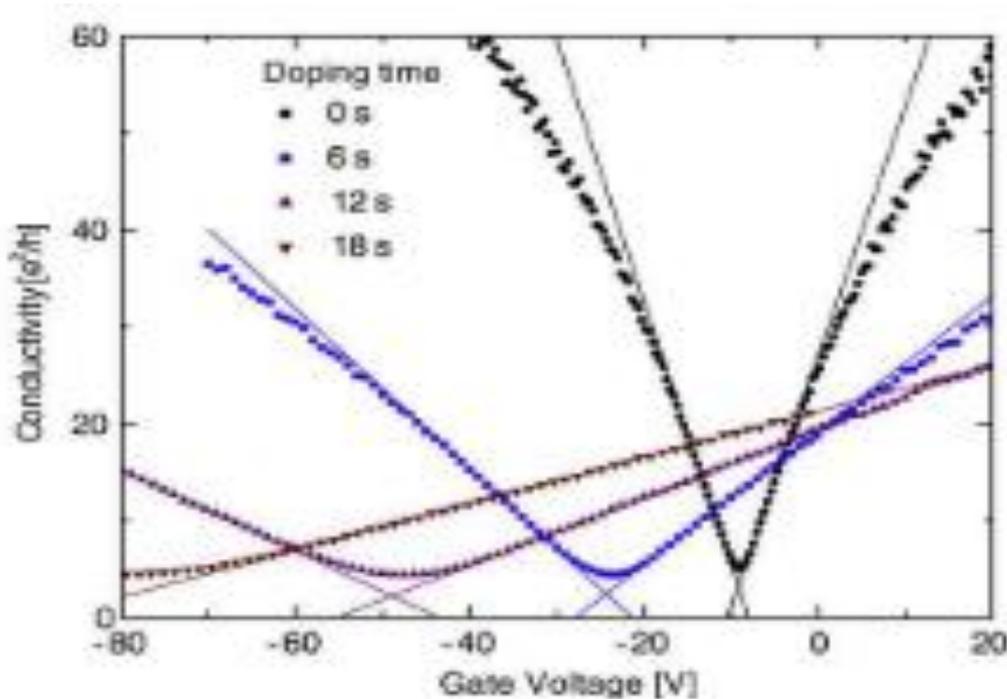


Figure II.2. Effet du dopage du graphène par des atomes de potassium sur la dépendance de la conductivité en fonction de la tension de grille [74].

2.8. Impuretés ponctuelles

Des travaux théoriques ont été également menés afin de décrire l'effet de défauts neutres et ponctuels. Ces défauts peuvent être par exemple des lacunes dans le cristal. Il peut également s'agir d'atomes formant des liaisons covalentes fortes avec le graphène et modifiant localement l'hybridation des orbitales, on parle alors d'états résonnants. Les premiers travaux théoriques modélisèrent ces défauts par un potentiel décrit par une fonction δ de Dirac $V(\vec{r}) = V_0\delta(\vec{r})$ et utilisent une approche combinant la règle d'or de Fermi et l'approximation de Born [76]. Les calculs aboutirent à une contribution à la résistance indépendante de la grille. Il a plus tard été montré que l'approximation de Born n'était pas valide dans le graphène. Cette notion était toutefois très populaire à l'époque et de nombreux expérimentateurs ont utilisé ce résultat pour discriminer la contribution des impuretés ponctuelles à la résistance du graphène. L'utilisation d'états résonnants dans un calcul semi-classique de la conductivité [77] mène à une relation de la forme :

$$\sigma \propto \frac{n}{n_i} \ln^2(\sqrt{\pi n R}) \quad (2.24)$$

Où R est la taille du défaut qui est de l'ordre de la distance interatomique, et n_i la densité d'impuretés ponctuelles.

Cette dépendance correspond bien au comportement exhibé par des échantillons de graphène suspendus, dans lesquels la concentration d'impuretés chargées est censée être faible [69]. Du côté expérimental, des expériences de dopage du graphène par des atomes d'hydrogène qui créent théoriquement des états résonants ont montré que la mobilité du graphène était sévèrement affectée par ce type de défauts [75]. Ces expériences arrivent à la conclusion que ce type d'impuretés constitue le mécanisme dominant de la diffusion dans le graphène. Ces défauts sont de plus responsables de diffusion entre les deux vallées, ce qui fait apparaître un pic supplémentaire dans le spectre Raman du graphène.

3. Modèles de capacité quantique C_Q

3.1. Présentation de modèle de Xia

La configuration expérimentale de ce modèle montre dans la figure ci-dessus, où une feuille de graphène supportée sur un substrat Si / SiO₂ (290 nm) est connectée à une électrode Cr (5 nm) / Au (80 nm). La surface du graphène est recouverte d'une épaisse couche de photo-résistance (~ 4,5 μm) à l'exception d'une petite fenêtre d'un diamètre de 10 μm, exposée à l'électrolyte. Cette configuration minimise la capacité de fond et empêche l'exposition des bords de graphène à l'électrolyte [78].

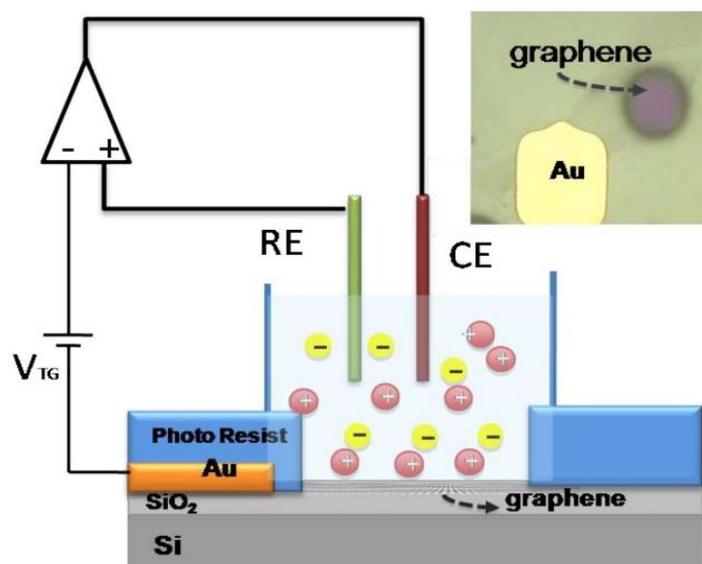


Figure II.3. Dispositif de graphène monocouche. Schéma de l'appareil de mesure de capacité quantique [78].

La capacité inter faciale du graphène est mesurée en utilisant la cellule électrochimique standard à trois électrodes en utilisant un potentiel-stat dans lequel le potentiel du graphène est contrôlé par rapport à une électrode de référence (une électrode Pt). La figure II.3 montre l'image optique du dispositif avec une électrode. La couleur distincte associée à la spectroscopie Raman permet une identification précise du graphène monocouche (ou du graphène bicouche ; voir les informations complémentaires). Avant la mesure de capacité, chaque dispositif est nettoyé et recuit à 200° C dans un environnement Ar / H₂ [79,80] pour éliminer les contaminations provenant de la fabrication du dispositif. Une configuration de dispositif alternatif, dans laquelle le graphène est connecté à deux électrodes, est également utilisée. La configuration alternative offre une flexibilité supplémentaire pour faire passer un courant le long de la feuille de graphène afin d'éliminer les contaminations. Les approches à une et à deux électrodes produisent des résultats similaires.

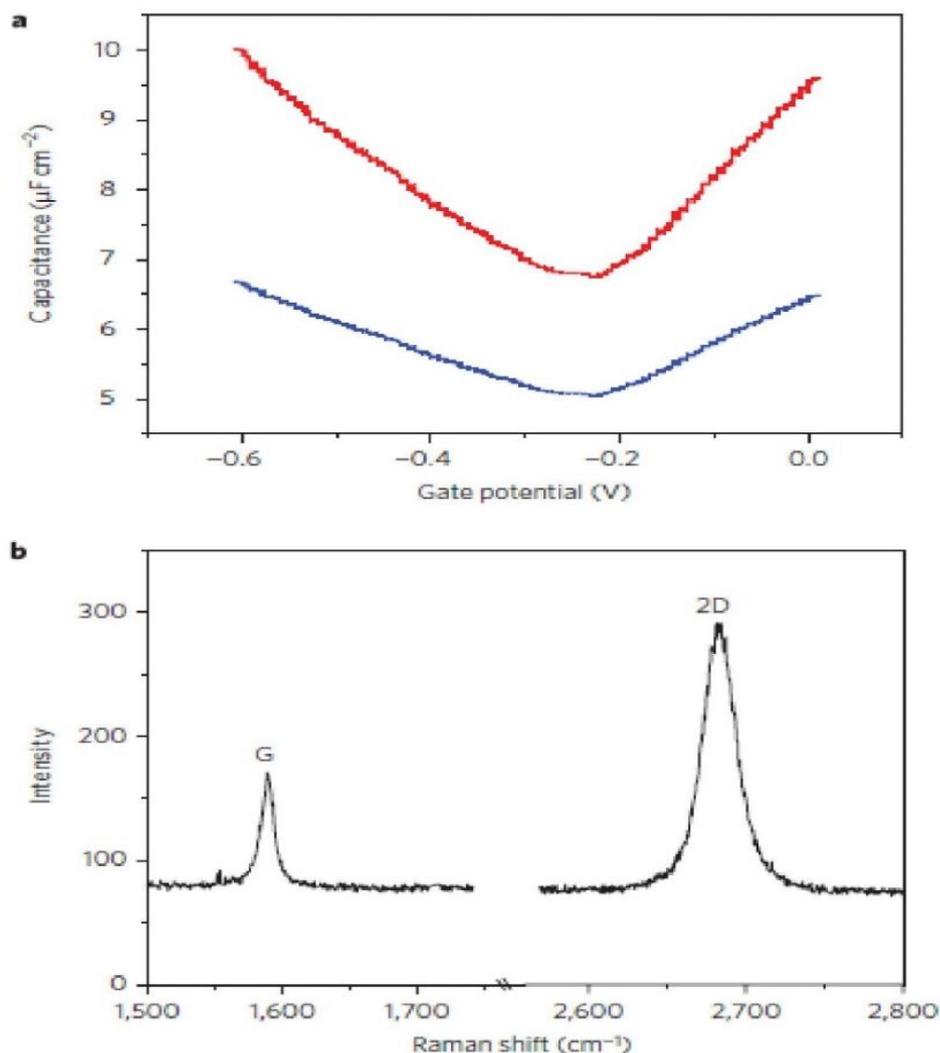


Figure II.4. La relation entre (a) la capacité du graphène et (b) le potentiel de grille [78].

