



Université Batna 2 – Mostefa Ben Boulaïd
Faculté de Technologie
Département d'Électronique



Thèse

Préparé au sein du laboratoire d'électronique avancée (LEA) et du laboratoire d'automatique avancée et d'analyse des systèmes (LAAAS) de la faculté de technologie de l'université de Batna2

Présentée pour l'obtention du diplôme de :
Doctorat en Sciences en Électronique
Option : Instrumentation

Sous le Thème :

Modélisation de nano capteurs de pression

Présentée par :

MENACER FARID

Devant le jury composé de :

Mme HOBAR FARIDA	Prof	Université d'Oum El Bouaghi	Présidente
M. ZOHIR DIBI	Prof.	Université de Batna 2	Rapporteur
M. MOHAMED BOUCHEMAT	Prof.	Université de Constantine 1	Examineur
Mme. THOURAYA BOUCHEMAT	Prof	Université de Constantine 1	Examineur
M.ABDELHAMID BENHAYA	Prof.	Université de Batna 2	Examineur
M. DJEFFAL FAYCAL	Prof.	Université de Batna 2	Invité

Remerciements

*Avant tout, je souhaite remercier mon directeur de thèse Monsieur **DIBI Zohir** professeur à l'Université de Batna. Je retiens du professeur DIBI ses grandes qualités d'encadrement, n'a eu de cesse de m'encourager et de me soutenir durant toutes ces années. J'en profite pour lui exprimer ici ma plus profonde gratitude. J'exprime également mes remerciements à Madame **HOBAR Farida**, professeur à l'université d'Oum El Bouaghi, pour le grand honneur qu'elle m'a fait de juger ce travail de thèse et de présider le jury*

*Mes remerciements vont également à Monsieur **DJAFFAL Fayçal** professeur à l'université de Batna, pour son aide dans ce travail.*

*Je tiens également à présenter ma profonde gratitude à Monsieur **MOHAMED Bouchemat**, professeur à l'université de Constantine, Monsieur **A. Benhaya** Professeur de l'université de Batna et **Madame T. Bouchemat**, professeur à l'université de Constantine d'avoir fait partie du jury en qualité d'examineurs et pour m'avoir honoré par leurs présence au jury.*

Mes remerciements ne seraient pas complets si je n'exprimais pas ma profonde gratitude à toutes les personnes qui ont collaboré de près ou de loin à la réalisation de ce travail, en particulier, tout le personnel du département d'électronique à l'université de Batna, pour leur bonne humeur et leur disponibilité.

Enfin, je dois une dette certaine à ma famille et à mes parents, qui ont été mes plus fidèles supporteurs et qui m'ont aidé à accomplir ce travail.

Mr. MENACER FARID

« La vie a une fin comme une lumière de bougie s'éteint, mais dans le cœur les souvenirs sont à jamais ancrés »

Je dédie cette thèse

*A la mémoire de ma très chère **mère**
Ton image demeure toujours présente à mon esprit. Tellement tu
me manques ce jour là.*

*Aucune dédicace ne pourra traduire mon profond amour et
gratitude pour tout l'amour et l'affection que tu m'as offerts. Tu
es à mes yeux le symbole de l'extrême tendresse et l'éternel
dévouement ; tes encouragements et prières ont été pour moi
source de réussite.*

*Que le paradis soit ta céleste demeure.
Que dieu bénisse ton âme*

*A la mémoire de mon cher frère ***AREZKI professeur à
l'Université de Biskra*** que la douleur de son absence est
toujours présente.*

*Qu'Allah repose son âme en paix.
Il y a tant de chose que j'aurai aimé te dire ...
Voilà je suis enfin arrivée... C'est le jour de ma soutenance..
Sans ta présence,
mon âme est triste et mon cœur est lourd..*

Dédicaces

*Je dédie cette thèse à Allah, le Clément et Miséricordieux,
dont la grâce me permet de présenter ce travail.*

*A mon cher **papa**, en témoignage de l'amour, affection et le
soutien que tu m'as offerts depuis ma naissance. Pour
toutes les peines et tous les sacrifices que tu as consentis
pour mon éducation, tu m'as appris à me battre jusqu'au
bout pour réussir, je n'ai été guidée jusqu'à présent que par
le désir de t'honorer. Aucun mot ne saurait exprimer ma
gratitude, mon amour et mon profond respect. Puisse Dieu,
tout puissant, te prêter longue vie, santé et bonheur.*

*A ma chère épouse **Laamari**, rien de tout cela n'aurait été
possible sans ta confiance, ton soutien et ton aide. Merci
pour ta tendresse, ton attention, ta patience et tes
encouragements; Merci pour tout.*

*A mes enfants, **Sami Amjed** et **Abdeljalil** qui sont ma source
d'inspiration et mon plus grand soutien*

A mes très chers sœurs et frères

*A toute ma grande famille qui m'a permis de vivre dans un
environnement serein et paisible.*

A tous mes amis,

*En particulier **Abdelmalek Kadri**, **Bezziane Ali** et **Bezziane
Adel**, je n'oublierai jamais les bons moments passés
ensemble et les beaux souvenirs partagés durant mes années
d'étude.*

*Je vous souhaite plein de bonheur et que notre amitié dure
toujours.*

Résumé

Dans cette étude nous présentons un nouveau nano capteur de force à base d'un transistor à effet de champ à grille suspendu (SG-SOIMOSFET). On a utilisé le nanotube de carbone comme une grille suspendu de transistor SOIMOSFET. Lorsqu'une force à l'échelle nanométrique est appliquée au niveau du nanotube, il se déplace et la capacité de grille-isolant est modifiée, ce qui provoque la variation de la tension de seuil et le courant de drain. Le nanotube de carbone est modélisé en 3D par les éléments finis FE à l'aide de l'élément BEAM188 de la bibliothèque ANSYS. Nous avons élaboré la structure SOIMOSFET à grille suspendu sur le simulateur électrique ATLAS pour simuler le comportement de notre capteur de force à grille suspendu en se basant sur la relation obtenue entre la déflexion du nanotube et la force appliquée. La sensibilité obtenue par notre modèle développé peut atteindre jusqu'à $230.68 \ln(A) / \text{pN}$, cette sensibilité est plus importante par rapport aux résultats existants déjà dans la littérature. Nous avons proposé aussi un dispositif conçu spécifiquement pour mesurer la pression appliquée en utilisant une structure constitué d'un transistor MOSFET à double grille. On propose une nouvelle méthode de prédiction de la pression appliquée, cette méthode est basée sur le modèle ANFIS (Adaptive Neuro Fuzzy Inference System). La comparaison des résultats de l'approche ANFIS avec les résultats obtenus par la logique floue (FL) et le réseau de neurones (RNA) a permis de valider l'approche (ANFIS) avec une valeur de coefficient de détermination R^2 de l'ordre de 0,9889 acceptable et supérieure à celle trouvée par FL et RNA. Finalement, nous avons proposé un biocapteur qui permet de détecter, de façon automatique et autonome, la présence des molécules d'acétone. Les nanotubes de carbone sont particulièrement adaptés pour la détection de la molécule d'acétone. La méthode de détection est basée sur la variation de la fréquence de résonance de résonateur. Nous avons constaté d'après les résultats que le résonateur à nanotubes peut détecter une seule molécule d'acétone. Les deux modèles développés, capteur de force et capteur d'acétone, sont modélisés par les réseaux de neurone multicouches à rétro propagation du gradient. Nous avons intégré avec succès les modèles neuronaux en tant que des nouveaux composants dans la bibliothèque de simulateur électrique ORCAD-PSPICE; ces composants doivent exprimer avec précision le comportement des capteurs.

Mots clés : nanotube de carbone, grille suspendue, nanoforce, pression, acétone, ANFIS, RNA, éléments finis, SILVACO (ATLAS), ANSYS.

Abstract

In this study we present a new nanoforce sensor based on a suspended gate field effect transistor (SG-SOIMOSFET). The carbon nanotube was used as a suspended gate of SOIMOSFET transistor. When the nanoscale force is applied at the nanotube, it moves and the gate-insulating capacity is changed, which causes the variation in the threshold voltage and the drain current. The carbon nanotube is modeled in 3D by finite elements using the BEAM188 element of the ANSYS library. To do so, a numerical investigation of Suspended Gate Silicon-on-Insulator MOSFET (SG-SOIMOSFET) is carried out using ATLAS 2D simulator. Based on the relationship between the nanotube's deflection and the applied force, a comprehensive study of the proposed nanoforce sensor behavior is performed. Moreover, we describe the evolution of the drain current characteristics as a function of the applied force while examining the influence of capacity variation of the insulating gate on the drain current in the saturation region. It is found that the sensor has a good sensitivity of $230.68 \ln(A)/pN$. We have also proposed a device specifically designed to measure the pressure applied using a structure consisting of a double gate MOSFET transistor. A new method of prediction of applied pressure is proposed, this method is based on the ANFIS model (Adaptive Neuro Fuzzy Inference System). The comparison of the results of the ANFIS approach with the results obtained by the fuzzy logic (FL) and the neural network (ANN) made it possible to validate the approach (ANFIS) with a value of determination coefficient R^2 of the order of 0.9889 acceptable and superior to that found by FL and ANN.

Finally, we have proposed a biosensor that can detect, automatically and autonomously, the presence of acetone molecules. Carbon nanotubes are particularly suitable for the detection of the acetone molecule. The detection method is based on the variation of the resonance frequency. We found from the results that the nanotube resonator can detect a single molecule of acetone. Both models developed, force sensor and acetone sensor are modeled by the multilayer neural network. We have successfully integrated neural models as new components into the ORCAD-PSPICE electric simulator library; these components must accurately express the behavior of the sensors.

Keywords: carbon nanotube, suspended gate, nanoforce, pressure, acetone, ANFIS, ANN, finite element, SILVACO (ATLAS), ANSYS.

ملخص

في هذه الدراسة نقوم باقتراح نموذج جديد لجهاز استشعار للقوة المطبقة. يعتمد هذا النموذج على استخدام ترانزستور ذو مقحل مجالي معلق. تم استخدام الأنبوب النانوي الكربوني كمقحل مجالي معلق للترانزستور (SG-SOIMOSFET). عندما يتم تطبيق القوة على الأنبوب النانوي الكربوني ، فإنه يتحرك وبالتالي يقوم بتغيير في سعة مكثفة العازل العلوي للترانزستور، والذي يسبب بدوره في تغير جهد العتبة وشدة التيار الكهربائي. تم تصميم نموذج للأنبوب النانوي الكربوني ثلاثي الأبعاد باستخدام طريقة العناصر المنتهية BEAM188 من مكتبة برنامج المحاكاة ANSYS. بناءً على العلاقة بين انحراف الأنابيب النانوية والقوة المطبقة ، يتم إجراء دراسة شاملة لسلوك مستشعر القوة المقترح. وجد أن حساسية الاستشعار جيدة حيث تبلغ $230.68 \ln(A)/pN$. لقد اقترحنا أيضًا جهازًا مصممًا خصيصًا لقياس الضغط المطبق باستخدام بنية تتكون من ترانزستور MOSFET مزدوج البوابة. تم اقتراح طريقة جديدة للتنبؤ بالضغط المطبق، وتعتمد هذه الطريقة على نموذج Adaptive Neuro Fuzzy Inference System (ANFIS) وأخيرًا، اقترحنا جهازًا للاستشعار يمكن أن يكتشف تلقائيًا و ذاتيًا وجود جزيئات الأسيوتون حيث تعتبر الأنابيب النانوية الكربونية مناسبة بشكل خاص للكشف عن جزيء الأسيوتون. تعتمد طريقة الكشف على تغيير في تردد جهاز الاستشعار. وجدنا من النتائج أن هذا الجهاز يمكنه الكشف عن جزيء واحد من الأسيوتون. كما تم اقتراح نموذج يعتمد على نظرية الشبكة العصبية الصناعية لكل جهاز استشعار مقترح سابقا (جهاز استشعار للقوة المطبقة و جهاز استشعار وجود جزيئات الأسيوتون). قد نجحنا في دمج النماذج العصبية كمكونات جديدة في مكتبة المحاكاة الكهربائية ORCAD-PSPICE، يجب أن تعبر هذه المكونات بدقة عن سلوك المستشعرات.

كلمات مفتاحية : مقحل مجالي معلق، الشبكة العصبية الصناعية، الأسيوتون، القوة المطبقة، الأنابيب النانوية الكربونية، طريقة العناصر المنتهية، الضغط المطبق.

Sommaire

Introduction générale.....	1
Objectif de travail.....	4
Références bibliographique.....	6
I Chapitre I : État de l’art	8
I.1 Introduction.....	8
I.2 Définition	8
I.3 Principales caractéristiques des capteurs	9
I.3.1 Etendue de la mesure ou dynamique	9
I.3.2 Résolution	10
I.3.3 Fonction de transfert	10
I.3.4 Linéarité.....	10
I.3.5 Caractéristiques statistiques	11
I.3.6 Rapidité.....	11
I.3.7 Sensibilité.....	12
I.3.8 Limite de détection	12
I.3.9 Chaîne de mesure.....	12
I.3.10 Différents types des capteurs:	13
I.4 Définition d'un capteur de pression	14
I.4.1 Capteur de pression piézoélectrique	14
I.4.2 Capteur de pression piezoresistif :	16
I.4.3 Capteur de pression capacitif	17
I.5 Les microsystèmes	20
I.5.1 Définition et applications des microsystèmes.....	20
I.5.2 Les principaux matériaux utilisés pour les microsystèmes.....	21
I.6 Conclusion :	23
I.7 Références bibliographiques.....	24
II Chapitre II : Modélisation du capteur de pression flexible en utilisant ANFIS (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System).....	26
II.1 Introduction.....	26
II.2 Principe de fonctionnement	28
II.3 Caractéristiques I-V	28
II.4 Modélisation du capteur de pression à base du système d’inférence flou	31

II.4.1 Méthodologie de modélisation par ANFIS	32
II.4.2 Résultats et discussions.....	35
II.4.3 Implantation du modèle ANFIS sur ORCAD-PSPICE	38
II.4.4 Modélisation de l'INV-ANFIS	39
II.4.5 Test du correcteur	40
II.5 Conclusion	41
II.6 Références bibliographiques.....	43
III Chapitre III : Modélisation de nanotube de carbone par les éléments finis.....	44
III.1 Nanotubes de carbone	44
III.2 Structures et propriétés des nanotubes de carbone	44
III.2.1 Structures géométriques	44
III.2.2 Les propriétés mécaniques des nanotubes de carbone	46
III.2.3 Les propriétés électriques des nanotubes de carbone	46
III.2.4 Les propriétés thermiques des nanotubes de carbone	48
III.3 Etat de l'art des nanosystèmes à base de nanotubes	49
III.4 Modélisation du nanotube de carbone par les éléments finis	51
III.4.1 Vue d'ensemble du logiciel ANSYS	51
III.4.2 Spécification des unités.....	52
III.4.3 Définition des types d'éléments et des constantes réelles	53
III.4.4 Définir les propriétés du matériel.....	57
III.4.5 Définition de la section transversale de l'élément	58
III.4.6 Création d'un modèle de nanotube de carbone.....	59
III.4.7 Maillage du nanotube généré	60
III.5 Validation du modèle du nanotube développé.....	61
III.6 Conclusion	64
III.7 Références bibliographique	65
IV Chapitre IV : Nano capteur de force intelligent à base de SG-SOIMOSFET	67
IV.1 Introduction.....	67
IV.2 Modélisation de capteurs Nanoforce	69
IV.3 Etude de la déflexion de nanotube de carbone.....	71
IV.3.1 Influence des paramètres géométriques sur la déflexion	74
IV.4 Modélisation électrique de SOIMOSFET à grille suspendue.....	78
IV.4.1 Caractéristiques courant du drain-force	78
IV.5 Modélisation du capteur nanoforce à base SG-SOIMOSFET par RNA	87
IV.5.1 Implémentation du modèle neuronal sur ORCAD-PSPICE	89

IV.6	Caractéristiques tension de seuil – force.....	91
IV.7	Conclusion	99
IV.8	Références bibliographiques.....	101
V	Chapitre V : Modélisation d'un capteur d'acétone à base de SWCNT en utilisant les éléments finis et les réseaux de neurones artificiels.....	103
V.1	Introduction.....	103
V.2	Principe de détection par résonance.....	105
V.3	Capteur d'acétone à base de nanotubes de carbone	106
V.3.1	Fréquences de résonance de SWCNT avec masse attachée	107
V.4	Etude numérique et paramétrique du nano-résonateur à base SWCNT	110
V.4.1	L'influence de rapport de masse d'acétone attachée sur la fréquence fondamentale du nano-résonateur	112
V.4.2	Effet de la longueur de SWCNT sur le décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur	113
V.4.3	L'influence de la chiralité du nanotube sur le décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur	114
V.4.4	L'influence de la position de la masse attachée sur la fréquence fondamentale du nano-résonateur	116
V.4.5	L'influence de la position de la masse attachée sur le décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur	117
V.4.6	L'effet de la distribution de masse d'acétone attachée sur la fréquence naturelle des résonateurs.....	119
V.5	Modélisation du capteur d'acétone à base des réseaux de neurone.....	121
V.5.1	Implantation du modèle neuronal sur ORCAD-PSPICE.....	124
V.6	Conclusion	126
V.7	Références bibliographique	128
	Conclusion générale.....	130

Liste des figures

Figure I.1:Schéma synoptique d'un capteur.....	9
Figure I.2:Exemple de caractéristique d'un capteur d'humidité du type capacitif	10
Figure I.3:Exemple de linéarisation de caractéristiques.....	10
Figure I.4:Schéma de principe d'une chaîne de mesure.....	13
Figure I.5:L'effet piézoélectrique : (a) effet direct, (b) effet inverse.....	14
Figure I.6:Schéma synoptique d'un capteur de pression piézoélectrique	15
Figure I.7:Capteur de pression en quartz	16
Figure I.8:Schéma de principe d'un capteur de pression piézorésistif.....	16
Figure I.9:Schéma de principe d'un capteur à membrane à détection piezorésistif.....	17
Figure I.10:Schéma synoptique d'un capteur de pression capacitif.....	17
Figure I.11:Structure d'un capteur de pression capacitif MEMS à base de LCP.....	18
Figure I.12:Multidisciplinarité dans la conception et la réalisation des microsystèmes	20
Figure II.1:Structure schématique du capteur de pression capacitif flexible	28
Figure II.2: Capteurs de pression capacitif flexible à base DG-MOSFET.....	29
Figure II.3:Evolution de I_{ds} en fonction de la pression appliquée pour différent valeur de V_{ds}	29
Figure II.4:Variation de I_{ds} en fonction de la pression à différentes température.....	30
Figure II.5:Système d'inférence flou.	31
Figure II.6:Architecture du modèle ANFIS lié au modèle TSK.	32
Figure II.7: Principe de fonctionnement d'ANFIS: Principe de fonctionnement d'ANFIS	33
Figure II.8:Structure d'ANFIS Sugeno du Premier ordre proposé pour l'estimation de I_{ds}	33
Figure II.9: Validation du modèle ANFIS	36
Figure II.10:Fonction de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs}	36
Figure II.11:Schéma de l'approche de simulation du capteur de pression capacitif flexible	38
Figure II.12:Circuit de simulation du modèle ANFIS utilisant le simulateur PSPICE.....	38
Figure II.13:Résultats de simulation du modèle ANFIS en utilisant le simulateur PSPICE.	39
Figure II.14:Linéarisation de la réponse.	40
Figure II.15:Résultats de simulation du modèle INV-ANFIS à l'aide du simulateur PSPICE	40
Figure II.16: Résultats de sortie dans le domaine temporel du modèle INV-ANFIS en utilisant le simulateur PSPICE.....	41
Figure III.1: Structure du maillage hexagonal d'une feuille de graphène et enroulement du nanotube de carbone.....	45
Figure III.2: Exemple de nanotube de différentes structures	45
Figure III.3:Exemple de bande de valence pour deux types de nanotubes.....	47
Figure III.4: Les étapes impliquées pour FEM dans ANSYS	52
Figure III.5: Sélection du système d'unité approprié dans ANSYS	53
Figure III.6: SWNTC simulée comme une structure d'un cadre spatiale.	55
Figure III.7: L'addition de type d'élément de bibliothèque ANSYS	56
Figure III.8: Sélection de l'élément BEAM 188.....	56
Figure III.9: Paramètres du type d'élément BEAM188.....	56
Figure III.10: L'élément BEAM188.	57
Figure III.11: Sélection le modèle de matériau.	58
Figure III.12: Les paramètres d'entrées de SWNTC: les paramètres d'entrées de SWNTC.	58
Figure III.13: Section sélectionnée de la liaison C-C (BEAM188).	59

Figure III.14: Coupe de la section transversale de la liaison C-C.....	59
Figure III.15: Modèle de SWNTC (7,7) développé avec Nanotube Modeler.....	60
Figure III.16:Fichier PDB représente les coordonnées x, y, z des atomes de nanotube de carbone (7,7).....	60
Figure III.17: Maillage du nanotube a) option de maillage b) Sélection des lignes à mailler.	61
Figure III.18: Créations d'éléments.	61
Figure III.19: Le modèle de SWNTC développé en utilisant le simulateur ANSYS.....	61
Figure III.20: Nano-résonateur à base de modèle de SWNTC développé en utilisant ANSYS.....	62
Figure III.21: Sélection des nœuds fixes de SWNTC.	62
Figure III.22: Contraindre le déplacement des nœuds sélectionnés dans le SWNTC.....	62
Figure III.23: Biocapteur à base de SWNTC développée par Der Ho Wu	63
Figure IV.1: Coupe transversale 2D du capteur nanoforce capacitif proposé	69
Figure IV.2: Circuit équivalent électrique du SG-SOIMOSFET.....	70
Figure IV.3: Schémas d'un nanotube de carbone soumis à une force ponctuelle	71
Figure IV.4: Déplacement des nœuds du nanotube soumis à une force	73
Figure IV.5: Variation de la déflexion en fonction de la position de la force appliquée pour différentes valeurs de force (C-F)	73
Figure IV.6: Variation de la déflexion maximale au centre du nanotube de carbone en fonction de la force appliquée(C-C)	74
Figure IV.7: Effet de la longueur de nanotube de carbone	75
Figure IV.8: Effet de la chiralité de nanotube de carbone	75
Figure IV.9: Effet de module de Young de nanotube de carbone a) sur la déflexion maximale de nanotube de carbone b) sur la sensibilité	76
Figure IV.10: Effet de module de Young de nanotube de carbone et la position de la force sur la déflexion maximale de nanotube de carbone pour ($F = 10\text{nN}$).....	76
Figure IV.11: Sensibilité entre C-C et C-F	77
Figure IV.12: Capteur de force à base de SG-SOIMOSFET après application de la force	79
Figure IV.13: Simulation de courant de drain I_{ds} en fonction de V_{ds}	80
Figure IV.14: Simulation de courant de drain I_{ds} en fonction de la force appliquée F	81
Figure IV.15: Modélisation du courant de drain en fonction de la force appliquée par une relation exponentielle	82
Figure IV.16: Linéarisation du capteur nanoforce	83
Figure IV.17: Evolution de la non-linéarité NL en fonction de l'étendue de la mesure de la force considérée (E.M).....	84
Figure IV.18: Logarithme naturel du courant de drain en fonction de la force appliquée	85
Figure IV.19: Caractéristiques de la sensibilité	85
Figure IV.20: Modélisation du capteur de nanoforce à l'aide de réseaux neuronaux	87
Figure IV.21: Performance du modèle neuronal développé	89
Figure IV.22: Circuit de simulation du modèle neuronal dans PSPICE.....	89
Figure IV.23: Performances du modèle INV-RNA développé	90
Figure IV.24: Analyse "Time Domain" de nano capteur de force à l'aide PSPICE.....	91
Figure IV.25: Simulation de V_{th} en fonction de la force appliquée	92
Figure IV.26:Modélisation de la tension de seuil en fonction de la force appliquée par une relation polynomiale de troisième ordre	93
Figure IV.27: Caractéristiques de la sensibilité	94
Figure IV.28: Modélisation du capteur de nanoforce à l'aide de réseaux neuronaux	94

Figure IV.29: Performe du modèle neuronale directe.....	96
Figure IV.30: Le modèle neuronal implanté en tant que composant dans le simulateur PSPICE	96
Figure IV.31: Résultats de simulation du modèle direct-RNA en utilisant PSPICE	97
Figure IV.32: Evolution de l'erreur EQM en fonction du nombre d'itérations	98
Figure IV.33: Réponse du modèle correcteur	98
Figure IV.34: Erreur de linéarisation pour différentes valeurs de la force appliquée	99
Figure V.1: Bio-détection en mode statique	104
Figure V.2: Vue schématique d'un capteur bio-NEMS	105
Figure V.3: Résonateur électromécanique	105
Figure V.4: Réponse en fréquence du résonateur électromécanique.	106
Figure V.5: Résonateur à nanotubes en cantilever avec une masse attachée à l'extrémité de la longueur du nanotube.....	108
Figure V.6: Résonateur à nanotubes ponté avec une masse attachée au centre de la longueur du nanotube	109
Figure V.7: Modèle de résonateur à base de SWCNT en utilisant ANSYS	110
Figure V.8: Relation entre le nombre de molécules d'acétone attachées et le pourcentage de décalage de fréquence	111
Figure V.9: Variation de la fréquence fondamentale du nanotube en fonction de rapport de masse d'acétone.....	112
Figure V.10: Troisième, quatrième et cinquième fréquences naturelles de nano-résonateur pour différent valeurs de rapport de masse d'acétone α (Configuration C-C)	113
Figure V.11: Décalage de la fréquence fondamentale de nano-résonateur en fonction du rapport de masse d'acétone α avec différentes longueurs de nanotubes	114
Figure V.12: Décalage de la fréquence fondamentale de nano-résonateur en fonction du rapport de masse d'acétone α avec différentes chiralité de nanotubes	114
Figure V.13: La sensibilité de détection pour $\alpha \geq 10^2$	115
Figure V.14: Position de la masse d'acétone attachée	116
Figure V.15: Variation de fréquence fondamentale du nano-résonateur en fonction de la position de la masse d'acétone attachée	117
Figure V. 16: Variation la valeur de décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur en fonction de la position de la masse d'acétone attachée	118
Figure V.17: Le décalage de la fréquence naturelle en fonction de la a) Ajustement de la courbe b) erreur de l'ajustement	119
Figure V.18: Nano résonateur à base de nanotube de carbones chargé avec des molécules d'acétone répartie	119
Figure V.19: Effets de la quantité de molécules d'acétone réparties au long du nanotube sur le décalage de la fréquence naturelle du nano-résonateur à base de nanotube de carbones	119
Figure V.20: Décalage de la fréquence naturelle du nano résonateur à base de nanotube de carbones en fonction λ et le rapport de masse α répartie	120
Figure V.21: Décalage de la fréquence naturelle du nano résonateur à base de nanotube de carbones en fonction λ et le rapport de masse α répartie	120
Figure V.22: Système d'apprentissage pour la modélisation du capteur	121
Figure V.23: Notation symbolique du modèle RNA optimisé.....	122
Figure V.24: Performance du modèle RNA développé	123
Figure V.25: Diagrammes représentant notre approche pour la simulation du capteur d'acétone	123

Figure V.26: ABM architecture du modèle établi dans PSPICE	123
Figure V.27: Sortie du modèle PSPICE par une analyse paramétrique	123
Figure V.28: Sortie du modèle PSPIC pour différentes chiralité de nanotube de carbone	123

Liste des tableaux

Tableau I.1: Capteurs de pression capacitive dans littérature	22
Tableau III.1: Synthèse de quelques caractéristiques des SWNTC	49
Tableau III.2: Paramètres de nanotube ajusté	53
Tableau III.3: Propriétés de l'élément de poutre	54
Tableau III.4: Quelques types d'éléments disponibles dans ANSYS	55
Tableau III.5: Les données d'entrée pour BEAM188.....	57
Tableau III.6: Fréquences naturelles de SWCNT dans une configuration de cantilever	63
Tableau III.7: Fréquence de résonance de SWCNT dans une configuration cantilever avec différente masse attachée	64
Tableau IV.1: Comparaison de la sensibilité de notre capteur avec les capteurs de la littérature précédente.....	86
Tableau IV.2: Paramètres optimisés du modèle de réseau neuronal.....	88
Tableau IV.3: Les paramètres optimisés du réseau pour la modélisation du capteur	95
Tableau V.1: Résultats de simulation par ANSYS et les résultats théoriques de pourcentage de décalage de fréquence	111
Tableau V.2: Paramètres optimisés du modèle de réseaux neuronaux	122

Notations et constantes

ANFIS	Adaptive Neuro Fuzzy Inference System
FL	Logique floue
RNA	Réseau de neurones
PDMS	Polydimethylsiloxane
NTC	Nanotube de carbone
MWNT	Nanotube de carbone à parois multiples
SWCNT	Nanotube de carbone mono-paroi
NL	Non linéarité
TSK	Takagi-Sugeno-Kang
ϵ_0	Permittivité diélectrique du vide
ϵ_r	Permittivité diélectrique
S	Surface des électrodes
P	Pression
T_{ox}	Épaisseur de l'oxyde
t_{si}	Épaisseur de Silicium
N_A	Concentration de dopants de type accepteur d'électrons
N_D	Concentration de dopants de type donneur d'électrons
V_d	Tension du drain
V_{ds}	Tension drain-source
V_g	Tension de grille
V_{gs}	Tension grille-source
V_{th}	Tension de seuil
T	Température
I_{ds0}	Courant de drain source d'offset
CPS	Capteur de pression capacitif
H	Hystérésis
σ	Écart type de la fonction gaussienne
P	Densité volumique du nanotube
α	Rapport de masse d'acétone
W_{kj}	Poids des connexions reliant le neurone j au neurone k
f_k	Sortie spécifiée par la règle floue
O_{k,i}	Sortie d'un nœud i de la couche k
\overline{W}_k	Sortie normalisée
R²	Coefficient de détermination
RMSE	Erreur quadratique moyenne
MAPE	Erreur absolue moyenne en pourcentage
C_h	Vecteur de chiralité
d	Diamètre du nanotube
(n, m)	Chiralité du nanotube
Θ	Angle d'hélicité

E_S	Énergie d'étirement de la liaison
E_B	Énergie de flexion de l'angle de liaison
E_T	Énergie de torsion de la liaison
K_R	Étirement de liaison
K_θ	Flexion d'angle de liaison
E_S	Énergie de déformation élastique
A	Section transversale de la poutre
L	Longueur de la poutre
K_ϕ	Rigidité de torsion
Δl	Changement de longueur
E	Module d'élasticité de la poutre
G	Module de cisaillement
J	Moment polaire d'inertie.
EX	Module de Young de nanotube de carbone
MLP	Perceptron multicouches
RLM	Régression linéaire multiple
I_r	Taux d'apprentissage
m_c	Constante de Momentum
ABM	Analog Behavioral Modeling
$NEMS$	Système électromécanique nanométrique
Λ	Parcours libre moyen (mean free path)
$\Delta\Omega$	Angle de rotation relatif
PDB	Protein Data Bank
$DOFs$	Degré de libertés
def_{max}	Déflexion maximale
$C-C$	Encastré-encastré
$C-F$	Encastré-libre
FS	Pleine échelle
f_{0n}	Fréquence naturelle

Introduction générale

Introduction générale

Au cours de ces dernières années, l'automatisation, le contrôle et la surveillance, dans la plupart des processus ont induit un besoin croissant en capteurs. En effet, dans la plupart des applications, le manque de capteurs adéquats et d'actionneurs pour coupler l'électronique de contrôle avec l'environnement extérieur est le principal problème dans le développement de nouveaux systèmes.

Les capteurs sont largement utilisés dans plusieurs domaines (santé, automobile, électromagnétisme, ...), et ils sont employés dans la vie quotidienne pour transformer des événements mécaniques, chimiques ou thermiques en signal électrique. Ils sont utilisés comme systèmes de détection de grandeur physiques qui relèvent la technologie microélectronique et offrent des avantages techniques et économiques.

La pression est l'un des paramètres les plus importants à mesurer sur de nombreux types de dispositifs. La mesure de pression peut être effectuée en utilisant différents effets physiques, par exemple, la piézorésistivité de certains matériaux [1], la variation de la capacité entre les électrodes conductrices d'un dispositif [2], ainsi que la piézoélectricité de certains matériaux (comme exemple le quartz) [3]. Ce genre de dispositifs, qui est le capteur de pression a un large éventail d'applications telles que l'automobile [4], l'aérospatiale [5] et médicale [6]. Le choix d'un capteur, pour mesurer la pression sur un système, dépend généralement de l'application souhaitée et la facilité de l'intégration de ce capteur dans le système. Les capteurs le plus répandu est celui de type capacitif. Ce choix est également supporté par plusieurs caractéristiques fonctionnelles (une grande sensibilité à la pression et une faible sensibilité à la température) [7].

Des recherches, mettant à profit les progrès de la microélectronique et d'autres techniques compatibles, ont permis d'une part de réaliser, à faible coût, des capteurs et des actionneurs miniaturisés et de hautes performances, et d'autre part d'élargir le spectre d'utilisation des capteurs. La transition de la micro vers la nano-échelle, et notamment le passage des microsystèmes électromécaniques (MEMS) aux nanosystèmes électromécaniques (NEMS), suscite un grand intérêt de la part de la communauté scientifique. La miniaturisation est en effet source de nombreux avantages largement rapportés dans la littérature [8,9]. La réduction des dimensions offre notamment une meilleure capacité d'intégration, une plus faible consommation énergétique et des performances accrues en termes de sensibilité via l'augmentation de la fréquence de résonance (MHz – GHz) [10]. Ces attributs sans précédents font des NEMS des candidats particulièrement prometteurs pour de nombreuses applications technologiques comme, la mesure de force ou de pression à l'échelle microscopique et nanoscopique, la détection d'espèces biologiques [11,12] ou d'agents chimiques simulant la menace [13], la spectrométrie de masse [14,15], la réalisation de sondes très haute fréquence pour l'acquisition d'images ultra-

Introduction générale

rapide au sein de techniques de microscopie à sonde locale [16], ou encore des applications plus fondamentales avec notamment l'étude de phénomènes quantiques [17,18].

Les NEMS (Nano Electro Mechanical Systems, systèmes nano électromécaniques) sont des MEMS aux dimensions réduites en dessous du micromètre, ils sont l'évolution logique des MEMS. Le domaine des NEMS donne actuellement lieu à une intense activité de recherche. D'une part, on assiste à une poussée de leurs réalisations par usinage de matériaux avec des procédés de réalisation de plus en plus complexes et coûteux nécessitant jusqu'à plusieurs centaines d'étapes pour un délai de plusieurs mois. De plus dans cette gamme de dimensions les méthodes d'usinage par gravure atteignent leurs limites en termes de contrôle des surfaces. D'autre part, leur réalisation par une approche de construction à partir de la base avec des nano-objets semble être une voie très prometteuse. Il est indéniable que l'apport des nanostructures (nanotubes, nano-fils,...) aura un impact important dans l'évolution des nanotechnologies. Tant du point de vue de la miniaturisation que de l'apport des nouvelles fonctionnalités offertes, tant au niveau du composant que du circuit voire du système, l'exploitation des nanotechnologies ouvre des perspectives de nouvelles architectures complexes qui restent à découvrir pour les futurs systèmes de communication.

Les nanosystèmes présentent des avantages par rapport à leurs antécédents les microsystèmes. Le premier, et le plus important de ces avantages, est la miniaturisation. À fonction équivalente, les nanosystèmes apportent un gain en volume et en masse. Inversement, ils permettent de réaliser plus de fonctions dans le même volume. Un deuxième avantage est la réduction de la consommation : du fait des faibles masses mises en jeu, voire de nouveaux modes d'actionnement (électrostatique par exemple). La réduction du coût est également souvent mise en avant, les techniques de fabrication collectives des microsystèmes (wafer de 200mm) permettent pour des grosses productions de diminuer très fortement le coût unitaire des pièces produites. Enfin, ces systèmes peuvent présenter une meilleure robustesse grâce aux nouveaux matériaux comme les nanotubes de carbone aux propriétés mécaniques exceptionnelles, ils peuvent être très rapides et opérer à très hautes fréquences.

Les nanotubes de carbone font l'objet de recherches intensives depuis leur découverte en 1991[19]. Ils possèdent de nombreuses propriétés intéressantes notamment leurs propriétés mécaniques et électriques. En effet, ils sont légers, possèdent une forte rigidité (module de Young de 1 TPa) couplée à une grande flexibilité et ont une conductivité bien supérieure à celle des matériaux classiques [20,21]. Leur fréquence de résonance naturelle est dans la gamme de GHz ce qui permet leur utilisation dans des composants électroniques à hautes fréquences. Au cours des dernières années, de nombreux NEMS à base de nanotubes de carbone ont été décrits dans la littérature. Comme par exemple les nanopinces, les interrupteurs, les mémoires, les relais

Introduction générale

statiques et les oscillateurs. Ces NEMS sont très prometteurs pour des applications en particulier dans la mesure de la pression ou de la force à l'échelle microscopique ou dans le domaine du biocapteur [22,23].

Ces dernières années, la mesure de la pression ou de la force à l'échelle microscopique et nanoscopique est devenue une problématique majeure pour de nombreuses applications et notamment dans des domaines tels que le micro-assemblage et la micromanipulation. Un capteur de pression ou de la force est un dispositif qui allie à la fois l'électronique et la mécanique. Il permet de convertir une force, c'est-à-dire une grandeur physique vectorielle en une grandeur électrique. Tous les capteurs de micro/nano force ou pression reposent soit sur la mesure des déplacements d'un solide indéformable (ES constitué d'une masse sismique rigide), soit, plus classiquement, sur la mesure des déformations d'une microstructure élastique (ES constitué d'un corps d'épreuve). Donc, la force inconnue doit être déduite de la connaissance de ces déplacements ou déformations grâce à des capteurs appropriés.

Dans plusieurs applications relatives aux chaînes de mesure et de contrôle, on fait assez souvent appel aux capteurs de pression capacitifs. Ces derniers présentent l'avantage d'une grande résolution, une faible consommation électrique, une grande précision et une possibilité d'intégration. Les inconvénients par contre résident dans la non linéarité de leur réponse, la dépendance de la température. L'exploitation de ce type de capteur nécessite alors, l'association d'un circuit de correction et de compensation en temps réel afin d'obtenir une réponse linéaire, complètement indépendante de la température. La structure capteur, circuit de conditionnement et circuit de correction, fait appel au concept du capteur intelligent. Dans la littérature, on donne le nom « capteur intelligent » à un composant qui regroupe plusieurs étages complémentaires dont le but est de fournir une information précise sur une grandeur physique à mesurer (pression, force, biomasse dans notre cas), donc directement exploitable. En effet, le développement considérable de la capacité d'intégration des composants microélectroniques et la miniaturisation des capteurs a permis d'assembler sur un seul chip, les différents étages constituant le capteur intelligent, à savoir le capteur de pression lui-même, le circuit de conditionnement et le circuit de correction du signal de sortie[24].

Un capteur intelligent peut être défini selon deux points de vue, fonctionnel et technologique :

✓ **Point de vue fonctionnel** : Les capteurs intelligents sont des dispositifs capables de détecter, de mesurer, de traduire et de traiter les données collectées en vue de les communiquer à d'autres organes du système dans lequel ils sont intégrés.

✓ **Point de vue technologique** : Le capteur intelligent correspond principalement à l'intégration, dans le corps du capteur, d'un organe de calcul interne (microprocesseur,

Introduction générale

microcontrôleur), d'un système de conditionnement du signal (programmable ou contrôlé) et d'une interface de communication.

Objectif de travail

Les capteurs étudiés dans ce manuscrit sont des capteurs type NEMS, qui sont très prometteurs pour des applications en particulier dans la mesure de la pression ou de la force à l'échelle microscopique et nanométrique ou dans le domaine de biocapteur.

Ce manuscrit est structuré en cinq chapitres.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des capteurs de pression piézo-resistifs et capacitifs, en explicitant leurs principales caractéristiques et leurs performances. Ensuite, une synthèse bibliographique sur les capteurs, les microcapteurs et les NEMS, décrivant l'essentiel des travaux déjà effectués dans ce domaine.

Dans le second chapitre, nous avons proposé un dispositif à base d'un transistor MSOFET conçu spécifiquement pour mesurer la pression. Nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATLAS) pour simuler le comportement du capteur de pression, où nous avons effectué une relation entre le courant de drain source et la pression appliquée. On propose aussi une nouvelle méthode de prédiction de la pression appliquée, cette méthode est basée sur le modèle ANFIS (Adaptive Neuro Fuzzy Inference System). Le modèle neuro-flou développé est implémenté sous forme d'un composant dans la bibliothèque du simulateur électrique ORCAD-PSPICE. Un deuxième modèle à base de neuro-flou, qui s'occupera de la correction et de la compensation du signal de sortie du capteur a été conçu et implémenté sur le même simulateur.

Dans le troisième chapitre, nous avons développé un modèle en 3D de nanotube de carbone par les éléments finis FE en utilisant le simulateur ANSYS. Cette modélisation est basée sur la méthode d'équivalence d'énergie qui permet d'effectuer un passage de modèle énergétique (mécanique quantique) au modèle de la mécanique de structure. Les résultats obtenus par ANSYS sont comparés à ceux obtenus par une résolution analytique et expérimentale.

Le quatrième chapitre a pour objectif la modélisation et l'analyse du comportement d'un nouveau nano capteur intelligent de force, pour cela on a utilisé le nanotube de carbone comme une grille suspendu d'un transistor SOIMOSFET, la variation de la force appliquée au niveau de nanotube de carbone engendre une variation de la capacité de la grille-oxyde de transistor et par conséquent la variation de la tension de seuil et le courant de drain de transistor. Nous avons fait appel aux réseaux de neurones d'abord pour reproduire fidèlement la nature de la réponse du modèle du nano capteur de force appelé modèle direct. Puis, en second lieu nous avons conçu un modèle inverse appelé capteur intelligent qui permet de linéarisation de la réponse de notre capteur de force développé.

Introduction générale

Enfin, dans le cinquième chapitre, nous avons proposé un nouveau biocapteur conçu spécifiquement pour détecter les molécules d'acétone, en utilisant un type particulier de résonateur à nanotubes constitué d'un nanotube de carbone suspendu. Il peut être potentiellement utilisé pour détecter la concentration en trace d'acétone dans la respiration humaine, ce qui conduit à un diagnostic de respiration rapide, pratique, précis et indolore des diabétiques. Nous avons développé aussi un modèle optimisé du capteur d'acétone en utilisant des réseaux neuronaux artificiels (RNA). Le modèle de capteur RNA-acétone proposé est implémenté en tant que composant dans la bibliothèque PSPICE.

Enfin, on termine ce travail par une conclusion générale et des perspectives

Références bibliographique

- [1] Y. Chuan and L. Chen, “ The compensation for hysteresis of silicon piezoresistive pressure sensor ”, *IEEE Sensors J.*, Vol. 11, no. 9, pp. 2016–2021, September 2011.
- [2] M. N. M. Nawi, A. Abd Manaf, M. F. Abd Rahman, M. R. Arshad, and O. Sidek, “ One side electrode type fluidic based capacitive pressure sensor ”, *IEEE Sensors J.*, Vol. 15, no. 3, pp. 1738–1746, March. 2015.
- [3] J.S. Danel, M. Dufour, F. Michel, “ Application of quartz micromachining to the realization of a pressure sensor ”, *Proc. 47th. IEEE International Frequency Control Symposium*, pp 587-596, 2-4 June 1993.
- [4] C. Wei, W. Zhou, Q. Wang, X. Xia, and X. Li, “ TPMS (tire pressure monitoring system) sensors: Monolithic integration of surface micromachined piezoresistive pressure sensor and self-testable accelerometer ”, *Microelectron. Eng.*, Vol. 91, pp. 167–173, March 2012.
- [5] K. N. Bhat et al., “ Design, development, fabrication, packaging, and testing of MEMS pressure sensors for aerospace applications ”, in *Micro and Smart Devices and Systems*. New Delhi, India: Springer-Verlag, pp. 3–17, 2014.
- [6] C. S. Shin, Y. T. Tseng, and S. K. Liaw, “A novel fiber Bragg grating needle pressure sensor for medical applications ”, *J. Neurosci. Neuroeng.*, Vol. 2, no. 1, pp. 53–57, 2013.
- [7] W. P. Eaton and J. H. Smith, “ Micromachined pressure sensors : Review and recent developments” , *Smart Mater. Struct.*, Vol. 6, no. 5, pp. 530–539, 1997.
- [8] Brandon K. Chen, Yu Sun, “Miniaturization of Micromanipulation Tools”, *Advanced Mechatronics and MEMS Devices*, Vol. 32, pp 89-98, July 2012.
- [9] Gonseth Stephan, Rudolf Felix, Eichenberger Christoph, Durrant Dick, Airey Phil, “Miniaturized high-performance MEMS accelerometer detector”, *CEAS Space Journal*, Vol. 7, no. 2, pp. 263-270, 2015.
- [10] Licheng Deng, Yuming Fang, Debo Wang, Zhiyu Wen, “A MEMS based piezoelectric vibration energy harvester for fault monitoring system”, *Microsystem Technologies* , Vol. 24, no. 9, pp 3637–3644, September 2018.
- [11] X. Xu, B. Bercu, F. Lime, L. Montès, “An innovative NEMS pressure sensor approach based on heterostructure nanowire”, *Microelectronic Engineering*, Vol. 87, no.3, pp 406-411 , Mar 2010.
- [12] P. Rolfe, “ Medical and biological measurement with micro and nanosensors”, *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, Vol. 46, no. 4, pp. 324–328, August 2010.
- [13] I. Bargatin, E. B. Myers, J. S. Aldridge, C. Marcoux, P. Brianceau, L. Duraffourg, E. Colinet, S. Hentz, P. Andreucci, M. L. Roukes , “ Large-Scale Integration of Nanoelectromechanical Systems for Gas Sensing Applications”, *Nano Lett.*, Vol. 12, no. 3, pp. 1269–1274, 2012.
- [14] M. S. Hanay, S. Kelber, A. K. Naik, D. Chi, S. Hentz, E. C. Bullard, E. Colinet, L. Duraffourg , M. L. Roukes, “Single-protein nanomechanical mass spectrometry in real time”, *Nat. Nanotechnol.*, Vol.7 , pp. 602–608, 2012.
- [15] E. Sage, A. Brenac, T. Alava, R. Morel, C. Dupré, M. S. Hanay, M. L. Roukes, L. Duraffourg, C. Masselon , S. Hentz, “Neutral particle mass spectrometry with nanomechanical systems”, *Nat. Commun.*, Vol. 6, 2015.
- [16] M. Li, H. X. Tang , M. L. Roukes, “Ultra-sensitive NEMS-based cantilevers for sensing, scanned probe and very high-frequency applications”, *Nat. Nanotechnol.*, Vol. 2, pp. 114–120, 2007.
- [17] V. Singh, B. Irfan, G. Subramanian, H. S. Solanki, S. Sengupta, S. Dubey, A. Kumar, S. Ramakrishnan , M. M. Deshmukh, “Coupling between quantum Hall state and electromechanics in suspended graphene resonator”, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 100, pp. 233103, 2012.
- [18] M. D. LaHaye, J. Suh, P. M. Echternach, K. C. Schwab , M. L. Roukes, “Nanomechanical measurements of a superconducting qubit”, *Nature*, Vol.459, pp. 960–964, 2009.
- [19] S. Iijima, “Helical Microtubules of graphitic carbon”, *Nature*, Vol.354, pp.56-58, 1991.
- [20] Xiaoshan Zhang, Lingwei Yang, Haitao Liu, “Enhancements in mechanical and electrical properties of carbon nanotube films by SiC and C matrix bridging”, *Journal of Materials Science*, , Vol. 53, no. 15, pp. 11027–11037, August 2018.

Introduction générale

- [21] Y. Ngabonziza, J. Li, C. F. Barry, “Electrical conductivity and mechanical properties of multiwalled carbon nanotube-reinforced polypropylene nanocomposites”, *Acta Mechanica*, Vol. 220, no. 1-4, pp. 289–298, August 2011.
- [22] Kaushik Parida, Venkateswarlu Bhavanasi, Vipin Kumar, Ramaraju Bendi, Pooi See Lee, “Self-powered pressure sensor for ultra-wide range pressure detection”, *Nano Research*, Vol. 10, no. 10, pp. 3557-3570, October 2017.
- [23] Clare E. Rowland, Carl W. Brown, James B. Delehanty, Igor L. Medintz, “Nanomaterial-based sensors for the detection of biological threat agents”, *materialtoday*, Vol. 19, no. 8, pp. 464-477, October 2016.
- [24] Andrew Sixsmith, Neil Johnson, “A Smart Sensor to Detect the Falls of the Elderly”, *IEEE Pervasive Computing*, Vol. 3, no. 02, 2004.

Chapitre I : État de l'art

I.1 Introduction

Avant les années soixante dix (70), les manomètres à tube de bourdon, les manomètres mécaniques à cadran, les membranes métalliques; sont utilisées pour mesurer la pression. Après les années 70 jusqu'à ce jour, l'électromécanique vers la microélectronique a évolué et changé qui a permis de fabriquer des capteurs de pression miniaturisés où le matériau dominant est le silicium monocristallin. Récemment, les capteurs de pression sont fabriqués à base de matériaux polymères en utilisant uniquement des plaques de circuit imprimé (PCB) ou par la combinaison "PCB-MEMS" de la technologie PCB et la technologie microsystemes. La technologie MEMS/NEMS permet de fabriquer des capteurs de pression de meilleures performances grâce aux avantages suivants : la miniaturisation, la faible consommation d'énergie, le grand volume de production, le faible coût, la sensibilité élevée. L'application de ces capteurs MEMS/NEMS est largement utilisée dans divers domaines tels que le domaine biomédical, la robotique, l'environnement et surtout l'automobile.

I.2 Définition

Un capteur est un dispositif qui sous l'effet d'une grandeur physique que l'on souhaite connaître et caractériser délivre une grandeur physique exploitable (signal électrique par exemple). On parle aussi de transducteur (figure I.1), puisque la grandeur physique d'entrée est généralement transformée en une autre grandeur physique de sortie comme un signal électrique tel qu'un courant, une tension, une charge, une impédance, etc.

Le capteur permet de prélever une grandeur abstraite, appelée information, qui sélectionne un événement particulier parmi un ensemble d'événements possibles. Pour pouvoir être traitée, cette information sera portée par un support physique, appelé alors de signal. L'information délivrée par un capteur pourra être logique (2 états), numérique (valeur discrète) ou analogique. D'une façon générale, les capteurs peuvent être classés selon deux critères:

- Grandeur mesurée : capteur de position, de température, de vitesse, de force, de pression, etc.
- Caractère de l'information délivrée : capteurs logiques appelés aussi capteurs tout ou rien (TOR), capteurs analogiques ou numériques

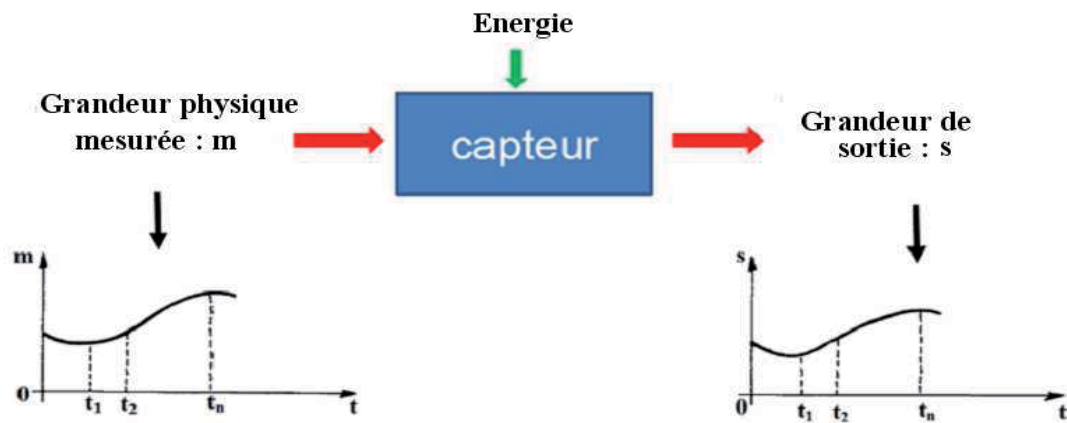


Figure I.1:Schéma synoptique d'un capteur

En fonction du mécanisme d'apport d'énergie à l'élément sensible qui permet de transformer le phénomène physique en signal exploitable, chaque catégorie peut être subdivisée en plusieurs sous catégories de capteurs : les capteurs mécaniques, électriques, optiques, etc.

I.3 Principales caractéristiques des capteurs

Suivant les applications souhaitées, le choix d'un capteur adéquat nécessite l'établissement préalable d'un cahier des charges dans lequel sont énumérés :

- le type de l'événement à détecter.
- la nature de cet événement.
- la grandeur de l'événement.
- l'environnement de l'événement.

A partir de ces paramètres, le choix du capteur est effectué. Par ailleurs, l'utilisation d'un capteur dans les meilleures conditions, nécessite un étalonnage qui permet de connaître les incertitudes de mesure relatives aux paramètres caractéristiques du capteur. Un certificat d'étalonnage d'un capteur contient généralement les caractéristiques suivantes : étendue de mesure, résolution, fonction de transfert, linéarité, caractéristiques statistiques, temps de réponse, sensibilité, limite de détection, etc. Des définitions métrologiques plus complètes, très bien élaborées et plus précises de ces paramètres sont présentées dans le Vocabulaire International de Métrologie (VIM) [1], dans le Guide pour l'expression de l'Incertitude de Mesure (GUM de l'anglais : Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement) ou encore dans les publications [2]. En revanche, un bref rappel de la définition de ces paramètres est présenté dans la suite de ce paragraphe.

I.3.1 Etendue de la mesure ou dynamique

Elle définit la zone dans laquelle les caractéristiques du capteur sont assurées par rapport à des spécifications données.

I.3.2 Résolution

Elle correspond à la plus petite variation de la grandeur que le capteur est susceptible de déceler. La résolution R_m dépend non seulement de la caractéristique des instruments de mesure associés au capteur mais aussi du rapport signal sur bruit du capteur.

I.3.3 Fonction de transfert

Elle donne la relation d'évolution de la grandeur de sortie en fonction de la grandeur d'entrée. Elle est donnée par une courbe en régime permanent (figure I.2) et ne donne pas d'informations sur les caractéristiques transitoires du capteur.

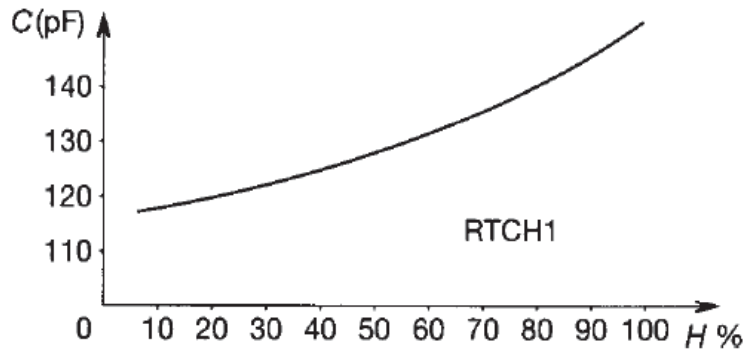


Figure I.2: Exemple de caractéristique d'un capteur d'humidité du type capacitif

I.3.4 Linéarité

C'est la zone de la réponse du capteur dans laquelle sa sensibilité est indépendante de la valeur de la grandeur mesurée. Cette zone peut être définie à partir de la définition d'une droite obtenue comme approchant au mieux la caractéristique réelle du capteur, par exemple par la méthode des moindres carrés. L'ajustement au moindre carré χ^2 , prenant en compte des incertitudes σ_i de chaque point de mesure, consiste à minimiser l'écart de linéarité entre la caractéristique linéarisée et la réponse expérimentale (figure I.3) :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{s(e_i) - s_{lin}(e_i)}{\sigma_i} \right)^2 \quad (I.1)$$

Où e_i représente la $i^{\text{ième}}$ valeur de l'entrée e et s_{lin} la caractéristique linéarisée.

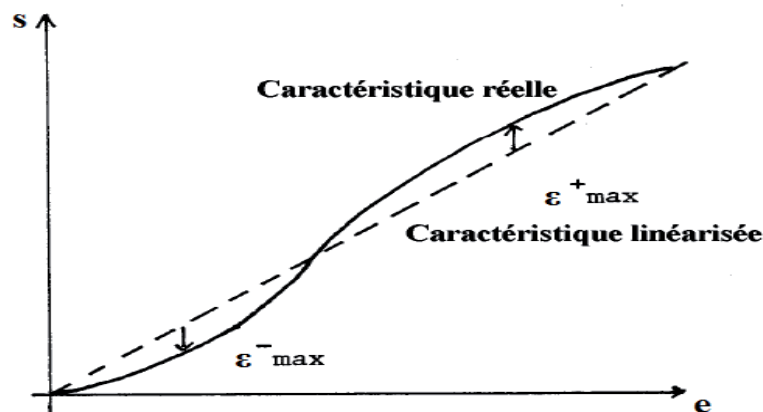


Figure I.3: Exemple de linéarisation de caractéristiques

I.3.5 Caractéristiques statistiques

Les caractéristiques statistiques permettent de prendre en compte la notion d'erreurs accidentelles qui peuvent survenir sur un capteur.

a) Fidélité

Elle définit la qualité d'un capteur à délivrer des résultats les plus proches possibles lors d'analyses répétées sur une même grandeur physique m . L'erreur de fidélité correspond à la dispersion (écart type) σ des résultats autour de la valeur moyenne $\langle m \rangle$ de n mesures effectuées sur m :

$$\langle m \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m_i \quad (\text{I.2})$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (m_i - \langle m \rangle)^2}{n-1}} \quad (\text{I.3})$$

Où m_i est la valeur de m à la $i^{\text{ième}}$ mesure. Parmi les écarts de fidélité on distingue : la répétabilité et la reproductibilité.

➤ **Répétabilité** : La répétabilité correspond à la variation aléatoire des résultats d'une série de mesures successives d'une même grandeur physique m , effectuée dans les mêmes conditions de mesure pendant un court intervalle de temps. Selon les normes ISO 3534-1 et ISO 5725-2, ces conditions sont appelées conditions de répétabilité et elles comprennent : même mode opératoire de mesure, même observateur, même équipement de mesure, même lieu de mesure.

➤ **Reproductibilité** : Elle représente la variation aléatoire des résultats de plusieurs séries de mesures, réalisées sur une même grandeur m , espacée dans le temps, dans des conditions expérimentales différentes. Selon les normes ISO 3534-1, ISO 5725-2, pour que la reproductibilité soit valable, il est nécessaire de spécifier les conditions que l'on fait varier. Ces conditions peuvent comprendre: Principe de mesure, méthode de mesure, observateur, instrument de mesure, conditions d'utilisation, temps de mesure.

b) Justesse

C'est l'aptitude d'un capteur à délivrer une réponse proche de la valeur vraie et ceci indépendamment de la notion de fidélité. Elle est liée à la valeur moyenne obtenue sur un grand nombre de mesures par rapport à la valeur réelle.

c) Précision

La définition du terme « précision » varie d'un auteur à un autre et inclut soit uniquement la reproductibilité ou la fidélité, soit également la notion de « justesse ». Elle définit l'écart en % que l'on peut obtenir entre la valeur réelle et la valeur obtenue en sortie du capteur.

I.3.6 Rapidité

C'est la qualité d'un capteur à suivre les variations de la grandeur mesurée. On peut la chiffrer par :

- la bande passante du capteur (à -3 dB) mesurée en fréquence.
- le temps de réponse (en %) à un échelon.

I.3.7 Sensibilité

La sensibilité S_v détermine l'évolution de la grandeur de sortie Δs en fonction de la grandeur d'entrée Δm en un point donné, c'est-à-dire la dérivée de la grandeur de sortie par rapport à celle d'entrée en ce point :

$$S_v = \frac{\Delta s}{\Delta m} = \frac{\partial s}{\partial m} \quad (\text{I.4})$$

Elle correspond à la pente de la tangente à la courbe issue de la caractéristique du capteur en un point donné. Dans le cas d'un capteur linéaire, la sensibilité est constante et égale à la pente de la droite. Il est important de signaler que cette grandeur est intrinsèque au capteur et ne dépend pas ou peu des autres équipements de mesure associé au capteur dans une chaîne de mesure (description de la chaîne de mesure dans le paragraphe suivant). Par conséquent, plus cette grandeur intrinsèque du capteur est forte, plus il est sensible.

I.3.8 Limite de détection

La limite de détection est la valeur minimale de la grandeur physique m que l'on est capable de déceler. La limite de détection ne doit pas être confondue avec la sensibilité du capteur car elle dépend à la fois de la sensibilité et de la résolution instrumentale R_m liée aux équipements utilisés pour la mesure du signal. Par conséquent, la limite de détection est utilisée pour évaluer la performance de l'association d'un capteur et du dispositif de mesure. Plus elle est faible, plus l'association est sensible. L'expression de la limite de détection LD , déduite à partir de la définition de la sensibilité du capteur, est de la forme :

$$LD = \frac{R_m}{S_v} \quad (\text{I.5})$$

Selon le VIM, la valeur de LD obtenue par une procédure de mesure doit tenir compte d'un intervalle de confiance. Si le bruit de mesure, donc la résolution du dispositif de mesure, est assimilé à une gaussienne, les probabilités que la limite de détection soit dans l'intervalle de confiance sont de 68,2%, 95,4% et 99,8% lorsqu'elle est déterminé en utilisant respectivement R_m , $2R_m$ ou $3R_m$.

I.3.9 Chaîne de mesure

Généralement, un capteur est utilisé dans une chaîne de mesure faisant intervenir plusieurs phénomènes différents (figure I.4) [2].

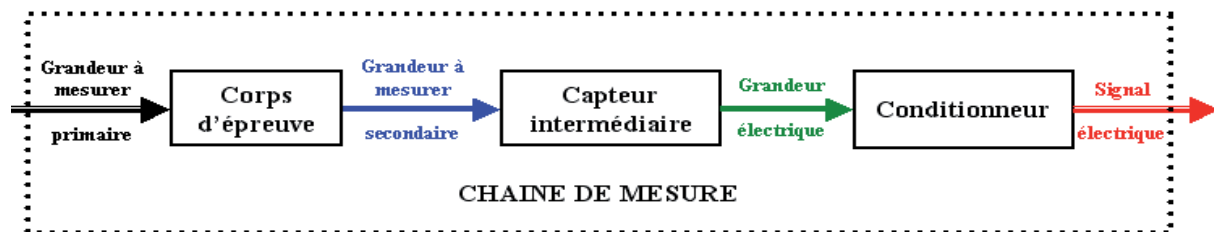


Figure I.4:Schéma de principe d'une chaîne de mesure.

De manière générale, la sortie d'une chaîne de mesure est du type électrique. Si la chaîne de mesure fait intervenir plusieurs transducteurs, on appelle corps d'épreuve celui en contact direct avec le phénomène à quantifier. Le dernier transducteur est associé à un conditionneur qui fournit la grandeur électrique de sortie de manière exploitable. Le choix de ce conditionneur est une étape très importante dans le cadre de la chaîne de mesure car, associé au capteur, il détermine la nature finale du signal électrique et va influencer les performances de la mesure.

I.3.10 Différents types des capteurs:

Il existe dans l'industrie une panoplie de capteurs qui peuvent être classés suivant leurs natures (actifs ou passifs) ou suivant le phénomène physique qui est à l'origine de leurs fonctionnements. On cite à titre d'exemple quelques types des capteurs les plus utilisés [3].

I.3.10.1 Capteurs de pression :

Dans tous les cas, les capteurs de pression peuvent se ramener au schéma synoptique cidessous (figure I.4). Le corps d'épreuve est l'élément mécanique qui, soumis aux variations de la grandeur à mesurer a pour rôle de transformer celle-ci en grandeur physique mesurable.

I.3.10.2 Capteurs d'accélération :

Un accéléromètre est un capteur qui, fixé à un mobile, permet de mesurer l'accélération de ce dernier. Le principe de tous les accéléromètres est basé sur la loi fondamentale de la dynamique.

$$\vec{F} = m \cdot \vec{\gamma} \quad (I.5)$$

Plus précisément, il consiste en l'égalité entre la force d'inertie de la masse sismique du capteur et une force de rappel appliquée à cette masse.

I.3.10.3 Capteurs d'humidité :

La mesure d'humidité est difficile à mettre en oeuvre. L'humidité dans l'air est mesurée généralement comme la fraction maximum d'eau qui peut être absorbée à une certaine température. Les techniques de détection les plus utilisées sont la détection résistive et la détection capacitive.

I.3.10.4 Capteurs de position :

Les capteurs de position sont des capteurs de contact. Ils peuvent être équipés d'un galet, d'une tige souple et d'une bille. L'information donnée par ce type de capteur est de type tout ou rien et peut être électrique ou pneumatique.

I.3.10.5 Capteurs de température :

De toutes les grandeurs physiques, la température est certainement l'une dont la mesure est la plus fréquente. La température détermine en effet de façon décisive les propriétés de la matière. Sa mesure n'est pas directe, mais à travers un phénomène associé tel que la variation de résistance d'un conducteur électrique, la dilatation d'un fluide ou l'émission d'un rayonnement thermique.

Parmi les capteurs les plus usuels (température, pression et accélération), les capteurs de pression connaissent, depuis les années 80 un essor de plus en plus important [4]. Qui est surtout ressenti depuis le développement des capteurs miniatures sur silicium, exploitant les techniques microélectroniques.

I.4 Définition d'un capteur de pression

La pression est un paramètre essentiel dans plusieurs disciplines telles que la thermodynamique, l'aérodynamique, l'acoustique, la mécanique des fluides. La pression est une grandeur très importante dans la chaîne de mesure, détection et de contrôle, elle a pour but d'étudier un milieu qui peut être soit un gaz soit un fluide. La mesure de cette grandeur physique est réalisée à l'aide d'un capteur de pression dont la sortie est un signal, appelé **réponse**. Un capteur de pression est un système constitué de deux parties [5] :

- Une partie détection appelée cellule sensible, qui contient un **corps d'épreuve** et un **transducteur**.
- Une partie traitement de l'information appelée **circuit électronique de traitement**.

I.4.1 Capteur de pression piézoélectrique

Les capteurs de pression piézoélectriques sont basés sur l'effet piézoélectrique [6]. Cet effet qui peut être direct ou indirect, a été découvert par les frères Curie en 1880. L'application d'une contrainte mécanique à un matériau piézoélectrique (le quartz par exemple), entraîne l'apparition d'une polarisation électrique proportionnelle à la force appliquée. En 1881, l'effet inverse a été découvert par Lippmann. L'application d'une tension électrique à un matériau piézoélectrique, entraîne l'apparition d'une déformation mécanique du matériau piézoélectrique qui est proportionnelle à la tension appliquée (figure I.5).



Figure I.5:L'effet piézoélectrique : (a) effet direct, (b) effet inverse

La détection de la pression d'un capteur de pression piézoélectrique se fait par la mesure de la tension électrique. Les avantages d'un capteur de pression piézoélectrique sont : construction robuste, petite taille, grande plage dynamique, électronique associée simple [7]. Ces types de capteurs sont sensibles à la température et nécessitent un câblage et une amplification spéciaux. Plusieurs efforts ont été effectués dans la simulation et la fabrication de capteurs de pression piézoélectriques [7, 8, 9]. Abhay B. Joshi et al [8], ont présenté la simulation de capteur de pression piézoélectrique pour la mesure de l'impulsion de l'artère radiale. Ce capteur de pression micromécanique basé sur un mécanisme de détection piézoélectrique a été conçu et simulé à l'aide de CoventorWare. Les résultats montrent que les conceptions des capteurs répondent aux critères d'application dans le système de mesure des impulsions (la pression appliquée comprise entre 1 et 30 kPa). C. Zinck et al [10] ont présenté la fabrication et la caractérisation de membranes de silicium actionnées par des films minces piézoélectriques, la combinaison de ces derniers avec des membranes de silicium micro-usinés a entraîné de nouveaux micro-dispositifs tels que capteurs de pression, accéléromètres, actionneurs et résonateurs acoustiques.

I.4.1.1 Principe de fonctionnement

La description de la structure et le principe d'un capteur de pression piézoélectrique est illustré sur la figure I.6.

- La membrane qui constitue le corps d'épreuve se déforme sous l'effet d'une pression appliquée.
- Le matériau piézoélectrique assure la transformation de cette déformation en variation de la tension.

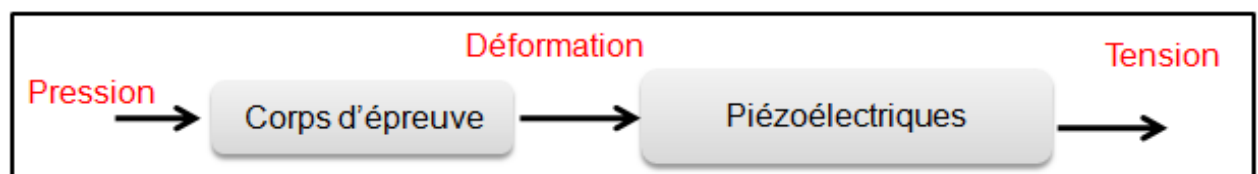


Figure I.6:Schéma synoptique d'un capteur de pression piézoélectrique

I.4.1.2 Exemple d'un capteur de pression piézoélectrique

Un capteur de pression en quartz est illustré sur la figure I.7 [11]. L'application d'une contrainte de pression hydrostatique sur la cavité oscillante en quartz permet d'exciter cette dernière à sa fréquence de résonance via une paire d'électrodes situées de part et d'autre de l'oscillateur.

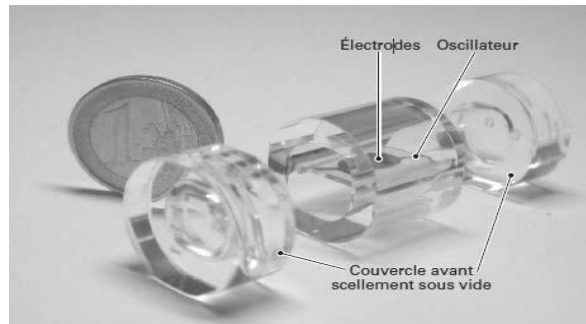


Figure I.7: Capteur de pression en quartz [11]

I.4.2 Capteur de pression piezoresistif :

La détection de la pression d'un capteur de pression piézorésistif se fait par la mesure d'une variation de résistance. Les avantages de ce capteur sont : bonne précision, faible non linéarité, électronique associée simple. Ces types de capteurs sont extrêmement sensibles à la température et nécessitent un circuit de compensation spécifique, ce qui élève considérablement leur prix de revient unitaire.

I.4.2.1 Structure d'un capteur de pression piézorésistif:

La plupart des capteurs de pression piézorésistif sont réalisés par micro usinage du silicium par un agent chimique anisotropique. Un capteur de pression piézorésistif est un dispositif composé d'une membrane micro usinée dans une plaquette de silicium orientée constituant le corps d'épreuve qui se déforme sous l'effet d'une pression appliquée. Des jauges piézorésistives en polysilicium implantées en surface du corps d'épreuve, connectées en pont de Wheatstone, forment un conditionneur passif. Ces jauges transforment la déformation en une variation de résistance (figure I.8) [12].

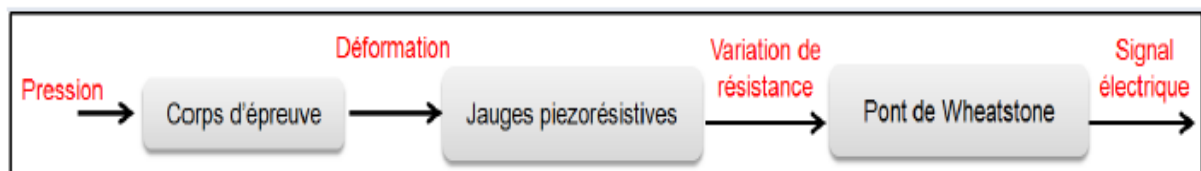


Figure I.8: Schéma de principe d'un capteur de pression piézorésistif [12]

Pour avoir une sensibilité élevée le conditionneur du capteur peut être constitué de deux jauges longitudinales et deux jauges transversales disposées en bordure de membrane et interconnectées en pont de Wheatstone [13] par des pistes d'aluminium (figure I.9). La tension de sortie du pont de Wheatstone alimenté en tension ou en courant constant est proportionnelle à la pression appliquée, aux facteurs de jauges du polysilicium, et à la tension ou au courant d'alimentation.

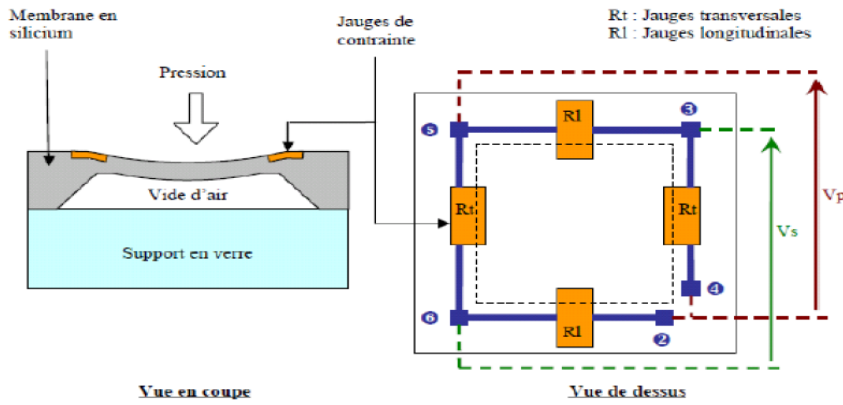


Figure I.9:Schéma de principe d'un capteur à membrane à détection piézorésistif

I.4.3 Capteur de pression capacitif

I.4.3.1 Principe de fonctionnement

La détection de la pression d'un capteur de pression capacitif se fait par la mesure d'une variation de capacité. Les avantages de ce capteur sont : une grande sensibilité à la pression et une faible sensibilité à la température [4]. La description de la structure et le principe d'un capteur de pression capacitif est illustré sur la figure I.10.

- La membrane qui constitue le corps d'épreuve se déforme sous l'effet d'une pression appliquée.
- Les armatures métalliques assurent la transformation de cette déformation en variation de capacité.
- Le circuit électronique de traitement et de mesure permet de transformer cette variation de capacité en tension électrique.

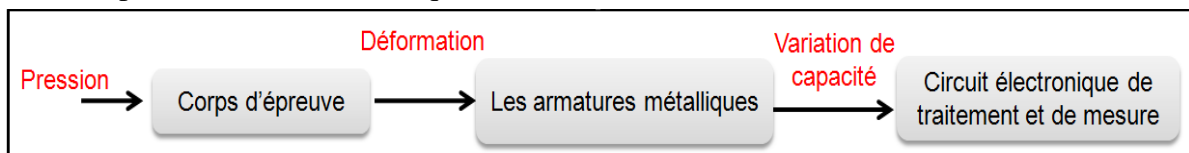


Figure I.10:Schéma synoptique d'un capteur de pression capacitif

I.4.3.2 Gap des capteurs de pression capacitifs

Plusieurs paramètres introduits dans la fabrication des capteurs de pression capacitifs. Le gap est l'un des paramètres les plus importants à contrôler pour fabriquer ce type de capteur, car la variation de la capacité dépend fortement de la valeur du gap. La réalisation du gap souhaité nécessite l'utilisation des techniques sophistiquées et des installations coûteuses. La plupart des capteurs de pression capacitifs sont fabriqués par le silicium en utilisant les techniques de micro-usinage en volume, micro-usinage en surface, ou une combinaison de ces deux techniques. Une autre technique pour fabriquer des capteurs de pression capacitifs est la technologie de circuits imprimés (PCB). Cette technique fournit un procédé de fabrication plus facile et à faible coût. La technologie PCB a été utilisée pour la fabrication de capteurs de pression capacitifs [14,15-16].

Le capteur de pression capacitif rapporté dans les travaux de Jithendra N.Palasangaram et al [15, 17] est fabriqué à l'aide de cette technique de circuit imprimé. La figure I.11 illustre un capteur de pression capacitif MEMS à base du polymère à cristaux liquides (LCP). Ce capteur de pression est fabriqué avec un rayon de diaphragme de 1,6 mm (diamètre de 3,2 mm) et une épaisseur de 50 μm , et fournit une variation de capacité totale de 0,277 pF pour une pression appliquée dans la gamme de 0 à 100 kPa.

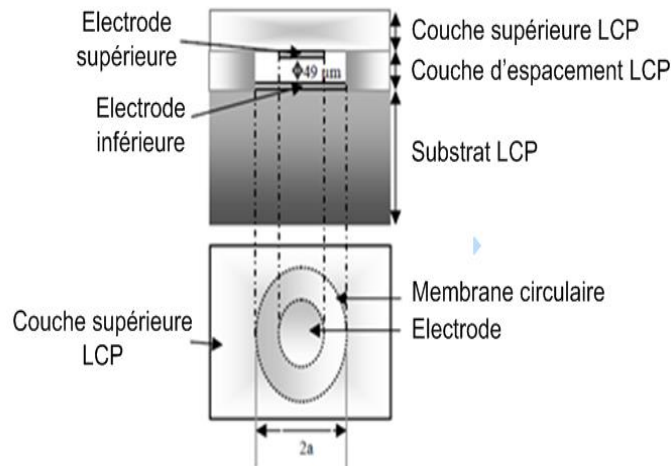


Figure I.11: Structure d'un capteur de pression capacitif MEMS à base de LCP [15, 17]

Il se compose de trois couches différentes :

- Une couche polymère à cristaux liquides LCP (Liquid Crystal Polymer) d'épaisseur de 762 μm avec métallisation de cuivre d'épaisseur de 0,5 μm , utilisée comme un substrat (avec l'électrode inférieure).
- Une couche supérieure LCP d'épaisseur de 50,8 μm avec métallisation de cuivre d'épaisseur de 0,5 μm utilisée comme une membrane (avec l'électrode supérieure).
- Une couche d'espacement LCP d'épaisseur de 50,8 μm utilisée pour définir la cavité du capteur (forme circulaire), qui est formée par un sandwich de deux couches LCP.

Le capteur de pression capacitif MEMS comprend trois couches LCP, où l'une d'eux est utilisée pour définir le gap. L'épaisseur de cette couche d'espacement détermine le gap initial (49 μm) entre les deux électrodes du capteur.

I.4.3.3 Etat de l'art des capteurs de pression capacitif :

Malgré leurs défauts, les capteurs de pression au silicium restent parmi les microsystèmes les plus vendus dans le monde. Ceci est lié d'une part aux différentes techniques qui ont été développées pour corriger leurs défauts tels que les dérives thermiques et d'autre part à la simplicité de mise en œuvre de ce type de détection.

Plusieurs travaux de recherches ont été effectués afin d'améliorer leurs performances et de les adapter aux nouvelles exigences industrielles. On cite, dans ce qui suit, quelques travaux de recherche sur les capteurs de pression capacitifs, depuis les deux dernières décennies :

En **1982**, les travaux de Wise [18] ont été effectués afin d'optimiser les performances des capteurs de pression au silicium. Il a déterminé la déflexion de la membrane en fonction de la température, par la méthode des différences finies, sans tenir compte des autres dimensions du capteur et en supposant que les coefficients de dilatation thermique du silicium et du pyrex sont constants. Il en a déduit la sensibilité thermique du capteur de pression capacitif dans un intervalle réduit de température -30 à 70 °C.

En **1985**, Benmoussa [19] a réalisé et conçu un capteur de pression capacitif à partir d'un processus technologique de fabrication des transistors MOS. Il a déterminé la réponse de membrane fine de silicium encastrée totalement soumise à une pression uniforme et constant.

Blasquez a effectué une étude de la réponse en régime statique des capteurs de pression capacitifs dont l'élément sensible est une membrane rectangulaire ou carrée de silicium dans l'hypothèse des faibles déformations. Il a montré les limites des capteurs de pression capacitifs et leurs aptitudes, ils ont caractérisés par une haute sensibilité à la pression, une remarquable basse sensibilité à la température et peuvent fonctionner dans des gammes de température assez élevées.

En **1991**, dans les travaux de Kudoh, un capteur de pression capacitif d'une nouvelle génération implantant avec un circuit intégré CMOS a été développé. Tel que le circuit électronique est un convertisseur Capacité - Fréquence dont la fréquence d'oscillation change en fonction de la capacité.

En **1995**, Elgamel a simulé les performances du capteur de pression capacitif due à la pression constante et uniforme et aux variations de température. Il a été présenté une technique simple et efficace, capable de représenter la relation entre la déflexion de la membrane et le changement de la capacité avec une pression statique et uniforme.

Malheureusement, nous n'avons vu pas le comportement thermique dans ce travail, Il a été étudié ce modèle à température ambiante et constante.

Dans les travaux de Eaton [20] effectués en **2000**, une application des micros capteurs de pression capacitifs a été développé. Il a présenté une solution analytique d'une membrane circulaire pour les grandes perturbations. Les résultats obtenus ont permis la validation des résultats expérimentaux ainsi que des modèles de simulation établis par la méthode des éléments finis.

Malgré l'évolution croissante du domaine des micros capteurs, des microsystèmes et l'avènement des capteurs intelligents « smart sensor », l'étude et la modélisation élémentaire des capteurs de pression restent toujours d'actualité. C'est pourquoi de nombreux travaux sont en cours afin de les optimiser et d'améliorer leurs performances.

En 2005, Les travaux d'Al-bahri consistaient en la détermination de l'influence de la température sur le comportement statique et dynamique du capteur de pression capacitif réalisé à partir de la filière silicium/verre, dans une large gamme de température (-20°C à +150°C) et pour différentes caractéristiques géométriques.

De récentes études ayant pour objet de corriger la non linéarité d'un capteur de pression, en utilisant une nouvelle technique de fabrication, ont été menées par Qing en 2007. Dans le domaine des hautes températures et en vue d'une application dans un environnement rude, Li. a mis au point un capteur capacitif interdigital à jauges de contraintes. Le capteur de pression capacitif à jauges de contraintes inter digitées opère en développant une capacité entre les différents conducteurs inter digités. Les travaux de Chen en 2008 ont été concentrés sur la conception structurelle et l'optimisation de la micro capteur de pression pour améliorer la sensibilité et la linéarité pour l'optimisation des paramètres du capteur de pression.

A partir de ces travaux, il en ressort qu'il y a certain problème qui subsiste dans l'étude des capteurs de pression capacitifs, et que leur domaine d'application suscite toujours l'intérêt des chercheurs, qui veulent aboutir à des dispositifs de plus en plus performants.

I.5 Les microsystèmes

I.5.1 Définition et applications des microsystèmes

Les microsystèmes (MEMS en anglais) sont des systèmes miniaturisés intelligents qui combinent de manière monolithique des capteurs et des actionneurs et des composants microélectroniques [21,22]. Les dispositifs MEMS sont fabriqués par des techniques de micro-usinage collectives issues de la fabrication des circuits intégrés [23]. Ils sont définis comme des dispositifs généralement de petites dimensions micrométriques. La technologie des microsystèmes peut être appliquée en utilisant une grande variété de matériaux et de techniques de fabrication et le choix dépendra du type de dispositif destiné à être fabriqué. La figure I.12 présente la multidisciplinarité dans la conception et la réalisation des microsystèmes.

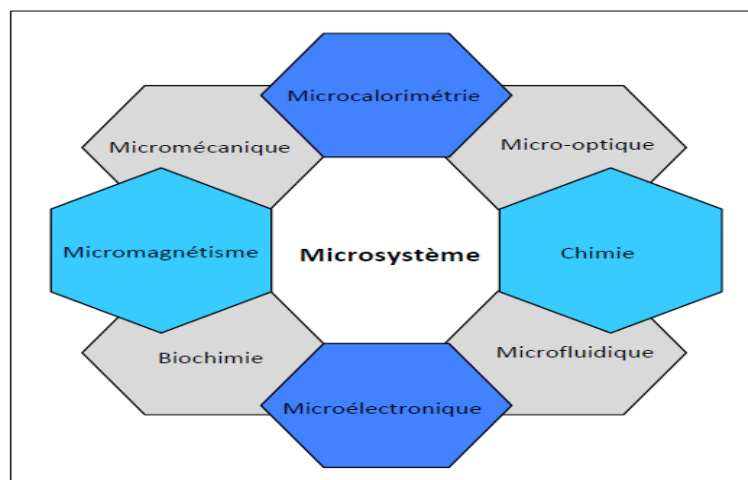


Figure I.12: Multidisciplinarité dans la conception et la réalisation des microsystèmes [24]

Les domaines d'applications des microsystemes les plus importants sont :

✓ L'industrie automobile [25 26] où les applications concernent en priorité des capteurs de pression, de température, de flux et les systèmes d'analyse de qualité d'huile. Les éléments de sécurité des automobiles, tels que les capteurs de pressions intégrés dans les pneus, les accéléromètres dans le dispositif de l'airbag.