La figure II.4 (a) montre la capacité totale (ligne bleue) et la capacité quantique (ligne rouge) du graphène en fonction du potentiel de grille mesurées dans un liquide ionique qu'appelé l'hexafluorophosphate de 1-butyl-3-méthylimidazolium (BMIM-PF6). Et un spectre Raman utilisé pour vérifier l'épaisseur est montré sur la figure II.4 (b). En raison de la concentration ionique élevée du liquide ionique ($2,9 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$), la longueur Debye approche de zéro, de sorte que la capacité mesurée ne se compose que de deux contributions : la capacité interrassiale issue de la double couche à l'interface graphène-liquide ionique et la capacité quantique du graphène. Les deux peuvent être modélisés comme deux condensateurs en série et celui avec une valeur plus petite domine la capacité totale. La double couche résulte de l'accumulation d'une couche de contre-ions sur une électrode chargée, qui a été modélisée par un condensateur à plaques parallèles dont la capacité par unité de surface est donnée par $\epsilon_0 \epsilon / t$, où $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F / m}$, ϵ est la constante diélectrique du liquide ionique et t est le rayon des contre-ions. Pour le liquide ionique BMIM-PF₆, $\epsilon = 7$ et $t \sim 0,3 \text{ nm}$ [81], ce qui conduit à une capacité double couche de $\sim 21 \mu\text{F / cm}^2$. Nous avons mesuré la capacité double couche directement en utilisant la même configuration expérimentale (indiquée dans les informations à l'appui). La capacité double couche mesurée est de $\sim 21 \mu\text{F / cm}^2$ et change à moins de $\pm 3\%$ dans la fenêtre de tension de grille, ce qui est cohérent avec le modèle. Ces résultats sont également en bon accord avec un précédent rapport de S. Baldelli [81]. La capacité double couche est grande par rapport à la capacité quantique théoriquement prédite du graphène. En outre, la capacité double couche ne dépend pas fortement du potentiel, ce qui permet d'extraire directement la capacité quantique (ligne rouge). Nous avons également mesuré la capacité quantique d'un graphène bicouche en utilisant les mêmes procédures. Avant de discuter des données expérimentales, nous résumons la prédiction théorique de la capacité quantique pour un graphène idéal.

L'expression de la capacité quantique a été dérivée sur la base du modèle 2D de gaz d'électrons libres, qui prend la forme de [82] :

$$C_Q = \frac{2e^2 k_B T}{\pi (\hbar v_F)^2} \ln \left[2 \left(1 + \cosh \left(\frac{eV_{ch}}{k_B T} \right) \right) \right] \quad (2.25)$$

Où \hbar la constante de Planck, e la charge de l'électron, k_B la constante de Boltzmann, $v_F \approx c/300$

La vitesse de Fermi de l'électron de Dirac, et $V_{ch} = E_F/e$ le potentiel du graphène. Lorsque $eV_{ch} \gg kT$, l'équation (24) se réduit à [83] :

$$C_Q \approx e^2 \frac{2}{\pi} \frac{eV_{ch}}{(\hbar v_F)^2} = \frac{2e^2}{\hbar v_F \sqrt{\pi}} \sqrt{n} \quad (2.26)$$

La théorie fournit une description quantitative de la capacité quantique du graphène en termes de vitesse de Fermi, de température, de densité, de porteurs et de quantités physiques fondamentales. Plusieurs caractéristiques importantes méritent d'être notées :

- 1) la capacité quantique a une valeur minimale au point de Dirac,
- 2) la valeur minimale est proche de zéro,
- 3) elle augmente linéairement avec V_{ch} avec une pente de $23 \mu\text{F} / \text{cm}^2 / \text{V}$,
- 4) elle est symétrique par rapport au point de Dirac.

Afin de comparer la capacité mesurée avec la théorie, on reprend le résultat expérimental de la figure II.5 (points bleus) en termes de V_{ch} , donné par $V_{ch} = (V_g C_i) / (C_i + C_g)$ où V_g est le potentiel de grille et $C_i = 20 \mu\text{F} / \text{cm}^2$ est la capacité double couche du liquide ionique [81].

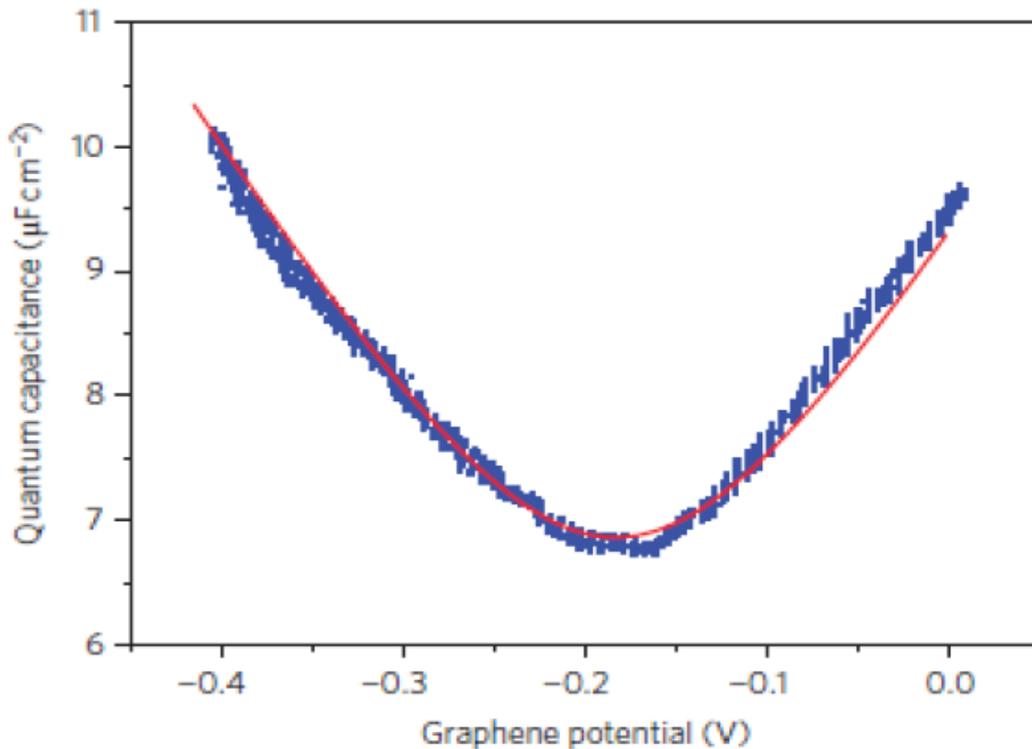


Figure II.5. Dépendance de la capacité quantique en fonction du potentiel du graphène (V_{ch}). Ajustement de la capacité mesurée (points bleus points) avec la théorie (ligne rouge) [78].

La capacité quantique mesurée affiche la « forme en V » et les valeurs absolues sont également proches de la prédiction théorique. Cependant, il existe plusieurs différences distinctes :

1) la capacité quantique minimale mesurée est ronde, ce qui est plus que ce que le frottement thermique à température ambiante peut éventuellement produire ;

2) le minimum mesuré est bien supérieur à la valeur prédite, $C_{Q\min} = \frac{2e^2 k_B T}{\pi(\hbar v_F)^2} \ln[4]$
 $\sim 0.8 \mu\text{F}/\text{cm}^2$ (induit thermique) ;

3) la pente mesurée est d'environ $11 \mu\text{F} / \text{cm}^2 / \text{V}$, ce qui ne représente qu'environ la moitié de la valeur prédite.

Le modèle théorique est basé sur l'hypothèse d'un graphène pur et parfait. En réalité, diverses impuretés et défauts existent, et des résultats théoriques et expérimentaux récents ont montré que les impuretés chargées jouent un rôle clé dans les propriétés de transport du graphène près du point de Dirac [73]. Fluctuations de potentiel locaux et flaques d'électrons / trous dans le graphène [84]. Les fluctuations potentielles basées sur une théorie auto-cohérente donnent lieu à une densité de porteurs supplémentaire, n^* , induite par les impuretés. Bien qu'une théorie microscopique de la capacité incluant les fluctuations de potentiel locales ne soit pas disponible, une simple approximation pour prendre en compte la densité de porteurs supplémentaire consiste à exprimer la concentration totale de porteurs comme :

$$n = |n_G| + |n^*| \quad (2.27)$$

Où n_G et n^* sont les concentrations de porteurs provoquées par le potentiel de grille et les impuretés chargées, respectivement.

Par conséquent, la capacité quantique est donnée par :

$$C_Q = \frac{2e^2}{\hbar v_F \sqrt{\pi}} (|n_G| + |n^*|)^{\frac{1}{2}} \quad (2.28)$$

Notez que [83] :

$$n_G = \left(\frac{eV_{ch}}{\hbar v_F \sqrt{\pi}} \right)^2 \quad (2.29)$$

3.2. Présentation de modèle de Cheremisin

Le spectre d'énergie obéit à la dépendance linéaire [1] :

$$E(k) = \hbar v k \quad (2.30)$$

La chute de tension aux bornes de la capacité et de la tension associée au niveau de Fermi du graphène [85] :

$$U = \frac{Q}{C} + \frac{\mu}{e} \quad (2.31)$$

En utilisant les statistiques de Gibbs, nous pouvons distinguer les composants de la potentielle thermodynamique des électrons et des trous [86] :

$$\Omega_e = -kT \sum_k \ln \left(1 + e^{(\mu - |E(k)|/kT)} \right) \quad (2.32)$$

$$\Omega_h = \Omega_e(-\mu) \quad (2.33)$$

En utilisant la densité d'états du graphène (DOS) $D_0 = 2|E|/\pi\hbar^2 v^2$, en incluant la dégradation de la vallée et du spin, nous obtenons :

$$N = N_T F_1(\xi), \quad P = N(-\xi) \quad (2.34)$$

Pour deux cas opposés de dégénérescence forte $\xi \geq 1$ et faible $\xi \ll 1$ la densité électronique donne :

$$N = N_T \left(\frac{\xi^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} \right), \quad \xi \geq 1. \quad (2.35)$$

$$N = N_T \left(\frac{\pi^2}{12} + \xi \ln 2 + \frac{\xi^2}{4} \right), \quad \xi \ll 1. \quad (2.36)$$

- La Capacité quantique à zéro magnétique est présentée comme tel [87] :

$$C_q = C_0 \ln [2(1 + \cosh \xi)] \quad (2.37)$$

- Capacité quantique en présence du champ magnétique [87] :

$$C_q = \frac{e^2 \Gamma}{kT} \left[4 \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\cosh(\varepsilon_N) \cosh \xi + 1}{(\cosh(\varepsilon_N) + \cosh \xi)^2} + \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{\xi}{2} \right)} \right] \quad (2.38)$$

- Influence de l'élargissement LL sur la capacité quantique [87]:

$$C_q = \frac{e^2 \Gamma}{kT} \left[4 \sum_{N=1}^{\infty} f(N, \xi, \sigma) + \frac{1}{2} f(0, \xi, \sigma) \right] \quad (2.39)$$

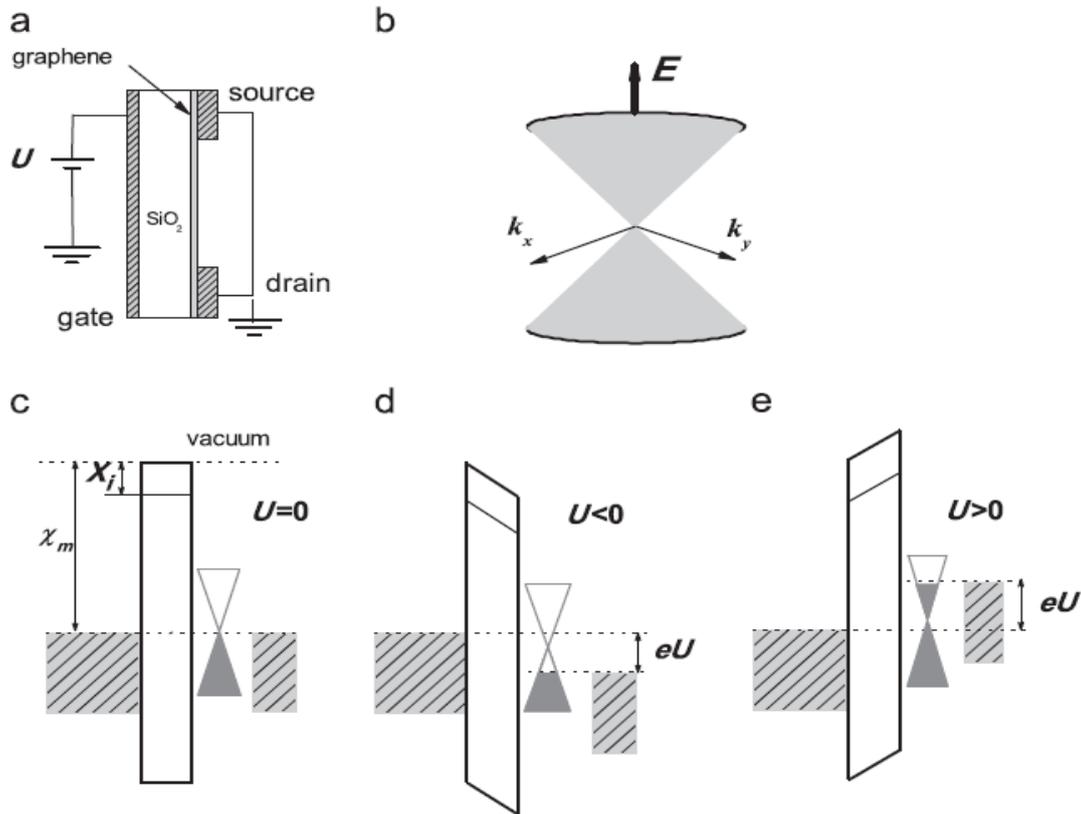


Figure II.6. (a) Configuration expérimentale du graphène à grille. (b) Structure de bande à $k \approx 0$. Le diagramme d'énergie pour (c) $U=0$, (d) $U < 0$ et (e) $U > 0$ [87].

Où χ_m est la fonction de travail du métal, et χ_i est l'affinité électronique de l'isolant.

3.3. Présentation de modèle de Khaledian

Dans ce modèle de Khaledian la capacité quantique est remarquablement influencée par le confinement quantique dans des dispositifs de taille nanométrique. Par conséquent, la capacité quantique a été supposée être modélisée pour les dispositifs à l'échelle nanométrique, les matériaux à base de graphène en particulier [82]. La capacité quantique peut être obtenue en calculant à un certain niveau de Fermi et à une certaine température, contrairement à la capacité totale obtenue par les expériences. La capacité quantique au point de Dirac ou à la neutralité de la charge est obtenue par la différenciation de la concentration des porteurs en

fonction des états du niveau d'énergie. Une expression générale de la capacité quantique unidimensionnelle est fournie par [89] :

$$C_Q = \frac{\partial Q}{\partial V} = \frac{e^2 \partial n_i}{\partial E} = \frac{e^2}{K_B T} \frac{\partial n_i}{\partial x} \quad (2.40)$$

Où n_i indique la concentration de porteurs et (V) désigne la tension appliquée au GNS, tandis que (e) représente la magnitude de la charge d'un électron.

Par conséquent, en substituant n_i de $n_i = \frac{2m^* K_B T}{3t\pi\hbar^2} F_0(\eta_F) + \sqrt{\frac{2m^* K_B T k^2}{9t\pi\hbar^2}} F_{(-1/2)}(\eta_F)$ dans équation (2.40), nous pouvons simplifier la capacité quantique comme suit :

$$C_Q = \frac{2e^2 m^*}{3\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \left(\frac{(x)^{-1/2}}{1 + \exp(x - \eta_F)} \right) \quad (2.41)$$

Les états à l'intérieur de la bande de conduction (bande permise) sont modérément rempli à température ambiante ($T = 300K$) dans le régime non dégénéré ; en conséquence, la partie exponentielle d'équation (40) est suffisamment grande pour éliminer 1 du dénominateur.

Par conséquent, la capacité quantique dans le régime non dégénéré peut être obtenue comme suit [90] :

$$C_{Q_{nd}} = \frac{2e^2 m^*}{3\pi\hbar^2} \cdot (x)^{-1/2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \exp(x - \eta_F) \quad (2.42)$$

En revanche, la partie exponentielle est vraiment petite dans le régime dégénéré en raison de la probabilité pour l'électron de remplir tous les états disponibles jusqu'au niveau de Fermi qui est approximativement égal à 1, ce qui suggère qu'il n'y a pas d'états accessibles dans la bande de conduction pour $E - E_F \leq 3K_B T$. Par conséquent, la capacité quantique dans le régime dégénéré peut être obtenue par [90] :

$$C_{Qd} = \frac{2e^2 m^*}{3\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{1}{t \cdot K_B T}} \cdot (x)^{-1/2} \quad (2.43)$$

4. Capacité d'oxyde Cox

La capacité totale d'une capacité MOS, de surface A_{eff} , est composée de la capacité d'oxyde, C_{ox} , en série avec la capacité dynamique du semi-conducteur, C_{sc} :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_s} \quad (2.44)$$

Avec :

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_{ox} \cdot A_{eff}}{t_{ox}} \quad (2.45)$$

Où t_{ox} l'épaisseur de la couche d'oxyde.

La charge au niveau de la grille Q_G est reliée à la tension aux bornes de l'isolant par la relation capacitive :

$$Q_G = C_{ox} \cdot V_{ox} \Rightarrow C_{ox} = \frac{Q_G}{V_{ox}} \quad (2.46)$$

Où V_{ox} est la tension appliquée aux bornes de l'oxyde, qui donne par la relation suivante :

$$V_{ox} = V_G + V_S \quad (2.47)$$

Après les équations précédentes la capacité d'oxyde devient comme suite :

$$C_{ox} = \frac{Q_G}{V_G + V_S} \quad (2.48)$$

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons parlé d'une manière générale des notions du transport dans les nanostructures de graphène. D'autre part, nous avons décrit la capacité d'oxyde. Enfin, nous avons passé en revue la capacité quantique dans ses différents modèles.

CHAPITRE III

MODÉLISATION DE LA CAPACITE QUANTIQUE DU GRAPHENE

1. Introduction

Graphène monocouche et bicouche ont une caractéristique unique qui est la densité de porteurs, cette dernière peut être réglée en continu par une porte externe, des porteurs de type électron à dopage positif aux porteurs de type trou à dopage négatif [91]. Cependant, la structure de bande près du point de Dirac représente le paramètre clé de la différenciation entre les deux types de graphène (monocouche et bicouche). Le graphène monocouche a une structure de bande conique et une densité d'états qui disparaît linéairement au point de Dirac, en revanche, le graphène bicouche a une structure de bande hyperbolique et une densité d'états qui augmente linéairement avec l'énergie à partir d'une valeur finie à l'énergie zéro.

Récemment, les feuilles de graphène ont fait l'objet d'études théoriques et expérimentales de la capacité quantique [83-79]. Les mesures de cette capacité du graphène bicouche ont montré un comportement similaire à celui du graphène monocouche mais, près du point de Dirac, une valeur de capacité finie a été trouvée. Afin de fournir un aperçu physique de la capacité des dispositifs en graphène, le développement des modèles analytiques intuitifs capturant la physique essentielle du dispositif en question est un point majeur. Kliros G.S présente un modèle analytique simple pour la capacité quantique des dispositifs en graphène monocouche et bicouche [92].

Ce chapitre est consacré pour la présentation des modélisations réalisées lors de ce travail, afin d'étudier la capacité quantique dans le graphène mono et bicouche. Dans la première partie, nous décrirons la relation de dispersion du graphène monocouche puis bicouche, et la densité d'états du graphène. Enfin, nous présenterons l'étude et la modélisation de la capacité quantique dans le graphène mono- et bicouche.

La plupart de nos simulateurs sont développés sous Matlab.

2. Capacité quantique

La capacité quantique, aussi appelée capacité chimique [93] et capacité électrochimique [94] est une quantité introduite pour la première fois par Serge Luryi (1988) [95], comme la variation de la charge électrique par rapport à la variation du potentiel électrochimique.

Dans l'exemple le plus simple, si vous fabriquez un condensateur à plaques parallèles dont l'une ou les deux plaques ont une faible densité d'états, la capacité n'est pas donnée par la formule normale des condensateurs à plaques parallèles, C_0 . Au contraire, la capacité est plus faible, comme s'il y avait un autre condensateur en série, C_0 . Cette deuxième capacité, liée à la densité d'états des plaques, est la capacité quantique qu'est représentée par C_Q . La capacité équivalente est appelée capacité électrochimique.