✓ L'industrie aérospatiale [27] est l'un des domaines où l'emploi des microsystemes va prendre une place de plus en plus prépondérante, car les aspects de miniaturisation et de fiabilité sont très importants dans les satellites. Dans un satellite, un microsysteme devra résister à des radiations importantes présentes dans l'espace, pour que son fonctionnement ne soit pas perturbé. Les principaux microsystemes utilisés sont des systèmes de positionnement par visée de la terre et des gyromètres.

✓ Le domaine aérien [28] est un grand consommateur de capteurs réalisés en technologie microsystemes. L'apport des microsystemes se retrouve surtout dans le gain en termes de miniaturisation et de réduction des coûts des capteurs, ce qui revient à dire une plus grande sécurité et fiabilité des avions. Il est ainsi possible d'installer dans les ailes des avions un réseau de capteurs qui fourniront une mesure de la pression, des contraintes dans les matériaux ou de la température en divers points, pour une plus grande aide au pilotage.

✓ L'industrie biomédicale [29] est à ce jour un grand domaine de recherche pour les microsystemes dans lequel de nouvelles possibilités d'application apparaissent. notamment l'analyse biomédicale.

Les microsystemes sont souvent utilisés pour :

- la conception d'instruments de diagnostic (mesure de pH du sang avec des ISFET "Ion Sensitive Field Effect Transistor", mesure du taux de glucose ou de sodium).
- des fins thérapeutiques (microélectrodes de stimulation. injection médicamenteuse par micro pompes, mesure de l'activité neuronale).
- dans le domaine de l'analyse biomédicale avec l'apparition des puces à ADN (acide désoxyribonucléique) qui sont présentées comme une vraie révolution pour l'analyse biochimique.

I.5.2 Les principaux matériaux utilisés pour les microsystemes

Le matériau de base est le silicium (Si) ainsi que ses dérivés tels que l'oxyde de silicium (SiO₂), le nitrure de silicium (Si₃N₄), le carbure de silicium (SiC). Ces matériaux sont déposés comme une couche mince d'épaisseur qui varie entre une dizaine d'Angström et plusieurs dizaines de micromètres. Divers métaux servent aussi à des liaisons électriques ou comme surface d'accroche biochimique tels que l'aluminium, le titane, l'or ou le cuivre. On peut joindre

à cette liste quelques polymères tels que la résine photosensible négative (SU-8), le polydiméthylsiloxane (PDMS) et les polyimides (PI).

Le PDMS est le polymère le plus utilisé pour réaliser des capteurs capacitifs souples. Il présente une constante diélectrique élevée, il est hautement déformable et hyper-élastique (il peut subir des elongations de plus de 100% et revenir à son état initial une fois la contrainte relâchée). Il peut être utilisé comme élément constitutif du capteur et comme élément d'enrobage, et rendre ainsi le dispositif portable et non-invasif.

Une synthèse de capteurs capacitifs de pression rencontrés dans la littérature et reposant sur l'exploitation du PDMS comme diélectrique déformable est présentée dans le tableau I.1. Les principales caractéristiques de ces capteurs, telles que la capacité à vide, l'étendue de mesure en force/pression appliquée, la sensibilité, et la résolution spatiale y sont présentées. Ces capteurs sont sensibles seulement en compression t (axe z) ou bien en compression et en cisaillement (axes x, y, et z). La séparation de la sensibilité en compression et en cisaillement peut être obtenue soit en temps réel (par combinaison simple de mesures), soit obtenue après un traitement des données (post traitement).

Tableau I.1: Capteurs de pression capacitive dans littérature

Type	Source	Ratio	Gamme de force ou pression	C ₀ (pF)	Sensibilité en compression (Z)	Sensibilité en cisaillement (X,Y)	Séparation Z et X, Y	Résolution spatiale (mm ²)
Film uniforme	(K. Lei et al., 2014)	(30 : 1)	0-240 kPa	NP	10 %/MPa (0,4 %/N)	Non	Non	36
			240-1000 kPa	NP	2,24 %/MPa (0,09 %/N)	Non	Non	36
		(24 : 1)	0-400 kPa	NP	2,5 %/MPa (0,1 %/N)	Non	Non	36
			400-3000 kPa	NP	0,28 %/MPa (0,01 %/N)	Non	Non	36
	(Surapaneni et al., 2013)	(10 : 1)	320 kPa (z) 128 kPa (x,y)	1,65	38 %/MPa (2,4 %/N)	0,08 %/ MPa (0,5 %/N)	Post-traitement	16
	(K. F. Lei et al., 2012)	(16 : 1)	0-945 kPa	0,95	6,8 %/N	Non	Non	28
	(S Nazeer, 2012)	(10 : 1)	10 mN-10 N 50 kPa-5 MPa	0,6	0,8 %/N	non caractérisée	Possible en temps réel	0,06
Film structuré	(Mannsfield et al., 2010)	(10 : 1)	3 kPa	28,4	2 %/kPa (3 %/N)	Non	Non	64
	(Mannsfield et al., 2010)	(10 : 1)	3 kPa	28,4	10 %/kPa (15 %/N)	Non	Non	64
	(H.-K. Lee et al., 2011)	(10 : 1)	0-30 mN (7,5 kPa)	0,2	1,2 %/N	1,3%/N	Post-traitement	4
	(Cheng et al., 2010)	(10 : 1)	0-180 mN (2,8 kPa)	0,45	0,95 %/mN	1,67 %/mN	Post-traitement	64
	(H.-K. Lee et al., 2006)	(10 : 1)	0-250kPa	0,18	3%/mN	Non	Non	0,16

I.6 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons exposé l'essentiel des travaux effectués dans le domaine des capteurs, des microcapteurs et des microsystèmes. La conception et l'amélioration des performances de ces nouveaux composants nécessitent l'optimisation des caractéristiques de leurs éléments de base, notamment le capteur élémentaire à principe capacitif ou piézorésistif.

Il en ressort de cet aperçu que l'étude des capteurs élémentaires suscite toujours l'intérêt des chercheurs afin de trouver des solutions à la demande du marché industriel qui devient de plus en plus exigeant en matière de performances. Les techniques de simulation utilisées fournissent des informations physiques et mécaniques détaillées de la structure étudiée. Ceci permet de bien comprendre l'effet des paramètres d'influence sur les caractéristiques météorologiques des dispositifs.

I.7 Références bibliographiques

- [1] Vocabulaire international de métrologie–Concepts fondamentaux et généraux et termes associés, JCGM 200:2012, 3ième édition (2012).
- [2] Gustavo Rafael Collere Possetti, Ricardo Canute Kamikawachi, Marcia Muller, José Luís Fabris, “Metrological Evaluation of Optical Fiber Grating-Based Sensors: An Approach Towards the Standardization”, *J. L. Tech.*, Vol. 30, n° 8, 2012.
- [3] LiBiao Han, JianNing Ding, Shuai Wang, Jiang Xu, NingYi Yuan, GuangGui Cheng, ZunFeng Liu, “Multi-functional stretchable and flexible sensor array to determine the location, shape, and pressure: Application in a smart robot”, *Science China Technological Sciences*, Vol.61, n° 8, pp. 1137-1143, August 2018.
- [4] Philippe Menini, “Faisabilité d’un capteur de pression capacitif miniature sur silicium”, Thèse doctorat de l’université P. Sabatier Toulouse, 1998.
- [5] T. Kudoh, S. Shoji and M. Esachi. , “An integrated miniature capacitive pressure sensors”, *Sensors and actuators A*, Vol.29, pp.185-193, 1991.
- [6] S. Le Dren, “Elaboration de couches épaisses piézoélectriques déposées sur substrats pour des applications microtechniques ”, thèse de doctorat, institut national des sciences appliquées de Lyon, 2000.
- [7] T. Shanmuganantham et al, “ A study scheme of Energy harvesting process of MEMS piezoelectric pressure sensor ”, *International Conference on Circuit, Power and Computing Technologies (ICCPCT)*, IEEE, 18-19 March 2016.
- [8] Abhay B. Joshi , Ashok E. Kalange, Dhananjay Bodas, S.A. Gangal, “ Simulations of piezoelectric pressure sensor for radial artery pulse measurement ”, *Materials Science and Engineering*, Vol. 168, no 1-3, pp 250-253, 2010.
- [9] A.V. Shirinov, W.K. Schomburg, “Pressure sensor from a PVDF film”, *Sensors and Actuators A*, Vol.142, no 1, pp. 48-55, 2008.
- [10] Zinck, C, Pinceau, D, Defay, E, Delevoye, E, Barbier, D, “Development and characterization of membranes actuated by a PZT thin film for MEMS applications”, *Sensors and Actuators A Physical*, Vol.115, no 2-3, pp. 483-489, 2004.
- [11] A. Permuy, E. Donzier, F. Rezgui, “ Capteurs microélectroniques ”, *Technique de l’ingénieur T3093*, mai 2004.
- [12] C. Plantier, “Conception, Modélisation et réalisation d’un capteur de pression piézorésistif à faible dérive thermique ”, thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, mars 1992.
- [13] C. Malhaire, “Caractérisation et modélisation de microtransducteurs de pression à hautes performances intégrés sur silicium”, thèse de doctorat, institut national des sciences appliquées de Lyon, 1998.
- [14] A. Luque, F. Perdigones, D. Medina, J. Garcia, and J. M. Quero, “ Capacitive pressure sensor fabricated using printed circuit board techniques ”, in *Proc. Spanish Conf. IEEE Electron Devices (CDE)*, pp. 1-4, February 2011.
- [15] J. N. Palasagaram and R. Ramadoss, “ MEMS-capacitive pressure sensor fabricated using printed-circuit-processing techniques ”, *IEEE Sensors J.*, Vol. 6, no. 6, pp. 1374–1375, December. 2006.
- [16] A. Petropoulos, G. Kaltsas, D. Goustouridis, and E. Gogolides, “ A flexible capacitive device for pressure and tactile sensing ”, *Procedia Chem.*, Vol. 1, no. 1, pp. 867–870, 2009.
- [17] J. N. Palasagaram and R. Ramadoss, “ MEMS Capacitive Pressure Sensor Array fabricated Using Printed Circuit Processing Techniques ”, *Industrial Electronics Society (IECON2005)*, 31st annual conference of IEEE, pp.2357-2362, Raleigh, NC, USA, 6-10 Nov. 2005.
- [18] K.W.lee , K.wise, SENSIM, “a simulation program for solid-state pressure sensors”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 29, no. 1, pp. 34 - 41,1982.
- [19] N.benmoussa, “conception, modélisation et réalisation d’un capteur de pression capacitif microélectronique”, thèse de doctorat de l’université Paule Sabatier Toulouse, 1985.
- [20] W.P.eaton, F.bitsie, J.smith, D.W.plummer, “a new analytical solution for diaphragm deflection and its application to a surface micro machined pressure sensor”, *TechConnect Briefs*, Vol.7, pp.640 – 643, 2000.
- [21] S.M. Sze, "Semiconductor Sensors", John Wiley and Sons, Inc., New York, 1994.

- [22] J.W. Gardner, "Microsensors Principles and Applications", John Wiley and Sons Ltd., Chichester, England, 1994.
- [23] Sylvain Paineau, Philippe Andreucci, Catherine Shaffout, " Microsystèmes : Application et mise en oeuvre ", Technique de l'ingénieur T.I : 3090, 02/2005.
- [24] A. Permuy, E. Donzier, F. Rezgui, " Micro systèmes1 ", technique de l'ingénieur 3092, 05/2004.
- [25] R. Hamoui, " Contribution à une plate forme d'aide à la conception de microsysteme ", thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon, 2009.
- [26] J. D. Turner, L. Austin, "Sensors for automotive telematics", Meas. Sci. Technol., Vol. 11, no.2, pp. R58-R79, 2000.
- [27] F. Presseccq, "Electronique spatiale : des composant dédiés aux composants commerciaux, enjeux d une mutation ", Colloque de CAO de circuits intégrés et systèmes, pp. 64-67, 1999.
- [28] J. B. Huang, C. M. Ho, S. Tung, C. Liu, Y. C. Tai, " Micro thermal shear stress sensor with and without cavity underneath ", Proceedings of the IEEE Instrumentation/ Measurement Technologies Conference (IMTC/95), pp. 171-174, 1995.
- [29] F. J. Martin, C. Groove, " Microfabricated drug delivery systems : concept to improve clinical Benefit ", Biomedical Microdevices, Vol. 3, no.2, pp. 97-108, 2001.

***Chapitre II : Modélisation
du capteur de pression flexible
en utilisant ANFIS (Adaptive
Neuro-Fuzzy Inference System)***

Résumé

Dans cette partie de l'étude nous avons proposé un dispositif conçu spécifiquement pour mesurer la pression appliquée en utilisant une structure constituée d'un transistor MOSFET à double grille. On propose aussi une nouvelle méthode de prédiction de la pression appliquée, cette méthode est basée sur le modèle ANFIS (Adaptive Neuro Fuzzy Inference System), qui combine la logique floue et les réseaux de neurones pour former un réseau hybride, utilisant la rétropropagation de l'erreur comme algorithme d'apprentissage. La comparaison des résultats de l'approche ANFIS avec les résultats obtenus par la logique floue (FL) et le réseau de neurones (RNA) a permis de valider l'approche (ANFIS) avec une valeur de coefficient de détermination R^2 de l'ordre de 0,9889 acceptable et supérieure à celle trouvée par FL et RNA. Le modèle neuro-flou développé est implémenté sous forme d'un composant dans la bibliothèque du simulateur électrique ORCAD-PSPICE. Ce composant exprime fidèlement le comportement du capteur.

Un deuxième modèle à base de neuro-flou, qui s'occupera de la correction et de la compensation du signal de sortie du capteur a été conçu et implémenté sur le même simulateur. Les résultats de simulation obtenus ont confirmé que l'association de notre composant de correction modélisée à base des ANFIS (INV-ANFIS), a apporté des améliorations considérables sur le fonctionnement du capteur de pression. En effet, il élimine l'effet de l'hystérésis et il délivre une sortie linéaire par rapport à la pression appliquée, complètement indépendante de la température.

II.1 Introduction

Le développement de capteurs de pression souple a été relativement important durant ces dernières années. Par exemple, des capteurs tactiles à base de silicium ont été réalisés en utilisant des techniques de micro-usinage (Muhammad *et al.*, 2011) [1]. Mais, en général, les dispositifs à base de silicium sont trop fragiles pour supporter une déformation importante, et ne sont pas suffisamment flexibles pour s'adapter à des surfaces d'analyse non planes. Parallèlement, différents matériaux à base de polymères, tels que le parylène, le polyimide (PI, ou Kapton), ou le polydiméthylsiloxane (PDMS), ont également été proposés comme substrats pour des matrices de capteurs souples. Ces capteurs à base de polymères sont très souvent de nature capacitive ou résistive (Tiwana *et al.*, 2012) [2]. Les capteurs souples capacitifs sont très utilisés en raison de la simplicité de leur principe de fonctionnement, celui-ci repose en effet sur la variation de l'épaisseur du diélectrique placé entre deux électrodes qui se déforment sous l'effet de la pression.

Les dispositifs capacitifs peuvent également être exploités avec des circuits électroniques de conditionnement présentant une faible consommation ce qui les rend compatibles avec des objectifs de dispositifs autonomes et de faible poids. Le PDMS est le polymère le plus utilisé pour réaliser des capteurs capacitifs souples. Il présente une constante diélectrique élevée, il est hautement déformable et hyper-élastique. Un exemple d'un capteur capacitif de pression flexible à haute sensibilité est celui qui est proposé par Cheng M et al.[3], ce capteur est à base d'une structure en sandwich. Dans cette structure le nanotube de carbone à parois multiples (MWNT) est utilisé pour fabriquer les deux électrodes du capteur car ce matériau possède de bonnes propriétés mécaniques et électroniques ; de plus, la couche diélectrique du capteur composée de parylène C (poly (chloro-p-xylylène)) est prise en sandwich entre les deux électrodes.

Les capteurs de pression capacitifs présentent l'avantage d'une grande résolution, une faible consommation électrique, une grande précision et une possibilité d'intégration. Les inconvénients par contre résident dans la non linéarité de leur réponse, la dépendance de la température, en plus, du phénomène d'hystérésis. L'exploitation de ce type de capteur nécessite alors, l'association d'un circuit de correction et de compensation en temps réel afin d'obtenir une réponse linéaire, complètement indépendante de la température et tient compte de l'effet d'hystérésis. La structure : capteur, circuit de conditionnement et circuit de correction, fait appel au concept du capteur intelligent.

Il s'agit dans cette partie de l'étude d'associer au capteur capacitif réalisé par Cheng et al. 2010 [3], une structure électronique permettant d'effectuer des corrections, afin d'obtenir une information précise sous forme numérique, donc directement exploitable et pouvant être par exemple facilement raccordé à un réseau industriel.

En premier lieu de cette partie de l'étude, nous avons présenté un dispositif conçu spécifiquement pour mesurer la pression appliquée en utilisant une structure constituée d'un transistor MOSFET ; l'espace entre la grille et le canal de transistor présente une capacité variable de capteurs flexibles. Lorsqu'une pression est appliquée à l'électrode de grille, il se déplace et la capacité de grille est modifiée, ce qui provoque la variation du courant de drain. En détectant le courant de drain électriquement, la pression d'entrée peut donc être mesurée. La caractéristique courant-pression du capteur flexible a été réalisée à l'aide d'Atlas TCAD.

On propose aussi une nouvelle méthode de prédiction de la pression appliquée. Cette méthode est basée sur le modèle ANFIS (Adaptive Neuro Fuzzy Inference System), qui combine la logique floue et les réseaux de neurones pour former un réseau hybride, utilisant la rétropropagation de l'erreur comme algorithme d'apprentissage. Les résultats obtenus sont comparés à ceux d'un modèle à base de réseaux de neurones artificiels de type MLP et d'un modèle à base de la logique floue (FL). Le modèle neuro-flou développé est implémenté sous

forme d'un composant dans la bibliothèque du simulateur électrique ORCAD-PSPICE ; ce composant doit exprimer fidèlement le comportement du capteur. Un deuxième modèle à base de neuro-flou, qui s'occupera de la correction et de la compensation du signal de sortie du capteur, a été conçu et implémenté sur le même simulateur.

II.2 Principe de fonctionnement

Cheng et al, 2010 [3] développent un dispositif de mesure capacitif sensible à la pression exercée de manière perpendiculaire au plan du capteur. La figure II.1 représente le principe de fonctionnement adopté pour ce type de capteur. Ces capteurs sont constitués de deux électrodes en nanotube de carbone à parois multiples (MWNT) séparés par un diélectrique composé de parylène C (poly (chloro-p-xylylène)). Ils se présentent plus précisément sous la forme d'électrodes positionnées en regard les unes des autres et séparées par une épaisseur de diélectrique déformable. L'application d'une pression induit une diminution de la distance entre les électrodes ce qui a pour effet de modifier la capacité de capteur.

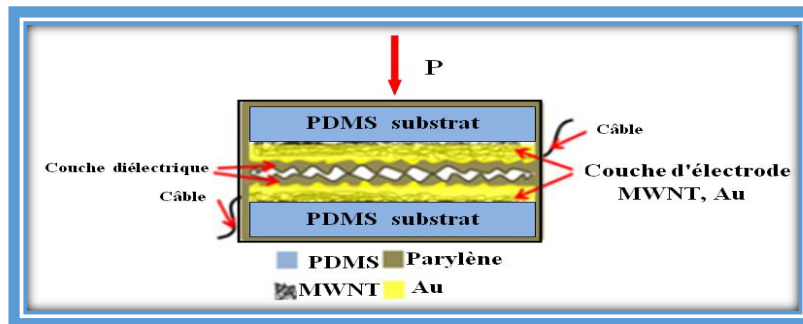


Figure II.1: Structure schématique du capteur de pression capacitif flexible

La capacité de capteur de pression peut être déterminée théoriquement par l'équation de l'électrostatique classique d'un condensateur plan qui est donné par l'équation II.1:

$$C = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{S}{d} \quad (\text{II.1})$$

Où ϵ_0 et ϵ_r sont la permittivité du vide et la permittivité diélectrique, respectivement, S et d sont la surface des électrodes en regard et l'épaisseur du diélectrique, respectivement. Sous l'action d'une pression P (figure II.1), l'épaisseur du diélectrique va diminuer avec Δd et ensuite la capacité C sera changée comme présenté par l'équation II. 2 :

$$C = C_0 + \Delta C = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 A}{d - \Delta d} = \frac{C_0}{1 - \frac{\Delta d}{d}} \quad (\text{II.2})$$

II.3 Caractéristiques I-V

Nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATLAS) pour simuler le comportement du capteur de pression à base de DG-MOSFET (figure II.2) en se basant sur les données expérimentales réalisées par Cheng et al, 2010 [3], nous avons effectué une relation entre le courant drain source du transistor et la pression appliquée.

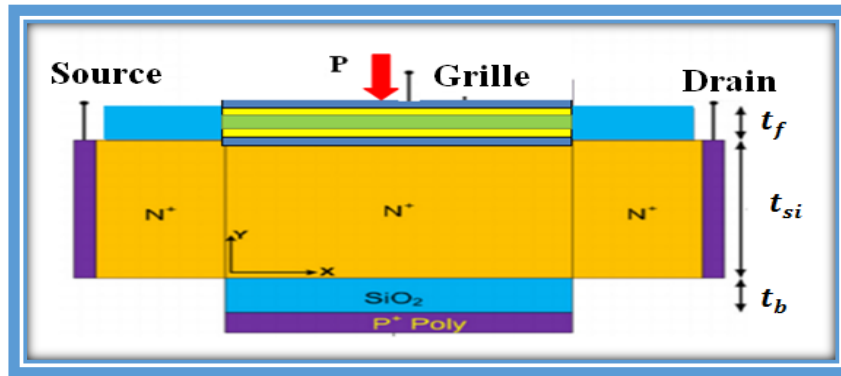


Figure II.2: Capteurs de pression capacitif flexible à base DG-MOSFET

La figure. II.2 représente l'architecture du dispositif considéré, ce dernier est un transistor MOSFET à double-grille faiblement dopé. Les paramètres technologiques de ce transistor sont : L est la longueur du canal, t_b est l'épaisseur de l'oxyde et t_{si} est l'épaisseur de silicium, V_{gs} est la tension appliquée aux deux grilles et V_{ds} est la tension appliquée au drain. Nous considérons un transistor MOSFET à double-grilles à canal de silicium type N faiblement dopé $N_A = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, les régions source et drain sont fortement dopées $N_D = 5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. La figure II.3 montre la variation du courant de drain en fonction de la pression appliquée pour un MOSFET à double-grille de 100nm de longueur du canal, une épaisseur de silicium de 25nm et une épaisseur d'oxyde de 2nm. À partir des courbes qui sont représenté dans la figure II.3, on peut constater l'effet de la pression appliquée sur le courant de drain du transistor.

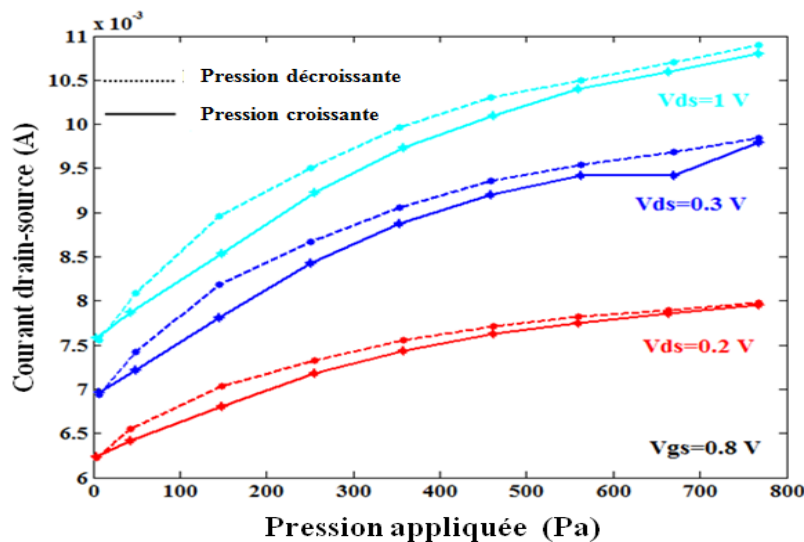


Figure II.3: Evolution de courant I_{ds} en fonction de la pression appliquée pour différent valeur de V_{ds}

Sur la figure II.3, nous représentons l'influence de la tension drain source et la pression appliquée sur le courant drain source de transistor du MOSFET à double-grilles. On constate d'après la figure II.3 : si le capteur est placé dans un environnement dynamique, l'effet d'hystérésis apparaît. En effet, la réponse du capteur peut avoir deux valeurs différentes pour une même pression suivant un cycle de pression (croissant ou décroissant).

Le capteur de pression capacitif repose sur le principe de la variation d'une capacité en fonction de la pression appliquée. Parmi les problèmes technologiques liés à la mesure de pression, on trouve celui du comportement thermique, en effet, sa réponse est largement dépendante de la température, en plus du caractère non linéaire de la réponse.

Afin d'évaluer la réponse du capteur de pression capacitif en fonction de la pression dans un milieu dynamique où la température varie. Nous avons représenté la variation de courant de drain de notre transistor pour une plage de pression de 0 Pa à 800 Pa pour différentes températures (figure II.4), en se basant sur la simulation obtenue par le simulateur TCAD-SILVACO.

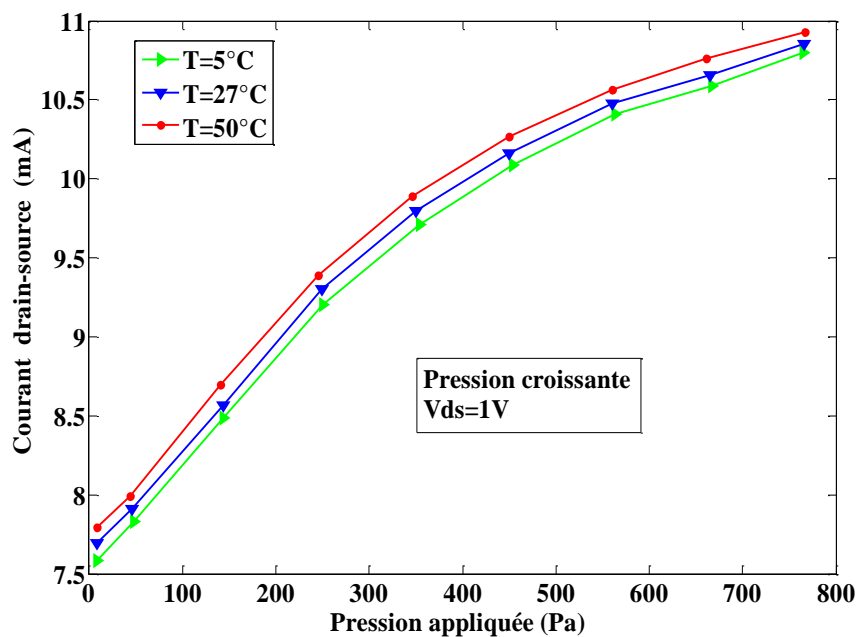


Figure II.4: Variation de courant drain source en fonction de la pression à différentes température

On remarque que la variation de courant drain-source de transistor est une fonction non linéaire, qui dépend de la pression appliquée et de la température ; ce qui donne un système multi variable. En examinant les résultats obtenus, la réponse du capteur peut être modélisée par une droite à laquelle on ajoute un terme de non linéarité en plus de l'hystérésis. Donc la réponse du capteur de pression capacitif est donnée par l'équation II.3.

$$I_{ds} = I_{ds0}(T) + S(T) \times P + NL(P, T) + Hp(P, P^-, T) \quad (\text{II.3})$$

Où

- $NL(P, T)$ exprime le terme de la non linéarité qui dépend de la pression appliquée et de la température.
- $I_{ds0}(T)$ est le courant de drain source d'offset qui dépend de la température, $S(T)$ est la sensibilité à la pression de capteur qui dépend de la température.
- $Hp(P, P^-, T)$ exprime l'hystérésis en pression qui dépend de la pression appliquée P , de la pression précédente P^- , et de la température T .

II.4 Modélisation du capteur de pression à base du système d'inférence flou

La logique floue et les réseaux de neurones artificiels sont des technologies complémentaires, ces techniques ont chacune leurs forces et leurs faiblesses. La combinaison de ces deux approches dans un système intégré semble plus prometteuse pour le développement des systèmes intelligents [4 ,5]. Un système d'inférence flou, aussi appelé le modèle flou est construit à partir de trois composants conceptuels, base de règles, base de données et le mécanisme de raisonnement.

La modélisation d'un système d'inférence flou (entrée/sortie) passe par trois étapes essentielles, fuzzification, inférence floue et la défuzzification (figure II.5). La Fuzzification consiste à transformer les entrées numériques en parties floues, Il est alors possible d'associer à des variables des coefficients d'appartenance à des sous-ensembles flous prenant des valeurs dans l'intervalle [0,1]. Ceci alimente alors le mécanisme d'inférence qui, à partir des valeurs d'entrées et selon la base de connaissance, détermine la valeur correspondante de la sortie. Enfin, la défuzzification joue le rôle inverse de la fuzzification, en convertissant les parties floues relatives aux sorties du mécanisme d'inférence en sorties numériques.

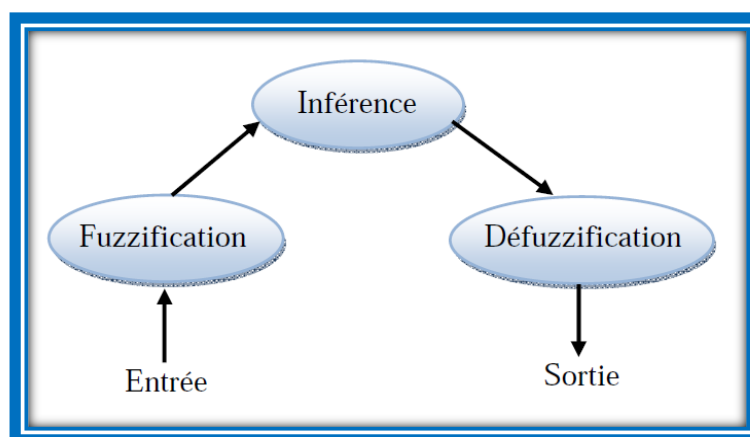


Figure II.5: Système d'inférence flou.

Le modèle ANFIS, connu sous le nom de réseau adaptatif à base de système d'inférence floue, développé par Jang et al en 1993 est une technique qui incorpore les concepts de la logique floue dans les réseaux de neurones [6,7]. Ce modèle simule la relation entre l'entrée et la sortie d'un processus à travers un apprentissage hybride pour déterminer la distribution optimale des fonctions d'appartenance. La figure II.6 représente l'architecture du modèle ANFIS lié au modèle Takagi-Sugeno-Kang (TSK) [8].

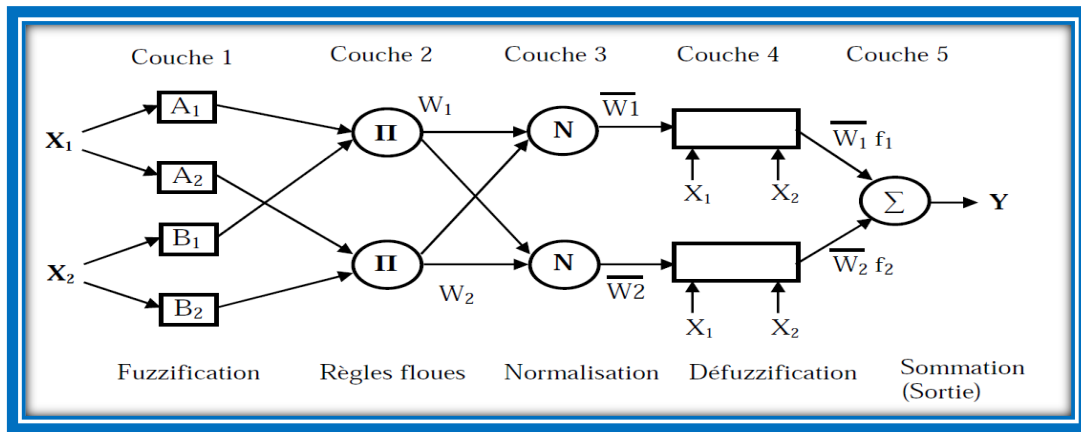


Figure II.6: Architecture du modèle ANFIS lié au modèle TSK.

Pour simplifier le modèle, nous considérons un système à deux entrées x_1 et x_2 , une seule sortie globale Y avec un modèle flou de type TSK de ce système, composé des deux règles suivantes:

Règles 1: si x_1 est $A1$ et x_2 est $B1$; alors $f1 = p1x_1 + q1x_2 + r1$ (II.4)

Règles 2: si x_1 est $A2$ et x_2 est $B2$; alors $f2 = p2x_1 + q2x_2 + r2$ (II.5)

Où p_i, q_i, r_i sont des coefficients constants, le modèle flou est défini par la fonction f_i qui relie les entrées à la sortie numérique. Le système Neuro-Flou (ANFIS : Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System), constitue une hybridation de la logique floue et les réseaux de neurones pour exploiter la richesse des deux approches. Ce système ne nécessite pas d'expertise préalable, il présente un grand choix des paramètres et un temps de convergence rapide.

II.4.1 Méthodologie de modélisation par ANFIS

La modélisation floue ou la construction d'un modèle flou peut être vue comme un processus d'identification de système. Ce processus est composé de trois phases :

- **Phase d'identification de la structure du modèle :** Cette phase se base sur la détermination de la structure de la base des règles, du nombre de symboles et de la structure des conclusions des règles
- **Phase d'identification des paramètres du modèle :** Cette phase permet l'identification des paramètres d'entrée, des paramètres de sortie et de la base des règles.
- **Phase de validation du modèle :** Cette phase sert à tester la validité du modèle tout d'abord par rapport à l'ensemble d'apprentissage, puis sur de nouvelles données de test. La figure II.7 représente le principe de fonctionnement d'un modèle ANFIS.

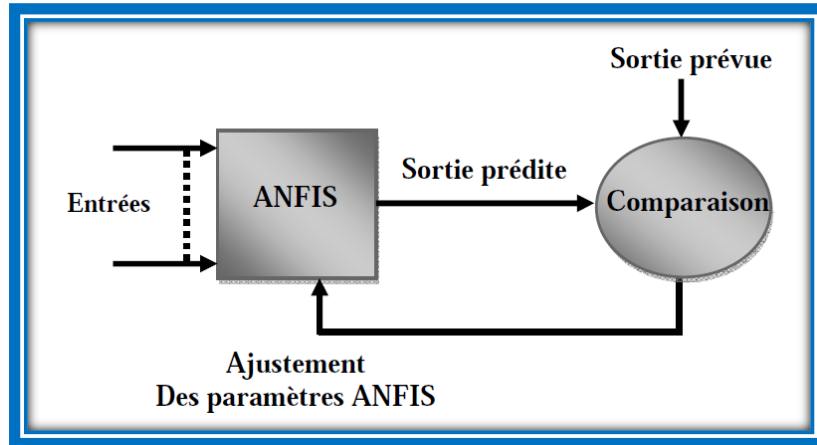


Figure II.7: Principe de fonctionnement d'ANFIS: Principe de fonctionnement d'ANFIS

Nous avons construit notre modèle ANFIS qui relie les paramètres d'entrée (P, T, H, Vds et Vgs) au paramètre de sortie Ids, P est la pression appliquée, T la température, Vds est la tension drain-source, Vgs est la tension grille-source, H est hystérésis, et Ids est le courant de drain. L'illustration correspondante est représentée sur la figure II.8.

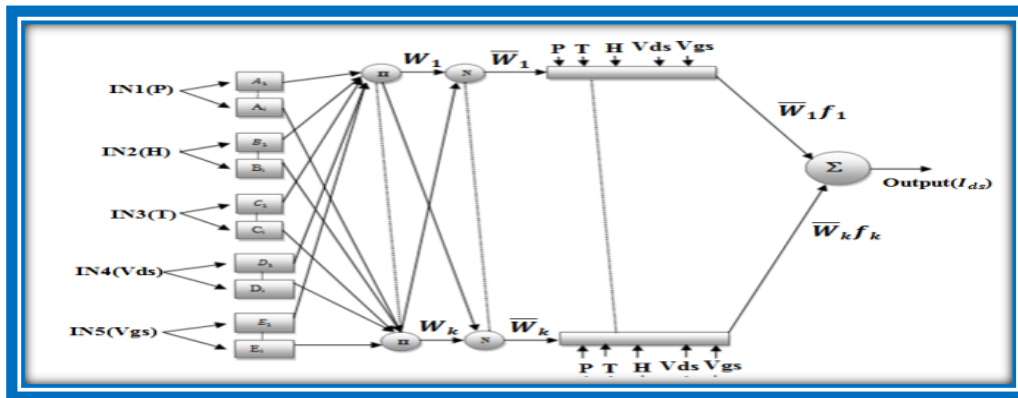


Figure II.8: Structure d'ANFIS Sugeno du Premier ordre proposé pour l'estimation du courant de drain.

L'expression générique de la règle floue Si-Alors, dans lequel les sorties sont des combinaisons linéaires de leurs entrées, est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Règle K : Si P est } A_i \text{ et T est } B_i \text{ et H est } C_i \text{ et Vgs est } D_i \text{ et Vds est } E_i \text{ alors} \\ f_k = p_k P + q_k T + h_k H + g_k Vgs + w_k Vds + r_k, \text{ avec } i = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots, m. \end{array} \right.$$

(II.6)

Où A_i, B_i, C_i, D_i et E_i des variables linguistiques pour les entrées, f_k est la sortie spécifiée par la règle floue, $\{p_k, q_k, h_k, g_k, w_k, r_k\}$ sont des paramètres de sortie qui sont déterminées pendant le processus d'entraînement, m est le nombre total des règles floues Takagi-Sugeno-Kang Si-alors, et n est le nombre des ensembles flous (fonctions d'appartenance) attachés à chaque entrée. La sortie $O_{k,i}$ d'un nœud i de la couche k (appelée nœud (i, k)) dépend des signaux provenant de la couche $k-1$ et des paramètres du nœud (i, k) .

➤ **Couche 1** : cette couche comporte autant de neurones qu'il y'a de sous ensembles flous dans le système d'inférence flou, les nœuds de cette couche sont tous de types adaptatifs. Cette

couche réalise la fuzzification des entrées ; c'est à dire qu'elle détermine les degrés d'appartenance de chaque entrée.

Le nombre d'appartenance pour les paramètres d'entrée est fixé à 3 pour chaque entrée, donc le nombre des règles floues Si-Alors de notre modèle ANFIS est égal à 243 (3 x 3 x 3 x 3 x 3). La sortie de la couche 1 est donnée par l'équation II.7:

$$\{O_{1,i} = \mu_{Ai}(P), i = 1,2,3\}, \{O_{1,i} = \mu_{Bi-3}(T), i = 4,5,6\}, \{O_{1,i} = \mu_{Ci-6}(H), i = 7,8,9\}$$

$$\{O_{1,i} = \mu_{Ai-9}(Vgs), i = 10,11,12\}, \{O_{1,i} = \mu_{Ai-12}(Vds), i = 13,14,15\} \quad (II.7)$$

Où i est le degré d'appartenance, ces paramètres sont appelés les paramètres prémisses. Les sous-ensembles flous choisis peuvent être de forme : Gaussien, triangle, trapézoïdal...etc. La fonction d'appartenance utilisée dans ce travail est la fonction gaussienne, O_1 est alors donnée par l'équation II.8.

$$o_i = \mu_{Ai}(x) = \exp\left(\frac{-0.5(x-c)^2}{\sigma^2}\right) \quad (II.8)$$

Avec c et σ sont l'ensemble des paramètres utilisés pour ajuster la forme de la fonction d'appartenance.

➤ **Couche 2** : les nœuds de cette couche sont des nœuds fixes (II), ils reçoivent les signaux de sortie de la couche précédente et envoient leur produit en sortie. Cette couche engendre le degré d'activation d'une règle.

$$o_{2,k} = \mu_{Ai}(P) \cdot \mu_{Bi-3}(T) \cdot \mu_{Ci-6}(H) \cdot \mu_{Ai-9}(Vgs) \cdot \mu_{Ai-12}(Vds) = W_K, K = 1, 2 \dots m \quad (II.9)$$

➤ **Couche 3** : les nœuds de cette couche sont aussi des nœuds fixes (N), chaque nœud dans cette couche calcule le degré normalisé d'une règle floue donnée. Le résultat à la sortie de chaque nœud représente la contribution de cette règle au résultat final.

$$O_{3,K} = \overline{W}_K = \frac{W_K}{\sum_{l=1}^m W_l} \quad (II.10)$$

➤ **Couche 4** : Les nœuds dans cette couche sont des nœuds adaptatifs, chacun de ces nœuds est relié à un nœud de normalisation correspondant et aux entrées initiales du réseau. La sortie d'un nœud K est donnée par :

$$O_{4,K} = \overline{W}_K \cdot f_K = \overline{W}_K \cdot (p_K P + q_K T + h_K H + g_K Vgs + w_K Vds + r_K) \quad (II.11)$$

Où \overline{W}_K est la sortie normalisée de la troisième couche, et $\{p_k, q_k, h_k, g_k, w_k, r_k\}$ est l'ensemble des paramètres. Ces paramètres sont appelés les paramètres conséquents.

➤ **Couche 5** : est représentée par un nœud unique au niveau duquel s'effectue la somme des signaux provenant de la couche précédente pour donner la sortie globale et finale du ANFIS.

$$O_{5,K} = \sum_{K=1}^m \overline{W}_K \cdot f_K = \frac{\sum_{K=1}^m W_K f_K}{\sum_{K=1}^m W_K} \quad (II.12)$$

Notons, que le système ANFIS est implémenté dans la boîte à outils "Neuro- Fuzzy" de MATLAB. Afin d'optimiser les valeurs des paramètres du modèle neuro-flou, l'apprentissage et la validation croisée des sous-ensembles sont adoptés. Les techniques de validation croisée

(cross validation K-fold), permettent d'obtenir une estimation des performances en exploitant la totalité du jeu de données.

II.4.2 Résultats et discussions

La base de données utilisée pour le développement de notre modèle ANFIS est établie sur la base de modèle numérique des caractéristiques courant-pression de transistor DG- MOSFET via l'utilisation du simulateur technologique et électrique ATLAS par éléments finis 2D, l'apprentissage d'ANFIS est fait avec une base de données de 700 éléments. Les valeurs minimales et maximales des paramètres d'entrée utilisées pour la construction de notre modèle ANFIS sont présentées dans le tableau II.1.

Tableau. II 1: Paramètres d'entrée utilisés pour la construction du modèle ANFIS proposé

paramètres	P(Pa)	T(°C)	H	Vds	Vgs
Min	0	5	Croissante =1	0.2	0.2
Max	800	50	Décroissante =2	1	1

Pendant l'apprentissage d'ANFIS, l'algorithme d'optimisation hybride est employé pour déterminer les valeurs optimales des paramètres du SIF (Système d'inférence Floue) de type TSK. L'algorithme d'apprentissage hybride est une association de la méthode des moindres carrés et de la descente de gradient par rétro-propagation [9,10]. Les paramètres utilisés dans ce travail sont résumés dans le tableau II.2.

Tableau. II 2: Paramètres du modèle ANFIS proposé

Paramètres d'ANFIS	Spécification
Entrée/ Sortie	5/1
type FIS	Sugeno
Méthode d'apprentissage SIF	Hybrid
Type d'appartenance d'entrée	Fonction Gaussien
Fonction d'appartenance de sortie	Linéaire
Règles floues	243
Époques	1200

L'optimisation des paramètres est effectuée de telle manière que l'erreur entre la cible et la sortie de ANFIS est minimisée pour obtenir une bonne correspondance entre les réponses mesurées et prédites.

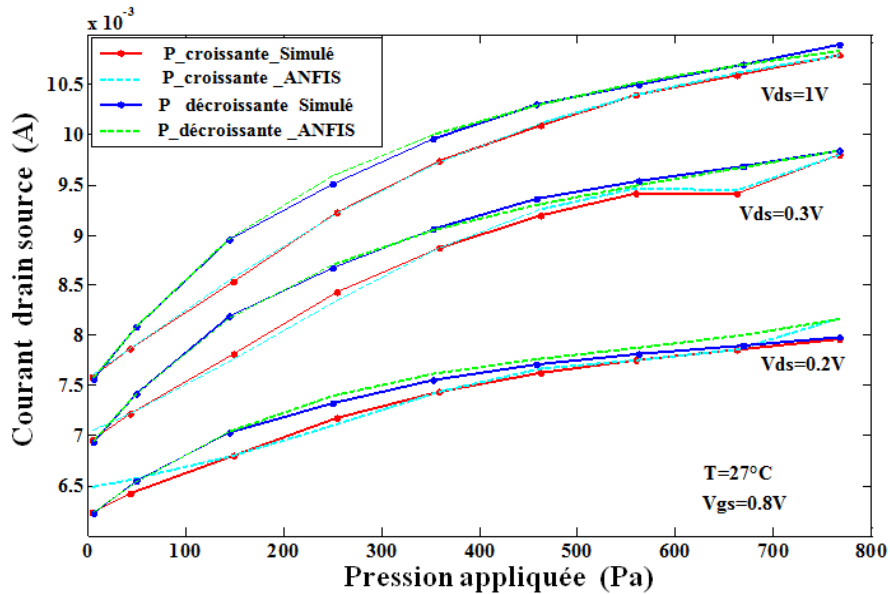


Figure II.9: Validation du modèle ANFIS

La figure II.9 représente la variation du courant de drain I_{ds} en fonction de la pression appliquée, pour différentes valeurs de la tension de polarisation V_{ds} , de notre modèle ANFIS et les résultats de la simulation obtenus par SILVACO.

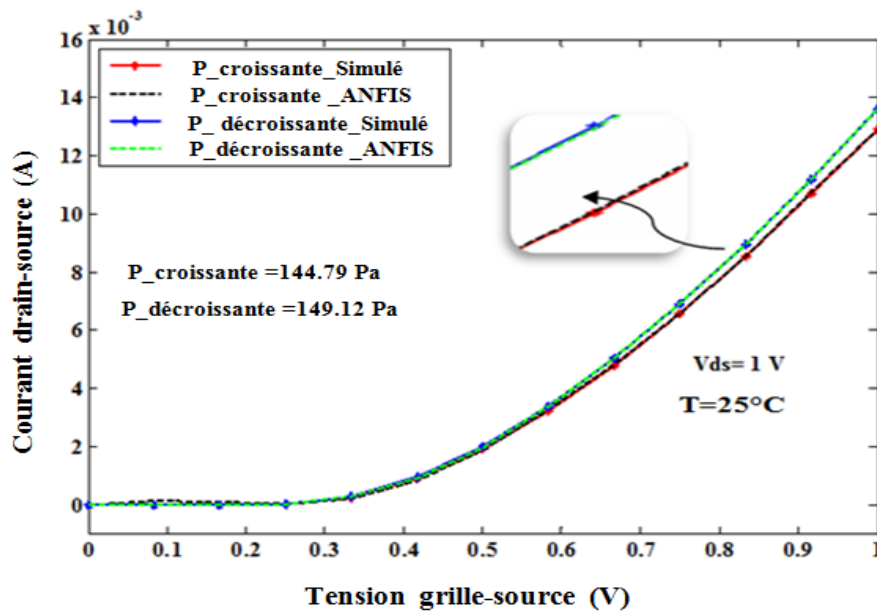


Figure II.10: Fonction de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs}

La figure II.10 représente les variations du courant de drain I_{ds} en fonction de la tension de polarisation de la grille V_{gs} , de notre modèle ANFIS et de modèle simulé par SILVACO, tracées pour différentes valeurs de la pression appliquée. La figure II.9 et La figure II.10 montrent un bon accord entre les résultats numériques et ceux prévus qui ont été obtenus par la technique d'ANFIS.

Dans le but de mettre en évidence les avantages de l'approche de modélisation neuro-floue proposée, une étude comparative a été effectuée en comparant les performances obtenues avec le modèle neuro-flou ANFIS et celles que nous avons obtenues en utilisant un modèle à base de

réseaux de neurones artificiels type perceptron multicouches (MLP) et un modèle à base de la logique floue (FL), respectivement. Les paramètres du réseau de neurones RNA que nous avons adoptés sont présentés dans le tableau II.3.

Tableau. II 3: Les paramètres du réseau de neurones RNA

Type d'approche RNA	perceptron multicouches (MLP)
Nombre de couches	3 couches
Nombre de neurones dans les couches	5 neurones pour la couche d'entrée
	6 neurones pour la couche cachée
	1 neurone pour la couche de sortie
Fonction d'activation	Logsig pour la couche cachée
	purelin pour la couche de sortie
Taux d'apprentissage (I_r)	0.3
Constante de Momentum (m_c)	0,9
Époques	2500

Trois indices statistiques de types différents ont été utilisés comme critères d'évaluation dans cette étude : l'erreur quadratique moyenne (RMSE), l'erreur absolue moyenne en pourcentage (MAPE) et le coefficient de détermination (R^2). L'expression de l'erreur RMSE est donnée par :

$$RMSE = \left[\frac{\sum_{k=1}^m (y_{test,k} - y_{pre,k})^2}{m} \right]^{1/2} \tag{II.13}$$

Où m est le nombre de vecteurs dans l'ensemble de données de l'apprentissage ou de test, $y_{pre,k}$ et $y_{test,k}$ indiquent respectivement les valeurs prédites et testées de point de données k. Le coefficient R^2 et l'erreur MAPE sont calculés par l'équation II.14 et l'équation II.15 respectivement.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{k=1}^m (y_{test,k} - y_{pre,k})^2}{\sum_{k=1}^m (y_{test,k} - \overline{y_{test,k}})^2} \tag{II.14}$$

$$MAPE = 100\% \frac{\sum_k |y_{test,k} - y_{pre,k}|}{m \overline{y_{test,k}}} \tag{II.15}$$

Où $\overline{y_{test,k}}$ est la valeur moyenne de tous les points de données. Nous avons utilisé les indices statistiques RMSE, R^2 et MAPE pour évaluer la validation de l'approche ANFIS. La comparaison des résultats de l'approche ANFIS avec les résultats obtenus par la logique floue (FL) et le réseau de neurones (RNA) a permis de valider l'approche (ANFIS) avec une valeur de coefficient de détermination R^2 de l'ordre de 0,9889 acceptable et supérieure à celle trouvée par les autres approches, comme ils sont présentés dans le tableau II.4.

Tableau. II 4: Validation de l'approche ANFIS proposée en termes d'indices statistiques

Méthode	$RMSE_{tr}$	R_{tr}^2	$MAPE_{tr}$	$RMSE_{tes}$	R_{tes}^2	$MAPE_{tes}$
RNA	0.0039	0.99978	0.2211	0.0201	0.9853	1.3315
ANFIS proposé	0.1961	0.9989	1.2844	0.4854	0.9889	3.5221
FL	-	0.9830	-	-	0.9669	-

II.4.3 Implantation du modèle ANFIS sur ORCAD-PSPICE

Afin de valider notre modèle ANFIS, tous les paramètres de fonctions d'appartenance d'entrée et les paramètres de sortie sont obtenus avec succès. Nous proposons d'implémenter le modèle ANFIS dans le simulateur PSPICE. Différents travaux se sont intéressés à l'implémentation des modèles de réseaux de neurones artificiels dans le simulateur PSPICE [11-16]. L'avantage de l'implantation du modèle comme un composant réside dans la rapidité de calcul et la capacité à concevoir des modélisations performantes avec un nombre réduit de paramètres.

L'utilisation des boites ABM (Analog Behavioral Modeling) de la bibliothèque de PSPICE, nous permet d'implanter le modèle ANFIS (les règles floues, le degré des règles floues, les paramètres de la fonction d'appartenance gaussienne pour les entrées...) sur ce simulateur. Dans la figure II.11 nous montrons le schéma de notre approche pour la simulation de capteur de pression capacitif.

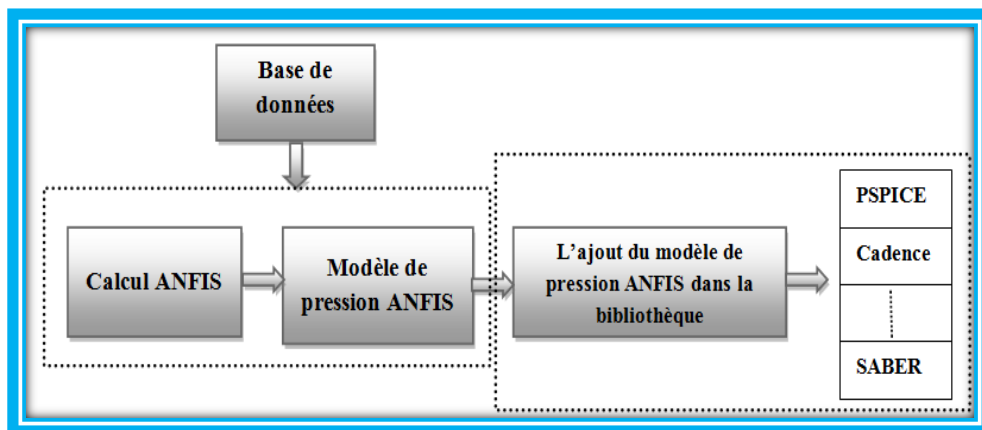


Figure II.11:Schéma de l'approche de simulation du capteur de pression capacitif flexible

L'implémentation des modèles ANFIS sous SPICE peut être réalisée avec une approche de type « boîte noire ». C'est-a-dire ne tenant compte que du comportement entrées/sorties. La figure II.12 représente le circuit de simulation du capteur de pression capacitif.

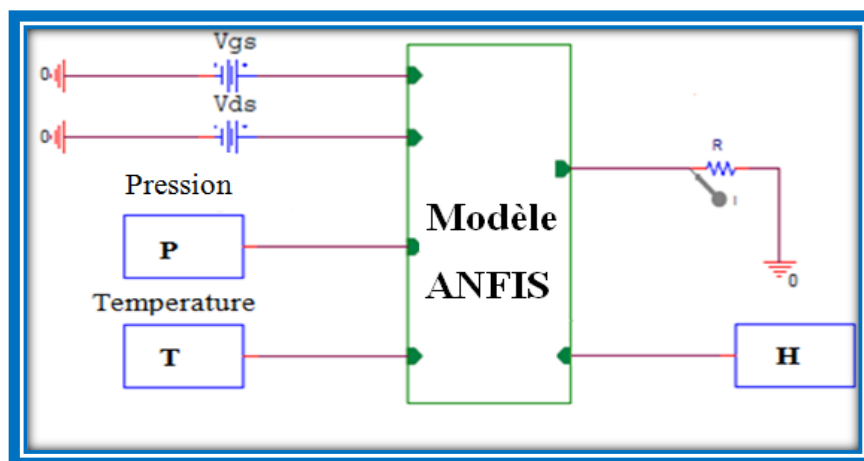


Figure II.12:Circuit de simulation du modèle ANFIS utilisant le simulateur PSPICE

La figure II.13 représente la caractéristique $I_{ds} = f(P)$ du modèle ANFIS pour différentes valeurs de V_{ds} pour une plage de pression qui varie de 0Pa jusqu'à 800Pa d'une manière croissante et décroissante.

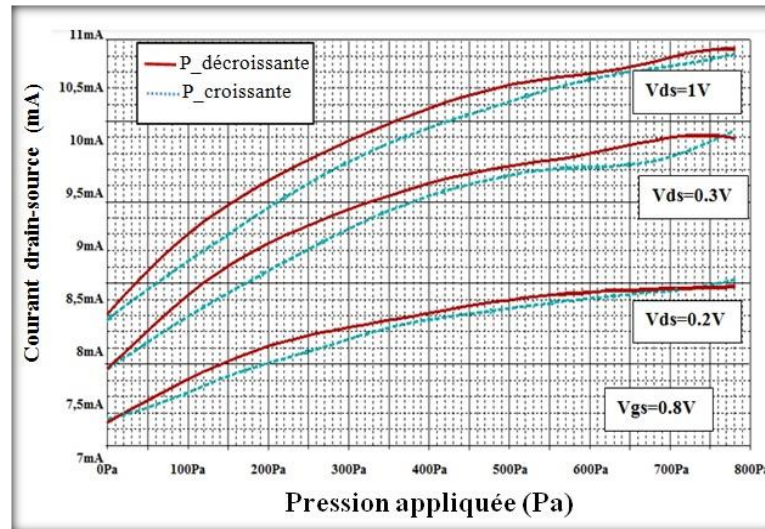


Figure II.13: Résultats de simulation du modèle ANFIS en utilisant le simulateur PSPICE.

Selon les résultats qui sont représenté dans la figure II.13, il est clair que le modèle conçu et implanté dans le simulateur PSPICE, exprime le comportement du capteur de pression capacitif dans un environnement électrique qui tient en compte la non linéarité et l'hystérésis de la réponse. Ces résultats montrent l'applicabilité des systèmes Neuro-Flou (ANFIS) à l'étude des capteurs de pression.

II.4.4 Modélisation de l'INV-ANFIS

Le but de cette partie de l'étude est de concevoir un modèle inverse INV- ANFIS permettant la correction de la réponse de notre capteur de pression capacitif, afin d'obtenir une sortie linéaire par rapport à la pression appliquée et complètement indépendante de la température. De plus, ce composant doit délivrer une réponse unique pour une même pression appliquée, quel que soit la valeur de la pression précédente, ce qui se traduit par l'élimination de l'effet d'hystérésis. L'ensemble capteur, circuit de conditionnement et le composant de correction, est dit capteur intelligent.

Pour surmonter le problème de la non-linéarité de la réponse de notre modèle, il est nécessaire d'effectuer une linéarisation de la sortie du capteur. De ce fait, nous avons choisi à titre d'exemple la courbe de $V_{ds} = 1V$, $V_{gs} = 0.1V$, $T=25^{\circ}C$ et une pression appliquée qui varie d'une façon croissante de 0 Pa jusqu'à 800Pa (figure II.14).

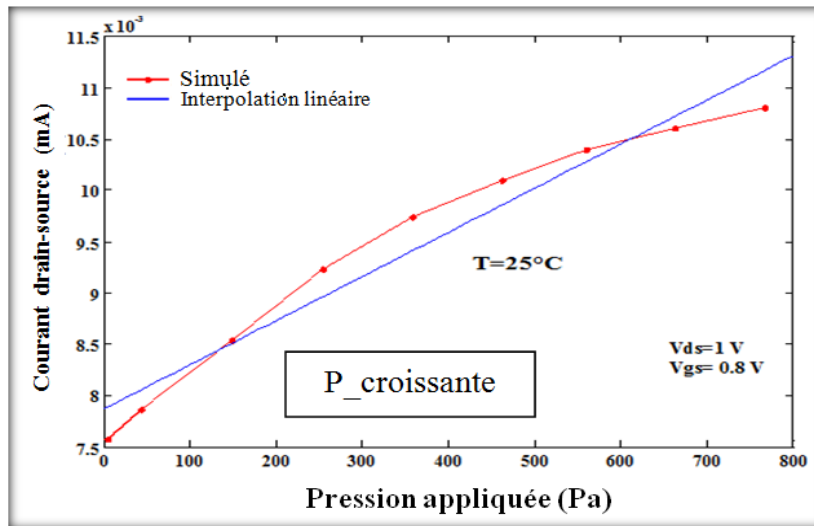


Figure II.14: Linéarisation de la réponse.

Par analogie avec la modélisation de modèles directe des capteurs, on procède à la modélisation des modèles correcteurs (INV-ANFIS). La génération des bases de données est similaire à celle utilisées pour la conception de modèle directe.

II.4.5 Test du correcteur

Afin de tester les performances de notre modèle correcteur (INV-ANFIS), nous proposons d'implémenter ce modèle dans le simulateur PSPICE. Nous avons envisagé différents tests, qui englobent les problèmes précédemment étudiés (la non linéarité, et l'effet de l'hystérésis). Les résultats de simulation obtenus qui sont représentés dans la figure II.15 et la figure II.16, montrent que le modèle INV-ANFIS développé a permis de corriger la sortie du capteur de pression, tout en éliminant les différents problèmes liés à la mesure de la pression, tels que la non linéarité et l'hystérésis.

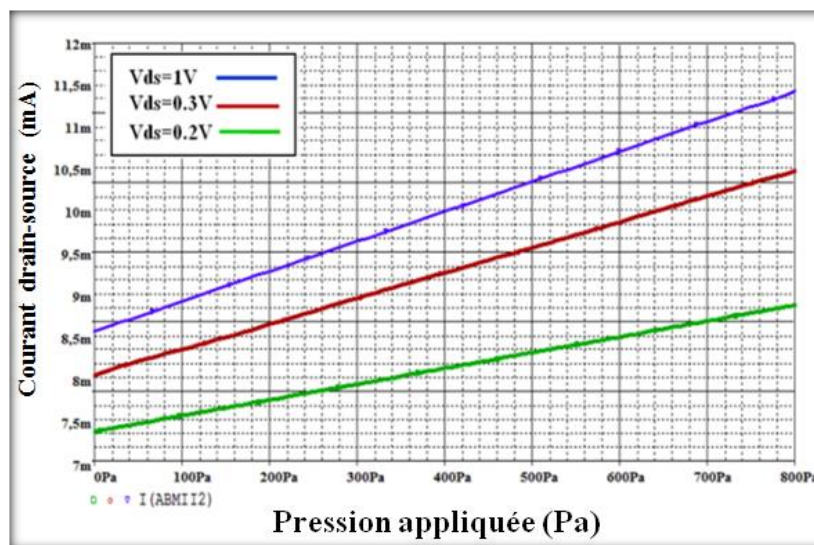


Figure II.15: Résultats de simulation du modèle INV-ANFIS à l'aide du simulateur PSPICE

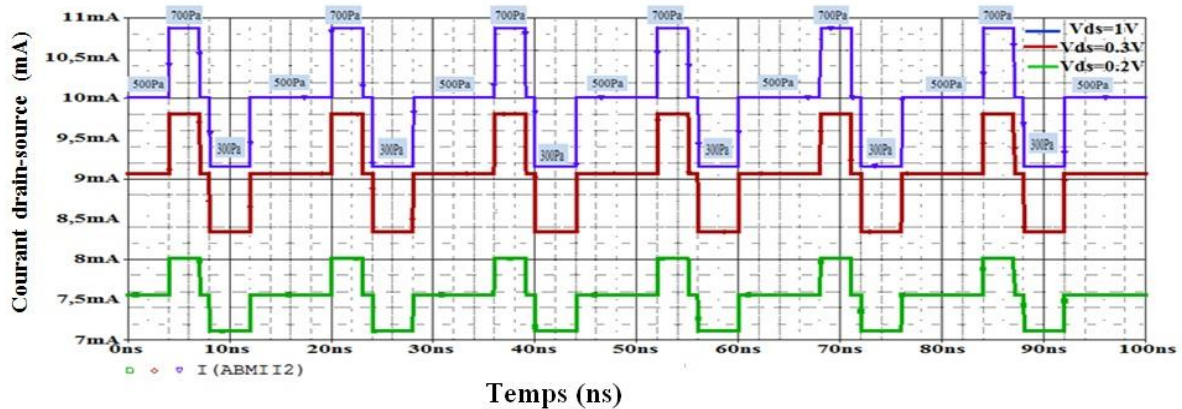


Figure II.16: Résultats de sortie dans le domaine temporel du modèle INV-ANFIS en utilisant le simulateur PSPICE

En examinant les résultats de simulation obtenus, nous pouvons confirmer que l'association de notre composant de correction modélisé à base des ANFIS (INV-ANFIS), a apporté des améliorations considérables sur le fonctionnement du capteur capacitif et flexible de pression. En effet, il délivre une sortie linéaire par rapport à la pression appliquée, complètement indépendante de la température en éliminant l'effet d'hystérésis. Le signal de sortie obtenu peut être éventuellement exploité par d'autre processus.

II.5 Conclusion

Dans cette partie de l'étude nous avons proposé un dispositif conçu spécifiquement pour mesurer la pression. Nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATLAS) pour simuler le comportement du capteur de pression à base de DG-MOSFET, où nous avons effectué une relation entre le courant de drain source et la pression appliquée.

Nous avons cherché dans cette étude à développer des nouveaux modèles à base de l'approche ANFIS pour le capteur de pression capacitif et son composant de correction. Selon les résultats obtenus, il est clair que le modèle ANFIS du capteur de pression capacitif conçu et implanté dans le simulateur PSPICE exprime fidèlement le comportement du capteur de pression capacitif, du fait qu'il tient compte de l'effet d'hystérésis.

L'insertion de deux modèles (le modèle directe et le modèle de correction INV-ANFIS) dans la bibliothèque du simulateur SPICE nous a permis de simuler le fonctionnement du capteur de pression capacitif dans des conditions dynamiques.

En examinant les résultats obtenus, nous pouvons dire que notre modèle de correction INV-ANFIS donne d'excellents résultats. En effet, il délivre une sortie linéaire par rapport à la pression appliquée, complètement indépendante de la température avec élimination de l'effet d'hystérésis, le modèle ANFIS peut être exploité directement par un processus industriel.

Nous avons effectué une étude comparative entre la modélisation du capteur de pression par l'approche ANFIS et la modélisation du capteur de pression par les proches FL et RNA. La

comparaison des résultats de l'approche ANFIS avec les résultats obtenus par la logique floue (FL) et le réseau de neurones (RNA) a permis de valider l'approche (ANFIS) avec une valeur de coefficient de détermination R^2 de l'ordre de 0,9889 acceptable et supérieure à celle trouvée par FL et RNA.

II.6 Références bibliographiques

- [1] Muhammad H. B., Oddo C. M., Beccai L., Recchiuto C., Anthony C. J., Adams M. J., Ward M. C.L., “Development of a bioinspired MEMS based capacitive tactile sensor for a robotic finger”, *Sensors and Actuators A:Physical*, Vol.165,n°2, pp.221–229,2011.
- [2] Tiwana,M.I., Redmond, S. J. and Lovell, N. H., “A review of tactile sensing technologies with applications in biomedical engineering”, *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 179, pp.17–31, 2012.
- [3] Cheng M-Y, Lin C-L, Lai Y-T and Yang Y-J., “A polymer based capacitive sensing array for normal and shear force measurement Sensors”, *Sensor*, Vol. 10 ,n°11 , pp. 10211–10225, 2010.
- [4] I. Rivals, L. Personnaz, g. Dreyfus Modélisation, “classification et commande Par réseaux de neurones : principes fondamentaux : Méthodologie de conception et illustrations industrielles”, *Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris*. 2003.
- [5] Arash Bahrammirzaee, “A comparative survey of artificial intelligence applications in finance: artificial neural networks, expert system and hybrid intelligent systems”, *Neural Computing and Applications*, Vol. 19, n° 8, pp 1165–1195, November 2010
- [6] Mohammad T. Dastorani, Alireza Moghadamnia, Jamshid Piri, Miguel Rico-Ramirez, “Application of ANN and ANFIS models for reconstructing missing flow data”, *Environmental Monitoring and Assessment*, Vol. 166, n° 1–4, pp 421–434, July 2010. doi: 10.1007/s10661-009-1012-8.
- [7] Ahmed El-Shafie, Mahmoud Reda Taha, Aboelmagd Noureldin, “ A neuro-fuzzy model for inflow forecasting of the Nile river at Aswan high dam”, *Water Resources Management* , Vol. 21, n° 3, pp 533–556, March 2007.
- [8] Babak Rezaee M.H., Fazel Zarandi, “Data-driven fuzzy modeling for Takagi–Sugeno–Kang fuzzy system”, *Information Sciences*, Vol. 180, n° 2, pp 241-255, January 2010.
- [9] Deogratias Nurwaha, Xin Hou Wang, “ Prediction of rotor spun yarn strength from cotton fiber properties using adaptive neuro-fuzzy inference system method”, *Fibers and Polymers*, Vol. 11, n° 1, pp 97–100, February 2010.
- [10] Armin Azad, Saeed Farzin, Hamed Kashi, Hadi Sanikhani, Hojat Karami, Ozgur Kisi, “Prediction of river flow using hybrid neuro-fuzzy models”, *Arabian Journal of Geosciences*, 11:718, November 2018.
- [11] F. Menacer, Z. Dibi, A. Kadri, F. Djeflal, “A new smart nanoforce sensor based on suspended gate SOIMOSFET using carbon nanotube”, *Measurement*, Vol. 125, pp 232-242, September 2018.
- [12] F. Menacer, Z. Dibi, A. Kadri, Modeling a new acetone sensor based on carbon nanotubes using finite elements and neural network”, *The European Physical Journal Plus*, June 2018, 133:238.
- [13] F. Menacer, A. Kadri, F. Djeflal, Z. Dibi, H. Ferhati, “ Modeling of boron nitride-based nanotube biological sensor using neural networks”, in *The 17th international conference (STA’2016)*, IEEE, Sousse, Tunisia, December 2016 (IEEE, 2016).
- [14] F. Menacer, A. Kadri, F. Djeflal, Z. Dibi, H. Ferhati, “ Modeling and investigation of smart capacitive pressure sensor using artificial neural networks”, in *6th International Conference on Systems and Control (ICSC 2017)*, IEEE, Batna, Algeria, May 2017 (IEEE, 2017).
- [15] F. Djeflal, M. Chahdi, A. Benhaya, M.L. Hafiane, “An approach based on neural computation to simulate the nanoscale CMOS circuits: Application to the simulation of CMOS inverter,” *Solid- State Electronics*, Vol. 51, pp. 48-56, 2007.

Chapitre III :
Modélisation de nanotube de
carbone par les éléments
finis

Résumé

L'objectif de cette partie de l'étude est de développer un modèle en 3D de nanotube de carbone par les éléments finis FE en utilisant le simulateur ANSYS. Cette modélisation est basée sur la méthode d'équivalence d'énergie qui permet d'effectuer un passage de modèle énergétique (mécanique quantique) au modèle de la mécanique de structure. Pour la modélisation des liaisons, l'élément élastique en 3D BEAM188 est utilisé et les atomes sont présentés sous forme de nœuds. La validité de notre modèle a été confirmée, les résultats obtenus par ANSYS sont comparés à ceux obtenus par une résolution analytique et expérimentale, les résultats de la comparaison montrent une bonne corrélation.

III.1 Nanotubes de carbone

Tout le développement des nanotubes de carbone a commencé en 1993, lorsqu'un groupe de chercheurs japonais (Iijima et Bethune (NEC, Tsukuba, Japon)) a découvert des formes cylindriques creuses de la molécule de carbone appelés nanotube de carbone mono-parois (en anglais : **Single Walled Carbon NanoTube, (SWCNT)**). Ils les identifient par microscopie électronique dans un sous produit de synthèse des fullerènes [1,2]. Ces nanotubes sont séparés de $\sim 0.34\text{nm}$ et ils ont un diamètre de l'ordre du nanomètre et une longueur de quelques micromètres. Depuis, différentes méthodes de synthèse spécifiques ont été mises au point et ont permis l'étude en laboratoire de ces structures et de leurs propriétés physicochimiques, ce qui laisse entrevoir de nombreuses applications, notamment dans les domaines de la microélectronique. Comme on le verra dans ce qui suit, certains nanotubes de carbone peuvent être métalliques ou quasi-métalliques et d'autres peuvent être semi-conducteurs [3].

III.2 Structures et propriétés des nanotubes de carbone

III.2.1 Structures géométriques

Le nanotube de carbone mono-paroi peut être vu comme l'enroulement d'une forme stable de feuille de graphène sur elle-même produisant ainsi un cylindre. La structure de ce nanotube est déterminée par le couple de nombres entiers (n, m) définissant un vecteur caractéristique de l'enroulement appelé vecteur de chiralité :

$$C_h = n \times \vec{a}_1 + m \times \vec{a}_2 \quad (\text{III.1})$$

Les vecteurs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs de base dits unitaires du maillage hexagonal. Sachant que la distance a_{c-c} entre deux atomes de carbone voisins est $a_{c-c} \approx 0.142 \text{ nm}$.

On a $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a_0 = 0.246 \text{ nm}$. Ainsi, le diamètre du nanotube, en nano mètre, s'écrit :

$$d = \frac{a_0}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + n.m} \quad (\text{III.2})$$

Ainsi en connaissant l'amplitude de \vec{a}_1 et \vec{a}_2 , on peut déduire la circonférence du tube puis son diamètre [4]. On peut aussi connaître l'angle d'hélicité θ caractérisant l'enroulement de

la feuille de graphène. Cet angle est formé par le vecteur C_h et le vecteur de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 (figure III.1), il est exprimé par la relation suivante [5]:

$$\theta = \arctan \left\{ \frac{\sqrt{3} m}{m + 2n} \right\} \tag{III.3}$$

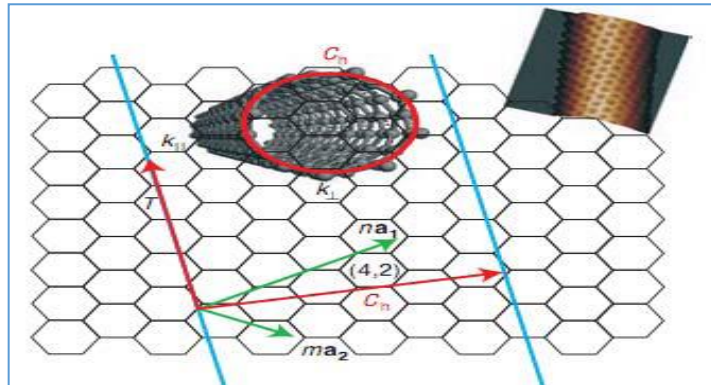


Figure III.1: Structure du maillage hexagonal d'une feuille de graphène et enroulement du nanotube de carbone [5].

C'est suivant la valeur de cet angle d'hélicité θ (compris entre 0 et 30°) qu'on peut déterminer le type des nanotubes de carbone mono-paroi. En réalité, la plupart des nanotubes sont statistiquement chiraux c'est-à-dire qu'ils sont superposables à leurs images par symétrie miroir. Toutefois, il existe d'autres nanotubes possédant des symétries distinctives (figure III.2) :

- On parle de tubes "Armchair" lorsque l'angle θ est égal à 30° ce qui se traduit par des indices chiraux égaux (n, n).
- On parle de tubes "Zigzag" lorsque l'angle θ est nul et l'un des indices chiral est nul (n, 0).

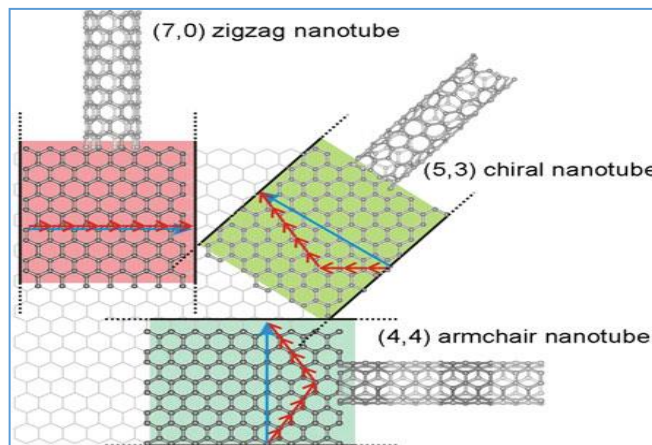


Figure III.2: Exemple de nanotube de différentes structures : (a) Nanotube chiral (5, 3), (b) nanotube Armchair (4, 4) et (c) un nanotube Zigzag (7, 0) [5].

III.2.2 Les propriétés mécaniques des nanotubes de carbone

Des études théoriques puis expérimentales ont montré que les nanotubes de carbone (SWNTC) possèdent d'excellentes caractéristiques mécaniques. Le module de Young d'un tube multi-feuillets a été calculé [6] comme étant jusqu'à 1,4 fois plus important que celui du graphite (environ 1 TPa) et des mesures ont été réalisées à partir de la fréquence de vibration thermique de SWNTC dans un microscope électronique en transmission, conduisant à des valeurs comprises entre 0,4 TPa et 3,7 TPa [7]. La valeur moyenne est de 1,8 TPa, ce qui est bien supérieur aux fibres de carbone commerciales (de l'ordre de 800 GPa). Une étude plus récente réalisée par Wong et al. [8] à l'aide d'un microscope à force atomique a permis de mesurer un module de Young moyen d'environ 1,28 TPa, indépendamment du diamètre du tube.

Malgré leur grande rigidité, les nanotubes de carbone se plient au-delà d'une certaine contrainte : l'observation directe en haute résolution au microscope électronique en transmission (MET) met immédiatement en évidence leur extraordinaire flexibilité. Par exemple la courbure semble en effet entièrement réversible jusqu'à un angle critique qui atteint 110° pour un tube mono-feuillet [9].

Les nanotubes exhibent donc des propriétés mécaniques uniques. Leur grande flexibilité associée à un module d'Young élevé leur confèrent un comportement que certains n'hésitent pas à décrire comme étant un comportement super élastique. Au niveau des NEMS (Nano Electromechanical System ou système électromécanique nanométrique) les nanotubes de carbone permettent d'obtenir des systèmes non seulement résistants, donc présentant d'excellentes durées de vie, mais aussi facilement actionnables. Ce sont donc vraiment des candidats idéaux pour ce type de fonctions électromécaniques. Toutefois, cela nécessite que trois types de contraintes soient remplis :

- Prédire le comportement d'un nanotube en fonction de ces paramètres géométriques afin de concevoir le composant idéal pour telles ou telles applications.
- Sélectionner les nanotubes en fonction de leur diamètre et de leur longueur pour l'application requise.
- Positionner de manière précise ces nanotubes dans le système en question.

III.2.3 Les propriétés électriques des nanotubes de carbone

Tout comme les propriétés mécaniques, les nanotubes de carbone possèdent des propriétés électriques très intéressantes pour des applications électroniques.

En premier lieu, il faut différencier les propriétés électriques que possèdent les nanotubes en fonction de leur type. En effet, en fonction de l'enroulement du nanotube mono-feuillet (de son vecteur de chiralité) ce nanotube sera métallique ou semi-conducteur.

Toutefois il est à noter que les nanotubes possédant plusieurs parois auront beaucoup plus de probabilité d'avoir un comportement métallique. En effet, il a été démontré [10] que la bande de valence d'un nanotube de carbone suivait une relation inversement proportionnelle à son diamètre (une bande de valence nulle entraînant un comportement au niveau du nanotube de carbone de type métallique). Des mesures réalisées sous champ magnétique ont été réalisées par M. Sagnès et al. afin d'estimer le comportement de nanotubes multi feuillets [11]. De ces expériences, a été déduit qu'il existe 75 % de probabilité d'avoir un nanotube de carbone multi-feuillet métallique.

En ce qui concerne les nanotubes mono-feuillet, une règle sur le vecteur chiral a été établie afin de savoir quelles sont les propriétés électriques du nanotube de carbone correspondant. Cette règle estime que si le couple (m, n) satisfait une relation telle que si $n-m$ est un multiple de 3 (0 compris) le nanotube aura un caractère métallique [12]. On estime donc qu'un tiers des nanotubes mono-feuillet produits sont métalliques. Les nanotubes armchair seront donc métalliques au vu de leur bande de valence. Les autres nanotubes, zig-zag et chiraux, seront eux soit semi conducteurs, soit métalliques en fonction de la relation donnée plus haut. Toutefois dans le cas où $n \neq m$ avec $n-m$ multiple de 3, les nanotubes auront une bande de valence plutôt réduite par rapport à celle des nanotubes armchair, ils ont alors un caractère dénommé semi métallique (figure III.3).

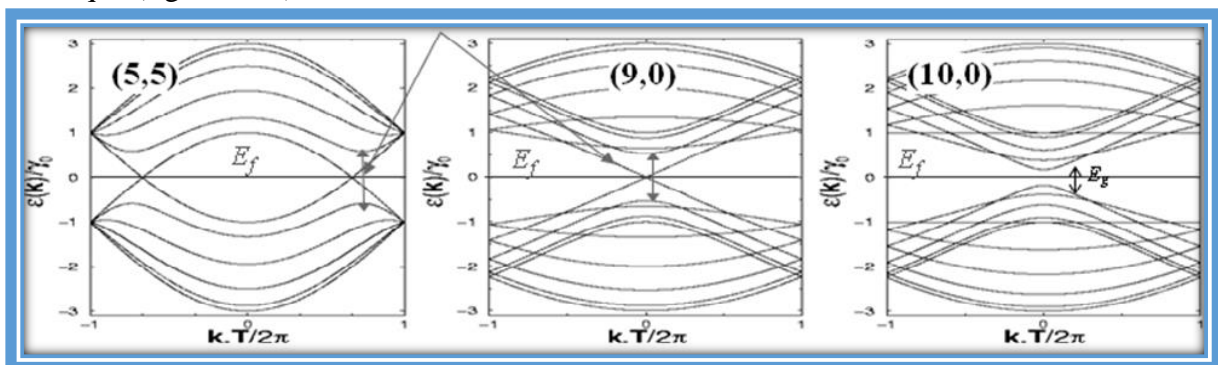


Figure III.3:Exemple de bande de valence pour deux types de nanotubes, de la gauche vers la droite : Armchair (toujours métallique), zigzag (9 est un multiple de 3 donc à caractère métallique) et zigzag (non multiple de 3 donc à caractère semi conducteurs) [12].

Une caractéristique de la densité de courant maximale des nanotubes métalliques, celle-ci a été estimée puis mesurée à plus de 1000 fois celle du cuivre, elle est en effet de l'ordre de 10^9 A. cm^{-2} pour les SWNTCs ; ce qui est mille fois plus élevé que pour les métaux usuels (10^6 A. cm^{-2}) [12].

Concernant les nanotubes mono-feuillet semi-conducteurs une performance en rupture correspond à la mobilité électronique. En effet, ces derniers peuvent être vus comme des fils unidimensionnels et en leur sein les électrons confinés se propagent sans dispersion ce qui leur confère ce qu'on appelle une mobilité balistique. Cette qualité confère aux nanotubes semi-conducteurs une place importante dans le monde de l'électronique, notamment dans la réalisation de transistor à grande fréquence de fonctionnement.

Toutefois les nanotubes possèdent une contrainte assez lourde : leur résistance de contact. En effet, cette résistance dépend de la bande de valence du nanotube et peut être calculée par la relation suivante [13].

$$R = \left(\frac{h}{4e^2}\right) \frac{1}{\lambda} \quad (\text{III.4})$$

Dans cette relation le premier terme ($h/4e^2$) représente la résistance quantique des nanotubes (6.5 kΩ) et λ le parcours libre moyen (mean free path), qui correspond à la distance de parcours balistique des électrons qui varie selon la longueur et le diamètre des nanotubes.

On obtient donc des valeurs de résistances de contact allant de 6 à 100 kΩ [13], ce qui est un problème majeur dans l'intégration de système pour lesquels les pertes (dont celles par les résistances) sont critiques. Une solution que nous allons utiliser afin de palier à ce problème majeur est l'utilisation de réseau de nanotubes. Un réseau de nanotubes permettra alors de connecter des nanotubes en parallèle et donc d'obtenir une résistance de contact équivalente à celle d'un nanotube divisée par le nombre de SWNTC.

Par exemple si l'on arrive à placer sur une même ligne un million de nanotubes, un calcul simple nous permet de trouver une résistance de contact équivalente à 0.1Ω dans le pire des cas (c'est-à-dire 100 kΩ par SWNTC). Dans ce cas, les nanotubes deviennent de très bons candidats pour des applications hyperfréquences où l'on veut que les pertes, notamment ohmiques, soient les plus faibles possibles

III.2.4 Les propriétés thermiques des nanotubes de carbone

Le diamant (à base de carbone) présente la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux connus à ce jour (environ $10^3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ à 300 K). Un plan de graphène possède une conductivité comparable. La structure particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être importante le long de l'axe du nanotube.

La mesure des propriétés thermiques d'un nano-objet comme le nanotube est délicate. Cependant, quelques études expérimentales ont permis de mesurer la conductivité thermique de nanotubes multi-feuillets. Leur conductivité est grande (de 600 à 2000 $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) [15], mais significativement plus faible que celle du graphite. Ces résultats sont a priori décevants, mais ils peuvent s'expliquer en considérant le fait que, bien que tous les feuillets puissent participer à la conduction thermique, seul le feuillet externe a été utilisé pour les mesures. Ces considérations

permettent donc d'estimer la conduction d'un tube mono-feuillet au même ordre de grandeur que celle du graphite. Enfin le tableau III.1 résume les différentes caractéristiques des SWNTC [14] :

Tableau III.1: Synthèse de quelques caractéristiques des NTC [14].