La capacité quantique est particulièrement importante pour les systèmes à faible densité d'états, comme un système électronique bidimensionnel dans une surface ou une interface de semi-conducteur ou dans le graphène, et peut être utilisée pour construire une fonctionnelle énergétique expérimentale de la densité électronique. [94]

3. Influence de la capacité quantique

La capacité quantique du graphène est pertinente pour comprendre et modéliser le graphène dans les dispositifs [96]. Elle est également pertinente pour les nanotubes de carbone [97].

Luryi a proposé une variété de dispositifs utilisant des gaz d'électrons bidimensionnel (2 DEG), qui ne fonctionnent qu'en raison de la faible densité d'états des gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG), et de l'effet de capacité quantique associé [95]. Par exemple, dans la configuration à trois plaques métal-isolant-2DEG-isolant-métal, l'effet de capacité quantique signifie que les deux condensateurs interagissent l'un avec l'autre. La capacité quantique peut être pertinente dans le profilage de la capacité-tension.

4. Développement du modèle

4.1. La relation de dispersion du graphène monocouche

Le graphène monocouche est considéré comme un semi-conducteur à écart zéro, ces bandes d'électrons π de conduction et de valence ne se touchent qu'en deux points isolés de sa

zone de Brillouin 2D. En effet, la relation de dispersion de ces bandes au voisinage de ces points est donnée par :

$$E_s(k) = s(\hbar v_F k) \quad (3.1)$$

Où $s=+1$ pour la bande de conduction BC et $s=-1$ pour la bande de valence BV, $v_F = \sqrt{3}\gamma_0\alpha/2$ est la vitesse de Fermi avec couplage intra-couche $\gamma_0 = 3.16$ eV et k est le vecteur d'onde des porteurs dans le plan bidimensionnel de la feuille de graphène. Le point $k=0$, appelé " point de Dirac ", est un choix pratique pour la référence de l'énergie ; ainsi, $E(k=0) = 0$ eV.

4.2. La relation de dispersion du graphène bicouche

Ce type de graphène est composé d'une paire de réseaux en nid d'abeille d'atomes de carbone, qui comprennent les atomes A_1 et B_1 sur la couche 1 et A_2 et B_2 sur la couche 2. La figure.III.1(a) montrée que les deux couches sont disposées en empilement de Bernal, où les atomes A_2 sont situés directement sous les atomes B_1 . La constante de réseau dans une couche est donnée par $a=0,246$ nm et l'espacement des couches par $d=0,334$ nm. En l'absence de désordre, la structure de bande du graphène bicouche propre peut être écrite [98] :

$$E_s(k) = s \left(\mu \frac{\gamma_1}{2} + \sqrt{\frac{\gamma_1^2}{4} + (\hbar v_F k)^2} \right) \quad (3.2)$$

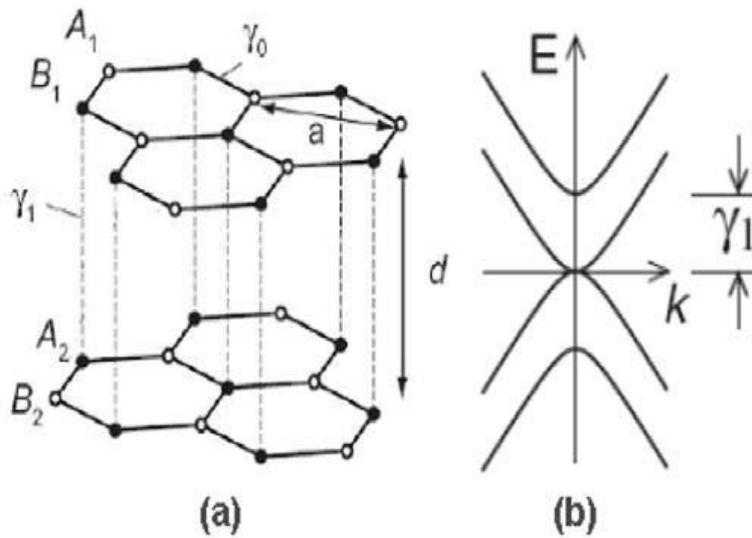


Figure III.1. Vue schématique du graphène bicouche dans l'empilement de Bernal (a) et des bandes de faible énergie du graphène bicouche parfait (b).

4.3. La densité d'états du graphène

La densité d'états du graphène monocouche et bicouche pur et parfait est donnée par les équations suivantes :

$$g_{MLG}(E) = \frac{g_s g_v}{2\pi(\hbar v_F)^2} |E| \quad (3.3)$$

Avec : g_s la dégénérescence de spin et g_v la dégénérescence de spin.

La densité d'états du graphène bicouche pur et parfait peut être bien approchée par une relation linéaire en fonction de l'énergie [99] :

$$g_{BLG}(E) = \frac{g_s g_v}{2\pi(\hbar v_F)^2} \left(|E| + \frac{\gamma_1}{2} \right) \quad (3.4)$$

Au niveau du point de Dirac, cette densité est exprimée par l'équation ci-dessus :

$$g_{BLG}(E) = \frac{g_s g_v}{2\pi(\hbar v_F)^2} \frac{\gamma_1}{2} = g_s g_v \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \quad (3.5)$$

Cette équation représente la formule dans laquelle la densité d'états d'un gaz d'électrons 2D avec une masse effective $m^* = \gamma_1 / (2v_F^2)$, c'est-à-dire proportionnel au couplage entre les couches.

En général, les échantillons de graphène monocouche et bicouche sur un substrat sont caractérisés par des flaques d'électrons et de trous induits par des impuretés chargées qui entrent des différentes variations de la densité des porteurs à travers l'échantillon sur une échelle typique de quelque nm [100]. D'autre part, la densité d'états gaussienne élargie $D(E)$ est donnée par l'équation :

$$D(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{(\varepsilon - E)^2}{2\Gamma^2}\right) g \varepsilon d\varepsilon \quad (3.6)$$

Où Γ est le paramètre d'élargissement de l'énergie.

Après l'intégration dans (3.6), nous obtenons la densité gaussienne du graphène bicouche ce qui suit :

$$D_{BLG}(E) = \frac{g_s g_v}{2\pi(\hbar v_F)^2} \times \left[\frac{2\Gamma}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{E^2}{2\Gamma^2}\right) + \text{Erf}\left(\frac{E}{\Gamma\sqrt{2}}\right) + \frac{\gamma_1}{2} \right] \quad (3.7)$$

Où erf(x) est la fonction d'erreur gaussienne.

Dans le cas où l'énergie de Fermi est près du point de Dirac la densité d'états devient :

$$D_{BLG}(0) = g_s g_v \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \times \left(1 + 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Gamma}{\gamma_1} \right) \quad (3.8)$$

En ce qui concerne la densité d'états élargie pour le graphène monocouche, lorsque $\gamma_1=0$ l'équation 7 devient :

$$D_{MLG}(E) = \frac{g_s g_v}{2\pi(\hbar v_F)^2} \times \left[\frac{2\Gamma}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{E^2}{2\Gamma^2}\right) + \text{Erf}\left(\frac{E}{\Gamma\sqrt{2}}\right) \right] \quad (3.9)$$

4.4. Expressions de la capacité quantique

La capacité quantique est définie comme la dérivée de la charge nette totale d'un dispositif de graphène monocouche ou bicouche par rapport au potentiel électrostatique appliqué. En effet, la charge totale est proportionnelle à la moyenne pondérée de la densité d'états du niveau d'énergie Fermi E_F . Dans le cas où la densité d'état en fonction de l'énergie est connue, la capacité quantique C_Q du canal à une température finie peut être calculée comme [101] :

$$C_Q = e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) \left(-\frac{\partial f(E - E_F)}{\partial E} \right) dE \quad (3.10)$$

Où $f(E)$ est la distribution de Fermi-Dirac $f(E - E_F) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}}$, e est la charge électron.

Équation (3.10), peut-être réécrite en employant l'intégration par parties comme suit :

$$C_Q = e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(E - E_F) \left(\frac{\partial D(E)}{\partial E} \right) dE \quad (3.11)$$

Que l'on choisisse (3.11), une solution analytique complète valable pour toute température où niveau de Fermi dépend de la possibilité d'évaluer une intégrale du type Fermi-Dirac de la forme [102] :

$$F = \int_0^{\infty} \frac{f}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} dE \quad (3.12)$$

Et c'est là qu'intervient la méthode de Selvaggi [103] et Selvaggi et al. [104] grâce à cette méthode l'équation (3.12) peut s'écrire sous cette forme :

$$F = \int_0^{\xi} f(x) dx + \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p \times \left(\int_0^{\xi} f(x) e^{-p(\xi-x)} dx - \int_{\xi}^{\infty} f(x) e^{-p(x-\xi)} dx \right) \quad (3.13)$$

En employant l'équation (3.9) dans (3.11) :

$$C_Q = \frac{e^2 A}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{erf}\left(-\frac{E}{\sqrt{2}\Gamma}\right)}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}} dE \quad (3.14)$$

$$C_Q = \frac{Ae^2 k_B T}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\operatorname{erf}(-ax)}{1 + e^{x-\xi}} \right) dx \quad (3.15)$$

$$C_Q = \frac{Ae^2 k_B T}{2} \left[\int_0^{+\infty} \left(\frac{\operatorname{erf}(-ax)}{1 + e^{x-\xi}} \right) dx + \int_0^{+\infty} \left(\frac{\operatorname{erf}(ax)}{1 + e^{-(x+\xi)}} \right) dx \right] \quad (3.16)$$

Avec : $A = \frac{g_s g_v}{2\pi(\hbar v_F)^2}$, $a = \frac{k_B T}{\sqrt{2}\Gamma}$, $\xi = \frac{E_F}{k_B T}$ et $x = \frac{E}{k_B T}$.