Paramètre	Valeurs et unités	Observations
Longueur du vecteur unitaire	2.49 Å	1.44 Å est la longueur de la liaison du carbone
Densité de courant	$>10^9$ A/cm ²	-1000 fois plus grand que celle du cuivre - Mesuré dans les MWNTCs
Conductivité thermique	6600 W/mK	Plus conducteur que la plupart des cristaux
Module d'Young	1 Tpa	Bien plus grand que celui de l'acier
Mobilité	10000-50000 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹	Simulations indiquent des mobilités supérieures à 100 000 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹
Libre parcours moyen (transport balistique)	300-700 nm semi-conducteur NTC 1000-3000 nm métallique NTC	- Mesuré à température ambiante - Au moins trois fois plus grand que la plupart des semi-conducteurs
Conductivité des NTC métalliques	10^9 A.cm ⁻²	-Mille fois le cuivre

III.3 État de l'art des nanosystèmes à base de nanotubes

La caractéristique principale des SWNTC, qui est à l'origine de leur appellation, est leur dimension : leur longueur peut atteindre plusieurs microns alors que leur diamètre est de l'ordre du nanomètre. La deuxième caractéristique des nanotubes est la nouvelle structure du carbone comparativement à celle déjà bien connue du graphite et du diamant, cette structure présente des liens étroits avec celle du graphite. De cette filiation structurale, découlent directement les propriétés des nanotubes. Nous allons présenter maintenant, de manière brève, l'ensemble de ces propriétés et les applications, réelles ou potentielles, qui y sont associées.

Les nanotubes possèdent des propriétés chimiques, électriques, mécaniques, thermiques et optiques exceptionnelles et très attirantes pour diverses applications. En effet, on peut fonctionnaliser les nanotubes de carbone pour réaliser des capteurs chimiques. Ces capteurs peuvent être réalisés en déposant des nanotubes fonctionnalisés sur un quartz qui possède une certaine fréquence de résonance. Il est alors possible de détecter la quantité de molécules qui adhèrent aux nanotubes par la mesure de la variation de la fréquence de résonance du système. Il existe aussi des capteurs comportant une fibre optique en silice avec à son extrémité des nanotubes de carbone fonctionnalisés. Lorsque des molécules viennent se poser sur les nanotubes, elles modifient l'indice de réfraction et par conséquent la quantité de lumière réfléchi [15]. Des capteurs de détection de gaz par ionisation ont été aussi développés [16].

Tous ces capteurs ont été testés expérimentalement, les mesures obtenues ont permis de valider leurs fonctionnements mais des efforts restent à faire pour les optimiser.

Les nanotubes peuvent assurer un transport quasi-balistique des électrons, un nanotube métallique de 1-3 nm de diamètre peut acheminer un courant qui peut aller jusqu'à une dizaine de μA ce qui se traduit par une densité de courant de l'ordre de 10^9 A/cm^2 . Les SWNTC se présentent comme de très bons candidats pour la réalisation des interconnexions [17], des transistors [18], des mélangeurs [19] et des diodes. Dans les transistors à effet de champ, le nanotube semiconducteur est utilisé comme zone active.

Dans le domaine de l'optoélectronique, un nanotube de carbone placé dans une géométrie de transistor a permis la réalisation d'un émetteur infrarouge par recombinaison de paire électron-trou, la longueur d'onde émise est dépendante du diamètre du nanotube et la position du point d'émission en fonction du potentiel de grille [20]. A l'inverse, des nanotubes fonctionnalisés avec du platine sont utilisés comme surface active dans une photodiode. L'exposition des SWNTC à la lumière produit un photo-courant dû à la génération d'une paire électron-trou séparée ensuite par un champ électrique. La génération de paires électrons-trous est plus forte au niveau des contacts entre les électrodes et le film de nanotubes [21].

Les SWNTC ont aussi été utilisés pour remplacer les filaments de tungstène dans les lampes à incandescence. Cela présente plusieurs avantages, comme une meilleure stabilité thermique, un faible seuil d'émission, une meilleure efficacité lumineuse et une durée de vie plus longue.

Des expériences ont été menées pour explorer le comportement des nanotubes en tant qu'antenne THz [22]. Un réflecteur parabolique des rayons infrarouge (20-25 μm), composé d'un réseau de nanotubes verticaux de 5 μm de long a été réalisé. Le réflecteur a permis de réfléchir une polarisation définie de la lumière incidente sans pertes ni dispersion [23].

L'étude des capacités des nanotubes de carbone à absorber les ondes électromagnétiques a été démontrée en les intégrant dans des lignes coplanaires. En effet un guide d'onde coplaire dans la bande de 0.01 à 50 GHz assemblé à un réseau de $\approx 10^3$ SWNTC alignés et orientés parallèlement au champ électrique possède un facteur de perte plus élevé qu'un CPW (coplanar waveguide) nu, l'atténuation dépend aussi de la fréquence. En moyenne, un nanotube contribue à 0.01% des pertes supplémentaires [24]. Des nanotubes ont été insérés dans le substrat d'un guide d'onde coplaire. L'atténuation dans le guide rempli de SWNTC est un ordre de grandeur supérieur à celle mesurée pour un guide vide [25]. La conductivité des nanotubes de carbone favorise l'absorption de puissance à l'intérieur des matériaux, sa valeur typique pour la réalisation d'absorbants est de 1 S/m [26].

Les nanotubes de carbone sont aussi de bons émetteurs d'électrons par effet de champ électrique, ils sont capables d'émettre des électrons par effet tunnel par leur pointe lorsqu'ils sont placés dans un champ électrique de telle façon que leur axe soit parallèle aux lignes de champ. Leur facteur de forme très élevé couplé à leur stabilité thermique et à leur rigidité mécanique font d'eux des émetteurs extrêmement performants capables de fournir des courants élevés et stables dans le temps. Parmi les types d'applications possibles on peut trouver les amplificateurs micro-ondes [27-28], les écrans plats, et l'éclairage arrière d'écrans plats passifs.

III.4 Modélisation du nanotube de carbone par les éléments finis

La modélisation par éléments finis est une technique d'analyse qui permet de modéliser des structures à géométrie complexe qui ne seraient pas modélisables avec des modèles analytiques. La géométrie est d'abord discrétisée à l'aide d'un maillage qui utilise une succession de nœuds reliés par des lignes pour former des éléments. Ces différents nœuds ont un nombre fini de degrés de liberté, ce qui permet de modéliser le système à l'aide d'un nombre fini d'équations. Le modèle à résoudre prend alors la forme d'un système matriciel qui est résolu numériquement à l'aide d'un solveur.

Afin de développer un modèle d'éléments finis pour un nanotube donné, il est nécessaire que :

- la géométrie du nanotube doit être bien comprise.
- Les coordonnées atomiques sont la base de toute modélisation atomique.
- La liaison entre les atomes devrait être établie par rapport aux observations expérimentales.
- Les liaisons chimiques seront remplacées par un élément structurel approprié.

Dans cette étude, nous allons essayer de modéliser le nanotube de carbone. Tout d'abord, la description de la géométrie de nanotube de carbone sera donnée. Différents types de liaisons existent entre les atomes dans une structure de nanotubes donnée. Par exemple, dans un SWNTC, il y a des liaisons covalentes qui relient deux atomes de carbone voisins. Ces liens doivent être remplacés par des éléments structurels tels que des ressorts, des poutres, des coques et des plaques. Dans cette étude, une description géométrique plus détaillée sera présentée pour le nanotube de carbone. Le type de liaison entre les atomes dans le nanotube devrait être étudié avec soin. Les caractéristiques de liaison jouent également un rôle important sur le reste des résultats de modélisation et de simulation. La précision du modèle dépend principalement de la compréhension de la structure des nanotubes et des interactions interatomiques des atomes. Plus tard, la modélisation de nanotube de carbone est également considérée.

III.4.1 Vue d'ensemble du logiciel ANSYS

ANSYS est un logiciel de modélisation par éléments finis à usage général permettant de résoudre numériquement une grande variété de problèmes mécaniques. Ces problèmes comprennent l'analyse statique / dynamique, structurelle (linéaire et non linéaire), le transfert de

chaleur et les problèmes de fluides, ainsi que les problèmes acoustiques et électromagnétiques.

En général, une solution à éléments finis peut être divisée en trois étapes (figure III.4) :

a) **Prétraitement (Preprocessor)**: (définition du problème). Les étapes majeures du prétraitement sont :

- (i) définir des coordonnées / lignes / zones / volumes.
- (ii) définir le type d'élément et les propriétés matérielles / géométriques.
- (iii) lignes / surfaces / volumes de maillage selon les besoins.

La quantité de détails requise dépendra de la dimensionnalité de l'analyse, c'est-à-dire 1D, 2D, axisymétrique et 3D.

b) **Solution**: assigner des charges, des contraintes, et résoudre, ici, il est nécessaire de spécifier les charges (point ou pression), les contraintes (translationnelle et rotationnelle), et après résoudre l'ensemble des équations qui en résulte.

c) **Post-traitement (Postprocessor)**: (traitement ultérieur et visualisation des résultats) : Dans cette étape, on peut avoir :

- (i) des listes de déplacements nodaux.
- (ii) des forces et des moments d'éléments.

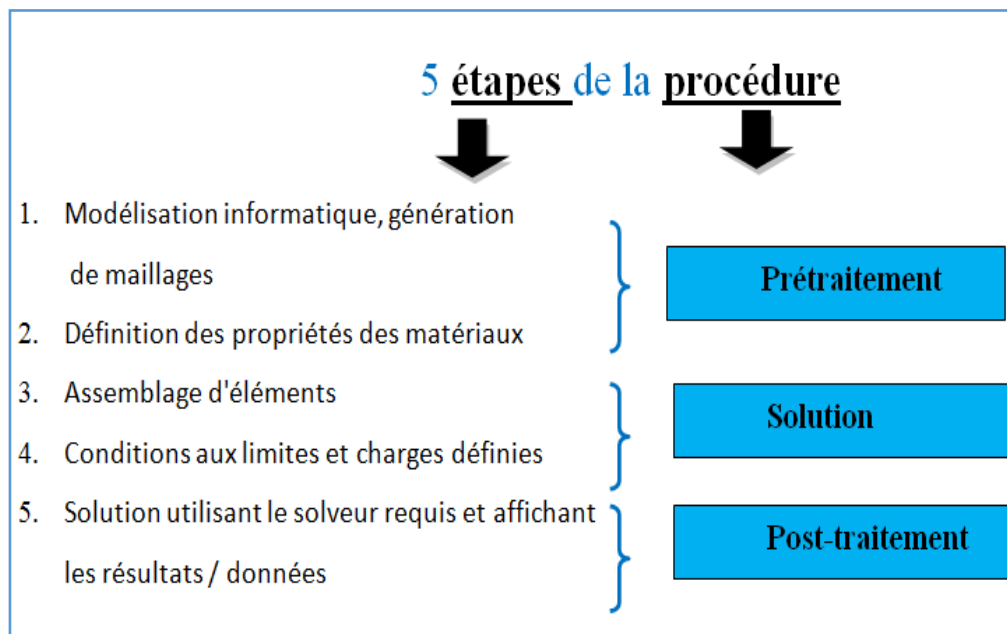


Figure III.4: Les étapes impliquées pour FEM dans ANSYS

Afin de créer un modèle atomique de ce nanotube dans ANSYS, nous devons suivre les étapes détaillées dans les sections suivantes.

III.4.2 Spécification des unités

Tout d'abord, nous activons le bouton [A] SI (MKS) pour informer le programme ANSYS que ce système d'unités est proposé pour être utilisé dans l'analyse. Tout système d'unités peut

être utilisé tant qu'il est garanti que les unités sont cohérentes pour toutes les données d'entrée. Les unités ne peuvent pas être définies directement à partir de l'interface graphique.

Afin de définir les unités comme système international d'unités (SI) depuis le menu principal d'ANSYS (figure III.5), sélectionnez : **Preprocessor** → **Material Props** → **Material Library** → **Select Units**.



Figure III.5: Sélection du système d'unité approprié dans ANSYS

Avant d'introduire dans les données d'entrée des propriétés des éléments BEAM 188, les dimensions et les paramètres de nanotube doivent être ajustées comme suite (Tableau III.2) :

Tableau III.2: Paramètres de nanotube ajusté

$L_{an} = 10^{10}L$	$F_{an} = 10^{20}F$	$M_{an} = 10^{26}M$	$E_{an} = E$	$G_{an} = G$	$K_{s,an} = 10^{10}K_s$	$f_{an} = 10^{-8}f$	$P_{cr,an} = 10^{20}P_{cr}$
---------------------	---------------------	---------------------	--------------	--------------	-------------------------	---------------------	-----------------------------

Où les dimensions originales de la longueur L, de la force F et de la masse M sont respectivement m, N et kg et que l'indice «an» indique les valeurs associées dans ANSYS. E, G, K_s, f et P_{cr} , désignent respectivement le module de Young, le module de cisaillement, la raideur de l'élément élastique, la fréquence propre et la charge de flambement.

III.4.3 Définition des types d'éléments et des constantes réelles

Dans cette étude, pour utiliser la procédure des éléments finis, l'énergie potentielle est utilisée pour évaluer la rigidité linéaire du nanotube. Compte tenu de petites déformations et en négligeant les interactions électrostatiques, l'énergie de déformation totale du système est donnée par l'équation suivante [29] :

$$E_{total} = \sum E_S + \sum E_B + \sum E_T \tag{III.5}$$

Où E_S est l'énergie d'étirement de la liaison, E_B est l'énergie de flexion de l'angle de liaison et E_T est l'énergie de torsion de la liaison qui sont exprimées comme suit :

$$E_S = \frac{1}{2}K_R(R - R_0)^2 \tag{III.6}$$

$$E_B = \frac{1}{2}K_\theta(\theta - \theta_0)^2 \tag{III.7}$$

$$E_T = \frac{1}{2} K_\varphi (\varphi - \varphi_0)^2 \tag{III.8}$$

Où K_R , K_θ et K_φ désignent l'étirement de liaison, la flexion d'angle de liaison et les rigidités de torsion respectivement alors que $(R - R_0)$, $(\theta - \theta_0)$ et $(\varphi - \varphi_0)$ représentent les écarts par rapport à leurs conditions d'équilibre.

Selon la théorie de la mécanique structurale classique, l'énergie de déformation élastique d'une poutre uniforme de longueur L est donnée :

$$E_S = \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \tag{III.9}$$

Où A ressemble à la section transversale de la poutre, L indique la longueur de la poutre, Δl est le changement de longueur et E est le module d'élasticité de la poutre.

Les déformations E_B et E_T dues à la charge de flexion et à la charge de torsion pure peuvent être données :

$$E_B = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \tag{III.10}$$

$$E_T = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\Omega)^2 \tag{III.11}$$

Où I est le moment d'inertie, α représente l'angle de flexion relatif des extrémités de la poutre, $\Delta\Omega$ est l'angle de rotation relatif des deux extrémités, G représente le module de cisaillement et J est le moment polaire d'inertie.

Considérant que l'énergie potentielle dans les deux approches est indépendante, l'équivalence énergétique de l'énergie stockée de la mécanique moléculaire et de la mécanique structurale révèle [30] :

$$K_R = \frac{EA}{L}, K_\theta = \frac{EI}{L}, K_\varphi = \frac{GJ}{L} \tag{III.12}$$

Les propriétés élastiques de l'élément de poutre sont indiquées par l'équation suivante:

$$d = \sqrt{\frac{K_\theta}{K_R}}, E = \frac{K_R^2 L}{4\pi K_\theta}, G = \frac{K_R^2 K_\varphi L}{8\pi K_\theta^2} \tag{III.13}$$

Où d , L , E et G représentent respectivement : le diamètre, la longueur, le module d'élasticité et le module de cisaillement de l'élément de poutre. Les propriétés de l'élément de poutre sont calculées en utilisant les valeurs des constantes données dans le tableau III.3 en utilisant l'équation III.13.

Tableau III.3: Propriétés de l'élément de poutre [30]

K_R	$6.52 \times 10^{-7} \text{ N/nm}$
k_θ	$8.76 \times 10^{-10} \text{ N nm/rad}^2$
K_φ	$2.78 \times 10^{-10} \text{ N nm/rad}^2$

L'élément élastique « BEAM188 » en 3D de la bibliothèque de simulateur ANSYS est utilisé, les atomes sont représentés sous forme de nœuds. La structure de nanotube de carbone peut être simulée comme une structure d'un cadre spatial (space-frame) figure III.6.

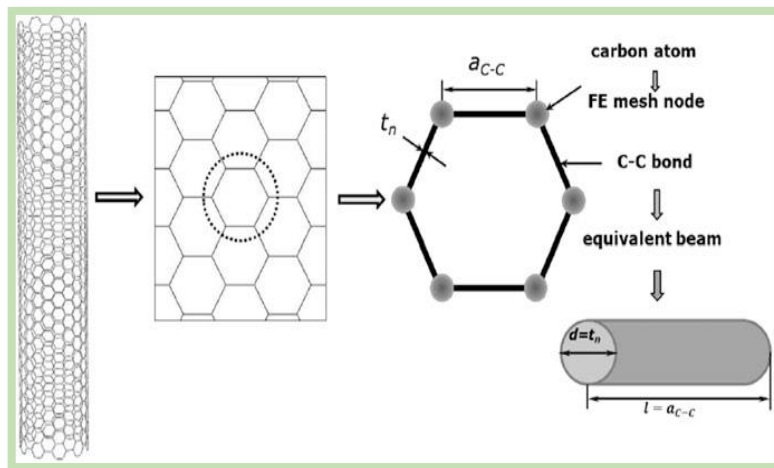


Figure III.6: SWNTC simulée comme une structure d'un cadre

La bibliothèque du simulateur ANSYS contient plus de 200 différents types d'éléments. Chaque type d'élément a un numéro unique et un préfixe qui identifie la catégorie d'élément par exemple : BEAM 188, BEAM118, PLANE77, SOLID96, etc. (Tableau III. 4).

Le type d'élément détermine:

- L'ensemble des degrés de liberté (qui à son tour implique la discipline - structurelle, thermique, magnétique, électrique, quadrilatère, brique, etc.).
- Si l'élément se trouve dans l'espace à deux dimensions ou en trois dimensions.

Tableau III.4: Quelques types d'éléments disponibles dans ANSYS

Catégorie	Nom d'élément (s)
Spars	LINK1, LINK8, LINK10, LINK180
Beams	BEAM3, BEAM4, BEAM23, BEAM24, BEAM44, BEAM54, BEAMI88, BEAMI89
Pipes	PIPE16, PIPE17, PIPE18, PIPE20, PIPE59, PIPE60
2-D Solids	PLANE2, PLANE25, PLANE42, HYPER56, HYPER74, PLANE82, PLANE83, HYPER84, VISC088, VISCO106, VISCO108, PLANE145, PLANE146, PLANE182, PLANE183
3-D Solids	SOLID45, SOLID46, HYPERS8, SOLID64, SOLID65, HYPER86, VISC089, SOLID92, SOLID95, VISCO107, SOLID147, SOUD148, HYPER158, SOLID185, SOLID186, SOLID187, SOLID191
Shells	SHELL28, SHELL41, SHELL43, SHELL51, SHELL61, SHELL63, SHELL91, SHELL93, SHELL99, SHELL150, SHELL181
Interface	INTER192, INTER193, INTER194, INTER195
Contact	CONTAC12, CONTAC52, TARGE169, TARGE170, CONTA171, CONTA172, CONTA173, CONTA174, CONTA175
Coupled-field	SOLID5, PLANE13, FLUID29, FLUID30, FLUID38, SOLID62, FLUID79, FLUID80, FLUID81, SOLID98, FLUID129, INFIN110, INFIN111, FLUID116, FLUID130
Specialty	COMBIN7, LINK11, COMBIN14, MASS21, MATRIX27, COMBIN37, COMBIN39, COMBIN40, MATRIX50, SURF153, SURF154
Explicit dynamics	LINK160, BEAM161, PLANE162, SHELL163, SOLID164, COMBI165, MASS166, LINK167, SOLID168

Pour définir les types d'éléments, on devrait être dans **PREP7**, depuis le menu principal d'ANSYS sélectionnez : **Preprocessor** → **Element Type** → **Add/Edit/Delete**. En réponse, une

fenêtre contextuelle illustrée à la figure III.7 apparaît. Cliquez sur le bouton [A] « Ajouter » et un nouvel élément, illustré à la figure III.8, apparaît. Sélectionnez un type d'élément approprié pour l'analyse effectuée, par exemple [B] **Beam188** comme indiqué sur la figure III.8. Ensuite, sélectionnez **OK** puis **Options** pour modifier les paramètres des éléments (figure III.9).

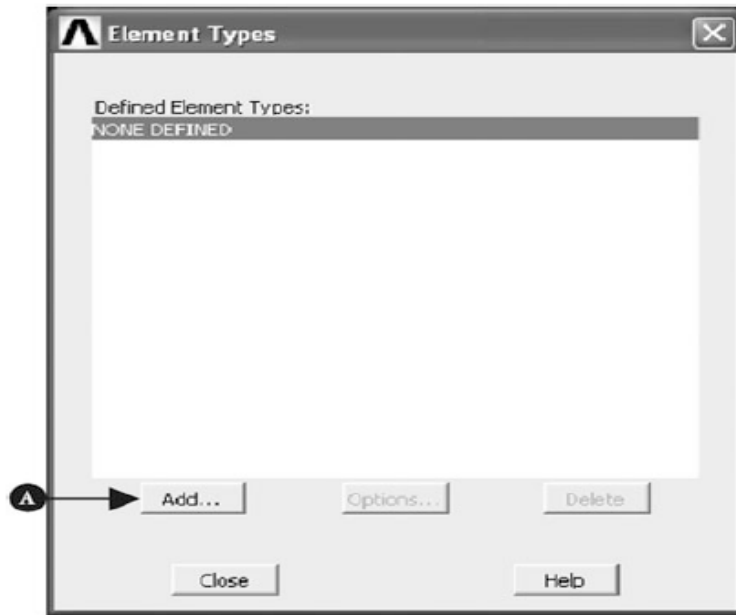


Figure III.7: L'addition de type d'élément de bibliothèque ANSYS

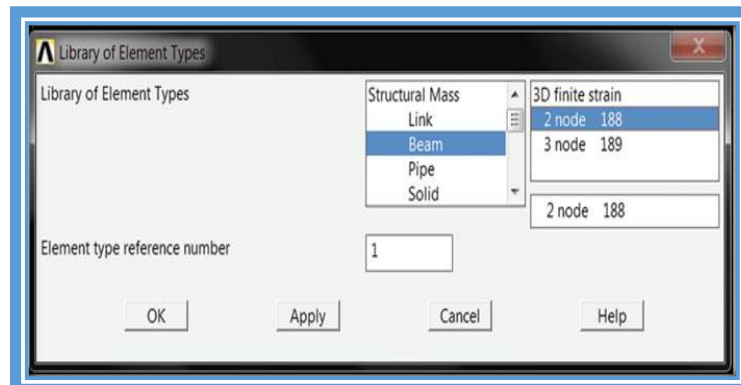


Figure III.8: Sélection de l'élément BEAM 188.

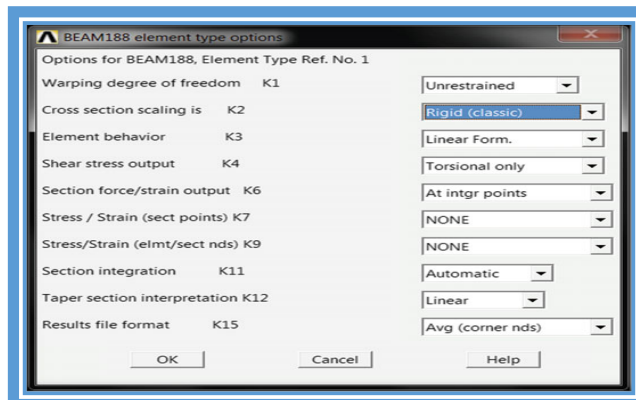


Figure III.9: Paramètres du type d'élément BEAM188

Les données d'entrée pour BEAM188 (figure III.10) sont résumées dans le tableau III. 5.

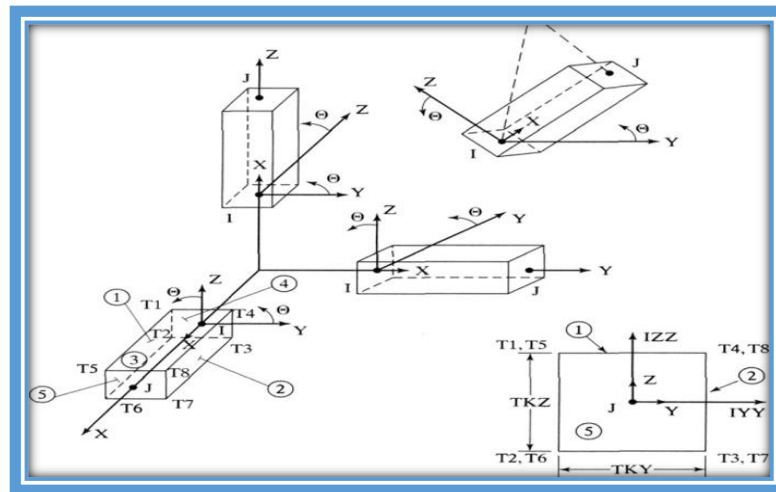


Figure III.10: L'élément BEAM188.

Tableau III.5: Les données d'entrée pour BEAM188

Nœuds	I, J, K (le nœud d'orientation)
Degrés de liberté	UX, UY, UZ (déplacements dans les directions X, Y et Z) ROTX (rotation autour de l'axe X), ROTY (rotation autour de l'axe Y), ROTZ (rotation autour de l'axe Z)
Constantes réelles (Real Constants)	SURFACE, Izz, Iyy, TKZ, TKY, THETA _x , ISTRN (contrainte initiale dans l'élément), Ixx
Propriétés matérielles	EX (module d'élasticité), ALPX (coefficient de Poisson), DENS (densité), GXY (module de cisaillement), DAMP (amortissement)
Charges de surface	Pressions face 1 (I-J) (-Z direction normale) face 2 (I-J) (-Y direction normale) face 3 (I-J) (+ direction tangentielle X) face 4 (I) (direction axiale + X) face 5 (J) (-X direction axiale) (utiliser une valeur négative pour le chargement opposé)
Températures	T1, T2, T3, T4, T5, T6, T7, T8

III.4.4 Définir les propriétés du matériel

La plupart des types d'éléments requiert des propriétés de matériau. Selon l'application, les propriétés du matériau peuvent être :

- Linéaire ou non linéaire
- Isotrope, orthotrope ou anisotrope
- Température constante ou dépendante de la température

Pour le SWNTC, les paramètres d'entrée utilisés sont représentés sur la figure III.11 et la figure III.12 avec EX représente le module de Young et PRXY est le rapport de Poisson selon l'axe x-y.

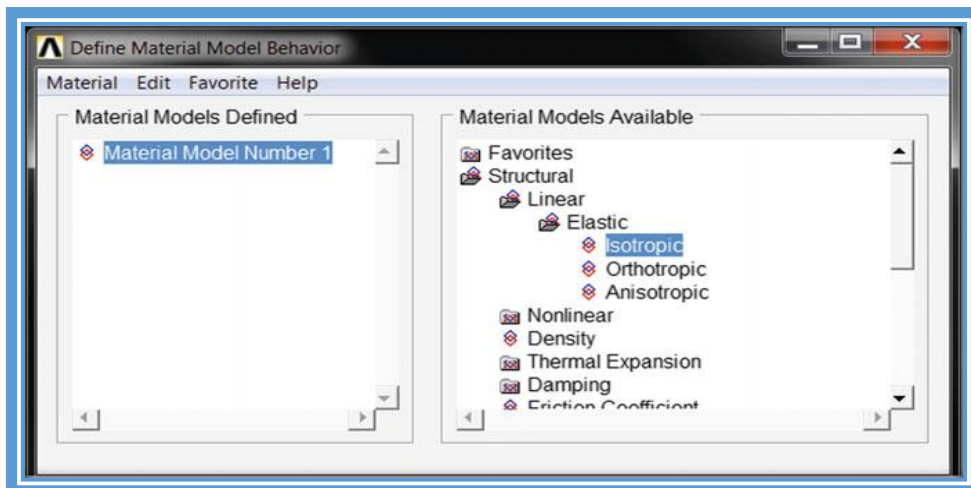


Figure III.11: Sélection du modèle du matériau.

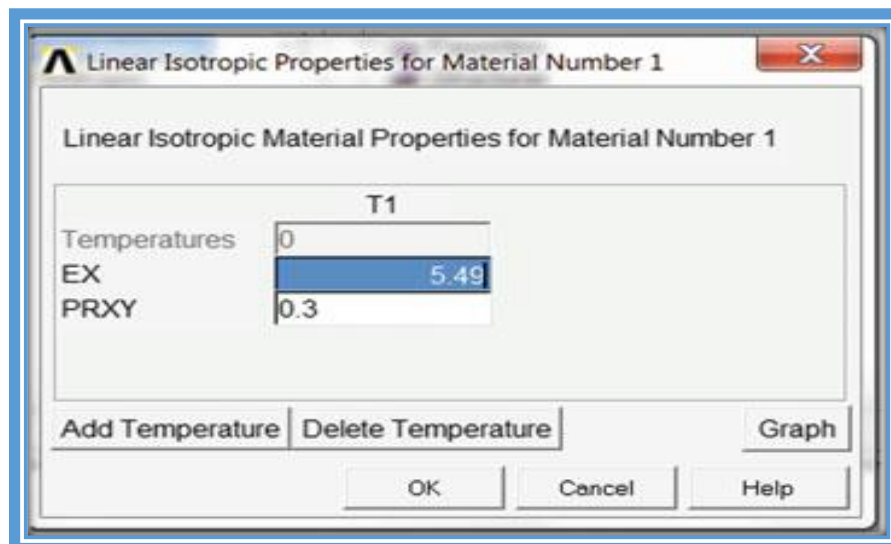


Figure III.12: les paramètres d'entrées de NTC.

III.4.5 Définition de la section transversale de l'élément

Les constantes réelles d'élément (**Element real constant**) sont des propriétés qui dépendent de type d'élément utilisé, telles que les propriétés transversales d'un élément de poutre, qui sont censées être définies en utilisant ce format: **Main Menu > Preprocessor > Sections > Beam > Common Sections**. La section transversale des éléments de poutre selon le modèle structural simplifié de la liaison carbone-carbone est indiquée à la figure III.13.

Ensuite, la section de l'élément est représentée: **Main Menu > Preprocessor > Sections > Beam > Plot Section**

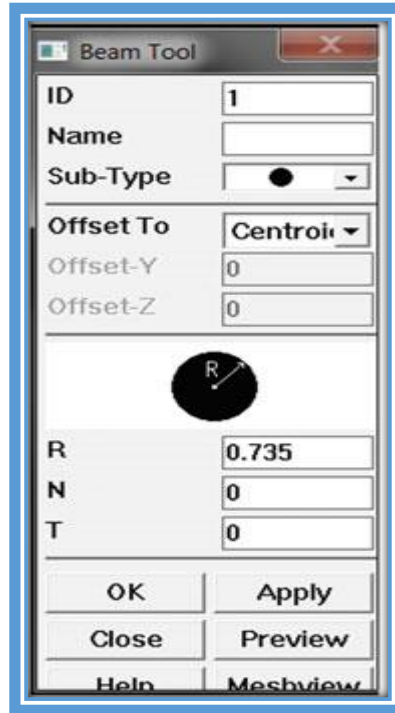


Figure III.13: Section sélectionnée de la liaison C-C

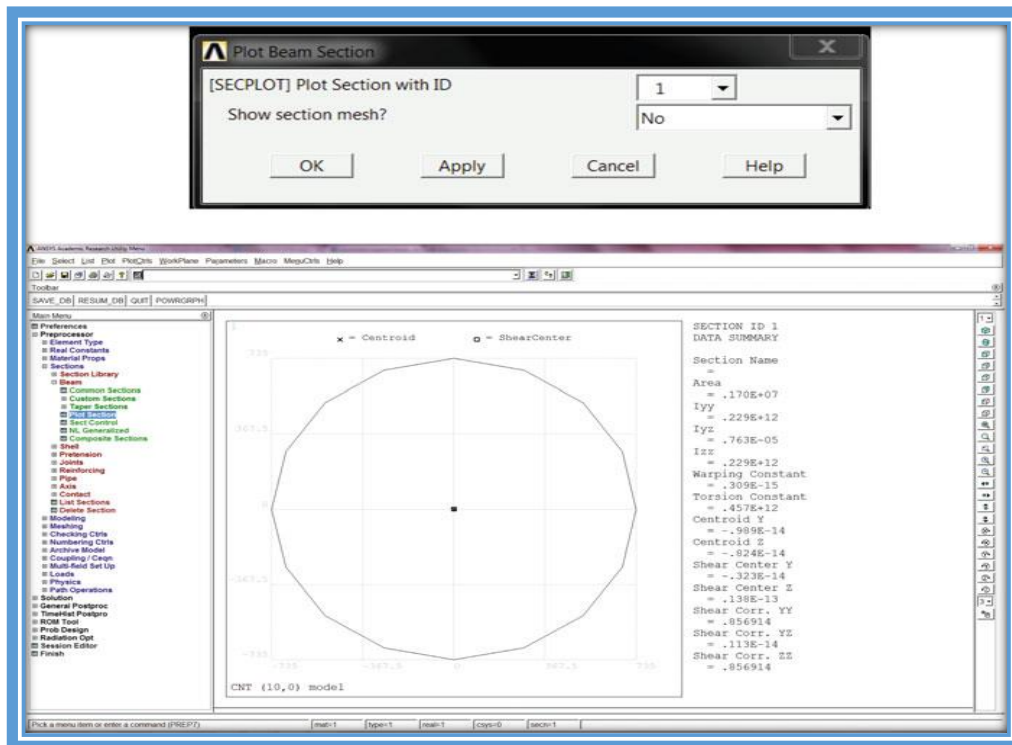


Figure III.14: Coupe de la section transversale de la liaison C-C.

III.4.6 Création d'un modèle de nanotube de carbone

Pour créer le modèle géométrique de SWNTC, nous devons générer les coordonnées atomiques du nanotube, puis insérer les coordonnées dans le programme ANSYS. Nous avons

utilisé un logiciel approprié tel que « **nanotube modeler** » pour créer les coordonnées (x, y, z) et ces coordonnées seront transférées à ANSYS (figure III.15 et figure III.16).

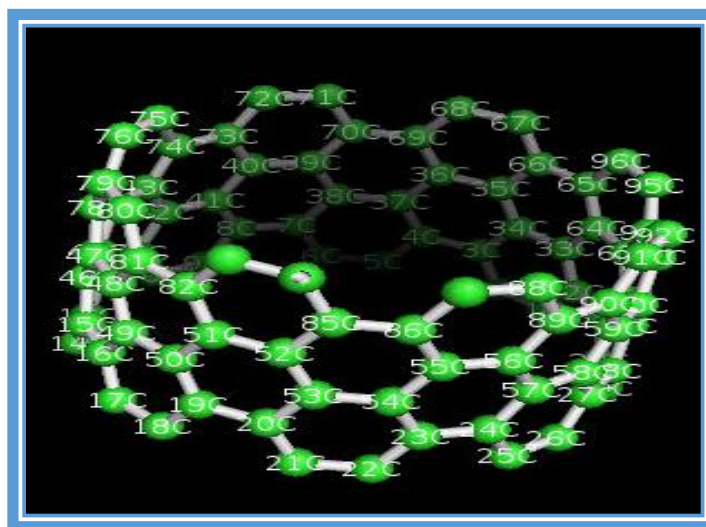


Figure III.15: Modèle de SWNTC (7,7) développé avec Nanotube Modeler.

Le modèle SWNTC développé dans le **Nanotube Modeler** est exporté en tant que fichier type PDB « **protein Data Bank** » et les coordonnées sont affichées comme un texte de bloc note (figure III.16)

ATOM	1	C	5.424	0.000	0.000	1.00	0.00
ATOM	2	C	5.239	1.404	0.000	1.00	0.00
ATOM	3	C	5.011	2.076	1.230	1.00	0.00
ATOM	4	C	4.303	3.302	1.230	1.00	0.00
ATOM	5	C	3.835	3.835	-0.000	1.00	0.00
ATOM	6	C	2.712	4.697	-0.000	1.00	0.00
ATOM	7	C	2.076	5.011	1.230	1.00	0.00
ATOM	8	C	0.708	5.378	1.230	1.00	0.00
ATOM	9	C	0.000	5.424	-0.000	1.00	0.00
ATOM	10	C	-1.404	5.239	-0.000	1.00	0.00
.
ATOM	89	C	-0.000	-5.424	4.919	1.00	0.00
ATOM	90	C	1.404	-5.239	4.919	1.00	0.00
ATOM	91	C	2.076	-5.011	6.149	1.00	0.00
ATOM	92	C	3.302	-4.303	6.149	1.00	0.00
ATOM	93	C	3.835	-3.835	4.919	1.00	0.00
ATOM	94	C	4.697	-2.712	4.919	1.00	0.00
ATOM	95	C	5.011	-2.076	6.149	1.00	0.00
ATOM	96	C	5.378	-0.708	6.149	1.00	0.00

Figure III.16: Fichier PDB représente les coordonnées x, y, z des atomes de nanotube de carbone (7,7)

III.4.7 Maillage du nanotube généré

Le maillage utilisé pour une simulation est essentiel pour déterminer la précision de la sortie car un trop grand nombre d'éléments peut conduire à un temps de calcul plus long et un nombre trop faible peut conduire à un résultat inexact.

L'instruction de maillage est comme suit : **Main Menu > Preprocessor > Meshing > Size Cntrls > ManualSize > Lines > All**, avec les options indiquées sur la figure III.17.

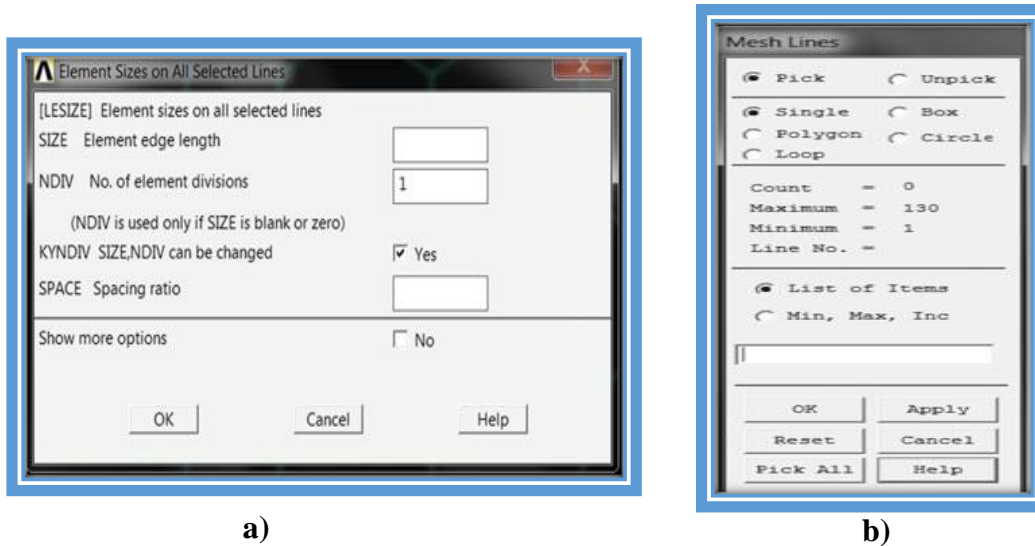


Figure III.17: Maillage du nanotube a) les options de maillage b) Sélection des lignes à mailler.

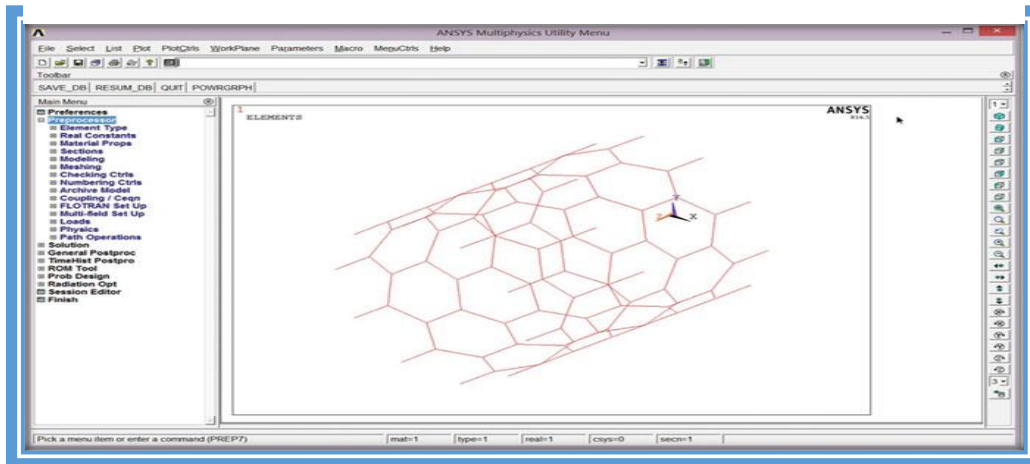


Figure III.18: Créations d'éléments.

III.5 Validation du modèle du nanotube développé

Après avoir généré le modèle géométrique du nanotube de carbone, comme il est représenté dans la figure III.19, nous allons simuler le comportement du nanotube de carbone comme un nano résonateur dans le but de valider notre modèle développé (figure III.20).

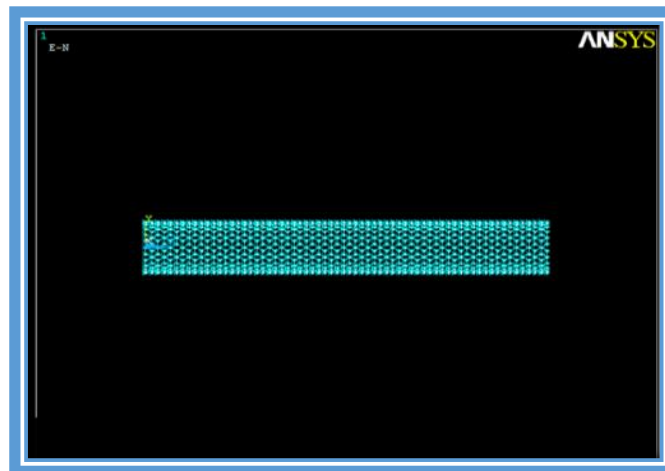


Figure III.19: le modèle du nanotube de carbone développé en utilisant le simulateur ANSYS.

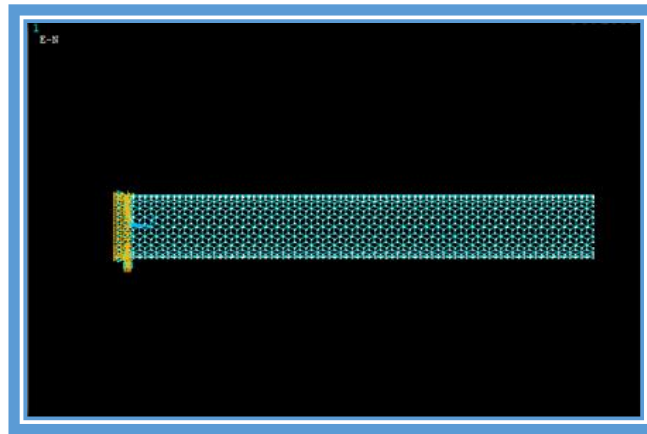


Figure III.20: nano-résonateur à base de modèle du nanotube de carbone développé en utilisant ANSYS.

Pour ce faire à travers ANSYS, nous devons fixer une extrémité du nanotube dans les directions x, y, z. L'extrémité sélectionnée est fixée en limitant tout degré de liberté (**all degree of freedoms DOFs**) par mettre tout déplacement à zéro ($U_x = U_y = U_z = 0$) comme indiqué sur la figure III.21 et la figure III.22.

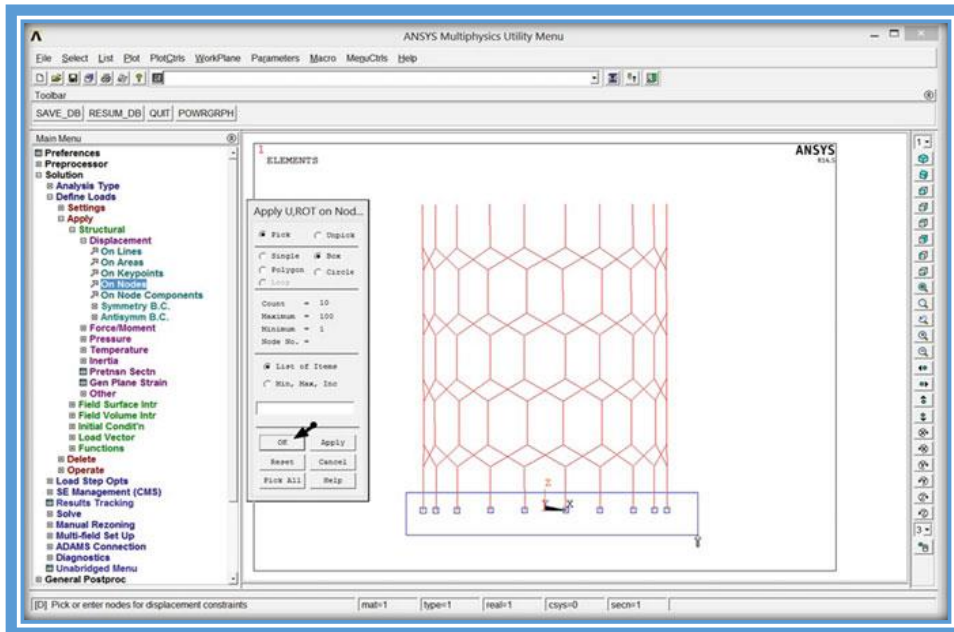


Figure III.21: Sélection des nœuds fixes de SWNTC.

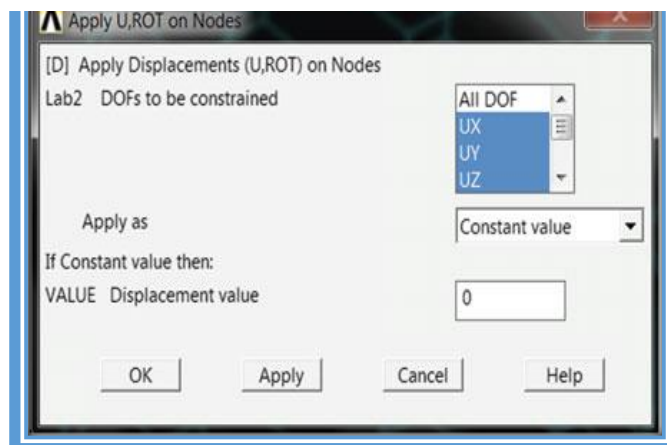


Figure III.22: Contraindre le déplacement des nœuds sélectionnés dans le SWNTC.

Une analyse fréquentielle (modale) a été effectuée pour calculer la fréquence naturelle de trois différentes structures de ce nano résonateur.

Tableau III.6: Fréquences naturelles de SWCNT dans une configuration de cantilever

D(nm)	L(μ m)	E(GPa)	notre simulation (HZ)	Valeur théorique (Hz) [29]	Résultats expérimentaux (HZ) [31]
63	5.75	20.3	1123912	1131638	968000
49	4.65	28.6	1602300	1665502	1420000
32	5.55	28.4	787200	778420	658000

Les résultats de la simulation sont comparés aux résultats théoriques [29] ainsi qu'aux données expérimentales correspondantes [31]. On constate d'après le tableau III.6 que les résultats théoriques, comparés à notre simulation basée sur les éléments finis et les résultats expérimentaux, sont tous en bon accord. D est le diamètre du SWNTC, L est la longueur du SWCNT et E est le module de Young du SWCNT.

Pour valider une autre fois notre modèle FEM développé, nous avons pris un exemple de nano résonateur étudié par Der Ho Wu et al [29] qui est représenté dans la figure III.23. Pour cela, nous avons utilisé notre modèle développé comme un capteur résonant, dans une configuration cantilever (encastré-libre) pour la détection d'espèces chimique. La méthode de détection est basée sur la variation de la fréquence de résonance du résonateur, dont le changement dans la masse effective du résonateur induit par la masse ajoutée au bout de nano résonateur entraîne une modification de sa fréquence de résonance.

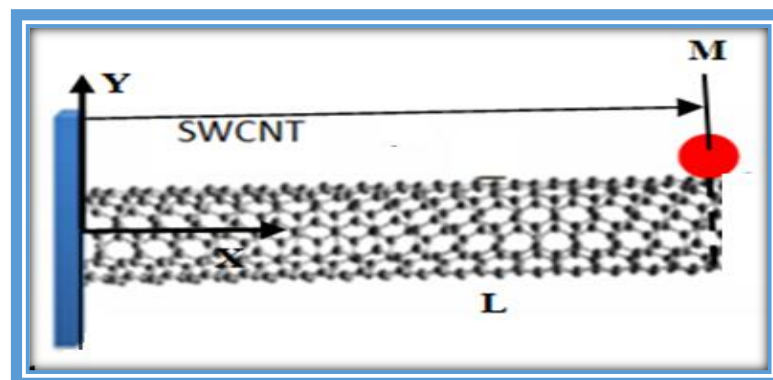


Figure III.23: biocapteur à base de NTC dans une configuration cantilever développée par Der Ho Wu [2]

Nos résultats de simulation numérique sont comparés avec les résultats théoriques et avec l'étude effectuée par Der Ho Wu et al [29].

Tableau III.7: Fréquence de résonance de SWCNT dans une configuration cantilever avec différente masse attachée

masse attachée (fg)	Valeurs théoriques (Hz)	FEM simulation effectuée par Der Ho Wu et al [29]	Notre simulation
20	2017274.93	2025396.28	2011356.73
22	1938830.63	1945438.16	1895438.22
24	1868879.03	1874251.81	1894251.93
26	1805990.60	1810343.33	1830355.35
28	1749051.48	1752552.38	1702144.45
30	1697179.17	1699961.81	1709961.77

On constate d'après le tableau III. 7 que les résultats théoriques, les résultats de la littérature et nos résultats de simulation FEM sont en bon accord.

III.6 Conclusion

Les nanotubes de carbone (SWNTC) sont des macromolécules tubulaires. Ils ont des propriétés physiques et chimiques remarquables dont les applications envisagées sont quasiment illimitées. Les SWNTC ont d'excellentes propriétés mécaniques, les mesures expérimentales et les simulations numériques donnent des valeurs du module de Young très élevés

Dans ce travail, Nous avons utilisé la simulation par éléments finis pour modéliser et caractériser numériquement le nanotube de carbone. Cette simulation est basée sur la méthode d'équivalence d'énergie qui permet d'effectuer un passage de modèle énergétique (mécanique quantique) au modèle de la mécanique de structures. La modélisation a été réalisée en utilisant le logiciel de calcul ANSYS.

Afin de valider le modèle proposé, les résultats obtenus par voie numérique ANSYS sont comparés à celles obtenus par une étude analytique et expérimentale, les résultats de la comparaison montrent une bonne corrélation.

III.7 Références bibliographique

- [1] Jozef Bocko Pavol Lengvarský, “ Buckling of single-walled carbon nanotubes with and without defects”, *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 31, n° 4, pp. 1825–1833, April 2017.
- [2] Zhi Zhu, Ronghua Yang, Mingxu You, Xiaoling Zhang, Yanrong Wu, Weihong Tan, “ Single-walled carbon nanotube as an effective quencher”, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, Vol. 396, n° 1, pp. 73–83, January 2010.
- [3] Lian-Mao Peng, Zhiyong Zhang, Sheng Wang, “Carbon nanotube electronics: recent advances”, *materials today*, Vol. 17, n° 19, Pages 433-442, November 2014.
- [4] S. Negi Vivek, Kumar Bhartiya, S. Chaturvedi, “ Charge calculation studies done on a single walled carbon nanotube using MOPAC”, *Indian Journal of Physics*, Vol. 92, n° 4, pp. 479–485, April 2018.
- [5] Sithara S. Wijeratne, Nolan C. Harris, and Ching-Hwa Kiang, “Helicity Distributions of Single-Walled Carbon Nanotubes and Its Implication on the Growth Mechanism”, *Materials (Basel)*, Vol. 3, n°4, pp. 2725–2734, 2010 Apr.
- [6] X. B. Dai, H. Merlitz, C. X. Wu, “Transverse elasticity of multi-walled carbon nanotubes”, *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, Vol. 54, n° 1, pp. 109–112, November 2006.
- [7] Ye-Wei Zhang, Lin Zhou, Bo Fang, Tian-Zhi Yang, “ Quantum effects on thermal vibration of single-walled carbon nanotubes conveying fluid”, *Acta Mechanica Solida Sinica*, Vol. 30, n° 5, pp. 550–556, October 2017.
- [8] Wong BS, Yoong SL, Jagusiak A, Panczyk T, Ho, HK, Ang WH, Pastorin G. “Carbon Nanotubes for Delivery of Small Molecule Drugs”, *Adv Drug Deliv Rev.*, Vol.65, n° 15, pp. 1964-2015, 2013.
- [9] J.-P. Salvetat, J.-M. Bonard, N.H. Thomson, A.J. Kulik, L. Forró, W. Benoit, L. Zuppiroli, “Mechanical properties of carbon nanotubes”, *Applied Physics A*, Vol. 69, n° 3, pp. 255–260, September 1999.
- [10] Byoung-Kye Kim, Hyo-Suk Kim, Hye-Mi So, Noejung Park, Suklyun Hong, Ju-Jin Kim, Jeong O. Lee, “Designing the Carbon Nanotube Field Effect Transistor Through Contact Barrier Engineering”, *One-Dimensional Nanostructures*, Vol. 3, pp. 217-246, 2008.
- [11] M. Sagnes, B. Raquet, B. Lassagne, J. M. Broto, E. Flahaut, CH. Laurent, Th. Ondarçuhu, F. Carcenac, and Ch. Vieu, “ Probing the electronic properties of individual carbon nanotube in 35T pulsed magnetic field”, *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 372, n° 5–6, pp. 733-7386, May 2003.
- [12] M. Dragoman, D. Dragoman, “Nanoelectronics principles and devices”, Artech house, 2006.
- [13] A. Raychowdury, K. Roy, “A circuit model for SWNTC interconnects: comparative study with Cu interconnects for scaled technology”, *Computer aided design*, pp. 237-240, 2004.
- [14] J. XU, “Nanotube Electronics: Non-CMOS Routes”, *Proceeding of the IEEE*, Vol. 91, n° 11, pp. 181-1829, November 2003.
- [15] M. Penza, G. Cassano, P. Aversa, “Acoustic and Optical VOCs sensors Incorporating Carbon Nanotubes”, *IEEE Sensors Journal*, vol.6, No. 4, August 2006.
- [16] A. Modi et al., “ Miniaturized gas ionization sensors using carbon nanotubes”, *Nature*, Vol. 424, pp. 171-174, 2003.
- [17] P.J. Burke, Z. Yu and C. Rutherglen, “Carbon Nanotubes for RF and Microwaves Gallium Arsenide applications symposium”, in the International conference (GAAS’2005), IEEE, Paris, France, 3-7 octobre 2005, (IEEE, 2005).
- [18] M. Zhang et al., “ Radio-Frequency Transmission Properties of Carbon Nanotubes in a Field-Effect Transistor Configuration”, *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 27, n° 8, pp. 668 - 670, August 2006.
- [19] L. Rabieirad, S. Mohammadi, “ Single-Walled Carbon Nanotube Mixer”, in the International conference (MTT-S’2006), IEEE, San Francisco, CA, USA, pp. 2055-2058, 11-16 June.
- [20] Jia Chen et al., “Bright Infrared Emission from Electrically Induced Excitons in Carbon Nanotubes”, *Science*, Vol. 310, n° 5751, pp. 1171-1174, Nov 2005.
- [21] S. Lu, B. Panchapakesan, “Photoconductivity in single wall carbon nanotube sheets”, *Institute of Physics Publishing*, *Nanotechnology*, Vol.17, pp. 1843-1850, Mar 2006.

- [22] Y.Wang et al., “Receiving and transmitting light radio waves: Antenna effect in arrays of aligned carbon nanotubes”, *Applied Physics Letters*, Vol.85, n° 13, 2004.
- [23] Y.Komijany, H.Sadaghat Pisheh, Y.Abdi, “Design and Fabrication of an Infrared Planar Reflector Using Carbon Nanotubes”, in the international conference on Infrared and Millimeter Waves (Joint’2005), IEEE, Williamsburg, VA, USA, 19-23 Sept, (IEEE, 2005).
- [24] C. Highstrete et al., “Microwave dissipation in arrays of single-wall carbon nanotubes”, *Applied Physics Letters*, Vol. 89, n° 17, pp. 1403–1406, 2006.
- [25] M.Dragoman, K.Grenier, E.Flahaut, “Experimental determination of microwave attenuation and electrical permittivity of double walled carbon nanotubes”, *Applied Physics Letters* 88, Vol.88, n° 15, pp. 153108, 2006.
- [26] A.Saib et al., “Carbon Nanotube Composites for Broadband Microwave Absorbing Materials, *IEEE Trans. On Microwave*”, Theory and Techniques, Vol.54, n°6, pp. 2745 – 2754, 2006.
- [27] P. Legagneux et al., “GHz Modulation of carbon nanotube cathodes for microwave amplifiers”, in the 5th International conference on Nanotechnology, IEEE, Nagoya, Japan, 15-15 July 2005, (IEEE, 2005).
- [28] J.Han et al., “Field Emission Properties of Carbon Nanotube Paste on Cathode with A Curved Surface for Microwave Power Amplifier”, in the 18th International conference on Vacuum Nanoelectronics (IVNC’2005), IEEE, Oxford, UK, 10-14 July 2005, (IEEE, 2005).
- [29] D. H. Wu, W. T. Chien, C. S. Chen, H. H. Chen., “Resonant frequency analysis of fixed-free single-walled carbon nanotube-based mass sensor”, *Sensors and Actuators A*, Vol. 126, n° 1, pp.117–121, 2006.
- [30] C. Li, T.W. Chou, “Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators”, *Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys.*, Vol.68, pp. 734051–734053,2003.
- [31] Z.L. Wang, R.P. Gao, P. Poncharal, W.A. de Heer, Z.R. Dai, Z.W. Pan, “Mechanical and electrostatic properties of carbon nanotubes and nanowires”, *Mater. Sci. Eng.*, Vol.16, pp.3–10, 2001.

***Chapitre IV : Nano capteur de
force intelligent à base de SG-
SOIMOSFET***

Résumé

Cette partie de travail a pour objectif la modélisation et l'analyse du comportement d'un nouveau nano capteur de force intelligent, pour cela on a utilisé le nanotube de carbone comme une grille suspendu d'un transistor SOIMOSFET. la variation de la force appliquée au niveau de nanotube de carbone engendre une variation de la capacité de la grille-oxyde de transistor et par conséquent la variation de la tension de seuil et le courant de drain de transistor.

Nous avons fait appel, dans cette étude, aux réseaux de neurones d'abord pour reproduire fidèlement la nature de la réponse du modèle du nano capteur de force appelé modèle direct. Puis, en second lieu nous avons conçu un modèle inverse appelé capteur intelligent qui permet la linéarisation de la réponse de notre capteur de force développé.

IV.1 Introduction

Ces dernières années, la mesure de force à l'échelle microscopique et nanoscopique est devenue une problématique majeure pour de nombreuses applications et notamment dans des domaines tels que le micro-assemblage, la micromanipulation. Un capteur de force est un dispositif qui allie à la fois l'électronique et la mécanique. Il permet de convertir une force, c'est-à-dire une grandeur physique vectorielle en une grandeur électrique. Tous les capteurs de micro ou nanoforce reposent soit sur la mesure des déplacements d'un solide indéformable (l'élément sensible ES constitué d'une masse sismique rigide), soit plus classiquement, sur la mesure des déformations d'une microstructure élastique (ES constitué d'un corps d'épreuve). Donc, la force inconnue doit être déduite de la connaissance de ces déplacements ou déformations grâce à des capteurs appropriés.

L'importance de la mesure de force à l'échelle microscopique voire nanoscopique a conduit à de nombreux prototypes de capteurs de micro ou de nanoforces. La plupart de ces prototypes ont des éléments sensibles qui sont des microstructures élastiques passives. Ces capteurs diffèrent par le moyen utilisé pour mesurer la déformation de l'élément sensible. Citons à titre d'exemple : les AFM avec photodiode 4 segments (Rougeot et al., 2005 ; Giroto et al., 2006) [1,2] ou interféromètre (Kato et al., juin 1997) [3], les capteurs de force piézorésistifs (Arai et al., 1996 ; Arai et al., 1998) [4,5] qui utilisent la variation d'une résistance lorsqu'une force externe est appliquée, les capteurs de force piézoélectriques (Li et Xi, 2004) [6] qui génèrent une différence de potentiel en présence d'un champ de force externe, les capteurs de force capacitifs (Sun et al., 2003 ; Sun et al., 2005) [7,8] basés sur le principe de changement de capacitance induit par le changement de distance entre deux plaques de métal après l'application d'une force externe, etc.

Parmi les nombreux capteurs ou dispositifs de détection étudiés et développés, les capteurs à base de micropoutres témoignent d'un nombre important de travaux publiés sur le sujet. Les micropoutres présentent de larges gammes de sensibilités, particulièrement intéressantes pour des applications dans le domaine de la sécurité, de l'environnement, du contrôle de procédés industriels et de qualités des produits, de la santé, etc. La littérature sur les capteurs de force de type micropoutre fait état de nombreuses publications sur le sujet. Kronex, E. Peiner et al. [9] ont utilisé des micropoutres en silicium pour la calibration de stylets d'instruments de type profilomètre mécanique. Pérez et al. [10] ont développé un capteur de force de type micropoutre en silicium destiné au contrôle des forces exercées par des micromanipulateurs lors de la préhension d'objets pour le MEB entre autre. La progression de la technologie des MEMS/NEMS pour obtenir des capteurs de nanoforce toujours plus sensibles conduit à l'utilisation de capteur de taille sub-micrométrique ou nanométrique. Les nanotubes de carbone, par leur dimension et leur rapport d'aspect, couple à leur rigidité mécanique sont de très bon nano capteurs.

Les capteurs capacitifs sont largement utilisés comme des capteurs de pression ou de force, ils comportent deux électrodes l'un est fixe et l'autre est mobile [11]. La mesure de force ou de la pression est obtenue en mesurant l'un des effets de cette grandeur physique sur un corps d'épreuve, soit par la déformation, soit par le changement de la perméabilité magnétique. Les capteurs de force reposent principalement sur la déformation de divers corps d'épreuve. L'effet le plus utilisé étant la déformation du corps d'épreuve par une force ou une pression. Pour augmenter la sensibilité du capteur capacitif, l'écart entre les deux électrodes doit être rempli avec des matériaux gazeux tels que l'air ou d'autres gaz. Cependant, le capteur capacitif a un problème c'est que sa sensibilité diminue avec la réduction de sa taille, en raison que la charge entre les deux électrodes est proportionnelle à la surface des électrodes. Par conséquent, il lui faut un circuit amplificateur lorsque sa taille est petite. Pour surmonter cette situation le capteur à base de MOSFET est l'une des solutions, car il assure l'effet de l'auto amplification de signal.

Dans cette partie, nous avons proposé un nouveau nano capteur conçu spécifiquement pour détecter et mesurer la force à l'échelle nano newton, en utilisant une structure à base d'un nanotube de carbone suspendu, dont ses deux extrémités sont encastrées. Le nano capteur de force peut être opérer selon un mode de fonctionnement statique. Dans le mode statique, la force appliquée au niveau du nano capteur de force, perturbe le bilan des forces (des moments) agissant dans le transducteur et ; par conséquent induit un mouvement mécanique de l'élément mobile qui permet au transducteur d'atteindre un nouvel état d'équilibre mécanique. L'écart entre cet état et celui initial est utilisé ensuite pour mesurer cette force appliquée. La détection de

la déflexion peut être également déduite par une mesure capacitive. Pour cela, on a utilisé le nanotube de carbone comme une grille suspendue d'un transistor SOIMOSFET. La distance entre la grille et l'oxyde de transistor présente une capacité, la déflexion du nanotube de carbone entraîne alors une variation de cette capacité. L'utilisation d'une structure encastré-encastré (Clamped-Clamped) en mode statique pour la détection de la nanoforce est un concept particulièrement efficace en termes de sa haute sensibilité d'une part et relativement simple à mettre en œuvre car cela ne nécessite, contrairement à une utilisation en mode dynamique, aucun dispositif d'actionnement d'une autre part.

Nous nous intéressons aussi dans cette partie à la conception d'un modèle neuronale du nano capteur de force à base des réseaux de neurones (RNAs). Ce modèle est implémenté sous forme d'un composant dans la bibliothèque du simulateur électrique ORCAD-PSPICE. Ce composant doit exprimer fidèlement le comportement du capteur. Un deuxième modèle à base des réseaux de neurones, qui s'occupera de la correction et de la compensation du signal de sortie du capteur, a été conçu et implémenté sur le même simulateur, tout en éliminant la non linéarité du capteur.

IV.2 Modélisation de capteurs Nanoforce

La structure de la figure IV.1 représente la section transversale en 2D du capteur nanoforce capacitif proposé. Comme illustré sur cette figure, deux matériaux, l'oxyde de silicium et l'air-gap sont utilisés en tant que diélectrique de la grille du dispositif.

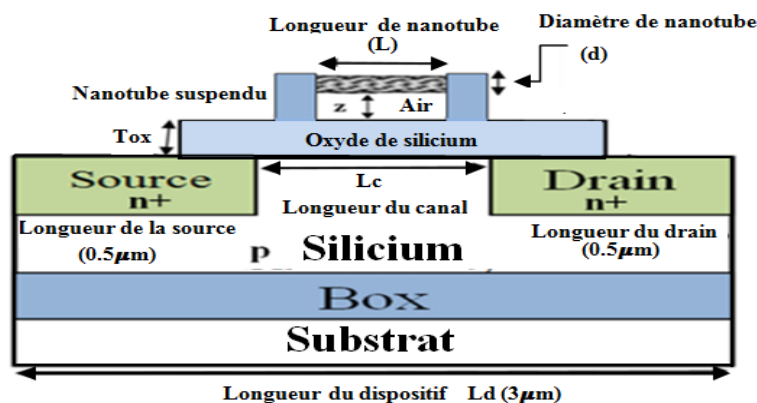


Figure IV.1: Coupe transversale 2D du capteur nanoforce capacitif proposé

L'existence de deux zones, l'air et le diélectrique, permet d'associer la capacité totale à deux capacités mises en série, C_{gap} pour l'air-gap et C_{ox} pour l'oxyde de la grille (figure IV.1), qui peuvent alors être calculées facilement. La capacité de l'air-gap dépend de la force appliquée et de la tension de grille. En effet, la loi des capacités mises en séries nous dit que :

$$C_{total} = \frac{C_{gap}C_{ox}}{C_{gap}+C_{ox}} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{rox}}{z \epsilon_{rox} + Tox} \tag{IV.1}$$

$$C_{ox} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{rox}}{Tox}, \quad C_{gap} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{rgap}}{z} \tag{IV.2}$$

Où ϵ_0 et ϵ_{rox} représentent la permittivité de l'air et la permittivité relative de l'oxyde, respectivement, z est la distance d'écartement entre le fond de la grille et le sommet de la couche d'oxyde et Tox désigne l'épaisseur de l'oxyde de grille. La permittivité relative de l'air-gap ϵ_{rgap} est considérée comme égale à un. Le circuit équivalent de l'ensemble du dispositif est montré dans la figure IV. 2, où C_{gap} est la capacité associée à l'écart entre l'oxyde de SOIMOSFET et le nanotube de carbone suspendu, qui dépend de la force en raison de l'effet mécanique et la tension de grille provoquée par l'effet électrostatique.

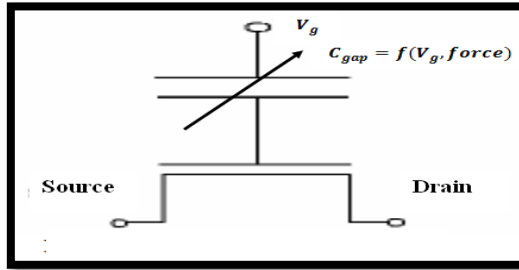


Figure IV.2: Circuit équivalent électrique du SG-SOIMOSFET

Si la polarisation de la grille est fixée pour ne pas affecter le potentiel de la grille suspendu, la tension de seuil V_{Th} de la structure SG-SOIMOSFET est donnée par l'équation suivante [12].

$$V_{th} = \phi_{MS} - \frac{Q'_{eff}}{C'_{eff}} - \frac{Q'_d}{C'_{eff}} + 2\phi_F \quad (IV.3)$$

Où ϕ_{MS} présente la différence entre la fonction de travail du métal et les matériaux semi-conducteurs, Q'_d et Q'_{eff} sont la charge de la couche d'appauvrissement et la charge effective positive d'interface par unité de surface, respectivement.

$$V_{th} = \phi_{MS} - (Q'_{eff} + Q'_d) \left(\frac{z \epsilon_{rox} + Tox}{\epsilon_0 \epsilon_{rox}} \right) + 2\phi_F \quad (IV.4)$$

Le courant de drain I_D dans la région de non-saturation et dans la région de saturation peut être exprimé comme suit:

$$I_D = \frac{\mu_n W}{L} C'_{eff} \left[(V_{gs} - V_{th}) V_{ds} - \frac{1}{2} \alpha V_{ds}^2 \right] \quad (IV.5)$$

$$I_D = \frac{\mu_n W}{2L} C'_{eff} \frac{(V_{gs} - V_{th})^2}{\alpha} \quad (IV.6)$$

Où L , μ_n , V_{gs} et V_{ds} sont la longueur de canal, la mobilité de porteuse de canal, les tensions de grille-source et de drain-source, respectivement. La valeur nominale à utiliser pour α est donnée par l'équation IV.7, où V_{SB} est la tension source-substrat, ϕ_0 est le potentiel de surface dans la forte inversion de la structure MOSFET, N_A désigne la densité d'impuretés d'accepteurs.

$$\alpha = 1 + \frac{\sqrt{2q\epsilon_s N_A}}{2C'_{eff} \sqrt{\phi_0 + V_{SB}}} \quad (IV.7)$$

En substituant les équations IV.1, IV.3 et IV.7 dans les équations IV.5 et IV.6, l'expression du courant de drain dans la région de non-saturation et dans le régime de saturation peut être présentée par les équations IV.8 et IV.9 respectivement:

$$I_D = \frac{\mu_n W}{L} V_{ds} \left[(Q'_{eff} + Q'_d) + \left(V_{GS} - \phi_{MS} - 2\phi_F - \frac{1}{2} \alpha V_{ds} \right) \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon_{rox}}{z\epsilon_{rox} + T_{ox}} \right) \right] \quad (IV.8)$$

$$I_D = \frac{\mu_n W}{2L} \frac{\left\{ V_{GS} - \phi_{MS} + (Q'_{eff} + Q'_d) \left(\frac{z\epsilon_{rox} + T_{ox}}{\epsilon_0 \epsilon_{rox}} \right) - 2\phi_F \right\}^2}{\left\{ 1 + \frac{\sqrt{2q\epsilon_s N_A}}{2\sqrt{\phi_0} + V_{SB}} \left(\frac{z\epsilon_{rox} + T_{ox}}{\epsilon_0 \epsilon_{rox}} \right) \right\}} \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon_{rox}}{z\epsilon_{rox} + T_{ox}} \right) \quad (IV.9)$$

IV.3 Etude de la déflexion de nanotube de carbone

On se propose d'étudier la flexion d'un nanotube de carbone encastré à ses deux extrémités, appelé aussi pont figure IV. 3, soumis à une charge concentrée F , de longueur L , de diamètre D , le module d'élasticité est de $E=2.038$ Tpa, le coefficient de Poisson est de 0.30 et la densité de masse volumique est 1330 kg/m³ [13]. Lorsque le nanotube de carbone est soumis à une force, en général tous les points appartenant au corps du nanotube de carbone changent de position. Le déplacement d'un point est défini comme étant la distance séparant sa position initiale de sa position finale.

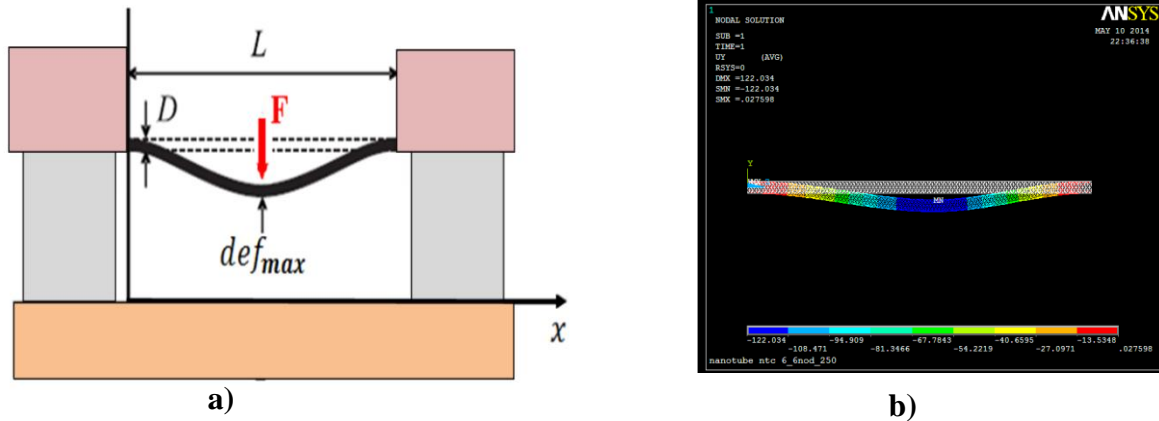


Figure IV.3: Schémas d'un nanotube de carbone soumis à une force ponctuelle a) Idéalisation mathématique b) Simulation par ANSYS

Des contraintes sont susceptibles d'être exercées sur les trois axes et les équations générales de la mécanique sont présentées par les équations suivantes:

$$S_x = \frac{1}{E} T_x - \frac{\gamma}{E} T_y - \frac{\gamma}{E} T_z \quad (IV.10)$$

$$S_y = -\frac{\gamma}{E} T_x + \frac{1}{E} T_y - \frac{\gamma}{E} T_z \quad (IV.11)$$

$$S_z = -\frac{\gamma}{E} T_x - \frac{\gamma}{E} T_y + \frac{1}{E} T_z \quad (IV.12)$$

- ✓ S_x, S_y et S_z représentent les allongements relatifs suivant les trois axes (x : parallèle à la longueur, y : parallèle à la largeur et z : parallèle à l'épaisseur).
- ✓ T_x, T_y et T_z représentent les contraintes suivant les trois axes.
- ✓ E et γ représentent le module de Young et le coefficient de poisson respectivement.

En mécanique, généralement lorsque $D \ll L$, alors on considère que $T_y = T_z = 0$; les équations mécaniques se résument par l'équation IV.13:

$$S_x = \frac{1}{E} T_x, \quad S_y = -\frac{\nu}{E} T_x \quad \text{et} \quad S_z = -\frac{\nu}{E} T_x \quad (\text{IV.13})$$

La formule décrit la déflexion def du nanotube de carbone parfaitement encastrée à ses deux extrémités en fonction de la distance x au centre du nanotube, est donnée par l'équation IV.14, où I est le moment d'inertie du nanotube.

$$def = \frac{F x}{48EI} (3L^2 - 4x^2) \quad \text{Pour} \quad 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \quad (\text{IV.14})$$

Lorsque une force F est appliquée au centre d'une structure encastré-encastré entrainera une déflexion maximale def_{max} au niveau de ce point est donnée par l'équation IV.15 :

$$def_{max} = \frac{FL^3}{48EI} \quad (\text{IV.15})$$

La figure IV.3 représente schématiquement le nanotube de carbone suspendu dans une configuration encastré-encastré. Le diamètre et la longueur de suspension du nanotube sont notés respectivement D et L , et la force appliquée F . L'axe des abscisses x représente la position de la force au long du nanotube, comprise entre 0 et L .

Lorsqu'aucune force est appliquée au niveau du nanotube de carbone ($F=0nN$), le nanotube est en position d'équilibre initial à l'horizontal. Lorsqu'une force F est appliquée au milieu de nanotube, cette force défléchit le nanotube de carbone vers le bas. La force élastique de rappel du nanotube de carbone contrebalance cet effet, et on aboutit à une nouvelle position d'équilibre. Pour chaque abscisse x , il correspond alors une altitude $y(x)$. On note def est la déflexion (ou déformation) du nanotube, c.à.d. le déplacement vertical du nanotube de carbone par rapport à sa position d'équilibre initiale. En particulier, pour $x = L/2$ la déflexion est maximale ; c.à.d. $y(L/2) = def_{max}$.

La première étape de cette partie de l'étude s'intéresse à la déflexion du nanotube de carbone qui est présenté en deux structures encastré-encastré (C-C) et encastré-libre (C-F), le simulateur tridimensionnel d'éléments finis ANSYS est conçu pour calculer la déflexion de modèle FE du nanotube de carbone. La figure IV. 4-a montre le déplacement de chaque point du nanotube qui est soumis à une force en son centre pour la configuration (C-C) et la figure IV. 4-b montre le déplacement à chaque point du nanotube de carbone qui est soumis à une force à son point d'extrémité pour la configuration (C-F).

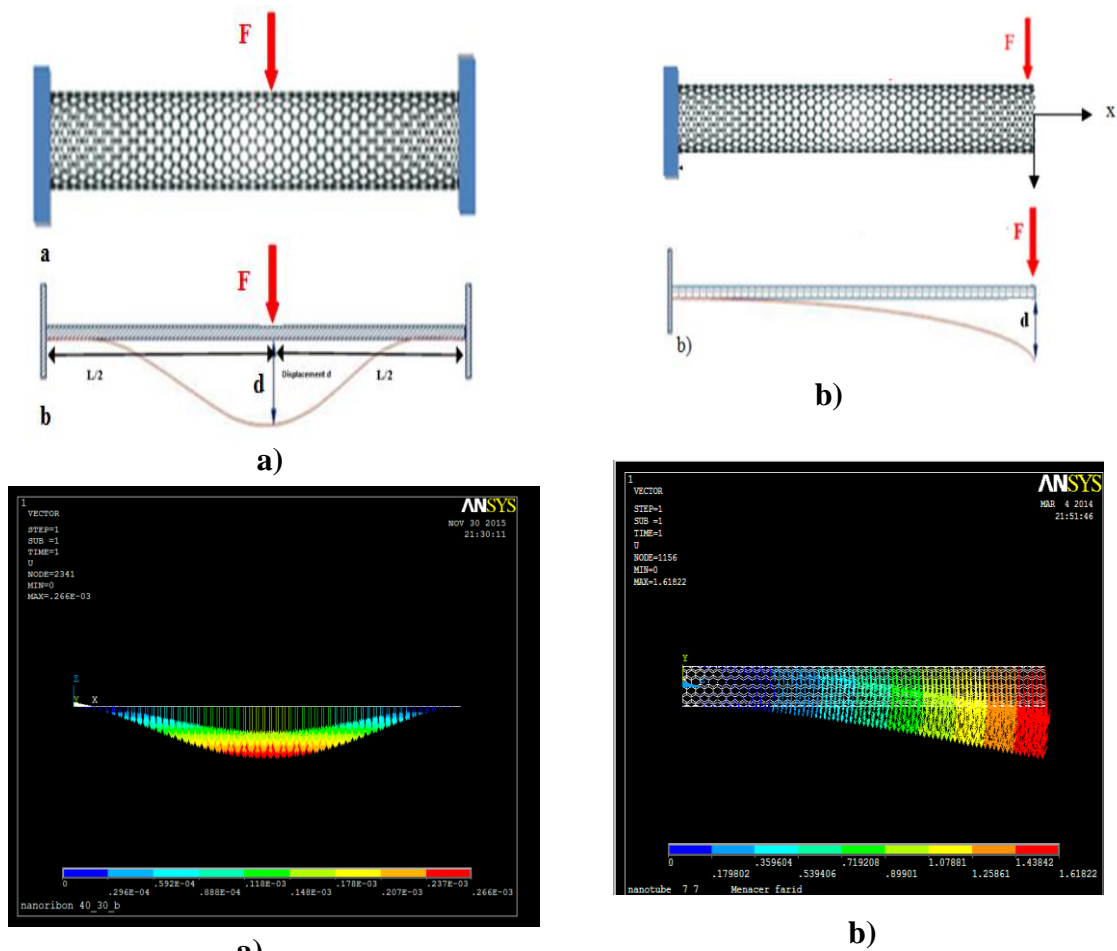


Figure IV.4: déplacement des nœuds du nanotube soumis à une force a) en son centre pour la configuration (C-C) b) en point d'extrémité pour la configuration (C-F)

La figure IV. 5 représente la variation de la déflexion maximale du nanotube de carbone à sa pointe d'extrémité dans la structure (C-F), paramétrée en force, en fonction de la position axiale x . Cette figure montre que cette déflexion est proportionnelle à la force appliquée. On constate que l'emplacement de la force appliquée sur le nanotube de carbone a un effet important sur la déflexion de ce dernier.

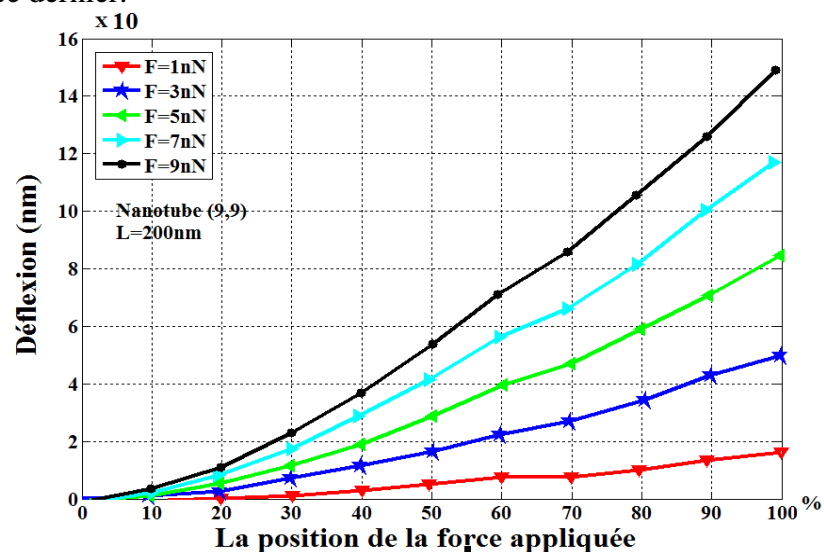


Figure IV.5: Variation de la déflexion en fonction de la position de la force appliquée pour différentes valeurs de force (C-F)

La figure IV. 6 représente la variation de déflexion maximale au centre du nanotube de carbone en fonction de la force appliquée dans la structure (C-C). Nous constatons que l'allure de la déflexion, en fonction de la force appliquée, est une droite ; on peut conclure que la déflexion maximale au centre du nanotube de carbone est directement proportionnelle à la force appliquée. La déflexion maximale est d'environ 55.510 nm pour une force ponctuelle de 9nN appliquée en milieu d'un nanotube de carbone, de chiralité $n=9$ et de longueur 200nm, et 30.918nm pour une charge de 5nN.