En utilisant l'équation (3.14) l'équation (3.16) peut-être réécrite ainsi :

$$C_Q = \frac{Ae^2 k_B T}{2} \left[\int_0^{\xi} \operatorname{erf}(-ax) dx + \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p \times \left(\int_0^{\xi} \operatorname{erf}(-ax) e^{-p(\xi-x)} dx - \int_{\xi}^{\infty} \operatorname{erf}(-ax) e^{-p(x-\xi)} dx \right) \right] \quad (3.17)$$

$$+ \frac{Ae^2 k_B T}{2} \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \times \int_0^{\infty} \operatorname{erf}(ax) e^{-p(\xi+x)} dx$$

Pour MLG homogène ($\Gamma \rightarrow 0$) et (3.17) se simplifie comme tel :

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} C_Q = \frac{Ae^2 k_B T}{2} \left[\xi + \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p \times \left(\int_0^{\xi} \operatorname{erf}(-ax) e^{-p(\xi-x)} dx - \int_{\xi}^{\infty} \operatorname{erf}(-ax) e^{-p(x-\xi)} dx \right) \right] \quad (3.18)$$

Pour $|E_F|$:

$$C_Q(E_F) = Ae^2 k_B T \ln(1 + e^\xi) \quad (3.19)$$

$$C_Q(-E_F) = Ae^2 k_B T \ln(1 + e^{-\xi}) \quad (3.20)$$

$\forall \xi \in \mathbb{R}$, la capacité quantique devient comme suite :

$$C_Q = C_Q(E_F) + C_Q(-E_F) \quad (3.21)$$

$$C_Q = Ae^2 k_B T \ln(1 + e^\xi) + Ae^2 k_B T \ln(1 + e^{-\xi}) = Ae^2 k_B T \ln\left(1 + e^{\frac{E_F}{k_B T}}\right) + Ae^2 k_B T \ln\left(1 + e^{-\frac{E_F}{k_B T}}\right) \quad (3.22)$$

$$C_Q = Ae^2 k_B T \left[\ln\left(1 + e^{\frac{E_F}{k_B T}}\right) + \ln\left(1 + e^{-\frac{E_F}{k_B T}}\right) \right] \quad (3.23)$$

$$C_Q = Ae^2 k_B T \left\{ \ln\left[2 + 2 \cosh\left(\frac{E_F}{k_B T}\right) \right] \right\} \quad (3.24)$$

5. Résultats et discussion

Nous avons simulé le modèle proposé dans notre travail et les résultats sont discutés dans cette partie. Sur la figure III.2, nous traçons la capacité quantique du graphène monocouche en fonction du niveau de Fermi, telle que décrite par l'équation (3.20).

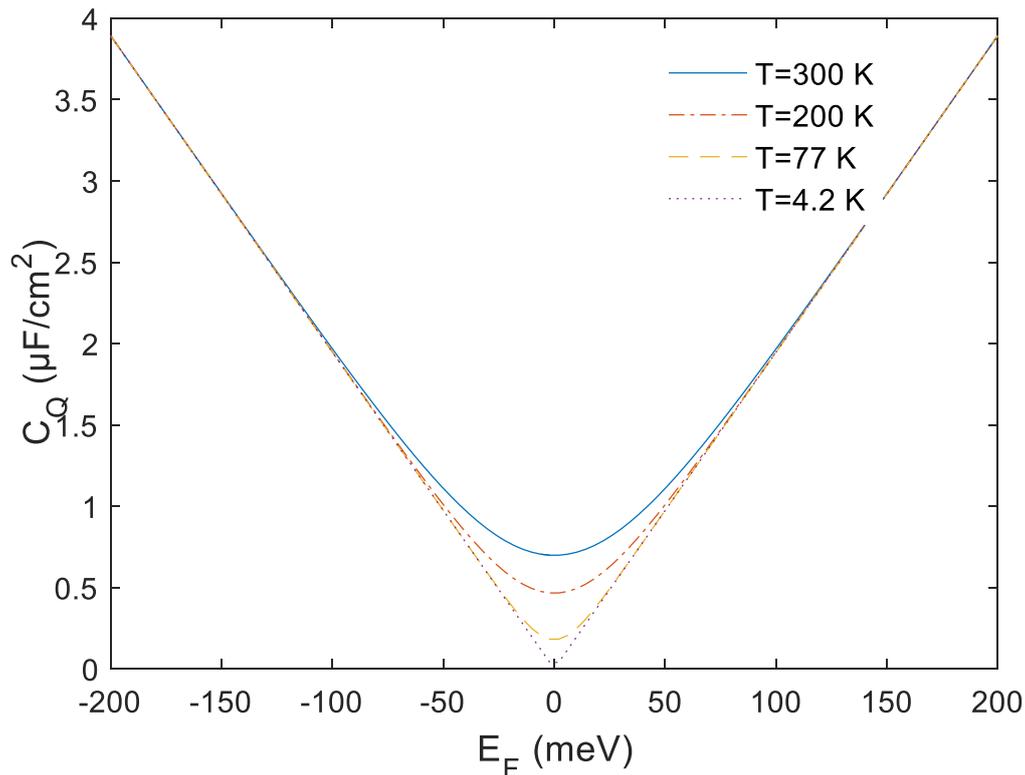


Figure III.2. Dépendance en température de la capacité quantique en fonction du niveau de Fermi pour un dispositif à base de graphène monocouche.

La figure III.2 montre la dépendance de la capacité quantique du graphène monocouche, en fonction de l'énergie de Fermi pour différentes valeurs de la température. On remarque sur cette figure que le minimum de la capacité quantique atteint au niveau du point de Dirac. On observe une variation rapide de la capacité quantique pour une valeur absolue de l'énergie de Fermi supérieure à 90 meV. Alors que dans l'intervalle allant de -90 meV à 90 meV, la variation de la capacité quantique est relativement lente. Ceci s'explique par l'influence du dopage sur les niveaux de Fermi qui influe sur la capacité quantique.

La variation de la température T (300K, 200K, 77K et 4.2K) provoque une diminution de la valeur minimale de la capacité quantique atteignant des valeurs de $0.6\mu\text{F}/\text{cm}^2$, $0.46\mu\text{F}/\text{cm}^2$, $0.18\mu\text{F}/\text{cm}^2$ et $0.03\mu\text{F}/\text{cm}^2$ respectivement. Nos résultats sont identiques à ceux obtenus par Kliros [94] qui a montré que, lorsque les énergies de Fermi $E_F \gg 90$ meV, la capacité quantique devient approximativement indépendante de température.

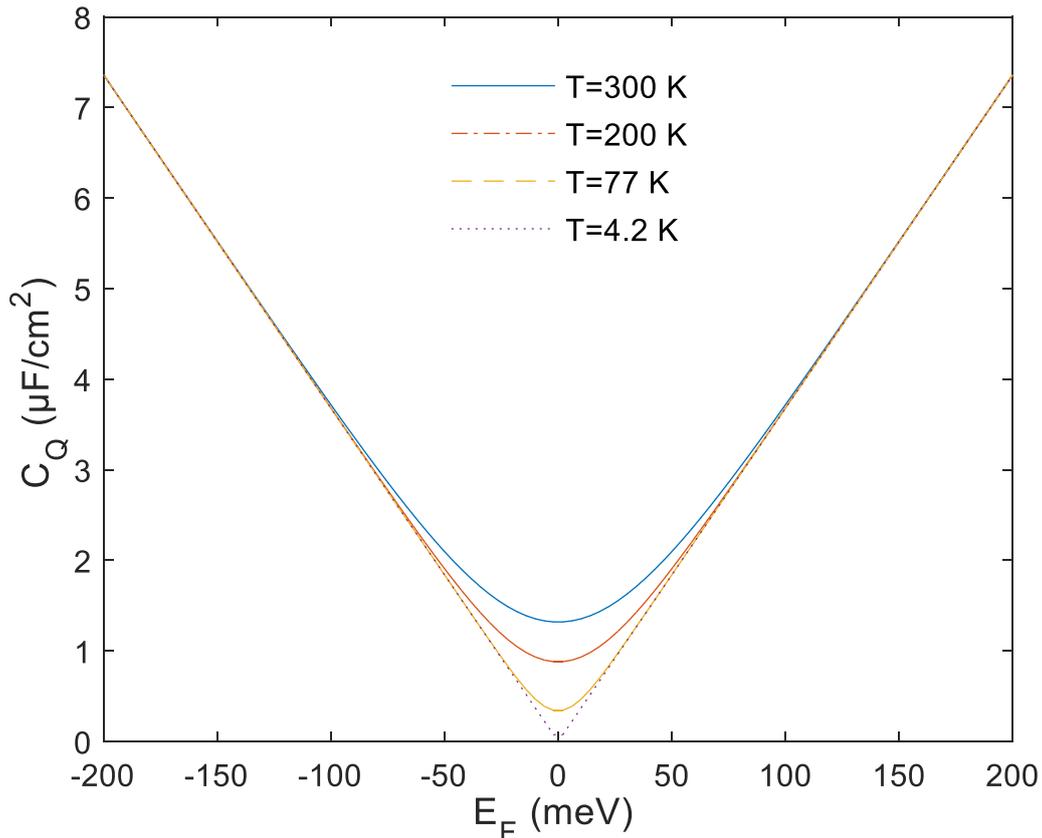


Figure III.3. Dépendance en température de la capacité quantique simulée en fonction d' E_F .

La figure III.3 montre la dépendance de la capacité quantique pour le graphène bicouche à l'énergie de Fermi, pour plusieurs valeurs de la température. On remarque sur cette figure que le minimum de la capacité quantique atteint au niveau du point de Dirac, à l'instar des résultats obtenus pour le graphène monocouche.

La tendance de la courbe de la capacité quantique s'élargit pour des valeurs de température T importantes (300K, 200K), et elle tend se rétrécir pour des basses températures, telles que pour 77K et 4.2K.

Les valeurs maximales de la capacité quantique, autour de $7.3 \mu\text{F}/\text{cm}^2$, sont atteintes pour de grandes valeurs de l'énergie de Fermi, c'est-à-dire pour un fort dopage, aussi bien pour le type n que le type p. Par rapport au graphène monocouche nous remarquons que l'évolution de la courbe de capacité quantique est rapide pour le même intervalle de E_F , donc la capacité prend des proportions plus importantes pour le graphène bicouche,

Nos résultats sont identiques à ceux obtenus par Kliros [92], qui a montré que lorsque les énergies de Fermi $|E_F| \gg 90 \text{ meV}$, la capacité quantique devient approximativement indépendante de température.