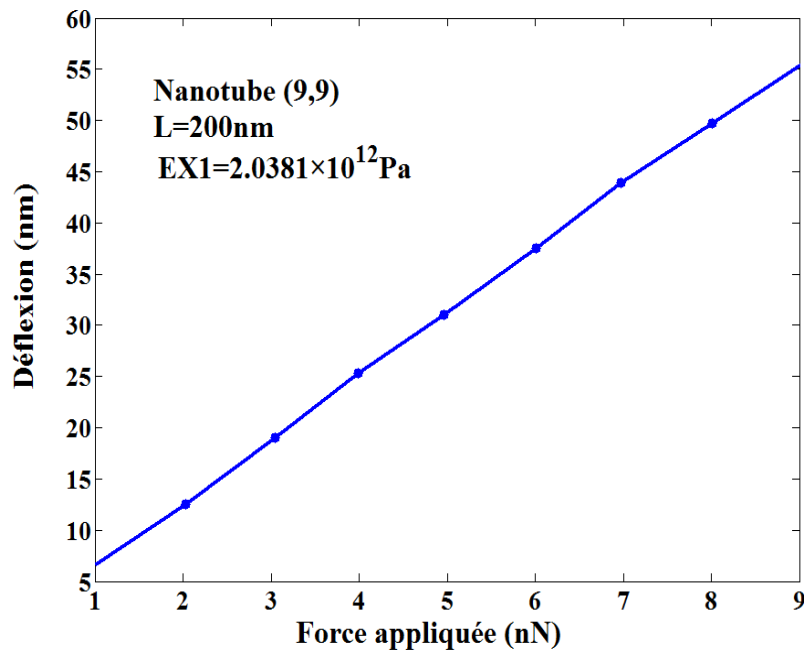


Figure IV.6: Variation de la déflexion maximale au centre du nanotube de carbone en fonction de la force appliquée(C-C)

IV.3.1 Influence des paramètres géométriques sur la déflexion

Afin d'étudier l'influence des différents paramètres géométriques et physiques sur la déflexion de nanotube de carbone, nous avons simulé la déformation, et plus particulièrement la déflexion maximale, en fonction de la longueur, la chiralité et le module de Young de nanotube de carbone pour une configuration ponté. Une première série de calculs correspondant à une chiralité de nanotube de carbone fixe ($n = m = 9$) et des longueurs variant entre 130 nm et 200nm, Les résultats de simulations sont représentés sur la figure IV. 7.

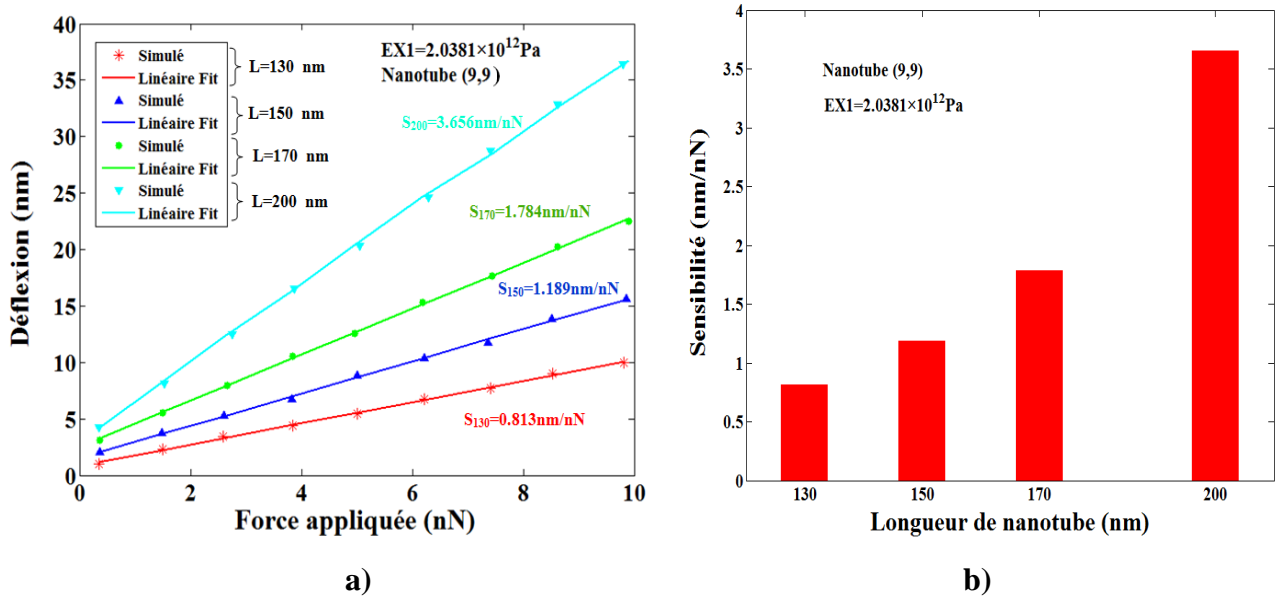


Figure IV.7: Effet de la longueur de nanotube de carbone a) sur la déflexion maximale de nanotube b) sur la sensibilité

Une deuxième série de calculs correspondant à une longueur de nanotube de carbone fixe de 200 nm et des chiralités variant entre 7 ($n = m = 7$) et 10 ($n = m = 10$), Les résultats de simulations sont représentés sur la figure IV. 8.

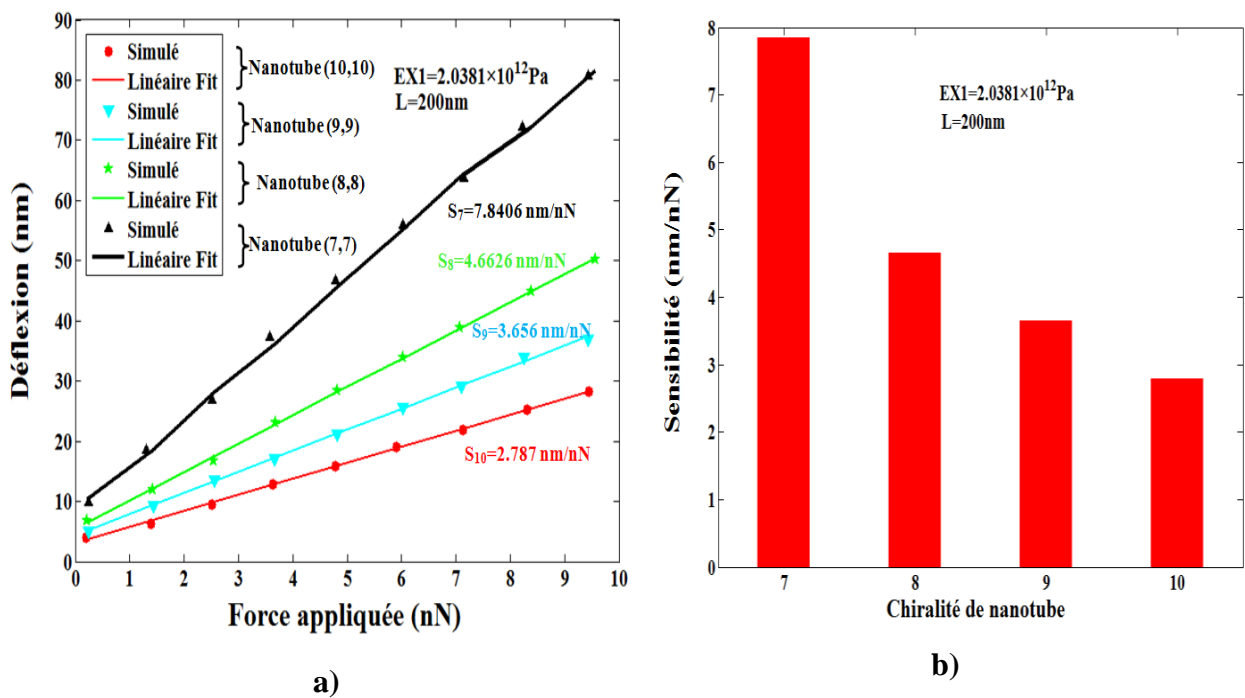


Figure IV.8: Effet de la chiralité de nanotube de carbone a) sur la déflexion maximale de nanotube de carbone b) sur la sensibilité

Une troisième série de calculs correspondant à un nanotube de carbone de chiralité 9 ($n = m = 9$) et de longueur fixe de 200 nm et de module de Young qui varie ($EX1 = 2.0381 \times 10^{12}$ Pa, $EX2 = 2.3055 \times 10^{12}$ Pa, $EX3 = 2.4301 \times 10^{12}$ Pa, $EX4 = 2.4497 \times 10^{12}$ Pa), Les résultats de simulations sont représentés sur la figure IV. 9.

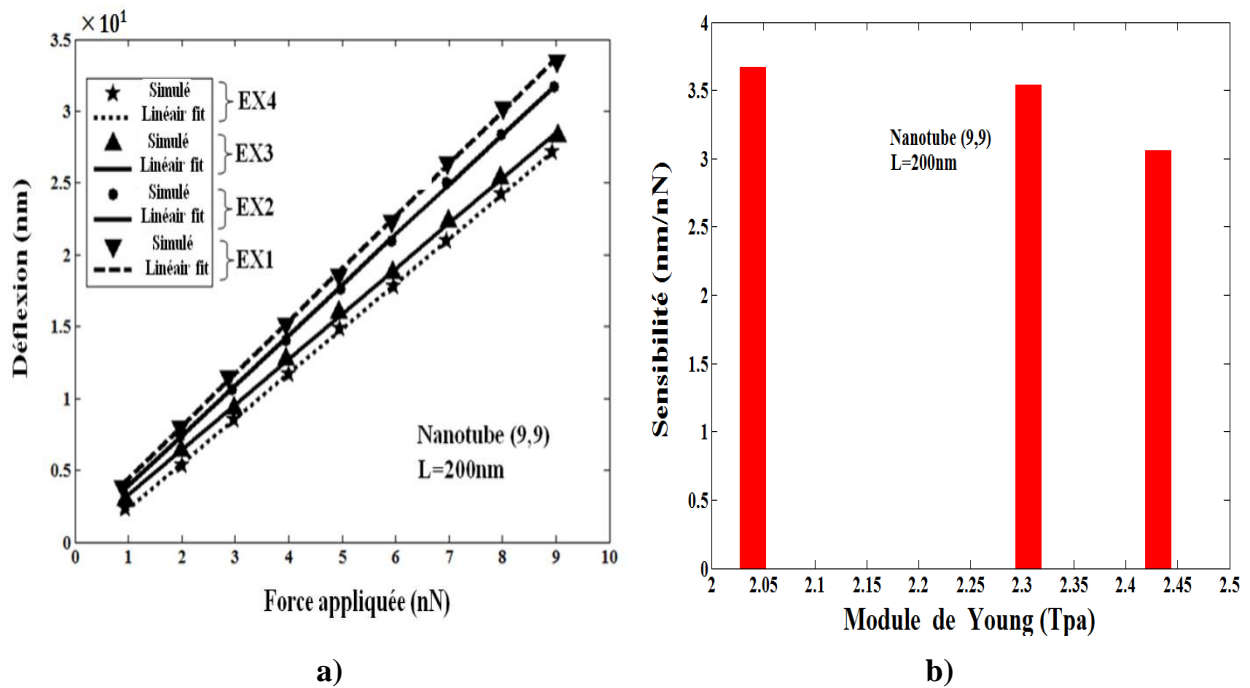


Figure IV.9: Effet de module de Young de nanotube de carbone a) sur la déflexion maximale de nanotube de carbone b) sur la sensibilité

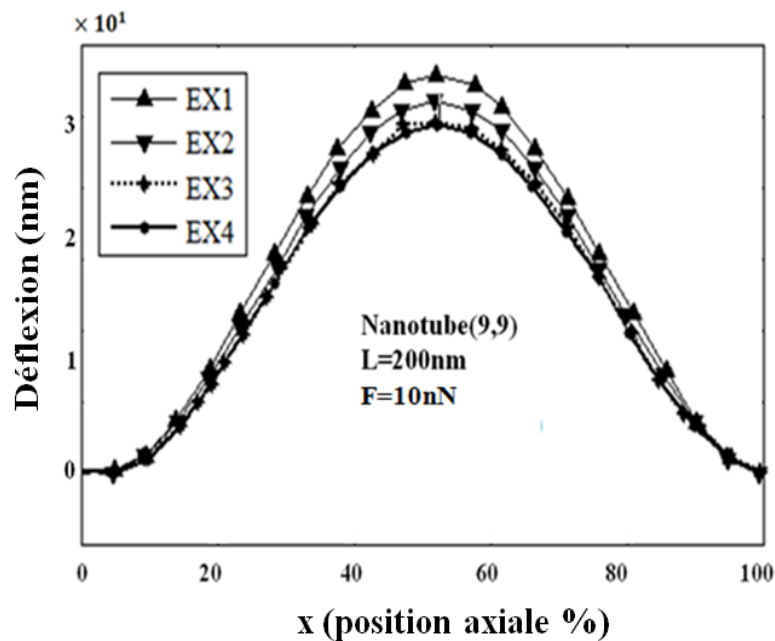


Figure IV.10: Effet de module de Young de nanotube de carbone et la position de la force sur la déflexion maximale de nanotube de carbone pour (F = 10nN)

Il est clair que, pour une force fixe appliquée, plus la longueur de nanotube de carbone est grande et son diamètre est petit, plus la déflexion de nanotube de carbone est importante. La figure IV. 9 et la figure IV. 10 montrent l'influence du module de Young sur la déflexion du nanotube. On constate que, lorsque la valeur du module de Young de nanotube de carbone est élevée, la déflexion du nanotube de carbone diminue. On remarque aussi qu'il ya une symétrie de la déflexion dans la structure C-C dont l'axe de symétrie se trouve au milieu de nanotube.

D'après la comparaison avec la figure IV. 7 et figure IV. 8, il est évident que l'effet du module de Young est beaucoup plus faible que celui de la longueur et du diamètre du nanotube. Selon les figures. IV. 6 et 7, 8 et 9 une relation linéaire entre la force appliquée et la déflexion du nanotube de carbone est enregistrée. Nous avons constaté que la déflexion du nanotube de carbone dépend fortement de leurs paramètres géométriques et physiques.

La sensibilité à la force appliquée est une caractéristique essentielle pour définir les performances d'un capteur de force. La sensibilité à la force appliquée est définie par l'équation IV.16.

$$S(F) = \frac{\Delta def}{\Delta F} \quad (IV.16)$$

Où ΔF est la variation de la force appliquée, Δdef représente la variation de la déflexion du nanotube. La figure IV. 7 montre que la sensibilité augmente pas à pas de 0.813 nm / nN à 3.656 nm / nN, lorsque la longueur du nanotube (9,9) prend les valeurs de 130 nm à 200 nm. D'autre part, la figure IV. 8 montre que la sensibilité décroît pas à pas de 7,8406 nm / nN à 2,787 nm / nN, lorsque la chiralité des nanotubes augmente de $n = 7$ à $n = 10$.

On peut conclure d'après la figure IV. 7 et le figure IV. 8 : Pour concevoir un capteur de force à haute sensibilité à la force, il est nécessaire d'avoir un nanotube de carbone qui a une chiralité la plus petite possible et une longueur la plus grande possible.

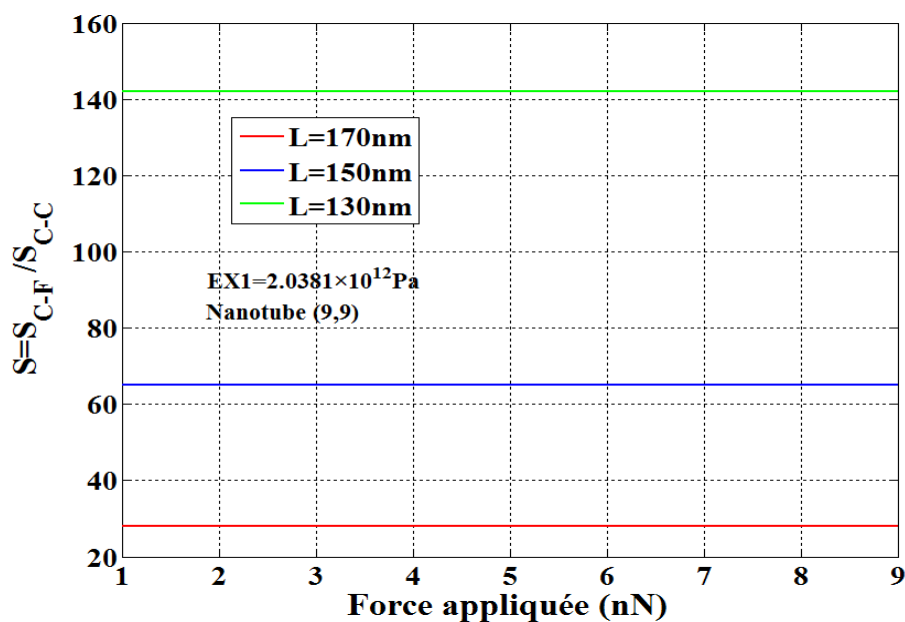


Figure IV.11: Sensibilité entre C-C et C-F (C-C: nanotube de carbone ponté avec la force appliquée au centre du nanotube de carbone C-F: nanotube de carbone en porte-à-faux avec la force appliquée à l'extrémité de la longueur de nanotubes)

Si, en faisant la comparaison de la sensibilisée entre les deux configurations pontée et encastré-libre, d'après la figure IV.11, la structure pontée s'avère moins sensible que la structure encastré-libre.

IV.4 Modélisation électrique de SOIMOSFET à grille suspendue

La détection de la déflexion du nanotube de carbone étudiée dans la partie précédente peut être détectée par une mesure capacitive, pour cela on a utilisé le nanotube de carbone comme une grille suspendue d'un transistor MOSFET. La variation de la force appliquée engendre une variation de la capacité grille-oxyde de transistor, le transistor MOSFET lui-même peut devenir un capteur capacitif. Dans la structure SG-SOIMOSFET (Suspended Gate Silicon on Insulator MOSFET), la grille est suspendue au-dessus de l'isolant de grille. L'espace entre la grille suspendue et l'oxyde supérieur s'appelle gap. Lorsqu'une force est appliquée à la grille, elle se déplace et la capacité entre la grille et l'oxyde supérieur est modifiée, ce qui provoque la variation du courant de drain et la tension sous-seuil de transistor. En détectant la tension sous-seuil ou le courant de drain électriquement la force d'entrée peut donc être mesurée.

Nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATLAS) pour simuler le comportement électrique du capteur de force à base de SOIMOSFET à grille suspendue, en se basant sur la base de données de la partie précédente où nous avons effectué une relation entre la déflexion du nanotube de carbone et la force appliquée [14]. Pour la simulation électronique de notre dispositif SG-SOIMOSFET, nous avons utilisé trois principaux programmes de TCAD Silvaco, le premier était **Deckbuild** qui est un environnement de développement et d'exécution, le deuxième était **TONYPLOT** qui est un outil de visualisation de structures et de caractéristiques offrant toutes les fonctionnalités des outils scientifiques, le troisième était ATLAS qui est le programme principal utilisé dans la simulation.

Le dispositif avait une longueur totale de $3 \mu\text{m}$ ($L_d=3 \mu\text{m}$), la couche supérieure d'oxyde pour isoler la grille du canal T_{ox1} était $0.017 \mu\text{m}$, l'épaisseur de la couche d'air entre l'oxyde supérieur et la grille est variable selon la force appliquée, initialement pour $F = 0 \text{ nN}$ elle est $z = 0.04 \mu\text{m}$. L'épaisseur de silicium était de $1 \mu\text{m}$, la couche d'oxyde inférieure était de $0.3 \mu\text{m}$ d'épaisseur. Les électrodes de la source et du drain recouvrent $0.5 \mu\text{m}$ à chaque extrémité du dispositif. La totalité de la surface de silicium a un type de dopage p de $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et les régions de chaque côté du canal ont un type de dopage n de $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. La charge d'interface sur la partie supérieure de silicium est donnée à $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, alors que la charge d'interface au bas de la surface de silicium est de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

IV.4.1 Caractéristiques courant du drain-force

Nous décrivons l'évolution des caractéristiques, courant du drain I_{ds} dans la région de saturation en fonction de la tension du drain V_{ds} ainsi que la tension de grille V_{gs} et la force appliquée F tout en étudiant l'influence des (C_{gap}) et l'épaisseur supérieure de l'oxyde de

silicium ($Tox1=17$ nm, $Tox2=19$ nm $Tox3=22$ nm) sur la réponse de nano capteur de force à base de GS-SOIMOSFET.

Lorsque la grille est soumise à une force F , sa position varie de z_1 vers $z_1 - d$, par conséquent le courant de drain source va changer de I_{ds1} vers I_{ds2} (figure IV. 12).

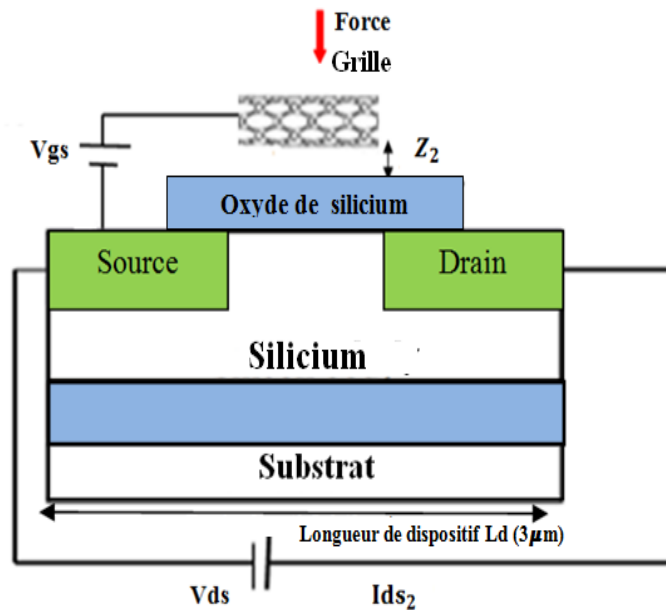
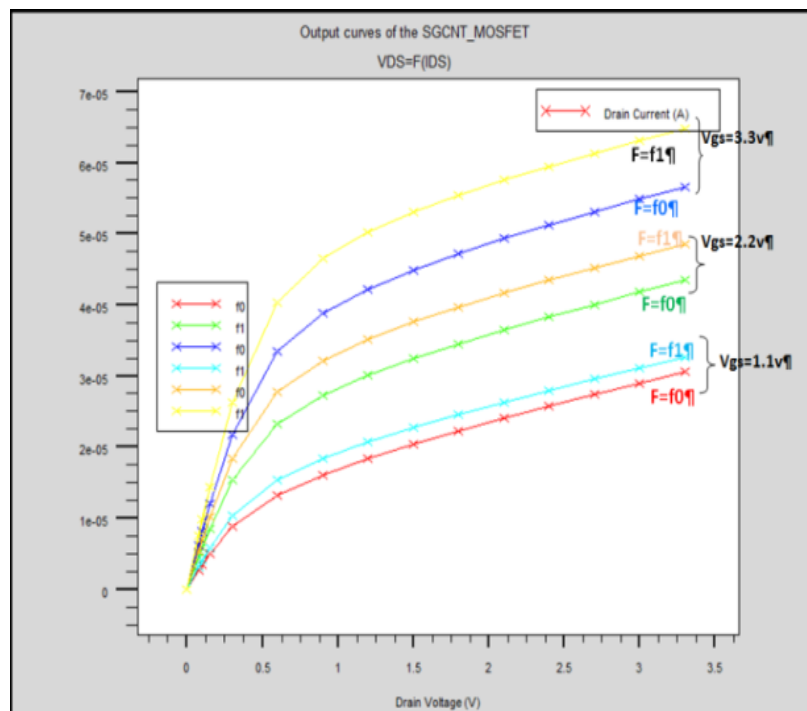
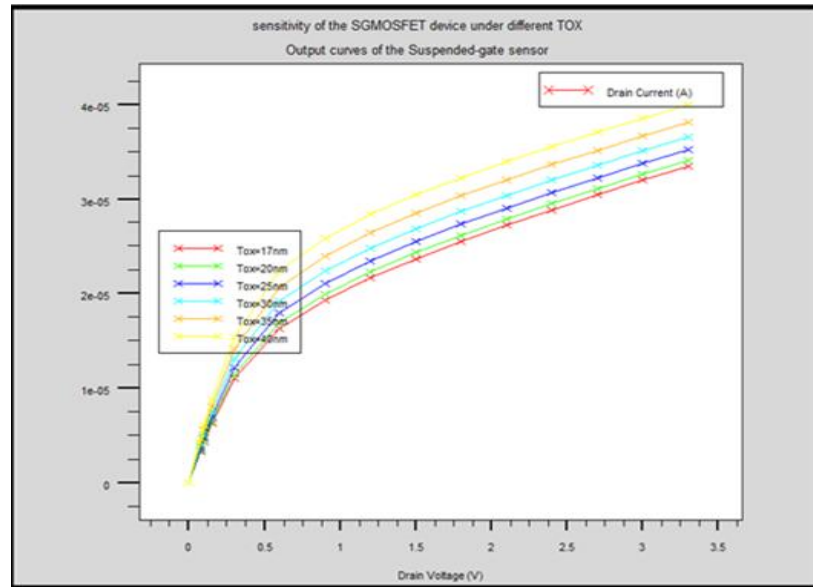


Figure IV.12: Capteur de force à base de SG-SOIMOSFET après application de la force

Le courant de sortie du transistor, en régime de saturation, en fonction de la force appliquée peut être déduit en combinant les résultats obtenus par la méthode des éléments finis avec ceux obtenus par le simulateur 2D ATLAS (figure IV.13).

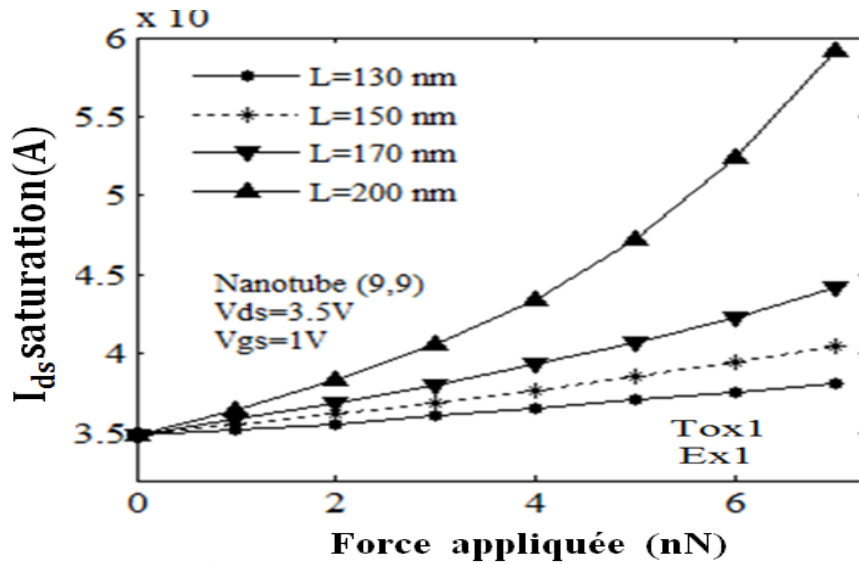


a)

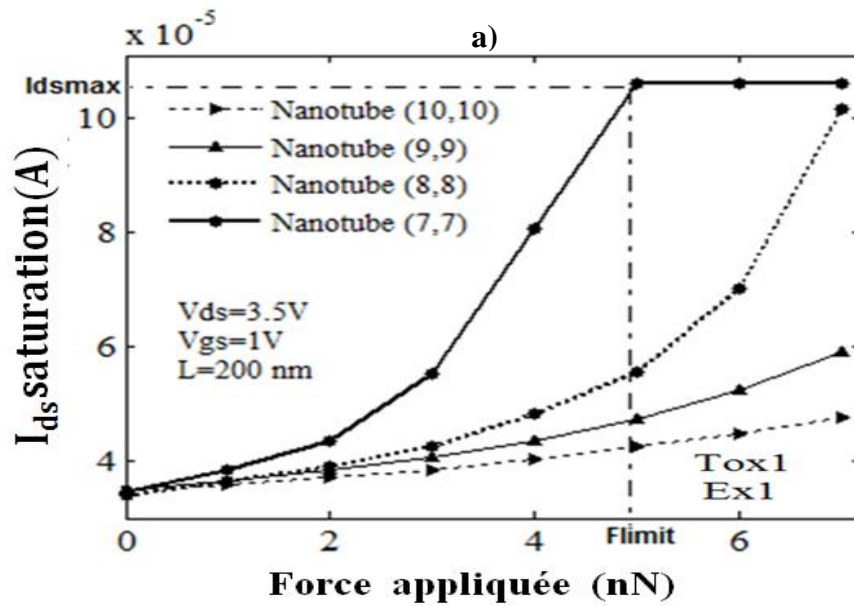


b)

Figure IV.13: Simulation de courant de drain I_{ds} en fonction de V_{ds} a) effet de la force b) effet de l'oxyde supérieur de transistor



a)



b)

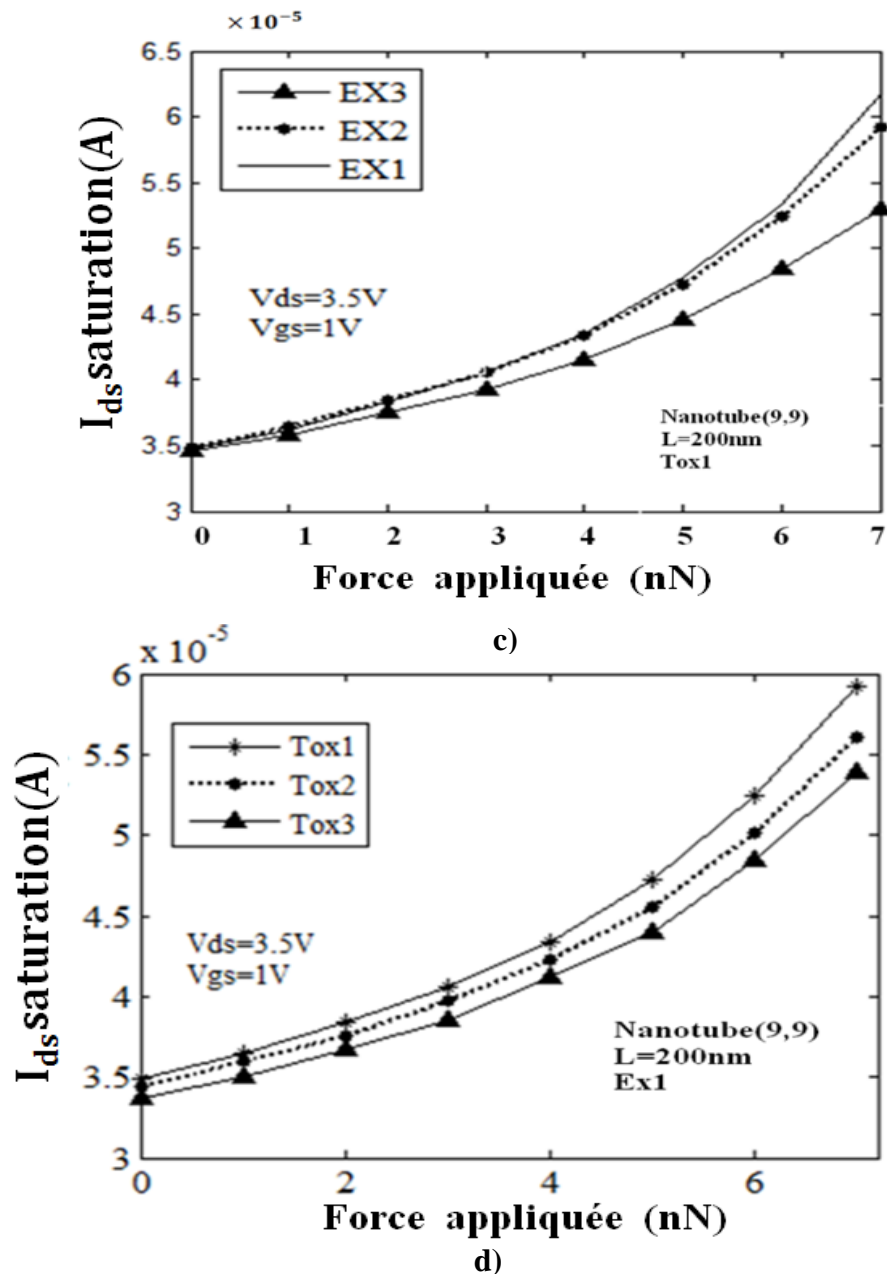


Figure IV.14: : Simulation de courant de drain I_{ds} en fonction de la force appliquée F a) Effet de la longueur b) Effet de la chiralité c) Effet de module de Young d) effet de l'oxyde supérieur de transistor

La figure IV.14 montre la variation du courant de drain en régime de saturation I_{ds} en fonction de la force appliquée F pour différentes longueurs et chiralité et différents modules de Young et aussi que pour différentes épaisseurs de l'oxyde supérieur de transistor. Il est clairement démontré que le courant de drain diminue avec l'augmentation du diamètre du nanotube de carbone (figure IV.14-b). On peut aussi constater que le courant de drain augmente avec l'augmentation de la longueur du nanotube de carbone (figure IV.14-a). La figure IV.14-c montre l'influence du module de Young sur le courant de drain en régime de saturation. On constate que, lorsque la valeur du module de Young de nanotube de carbone est élevée, le courant de drain en régime de saturation diminue. Nous constatons d'après la figure IV. 14-d que la diminution de l'épaisseur de l'isolant (l'oxyde supérieur) entraîne une diminution du courant

drain. Nous avons constaté aussi que le courant de drain en régime de saturation I_{ds} dépend fortement des paramètres géométriques et physiques de nanotube de carbone et de transistor. Ceci indique le comportement électrique complexe associé au nano capteur de force étudié.

Lorsque la déflexion du nanotube de carbone atteint sa valeur maximale pour une force appliquée $F = F_{limit}$ (pour l'épaisseur d'air $z = 0$), on observe que le courant de drain en régime de saturation reste constant $I_{ds} = I_{dsmax}$ même si la force appliquée est supérieure à F_{limit} . Comme à titre d'exemple, d'après la figure IV.14-b, le courant de drain et la force maximale qui peut être détectée pour un nanotube de carbone de chiralité 7 ($n = m = 7$) sont $F_{limit} = 5 \text{ nN}$ et $I_{dsmax} = 105 \mu\text{A}$ respectivement.

Considérant les figures ci-dessus, nous remarquons que les paramètres géométriques et physiques de capteur de force à base de SG-SOIMOSFET ont une influence significative sur les caractéristiques force-courant.

En outre, il apparaît clairement à partir de figure IV.14 que l'impact de différents paramètres sur le courant de drain est un comportement complexe, qui peut être expliqué par la modulation de la capacité de grille provoquée par la longueur du nanotube de carbone et la variation de l'espacement d'air. De plus, l'effet de la chiralité sur le courant de drain peut s'expliquer par la résistance des nanotubes en fonction de sa configuration (chiralité).

En raison de ce comportement complexe, l'utilisation de la technique basée sur RNA est cruciale pour prédire et améliorer la linéarité de la réponse du capteur étudié. La réponse non linéaire de notre capteur peut être modélisée sous une forme d'une relation exponentielle entre le courant de drain et la force appliquée, comme le montre la figure IV.15.

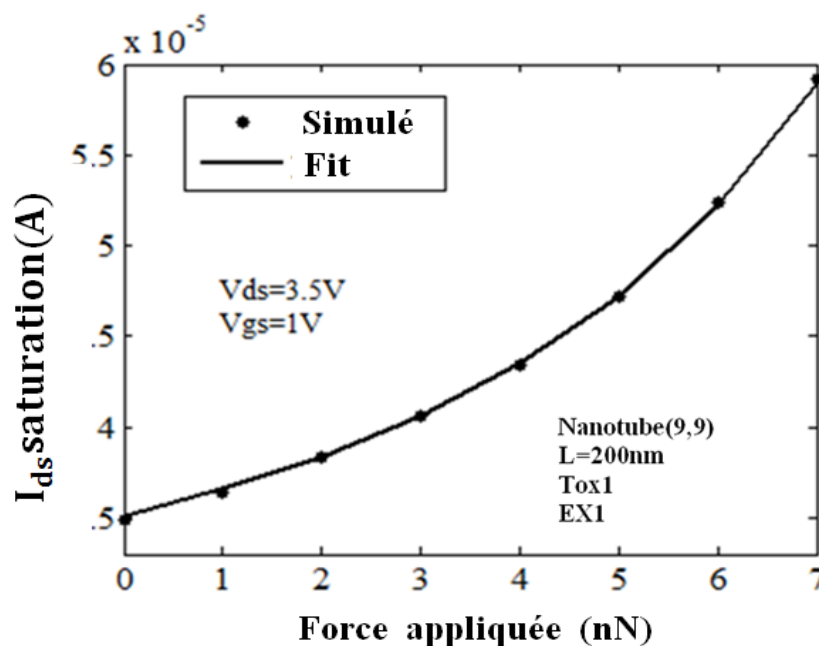


Figure IV.15: Modélisation du courant de drain en fonction de la force appliquée par une relation exponentielle

L'analyse du résultat montre que l'allure de la courbe qui est représentée par la figure IV.15 peut être ajustée par une relation exponentielle, pour un nanotube de carbone qui est la plus appropriée pour la réponse du capteur ; il est exprimé par la relation suivante :

$$I_{ds} = 3.304 \times 10^{-5} e^{0.01833 F} + 2.1 \times 10^{-6} e^{0.332 F} \quad (IV.17)$$

La non linéarité de la réponse du nano capteur de force , pour un nanotube (9, 9) de longueur 200 nm, est calculée en faisant la différence entre les points de mesure $(I_{ds})_m$ et la droite des moindres carrés de ses mêmes points $(I_{ds})_l$ représenté sur la figure IV.16. Cette différence est exprimée dans l'équation IV.18 en pourcentage de la réponse en pleine échelle (FS).

$$NL = 100 \times \frac{(I_{ds})_m - (I_{ds})_l}{FS} \quad (IV.18)$$

De plus, pour pouvoir comparer les différentes non linéarités NL, nous définissons la moyenne de non linéarité qui est écrite en équation IV.19 comme :

$$\overline{NL} = \frac{abs(NL_{max}) + abs(NL_{min})}{2} \quad (IV.19)$$

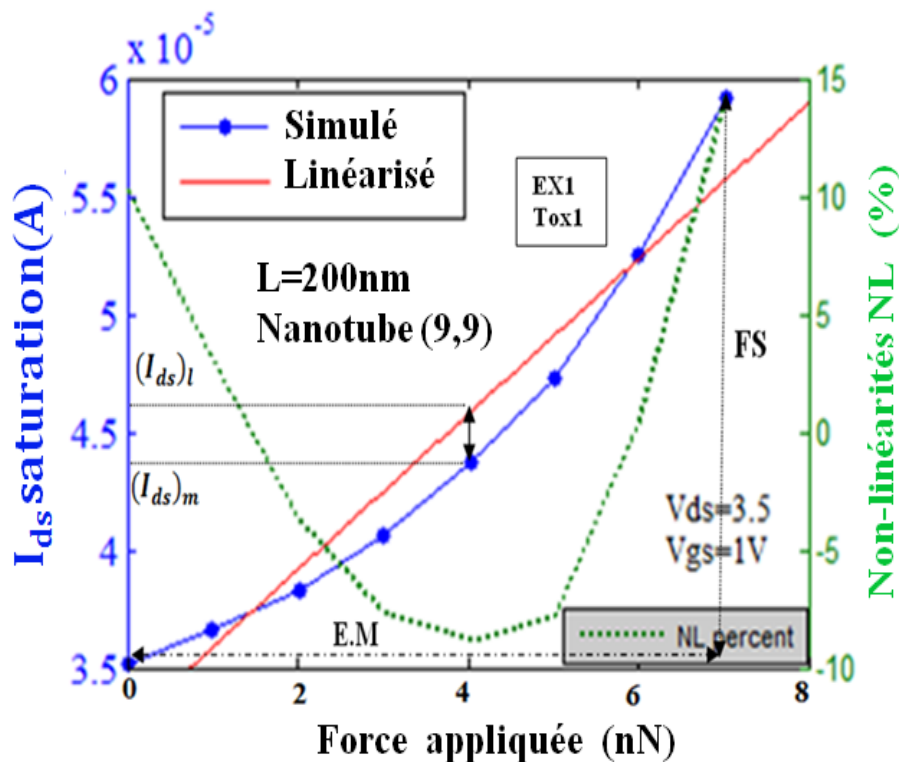


Figure IV.16: Linéarisation du capteur nanoforce

La figure IV.17 représente la non-linéarité NL en fonction de l'étendue de mesure (E.M) de la force considérée pour un nanotube (9,9) et un nanotube (8,8) d'une longueur de 200 nm.

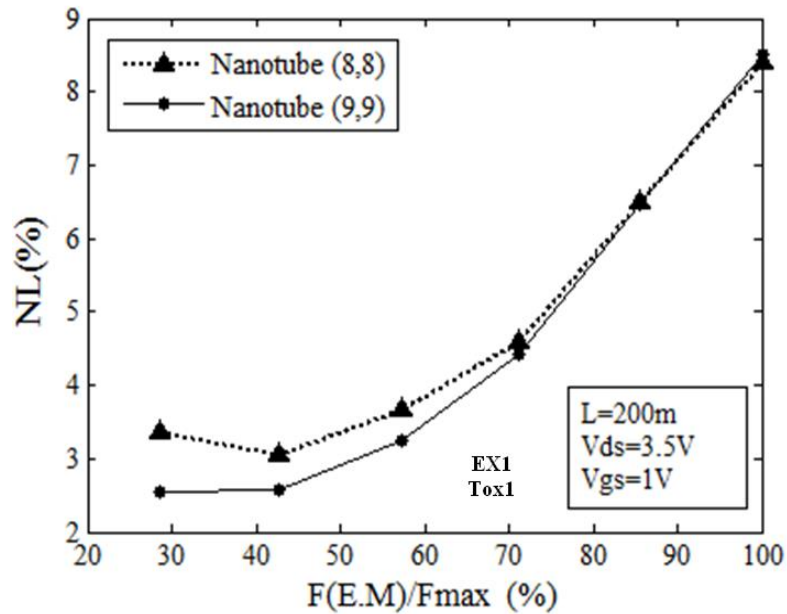
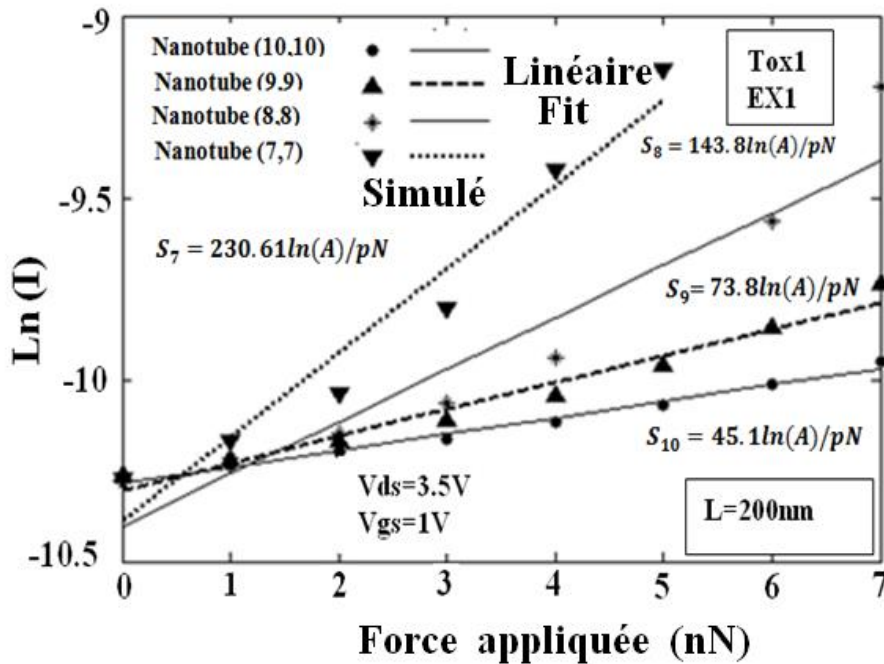


Figure IV.17: Evolution de la non-linéarité NL en fonction de l'étendue de la mesure de la force considérée (E.M)

Nous pouvons souligner que le capteur de force a une réponse non linéaire pour des plages de mesure étendues, dans le cas de forces appliquées élevées. On observe clairement à partir de cette figure que la non-linéarité du capteur dépend de la plage de force mesurée dans laquelle les mesures ont été effectuées.