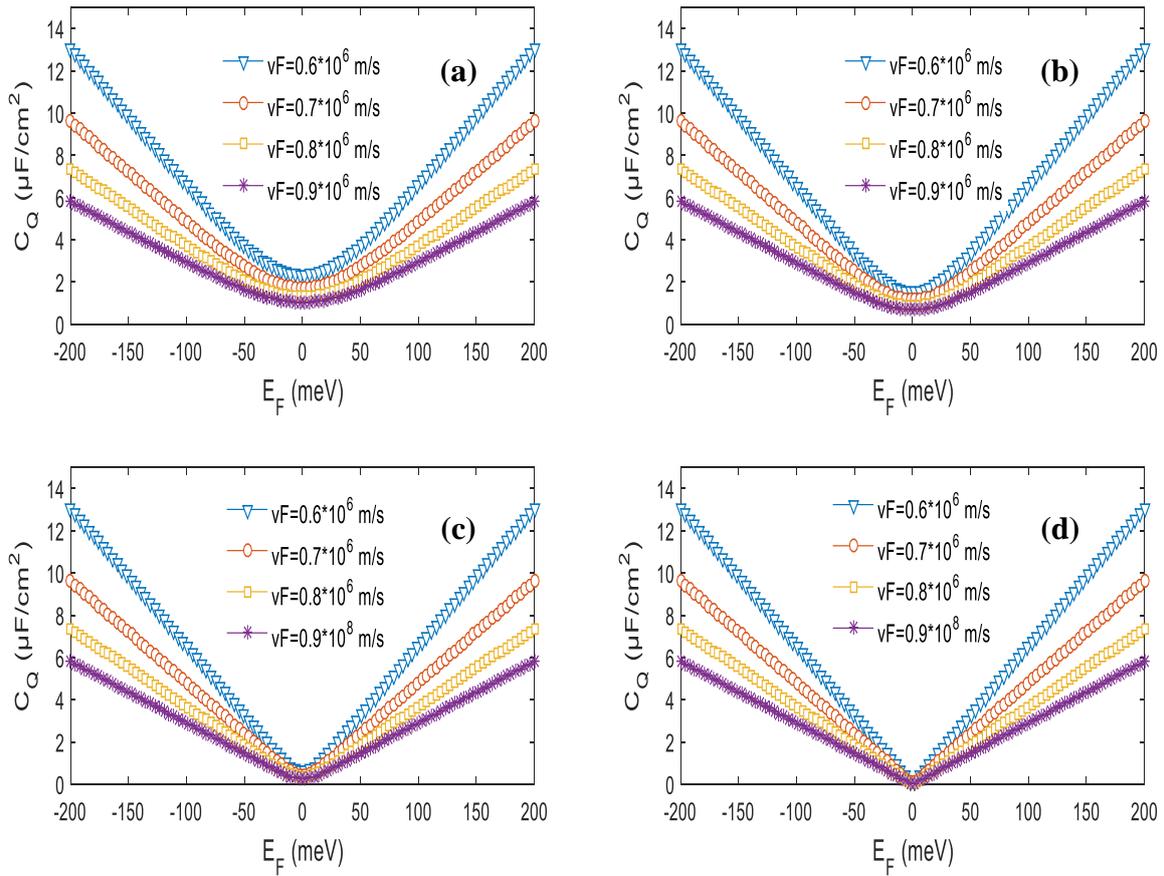


Figure III.4. Dépendance de la capacité quantique en fonction de E_F à la vitesse de Fermi :
 (a) $T=300\text{K}$, (b) $T=200\text{K}$, (c) $T=77\text{K}$, et (d) $T=4.2\text{K}$.

La figure III.4 représente la dépendance de la capacité quantique en fonction de E_F avec la vitesse de Fermi comme paramètre pour différentes valeurs de la température. Nous avons choisi les vitesses, de $0.6 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ à $0.9 \cdot 10^6 \text{ m/s}$, car on a déjà rapporté dans la littérature [105] que la vitesse de Fermi de la capacité quantique pouvait atteindre un minimum de $0.5 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ pour le graphène monocouche. Ce qui rend ce paramètre très important pour distinguer le graphène monocouche du graphène bicouche dans le modèle que nous avons développé dans ce mémoire.

On remarque deux points importants dans ces figures :

- Le premier point concerne l'allure parabolique des courbes. En effet, les paraboles sur les différentes figures ont tendance à s'élargir au fur et à mesure que la vitesse de Fermi augmente, plus celle-ci est grande plus la parabole est large.
- Le deuxième point concerne l'impact de la température. On observe que, pour les mêmes valeurs de la vitesse de Fermi, la température influence la variation de la

capacité quantique de telle sorte que, les allures des courbes deviennent plus coniques au fur et à mesure que les températures baissent.

Ces résultats peuvent s'expliquer par le fait que :

D'un côté, la différence entre le graphène monocouche et le graphène bicouche réside dans la nature des porteurs. En effet, dans le graphène monocouche, les porteurs sont considérés comme des particules dans une masse, tandis que pour le graphène bicouche, le mouvement des porteurs est soumis à l'influence de leurs masses. D'un autre côté, la capacité quantique dans le graphène bicouche est plus importante en raison d'un dopage plus important.

6. Conclusion

En conclusion, nous avons présenté un modèle simple de la capacité quantique pour des dispositifs de graphène monocouche et bicouche. Cette capacité est calculée à partir de la densité d'états élargie en tenant compte des flaque d'électrons-trous et de la durée de vie finie possible des états électroniques à travers une distribution d'élargissement gaussienne. Les résultats obtenus sont en accord avec de nombreux travaux sur la capacité quantique du graphène monocouche ou bicouche notamment ceux que nous avons parcourus dans le chapitre II. La dépendance à la température de la capacité quantique est étudiée analytiquement. Il doit être clair pour le lecteur que si la DOS est une fonction connue de l'énergie, on peut utiliser en physique du solide comme en mécanique statistique l'intégrale de Fermi-Dirac généralisée (équations 3.10). Dans les résultats obtenus, nous avons trouvé que, lorsque la température augmente, le minimum de la capacité augmente considérablement pour le graphène bicouche, alors qu'elle est presque inchangée pour le graphène monocouche. De plus, dans le régime à basse température, il semble que l'effet de la formation de flaque d'électrons-trous (dopage) soit très similaire aux dispositifs de graphène monocouche et bicouche. Nos résultats concordent avec ceux trouvés dans l'article de Kliros [94] et viennent l'appuyer.

Conclusion générale

Dans ce mémoire nous avons étudié de la capacité quantique du graphène monocouche et bicouche en fonction de l'énergie de Fermi, de la température et de la vitesse de Fermi.

En premier lieu nous avons commencé par l'état d'art du graphène, en le décrivant comme le matériau principal dans les applications électroniques. Nous avons suivi son histoire et son évolution à travers le temps, et parler de sa structure et ses propriétés incroyables, si importantes que ses performances dépassent de loin les matériaux similaires 2D et 3D que nous connaissons et son grand potentiel pour remplacer le silicium dans un futur proche.

Par ailleurs nous avons mis en lumière quelques méthodes de caractérisation du graphène aussi bien pour le graphène monocouche que pour le graphène bicouche, pour ensuite se pencher sur des incontournables de la théorie du graphène, comme les notions de transport ou nous avons vu le modèle de Kubo-Greenwood, la variation de l'énergie de Fermi ou encore la résistance finie au point de Dirac.

Pour finir, après avoir présenté quelques modèles connus de capacité quantique comme le modèle de Khaledian, notre attention s'est portée sur le modèle de George S. KLIROS. En effet, nous avons obtenu des résultats en reproduisant l'étude relative à l'effet des variations de température sur la capacité quantique.

Nos résultats ont montré que :

- Pour les mêmes valeurs de la vitesse de Fermi, la température influence la variation de la capacité quantique de telle sorte que les allures des courbes deviennent plus coniques au fur et à mesure que les températures baissent.
- La concordance avec les courbes présentées dans l'article de Kliros [92], ce qui nous a mené à dire que, les paraboles sur les différentes figures ont tendance à s'élargir au fur et à mesure que la vitesse de Fermi augmente.

Ces résultats peuvent s'expliquer par le fait que, d'un côté, la différence entre le graphène monocouche et le graphène bicouche réside dans la nature des porteurs. En effet, dans le graphène monocouche, les porteurs sont considérés comme des particules sans masse, tandis que pour le graphène bicouche, le mouvement des porteurs est soumis à l'influence de leurs masses. D'un autre côté, la capacité quantique dans le graphène bicouche est plus importante en raison d'un dopage plus important.

Références bibliographiques

- [1] P. R. Wallace, "The band theory of graphite," *Physical review*, vol. 71, p. 622, 1947.
- [2] J. Slonczewski and P. Weiss, "Band structure of graphite," *Physical Review*, vol. 109, p. 272, 1958.
- [3] R. Peierls, "Quelques propriétés typiques des corps solides," in *Annales de l'institut Henri Poincaré*, pp. 177-222, 1935.
- [4] L. D. Landau, "Zur Theorie der phasenumwandlungen II," *Phys. Z. Sowjetunion*, vol. 11, pp. 26-35, 1937.
- [5] N. D. Mermin, "Crystalline order in two dimensions," *Physical Review*, vol. 176, p. 250, 1968.
- [6] J. W. May, "Platinum surface LEED rings," *Surface Science*, vol. 17, pp. 267-270, 1969.
- [7] X. Lu, M. Yu, H. Huang, and R. S. Ruoff, "Tailoring graphite with the goal of achieving single sheets," *Nanotechnology*, vol. 10, p. 269, 1999.
- [8] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, *et al.*, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *science*, vol. 306, pp. 666-669, 2004.
- [9] M. Berd, N.-E. Boudra, and H. Hacheche, "Synthèse et caractérisation de l'oxyde du graphène," Thèse de doctorat, Université Abderrahmane Mira-Bejaia, 2018.
- [10] M. Skoda, I. Dudek, A. Jarosz, and D. Szukiewicz, "Graphene: one material, many possibilities—application difficulties in biological systems," *Journal of Nanomaterials*, vol. 2014, 2014.
- [11] M. Clavel, "Etude de l'intégration de transistors à canal en graphène épitaxié par une technologie compatible CMOS," Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2011.
- [12] F. Lapointe, "Propriétés optiques dans l'infrarouge des nanotubes de carbone et du graphène," Thèse de doctorat, Université de Montréal, 2014.
- [13] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene," *science*, vol. 321, pp. 385-388, 2008.
- [14] O. Duigou, "Développement de la croissance de graphène par CVD sur cobalt, analyses morphologique et structurale," Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2015.
- [15] M. El Achaby, "Nanocomposites graphène-polymère thermoplastique: Fabrication et étude des propriétés structurales, thermiques, rhéologiques et mécaniques," Thèse de doctorat, Université Mohammed V-Agdal, 2012.

-
- [16] A. C. Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene," *Reviews of modern physics*, vol. 81, p. 109, 2009.
- [17] M. O. Ne, M. Boujnah, A. Benyoussef, and A. El Kenz, "Electronic and electrical conductivity of AB and AA-stacked bilayer graphene with tunable layer separation," *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 30, pp. 1263-1267, 2017.
- [18] N. F. Mott and H. Jones, *The theory of the properties of metals and alloys*: Dover Publications, 1958.
- [19] E. Adams, "E. Schrödinger, Mémoires sur la Mécanique Ondulatoire," *Bulletin of the American Mathematical Society*, vol. 39, pp. 854-854, 1933.
- [20] N. Meng, "Fabrication et caractérisation de transistors à base de Graphène Nano Ruban en vue d'application haute fréquence," Thèse de doctorat, Université de Lille 1, 2011.
- [21] J.-M. Bethoux, H. Happy, G. Dambrine, V. Derycke, M. Goffman, and J.-P. Bourgoin, "An 8-GHz $f_{\text{sub } t}$ /carbon nanotube field-effect transistor for gigahertz range applications," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 27, pp. 681-683, 2006.
- [22] H. Aoki and M. S. Dresselhaus, *Physics of graphene*: Springer Science & Business Media, 2013.
- [23] M. Birowska, K. Milowska, and J. Majewski, "Van der Waals density functionals for graphene layers and graphite," *Acta Phys. Pol. A*, vol. 120, pp. 845-848, 2011.
- [24] M. Terrones, A. R. Botello-Méndez, J. Campos-Delgado, F. López-Urías, Y. I. Vega-Cantú, F. J. Rodríguez-Macías, *et al.*, "Graphene and graphite nanoribbons: Morphology, properties, synthesis, defects and applications," *Nano today*, vol. 5, pp. 351-372, 2010.
- [25] T. Taychatanapat, K. Watanabe, T. Taniguchi, and P. Jarillo-Herrero, "Quantum Hall effect and Landau-level crossing of Dirac Fermions in trilayer graphene," *Nature Physics*, vol. 7, pp. 621-625, 2011.
- [26] L. Chaussé, "Étude de la tricouche de graphène biaisée en empilement ABA," Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke, 2018.
- [27] R. Fates, "Contribution à l'étude théorique et expérimentale des nanostructures semi-conductrices 2D et 3D," Thèse de doctorat, Université de Jijel, 2017.
- [28] C. Casiraghi, "Raman spectroscopy of graphene," in *Spectroscopic Properties of Inorganic and Organometallic Compounds: Techniques, Materials and Applications, Volume 43*. vol. 43, ed: The Royal Society of Chemistry, pp. 29-56, 2012.

-
- [29] S. Mzali, "Méthodologie de fabrication de transistors à base de Graphène: application aux composants optoélectroniques hyperfréquences," Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2016.
- [30] D. Basko, S. Piscanec, and A. Ferrari, "Electron-electron interactions and doping dependence of the two-phonon Raman intensity in graphene," *Physical Review B*, vol. 80, p. 165413, 2009.
- [31] C. Casiraghi, A. Hartschuh, H. Qian, S. Piscanec, C. Georgi, A. Fasoli, *et al.*, "Raman spectroscopy of graphene edges," *Nano letters*, vol. 9, pp. 1433-1441, 2009.
- [32] A. Allard, "Etude ab initio des phonons du graphène sur substrats métalliques," Thèse de doctorat, Université de Lille 1, 2011.
- [33] E. Moreau, "Elaboration de graphène par épitaxie par jets moléculaires et caractérisation," Thèse de doctorat, Université de Lille 1, 2011.
- [34] F. Hiebel, "Etude de l'interface graphène-SiC (000-1)(face carbone) par microscopie à effet tunnel et simulations numériques ab initio," Thèse de doctorat, Université de Grenoble, 2011.
- [35] M. Sprinkle, P. Soukiassian, W. De Heer, C. Berger, and E. Conrad, "Epitaxial graphene: the material for graphene electronics," *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters*, vol. 3, pp. A91-A94, 2009.
- [36] L. Zhi and K. Müllen, "A bottom-up approach from molecular nanographenes to unconventional carbon materials," *Journal of Materials Chemistry*, vol. 18, pp. 1472-1484, 2008.
- [37] C.-D. Kim, B.-K. Min, and W.-S. Jung, "Preparation of graphene sheets by the reduction of carbon monoxide," *Carbon*, vol. 47, pp. 1610-1612, 2009.
- [38] U. Khan, A. O'Neill, M. Lotya, S. De, and J. N. Coleman, "High-concentration solvent exfoliation of graphene," *small*, vol. 6, pp. 864-871, 2010.
- [39] J. A. N'Diaye, "Synthèse et application du graphène en tant que mousse absorbante de contaminants en milieu aqueux et ainsi qu'électrode pour la détection électrochimique du peroxyde d'hydrogène," Thèse de doctorat, Université du Québec, 2016.
- [40] K. Dalla Francesca, "Exfoliation du graphène par voie liquide en vue d'une application aux contacts électriques," Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2016.
- [41] J. Lloyd-Hughes and T.-I. Jeon, "A review of the terahertz conductivity of bulk and nano-materials," *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 33, pp. 871-925, 2012.
-

-
- [42] W. Hong, Y. Xu, G. Lu, C. Li, and G. Shi, "Transparent graphene/PEDOT–PSS composite films as counter electrodes of dye-sensitized solar cells," *Electrochemistry Communications*, vol. 10, no. 10, pp. 1555-1558, 2008.
- [43] J. Wang *et al.*, "Influence of polymer/fullerene-graphene structure on organic polymer solar devices," *Integrated Ferroelectrics*, vol. 137, no. 1, pp. 1-9, 2012.
- [44] G. Eda, H. Emrah Unalan, N. Rupesinghe, G. A. Amaratunga, and M. Chhowalla, "Field emission from graphene based composite thin films," *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 23, p. 233502, 2008.
- [45] Q. Zhang, J. Pan, X. Yi, L. Li, and S. Shang, "Nonvolatile memory devices based on electrical conductance tuning in poly (N-vinylcarbazole)–graphene composites," *Organic Electronics*, vol. 13, no. 8, pp. 1289-1295, 2012.
- [46] S. Bae *et al.*, "Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes," *Nature nanotechnology*, vol. 5, no. 8, pp. 574-578, 2010.
- [47] Y. Lee *et al.*, "Wafer-scale synthesis and transfer of graphene films," *Nano letters*, vol. 10, no. 2, pp. 490-493, 2010.
- [48] Z. Song *et al.*, "Polymer–graphene nanocomposites as ultrafast-charge and-discharge cathodes for rechargeable lithium batteries," *Nano letters*, vol. 12, no. 5, pp. 2205-2211, 2012.
- [49] Q. Wu, Y. Xu, Z. Yao, A. Liu, and G. Shi, "Supercapacitors based on flexible graphene/polyaniline nanofiber composite films," *ACS nano*, vol. 4, no. 4, pp. 1963-1970, 2010.
- [50] S. Ansari and E. P. Giannelis, "Functionalized graphene sheet—Poly (vinylidene fluoride) conductive nanocomposites," *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, vol. 47, no. 9, pp. 888-897, 2009.
- [51] K. Min *et al.*, "Graphene electrodes for artificial muscles," *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, vol. 539, no. 1, pp. 260/[600]-265/[605], 2011.
- [52] X. Sun *et al.*, "Nano-graphene oxide for cellular imaging and drug delivery," *Nano research*, vol. 1, no. 3, pp. 203-212, 2008.
- [53] K. Yang, S. Zhang, G. Zhang, X. Sun, S.-T. Lee, and Z. Liu, "Graphene in mice: ultrahigh in vivo tumor uptake and efficient photothermal therapy," *Nano letters*, vol. 10, no. 9, pp. 3318-3323, 2010.
-

- [54] R. Kubo, "Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems," *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 12, no. 6, pp. 570-586, 1957.
- [55] N. Mott, "Electrons in disordered structures," *Advances in Physics*, vol. 16, no. 61, pp. 49-144, 1967.
- [56] F. Knider, "Etude ab initio de la résistivité de l'aluminium, le sodium, le plomb et le manganèse en phase liquide," Université Paul Verlaine-Metz, 2007.
- [57] P. L. Rossiter, *The electrical resistivity of metals and alloys*. Cambridge university press, 1991.
- [58] J. Ziman, "Principles of the Theory of Solids, Cambridge Univ," *Press, New York* xiii, 1964.
- [59] A. Missaoui, "Etude des propriétés de transport quantique dans les systèmes bidimensionnels à base de Carbone: Graphène, semi-conducteurs organiques," Faculté des Sciences Mathématiques, Physiques et Naturelles de Tunis, 2017.
- [60] G. Albert, "Transport mésoscopique dans les nanostructures hybrides supraconducteur-graphène," Université de Grenoble, 2011.
- [61] K. I. Bolotin *et al.*, "Ultrahigh electron mobility in suspended graphene," *Solid state communications*, vol. 146, no. 9-10, pp. 351-355, 2008.
- [62] A. K. Geim and K. S. Novoselov, "The rise of graphene," in *Nanoscience and technology: a collection of reviews from nature journals*: World Scientific, 2010, pp. 11-19.
- [63] Y.-W. Tan *et al.*, "Measurement of scattering rate and minimum conductivity in graphene," *Physical review letters*, vol. 99, no. 24, p. 246803, 2007.
- [64] M. Katsnelson, "Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene," *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 51, no. 2, pp. 157-160, 2006.
- [65] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, and C. W. Beenakker, "Sub-Poissonian shot noise in graphene," *Physical review letters*, vol. 96, no. 24, p. 246802, 2006.

-
- [66] J.-H. Chen, W. G. Cullen, C. Jang, M. Fuhrer, and E. D. Williams, "Defect scattering in graphene," *Physical review letters*, vol. 102, no. 23, p. 236805, 2009.
- [67] J. Martin *et al.*, "Observation of electron–hole puddles in graphene using a scanning single-electron transistor," *Nature physics*, vol. 4, no. 2, pp. 144-148, 2008.
- [68] Y. Zhang, V. W. Brar, C. Girit, A. Zettl, and M. F. Crommie, "Origin of spatial charge inhomogeneity in graphene," *Nature Physics*, vol. 5, no. 10, pp. 722-726, 2009.
- [69] E. R. Mucciolo and C. H. Lewenkopf, "Disorder and electronic transport in graphene," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, no. 27, p. 273201, 2010.
- [70] N. Peres, "Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction," *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 3, p. 2673, 2010.
- [71] E. Hwang, S. Adam, and S. D. Sarma, "Carrier transport in two-dimensional graphene layers," *Physical review letters*, vol. 98, no. 18, p. 186806, 2007.
- [72] T. Ando, "Screening effect and impurity scattering in monolayer graphene," *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 75, no. 7, pp. 074716-074716, 2006.
- [73] K. Nomura and A. H. MacDonald, "Quantum transport of massless Dirac Fermions," *Physical review letters*, vol. 98, no. 7, p. 076602, 2007.
- [74] J.-H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. Fuhrer, E. D. Williams, and M. Ishigami, "Charged-impurity scattering in graphene," *Nature physics*, vol. 4, no. 5, pp. 377-381, 2008.
- [75] J.-H. Chen *et al.*, "Diffusive charge transport in graphene on SiO₂," *Solid State Communications*, vol. 149, no. 27-28, pp. 1080-1086, 2009.
- [76] L. Ponomarenko *et al.*, "Effect of a high- κ environment on charge carrier mobility in graphene," *Physical review letters*, vol. 102, no. 20, p. 206603, 2009.
- [77] E. Hwang and S. D. Sarma, "Single-particle relaxation time versus transport scattering time in a two-dimensional graphene layer," *Physical Review B*, vol. 77, no. 19, p. 195412, 2008.
- [78] T. Stauber, N. Peres, and F. Guinea, "Electronic transport in graphene: A semiclassical approach including midgap states," *Physical Review B*, vol. 76, no. 20, p. 205423, 2007.
- [79] J. Xia, F. Chen, J. Li, and N. Tao, "Measurement of the quantum capacitance of graphene," *Nature nanotechnology*, vol. 4, no. 8, pp. 505-509, 2009.
-

- [80] M. Ishigami, J. Chen, W. Cullen, M. Fuhrer, and E. Williams, "Atomic structure of graphene on SiO₂," *Nano letters*, vol. 7, no. 6, pp. 1643-1648, 2007.
- [81] E. Stolyarova *et al.*, "High-resolution scanning tunneling microscopy imaging of mesoscopic graphene sheets on an insulating surface," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 104, no. 22, pp. 9209-9212, 2007.
- [82] S. Baldelli, "Surface structure at the ionic liquid– electrified metal interface," *Accounts of chemical research*, vol. 41, no. 3, pp. 421-431, 2008.
- [83] T. Fang, A. Konar, H. Xing, and D. Jena, "Carrier statistics and quantum capacitance of graphene sheets and ribbons," *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 9, p. 092109, 2007.
- [84] A. Das *et al.*, "Monitoring dopants by Raman scattering in an electrochemically top-gated graphene transistor," *Nature nanotechnology*, vol. 3, no. 4, pp. 210-215, 2008.
- [85] S. Adam, E. Hwang, V. Galitski, and S. D. Sarma, "A self-consistent theory for graphene transport," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 104, no. 47, pp. 18392-18397, 2007.
- [86] S. Kim *et al.*, "Direct measurement of the Fermi energy in graphene using a double-layer heterostructure," *Physical review letters*, vol. 108, no. 11, p. 116404, 2012.
- [87] M. Cheremisin, "On the Quantum Hall Effect in mono (bi)-layer graphene," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 64, pp. 15-22, 2014.
- [88] M. Cheremisin, "Quantum capacitance of the monolayer graphene," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 69, pp. 153-158, 2015.
- [89] L. Wei, D. J. Frank, L. Chang, and H.-S. P. Wong, "Noniterative compact modeling for intrinsic carbon-nanotube FETs: Quantum capacitance and ballistic transport," *IEEE transactions on electron devices*, vol. 58, no. 8, pp. 2456-2465, 2011.
- [90] M. Khaledian, R. Ismail, M. Saeidmanesh, M. Ahmadi, and E. Akbari, "Carrier statistics and quantum capacitance models of graphene nanoscroll," *Journal of Nanomaterials*, vol. 2014, 2014.
- [91] Z. Chen, Y.-M. Lin, M. J. Rooks, and P. Avouris, "Graphene nano-ribbon electronics," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 40, no. 2, pp. 228-232, 2007.

-
- [92] G. S. Kliros, "A phenomenological model for the quantum capacitance of monolayer and bilayer graphene devices," *arXiv preprint arXiv:1105.5827*, 2011
- [93] J. Bisquert and V. S. Vikhrenko, "Interpretation of the time constants measured by kinetic techniques in nanostructured semiconductor electrodes and dye-sensitized solar cells," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 108, no. 7, pp. 2313-2322, 2004.
- [94] D. A. Miranda and P. R. Bueno, "Density functional theory and an experimentally-designed energy functional of electron density," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, no. 37, pp. 25984-25992, 2016.
- [95] S. Luryi, "Quantum capacitance devices," *Applied Physics Letters*, vol. 52, no. 6, pp. 501-503, 1988.
- [96] Z. Mišković and N. Upadhyaya, "Modeling electrolytically top-gated graphene," *Nanoscale research letters*, vol. 5, no. 3, pp. 505-511, 2010.
- [97] S. Ilani, L. A. Donev, M. Kindermann, and P. L. McEuen, "Measurement of the quantum capacitance of interacting electrons in carbon nanotubes," *Nature Physics*, vol. 2, no. 10, pp. 687-691, 2006.
- [98] E. McCann and V. I. Fal'ko, "Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in a graphite bilayer," *Physical review letters*, vol. 96, no. 8, p. 086805, 2006.
- [99] M. Barbier, P. Vasilopoulos, F. Peeters, and J. M. Pereira Jr, "Bilayer graphene with single and multiple electrostatic barriers: Band structure and transmission," *Physical Review B*, vol. 79, no. 15, p. 155402, 2009.
- [100] A. Deshpande, W. Bao, Z. Zhao, C. N. Lau, and B. LeRoy, "Mapping the Dirac point in gated bilayer graphene," *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 24, p. 243502, 2009.
- [101] S. Datta, *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge university press, 2005.
- [102] G. Kliros, "Influence of density inhomogeneity on the quantum capacitance of graphene nanoribbon field effect transistors," *Superlattices and Microstructures*, vol. 52, no. 6, pp. 1093-1102, 2012.
- [103] J. P. Selvaggi, "Exact analytical solution to the electron density for monolayer and bilayer graphene," *Journal of Computational Electronics*, vol. 17, no. 2, pp. 491-498, 2018.

- [104] J. P. Selvaggi, "Analytical evaluation of the charge carrier density of organic materials with a Gaussian density of states revisited," *Journal of Computational Electronics*, vol. 17, no. 1, pp. 61-67, 2018.
- [105] T.-F.Chung,Y.Xu,et Y.P.Chen, "Transport measurements in twisted bilayer graphene: Electron-phonon coupling and Landau level crossing," *Physical review B*, vol 98, no. 03, 2018.

Résumé

Dans cette présente étude, nous avons évalué la capacité quantique du graphène monocouche et bicouche en fonction de l'énergie de Fermi, de la température et de la vitesse de Fermi. En outre, ce matériau ayant une structure unique et des propriétés optiques, mécaniques et chimiques exceptionnelles qui ont permis son utilisation dans de nombreux domaines d'applications.

Le but de notre travail était dans un premier temps, la présentation de quelques modèles connus de la capacité quantique tels que le modèle de Khaledian, de Cheremisin, et de Xia, et notre attention s'est portée sur le modèle de George S. KLIROS. Dans une deuxième étape, une étude relative à l'effet des variations de la température sur la capacité quantique.

Enfin, les variations des résultats obtenus entre le graphène monocouche et le graphène bicouche peuvent s'expliquer par la nature des porteurs, ces résultats montrent que pour la même valeur de vitesse de Fermi, la température affectera le changement de capacité quantique, de sorte que la forme de la courbe devient plus effilée à mesure que la température baisse.

Mots clés : Graphène, monocouche, bicouche, capacité quantique, vitesse de fermi.

Abstract

In this study, we have evaluated the quantum capacity of the monolayer and bilayer graphène as a function of Fermi energy, temperature, and Fermi velocity. Moreover, this material has a unique structure and outstanding optical, mechanical, and chemical properties that have allowed its use in many applications.

The aim of our work was, in a first step, the presentation of some known models of quantum capacitance such as the Khaledian, Cheremisin, and Xia models, and our attention was focused on the George S. KLIROS model. In a second step, a study on the effect of temperature variations on quantum capacitance was performed.

Finally, the variations of the results obtained between monolayer and bilayer graphène can be explained by the nature of the carriers. These results show that the temperature will affect the change of quantum capacitance for the exact value of Fermi velocity. The shape of the curve becomes more tapered as the temperature decreases.

Keywords: Graphène, monolayer, bilayer, quantum capacitance, Fermi speed.

ملخص

في هذه الدراسة، قمنا بتقييم السعة الكمومية للجرافين أحادي الطبقة وثنائي الطبقة كدالة لطاقة فيرمي ودرجة الحرارة وسرعة فيرمي. علاوة على ذلك، تتمتع هذه المادة بهيكل فريد وخصائص بصرية وميكانيكية وكيميائية رائعة سمحت باستخدامها في العديد من مجالات التطبيقات.

كان الهدف من عملنا في الخطوة الأولى، تقديم بعض النماذج المعروفة للسعة الكمومية مثل نماذج Khaledian، Cheremisin، وXia، وتركز اهتمامنا على نموذج George S. KLIROS في الخطوة الثانية، تم إجراء دراسة حول تأثير التغيرات في درجات الحرارة على السعة الكمومية.

أخيراً، يمكن تفسير الاختلافات في النتائج التي تم الحصول عليها بين الجرافين أحادي الطبقة وثنائي الطبقة من خلال طبيعة المواد الحاملة. توضح هذه النتائج أنه لنفس قيمة سرعة فيرمي، ستؤثر درجة الحرارة على تغير السعة الكمومية، بحيث يصبح شكل المنحنى أكثر تناقصاً مع انخفاض درجة الحرارة.

الكلمات المفتاحية: الجرافين، أحادي الطبقة، الطبقة الثنائية، السعة الكمومية، سرعة فيرمي.