Les figures IV.18-a et IV.18-b représentent la variation de $\ln(I)$ en fonction de la force appliquée F, on peut voir qu'il y a une relation linéaire entre la force appliquée et $\ln(I)$ à travers l'ajustement linéaire, ce qui nous permet de calculer la sensibilité par la relation $S = \Delta \ln(I) / \Delta F$.



a)

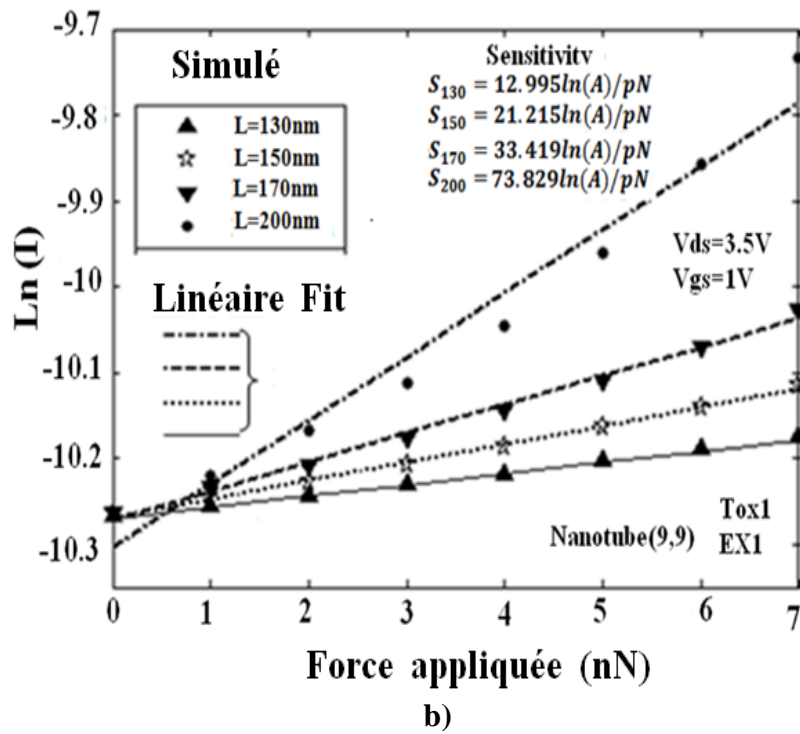


Figure IV.18: logarithme naturel du courant de drain en fonction de la force appliquée a) pour différentes chiralités de nanotubes b) pour différentes longueurs de nanotubes

La figure.IV. 19-a montre que la sensibilité augmente progressivement de 12,995 lnA / pN à 21,215 lnA / pN à 33,419 lnA / pN à 73,829 lnA / pN, lorsque la longueur du nanotube (9,9) prend les valeurs de 130 nm , 150 nm, 170 nm et 200 nm, respectivement. D'autre part, la figure.IV. 19-b montre que la sensibilité diminue pas à pas de de 230,68 lnA / pN à 143,87 lnA / pN à 73,829 lnA / pN à 45,117 lnA / pN, lorsque la chiralité des nanotubes prend les valeurs n=7, n=8, n=9 et n=10 respectivement.

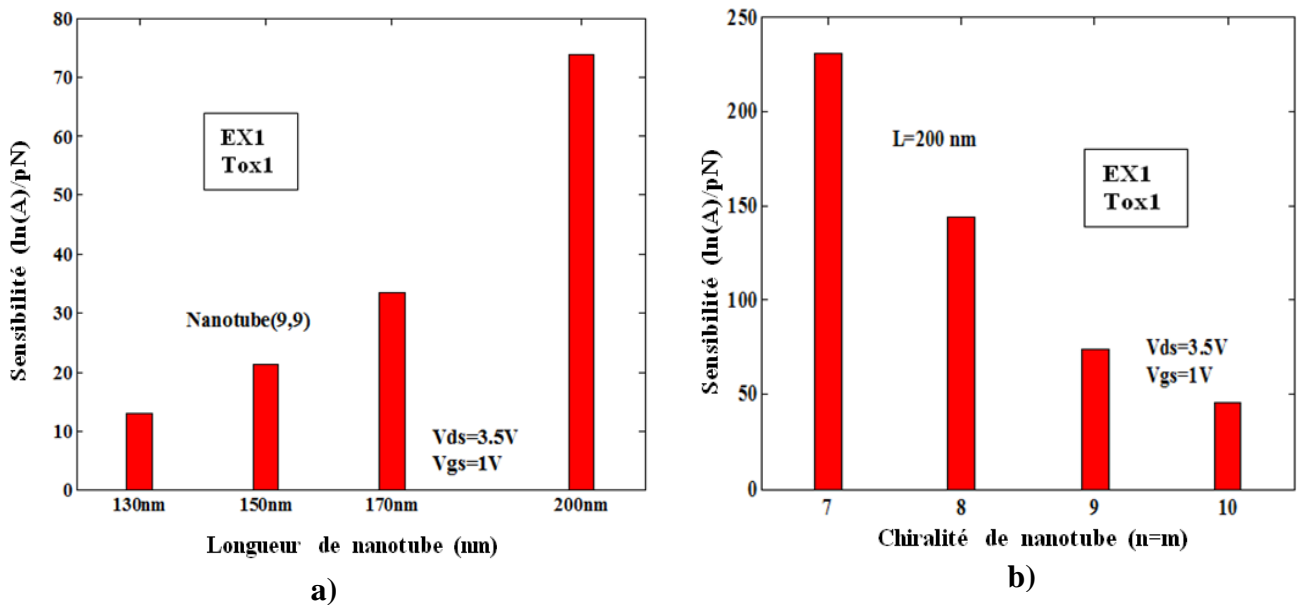


Figure IV.19: Caractéristiques de la sensibilité a) Effet de la longueur sur la sensibilité b) Effet de la chiralité sur la sensibilité

Après ces résultats, on peut en conclure que pour avoir un nano capteur de force à haute sensibilité, il est nécessaire de choisir le nanotube de carbone le plus long avec le diamètre le plus court possible. Afin d'avoir une idée qualitative sur le comportement de sensibilité du dispositif proposé, il semble utile d'évaluer la force de la conception du nano capteur de force étudié en ce qui concerne la caractéristique de sensibilité. Pour ce faire, le tableau IV.1 résume une comparaison de performance entre le nano capteur de force à base de nanotube de carbone proposé et les structures conventionnelles rapportées dans [15-16].

Tableau IV.1: Comparaison de la sensibilité de notre capteur avec les capteurs de la littérature précédente

Modèles	Sensibilité
Capteur proposé par Z. Wang et al [15]	10.18 ln(A)/pN
Capteur proposé par by S. Lu et al [16]	70.2 ln(A)/pN
Notre capteur	230.68 ln(A)/ pN

Ce tableau démontre que le capteur capacitif à base de nanotube de carbone proposé surclasse considérablement ses homologues conventionnels, où il offre une amélioration de 280% de la sensibilité du dispositif par rapport à la conception conventionnelle [16].

Il est évident que notre dispositif proposé peut améliorer les performances du capteur de nanoforce, non seulement en réalisant un capteur entièrement compatible avec la technologie CMOS, mais aussi en améliorant sensiblement la sensibilité par rapport à la technologie de capteur nanoforce piézoélectrique. Cela rend le potentiel de capteur proposé plus élargi à être utilisé pour des applications de micro-robotique, de micro-assemblage et d'examen biologiques. Malgré les résultats obtenus dans l'amélioration de la sensibilité de la structure, cette structure présente toujours certaines limites. Ceci est dû au comportement non linéaire associé à la réponse du capteur, comme indiqué sur la figure IV.14. De plus, les résultats de simulation montrent que la sensibilité à la force dépend de la géométrie et la physique de la structure. Dans cette mesure, pour les raisons mentionnées ci-dessus est pour éviter le comportement de non-linéarité du capteur, de nouvelles connaissances basées sur le modèle de correcteur utilisant les réseaux de neurone artificiels peuvent être intuitivement efficaces pour obtenir un bon comportement entre le courant de drain et les forces appliquées, ce qui constitue l'objectif principal de la partie suivante.

IV.5 Modélisation du capteur nanoforce à base SG-SOIMOSFET par RNA

Un modèle d'un processus est une description mathématique de son fonctionnement, qui permet de rendre compte des relations existantes entre ses entrées et ses sorties. On parle aussi de boîte noire, ce qui est le cas des réseaux de neurones, dont les paramètres peuvent être estimés par apprentissage. Les réseaux de neurones offrent l'avantage de la simplicité d'implantation et un temps de calcul relativement faible par rapport aux modèles numériques [17].

La modélisation par les réseaux de neurones de notre capteur doit passer par les étapes suivantes [18,19]:

- ✓ Conception d'une base de données.
- ✓ Choix d'une structure de réseau de neurones (un algorithme approprié).
- ✓ Mesure de la performance du modèle obtenu.

Le réseau neuronal développé est conçu pour connecter le vecteur d'entrée ($F, L, n, Vds, Vgs, EX, Tox$) au vecteur de sortie I_{ds} ; où F est la force appliquée, L est la longueur de nanotube de carbone, n est la chiralité de nanotube de carbone, Vds est la tension de source drain, Vgs est la tension de source grille, EX est le module de Young, Tox est l'épaisseur d'oxyde et I_{ds} est le courant de drain source, la figure IV.20-a illustre l'architecture du réseau établie.

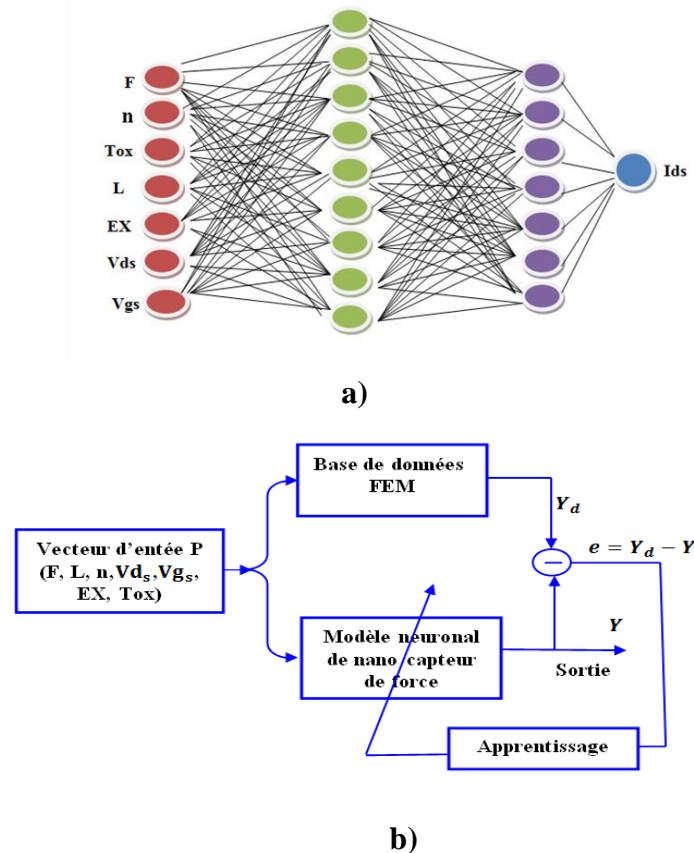


Figure IV.20: Modélisation du capteur de nanoforce à l'aide de réseaux neuronaux a) Notation symbolique du modèle neuronale optimisé b) Système d'apprentissage pour la modélisation de capteurs

Sur la base des résultats obtenus de la simulation précédente de notre nano capteur de force, et en utilisant l'interface MTLAB, nous avons construit une base de données de 1241 vecteurs. Après avoir construit la base de données, on procède à l'apprentissage du réseau de neurones. Dans notre cas, un réseau MLP a été choisi, l'intérêt de ce type de réseau est dans sa facilité d'implémentation avec la caractéristique d'approximation universelle.

Pour que le modèle neuronale exprime fidèlement la variation de la réponse de notre nano capteur de force, il faudra trouver une architecture optimale du réseau de neurones (MLP) [20,21], nombre de couches cachées, nombre de neurones dans chaque couche, ainsi que la fonction d'activation pour chaque couche. L'apprentissage et l'optimisation du réseau sont accomplis par un programme structuré en MATLAB. Le réseau optimisé a sept entrées, et un seul neurone dans la couche de sortie I_{ds} ; la figure IV.20-b représente le système d'apprentissage pour la modélisation de notre nano capteur.

Le tableau IV.2 résume les paramètres optimisés du réseau pour la modélisation de notre nano capteur de force.

Tableau IV.2: Paramètres optimisés du modèle de réseau neuronal

Base de données	Base d'apprentissage	621						
	Base de teste	310						
	Base de validation	310						
Nombre de neurones	couche d'entrée	7						
	première couche cachée	9						
	deuxième couche cachée	7						
	couche de sortie	1						
Fonction de transfert	première couche cachée	Logsig						
	deuxième couche cachée	Logsig						
	couche de sortie	Linéaire						
Entrée	F(Nn)	n	L (nm)	EX(Pa)	Tox (nm)	Vgs(V)	Vds(V)	
	Max	7	10	200	2.4301×10^{12}	22	1.5	5
	Min	0	7	130	2.0381×10^{12}	17	0.2	1
Sortie	$I_{ds}(A)$							
	Max	107×10^{-6}						
	Min	36×10^{-6}						
MSE teste	6.6158×10^{-5}							
MSE d'apprentissage	10^{-5}							

Une fois l'apprentissage est terminé, il est nécessaire de le tester sur une base de données différente de celle utilisée pour l'apprentissage. La figure IV.21 compare les résultats prédits par le modèle neuronal et ceux simulés par les éléments finis. Comme il est montré à partir de cette figure, un très bon accord entre eux peut être observé pour toute la gamme de simulation. Cela montre l'applicabilité des réseaux de neurones artificiels à l'étude de notre capteur de nanoforce.

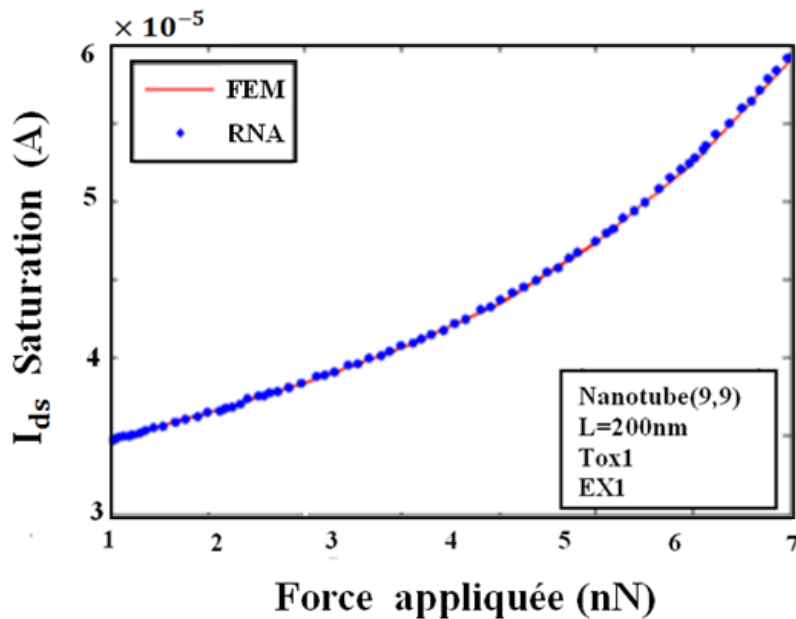


Figure IV.21: Performance du modèle neuronal développé

IV.5.1 Implémentation du modèle neuronal sur ORCAD-PSPICE

Pour valider notre modèle neuronal, nous proposons d'implémenter ce modèle dans le simulateur PSPICE. L'avantage de cette implémentation réside dans la rapidité de calcul et la capacité à concevoir un modèle efficace avec un nombre réduit de paramètres. L'utilisation des ABMs (Analog Behavioral Modelling) de la librairie PSPICE nous permet d'implémenter le modèle neuronal (poids, biais, fonctions d'activation ...) sur ce simulateur.

Le modèle neuronal du nano capteur de force comporte 17 boîtes ABM; ce modèle neuronal peut être utilisé comme interface entre la modélisation numérique du composant et le simulateur électronique. La figure IV.22 montre le modèle ABM (Analog Behavioral Modelling) de notre nano capteur de force implémenté dans le logiciel de simulateur PSPICE

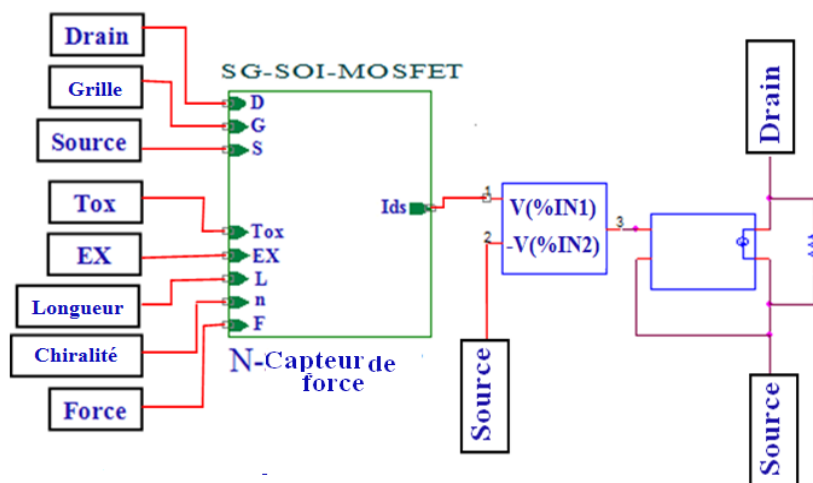


Figure IV.22: Circuit de simulation du modèle neuronal dans PSPICE

Selon les résultats précédents, il est clair que le modèle conçu et mis en œuvre dans le simulateur PSPICE exprime fidèlement le comportement du capteur nanoforce. Le modèle neuronal développé prend en compte la non-linéarité de la réponse, la dépendance des paramètres physiques et géométriques de notre capteur.

IV.5.1.1 Modélisation du modèle correcteur à base de RNA

Les réseaux de neurones ont l'avantage d'une grande adaptation aux différents problèmes causés par la non-linéarité des capteurs. Dans notre cas, nous proposons un modèle neuronal intelligent en tant que composant de linéarisation et de correction des sorties des capteurs. Par analogie avec la modélisation neuronale de notre capteur (modèle direct), nous avons réalisé une modélisation du modèle correcteur (modèle inverse).

A la fin de la phase d'apprentissage et d'optimisation, une architecture neurale 7-6-9-1 a été obtenue. Afin de valider notre modèle neural de correction, nous proposons de l'implémenter dans la bibliothèque de simulateurs PSPICE. Les résultats de simulation obtenus, qui sont représentés dans la figure IV. 23, montrent que le modèle de correction développé a permis de corriger la sortie du capteur, tout en éliminant la non-linéarité de la réponse.

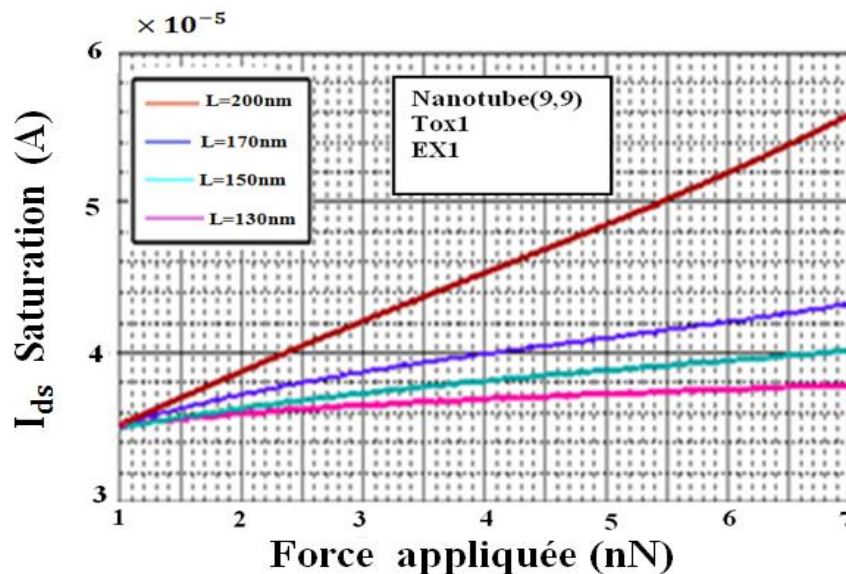


Figure IV.23: Performances du modèle INV-RNA développé (effet de longueur de nanotube)

Afin de tester le comportement dynamique du modèle de capteur de nanoforce, nous avons fait varier la force appliquée en fonction du temps dans un cycle de 50 ns. Nous utilisons l'analyse "Time Domain" de PSPICE, nous obtenons les résultats représentés sur la figure IV. 24. Il est à noter que l'effet de l'hystérésis du capteur intelligent est quasi nul, il peut alors être négligé. Ce test sert à la validation finale du modèle proposé; l'analyse de ces résultats valide le modèle conçu du capteur intelligent.

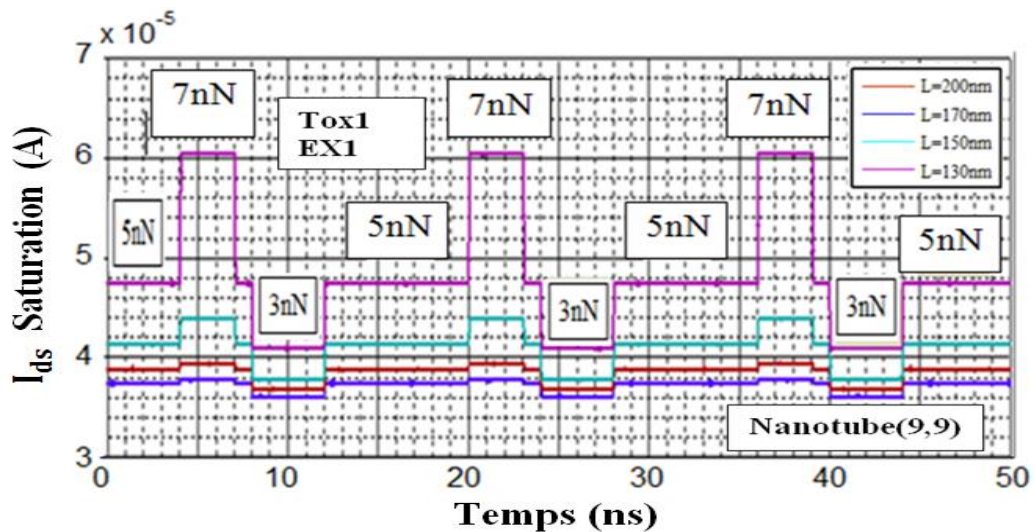
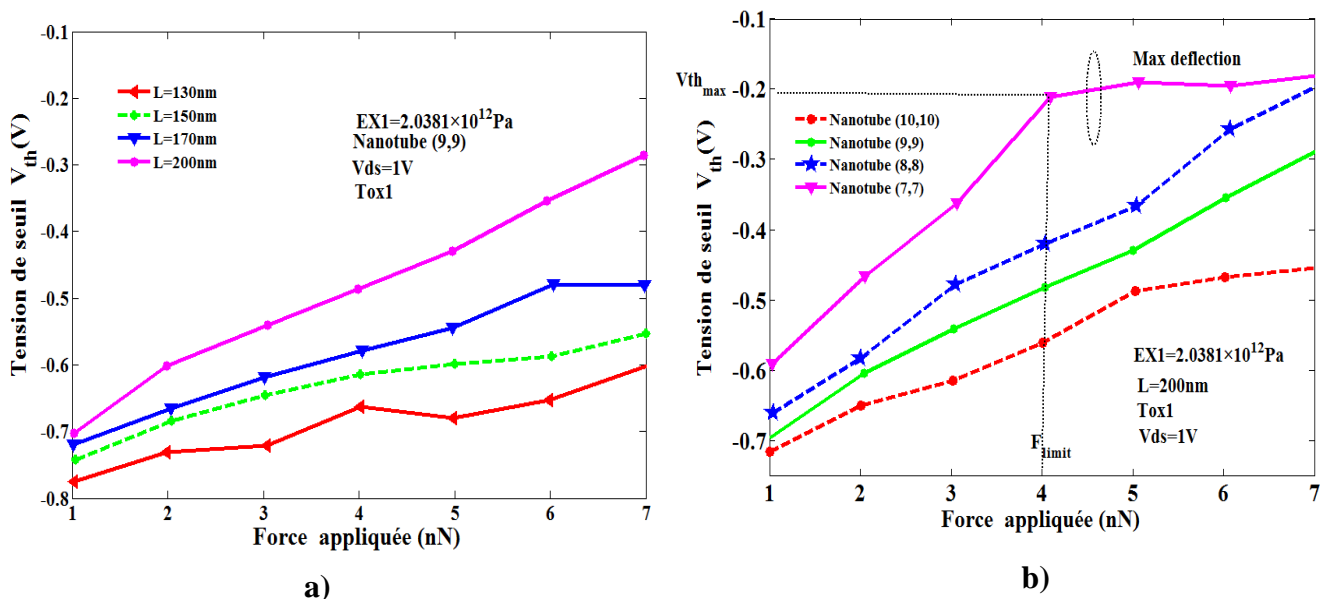


Figure IV.24: Analyse "Time Domain" de nano capteur de force à l'aide PSPICE

IV.6 Caractéristiques tension de seuil – force

Lorsque la grille suspendue du transistor est soumise à une force F , sa position change de z_1 vers $z_2 = z_1 - d$, par conséquent la tension de seuil va changer de V_{th1} vers V_{th2} . Nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATLAS) pour simuler le comportement du capteur de force à base de SOIMOSFET à grille suspendue, en se basant sur les données de la partie précédente obtenue par la méthode des éléments finis où nous avons effectué une relation entre la déflexion du nanotube et la force appliquée. En combinant les résultats obtenus par la méthode des éléments finis et celle de SILVACO, la tension de seuil (threshold voltage) V_{th} en fonction de la force appliquée peut être déduite. La figure IV.25 illustre la relation entre la tension de seuil du transistor et la force appliquée.



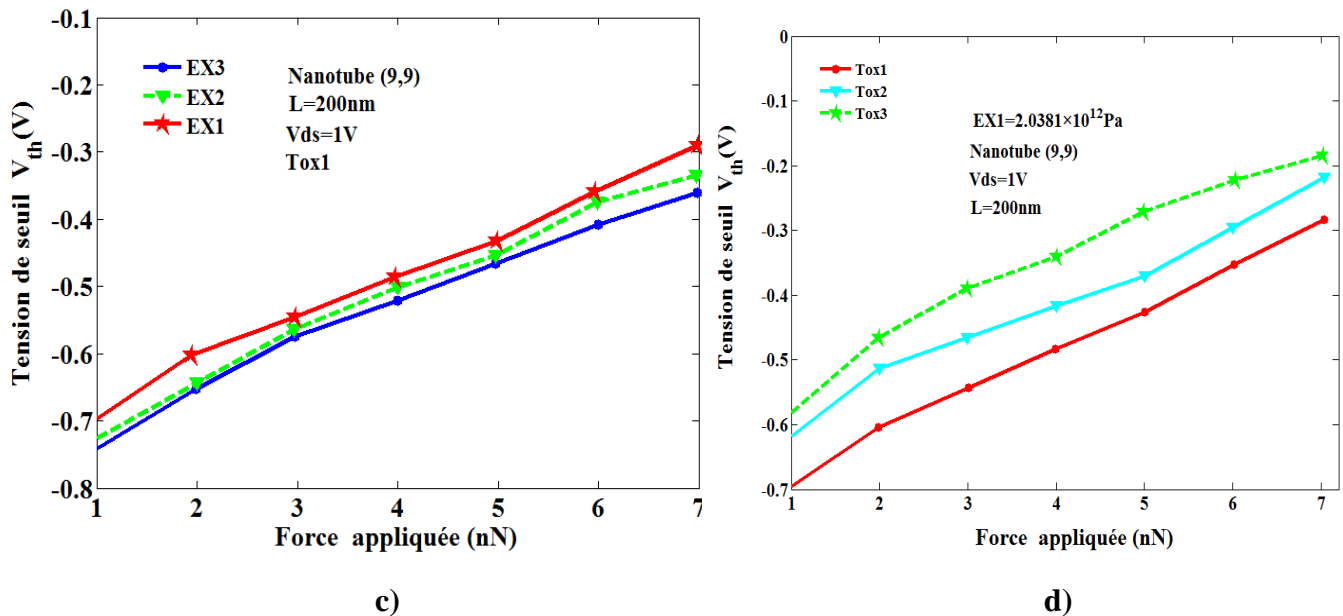


Figure IV.25: Simulation de V_{th} en fonction de la force appliquée a) effet de la longueur b) effet de la chiralité c) effet de module de Young d) effet de l'oxyde supérieur de transistor

A partir du résultat obtenu dans la figure IV.25, on remarque que l'augmentation de la force appliquée a comme conséquence une augmentation de la valeur de la tension de seuil V_{th} . Suite aux résultats obtenus à partir des graphes de la figure IV.25-a et la figure IV.25-b, nous pouvons affirmer qu'il existe deux paramètres géométriques importants qui peuvent influencer sur la sensibilité du capteur, ce sont la longueur L et la chiralité n du nanotube de carbone. Les figures. IV.25 à IV.25-c ci-dessus illustrent l'effet de la chiralité, la longueur du nanotube de carbone et l'épaisseur de l'oxyde supérieur de transistor Tox sur la caractéristique $V_{th} = f(force)$; On constate que l'augmentation de la longueur de nanotube de carbone provoque une augmentation de la tension de seuil v_{th} par contre l'augmentation du diamètre de nanotube de carbone ou l'augmentation de l'épaisseur de l'oxyde supérieur de transistor provoque une réduction de la tension de seuil V_{th} . On constate d'après ces figures, il est évident que l'effet du diamètre du nanotube de carbone est beaucoup plus grand que celui de la longueur du nanotube de carbone et celui de l'épaisseur de l'oxyde supérieur de transistor.

On remarque d'après la figure IV.25-b, les changements de la tension de seuil V_{th} observés semblent se stabiliser lorsque l'épaisseur de l'air gap $Z_{gap} = 0$, pour le cas d'un nanotube de carbone de chiralité $n=9$ et de longueur 200nm , pour une force appliquée $F > 4\text{nN}$ la tension de seuil devienne constante $V_{th} = -0.2\text{V}$. Cependant, ce fait n'a pas d'impact négatif sur la capacité de la détection de la force appliquée car notre objectif est de détecter les plus faibles forces à l'échelle nanométrique.

Pour l'obtention du modèle mathématique de la réponse de nano capteur de force nous avons fait une interpolation polynomiale du troisième degré. Les valeurs extrapolées à partir d'un polynôme de troisième degré ont un très bon ajustement aux valeurs d'origine pour un nanotube (9, 9) avec une longueur de 200 nm ; il est exprimé par l'équation IV.21.

$$V_{th} = 0.001503 * F^3 + 0.01895 * F^2 + 0.1353 * F - 0.8169 \tag{IV.21}$$

La non linéarité de la réponse en force , pour un nanotube de chiralité 9 et d'une longueur de 200 nm, est calculée en faisant la différence entre les points de mesure $(V_{th})_m$ et la droite des moindres carrés de ses mêmes points $(V_{th})_l$. Cette différence est exprimée en pourcentage par rapport à la réponse pleine échelle (FS).

$$NL = 100 \times \frac{(V_{th})_m - (V_{th})_l}{FS} \tag{IV.22}$$

La non-linéarité de la réponse du capteur de nanoforce (NL) en fonction de la force appliquée est représentée dans la figure IV.26.

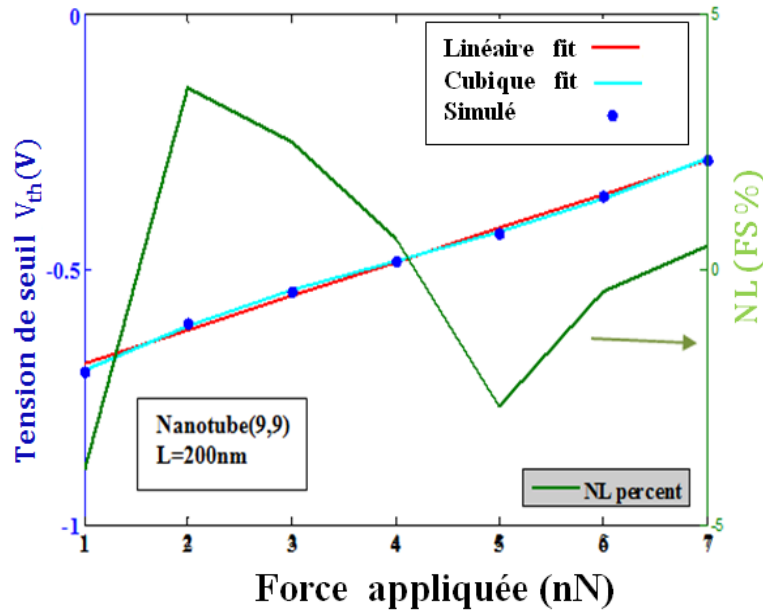


Figure IV.26: modélisation de la tension de seuil en fonction de la force appliquée par une relation polynomiale de troisième ordre

La figure IV.27-a représente l'effet de la longueur du nanotube de carbone sur la sensibilité du capteur ,on constate que la sensibilité du capteur prend les valeurs de 0.026155 V/nN ,0.029176 V/nN ,0.041428 V/nN ,0.066391 V/nN respectivement quand la longueur du nanotube de carbone a les valeurs 130nm , 150nm, 170nm and 200nm respectivement. On constate aussi d'après la figure IV.27-b que la sensibilité du capteur augmente de 0.046445 V/nN à 0.066391 V/nN à 0.0762 V/nN à 0.12431 V/nN quand la chiralité de nanotube de carbone prend les valeurs n=10 , n=9, n=8 and n=7 respectivement. Après ces résultats on peut conclure, pour avoir un nano capteur de force à haute sensibilité ;le nanotube de carbone considéré doit être prit avec un petit diamètre et une grande longueur.

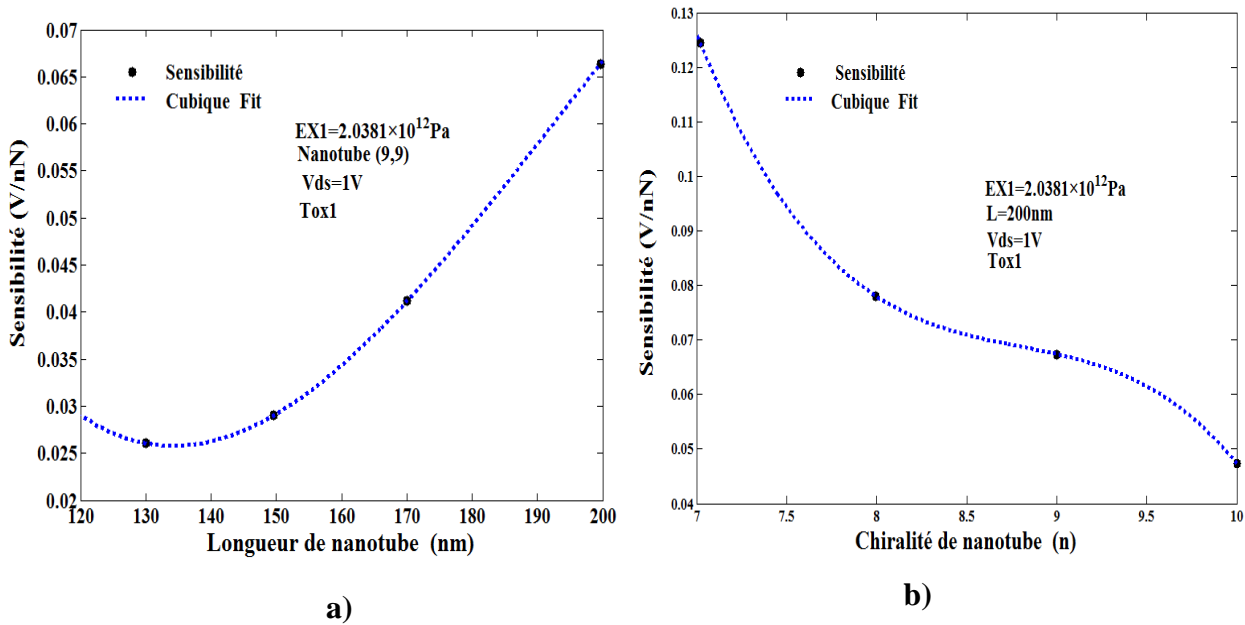


Figure IV.27 : Caractéristiques de la sensibilité a) Effet de la longueur sur la sensibilité b) Effet de la chiralité sur la sensibilité

On constate d’après la figure IV.27 que la sensibilité obtenue par notre modèle développé peut atteindre jusqu’à 0.12431V/nN ; par contre la sensibilité obtenue par des études antérieures par exemple la sensibilité de nano capteur développé par R. Hinchet [22] est de 0.011 V/nN. On constate que la sensibilité de notre nano capteur de force proposé est plus importante par rapport aux résultats de la littérature.

IV.6.1.1 Modélisation de nano capteur de force par les réseaux de neurones

L’objectif de cette partie est de créer un modèle directe à base des réseaux de neurone « ANN-model », ce dernier sert à substituer la réponse du nano capteur de force développé et de reproduire fidèlement son comportement.

La figure IV.28 illustre le réseau de neurones développé pour l’estimation de la tension de seuil V_{th} . Le réseau produit un résultat (la tension de seuil (V_{th}) en propageant ses entrées initiales ($[F, L, n, V_{ds}, V_{gs}, EX, Tox]$) à travers les différents neurones du réseau jusqu’à la sortie.

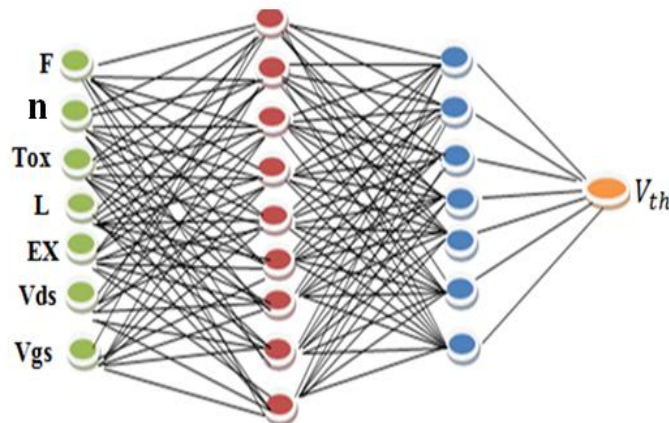


Figure IV.28: Modélisation du capteur de nanoforce à l'aide de réseaux neuronaux (architecture optimisée)

La configuration d'un réseau de neurones pour l'estimation de la tension de seuil V_{th} nécessite le choix d'une architecture adéquate, un algorithme d'apprentissage et des fonctions d'activation. Dans notre cas, le réseau de neurones développés est formé de quatre couches et les fonctions d'activation dont la fonction Sigmoid pour les couches cachées et la fonction Identité pour la couche de sortie. Notre réseau de neurones a 7 entrées ($[F, L, n, Vds, Vgs, EX, Tox]$) et une seule sortie (V_{th}). Toutes les entrées sont normalisées pour améliorer la performance du processus d'apprentissage du réseau. Dans notre cas nous avons choisi le type du réseau MLP (Multilayer Perceptron), l'intérêt de ce réseau est dans sa caractéristique d'approximation universelle, et sa facilité de l'implémentation.

L'apprentissage et l'optimisation du réseau précédant est accompli par un programme structuré en MATLAB, différentes architectures sont testées pour déterminer le nombre adéquat de couches et de neurones cachés. Le tableau IV.3 résume les paramètres optimisés du réseau pour la modélisation du capteur.

Le nombre de neurones de la première couche cachée est de l'ordre de 9 neurones, la deuxième couche cachée est de l'ordre de 7 neurones et le modèle se stabilise au bout de 5.106 itérations. A partir de la figure IV.29 on peut facilement vérifier la fiabilité de notre modèle pour la prédiction de la réponse de notre nano capteur de force sur une large gamme de force appliquée.

Tableau IV.3: les paramètres optimisés du réseau pour la modélisation du capteur

Base de données	Base d'apprentissage		821					
	Base de teste		410					
	Base de validation		410					
Nombre de neurones	Couche d'entrée		7	Fonction de transfert	1ère couche cachée		logsig	
	1ère couche cachée		9		2ème couche cachée		logsig	
	2ème couche cachée		7		Couche de sortie		Linear	
	Couche de sortie		1					
Entrée	F		n	L(nm)	Ex	Tox (nm)	Vgs	Vds
	Max	7Nn	10	200	2.4301×10^{12}	22	1.5 V	2V
	Min	1Nn	7	130	2.0381×10^{12}	17	0.2 V	0.5V
Sortie	v_{th}		MSE de teste			7.3158×10^{-5}		
	Max	-0.1822	MSE d'apprentissage			10^{-5}		
	Min	-0.7792						

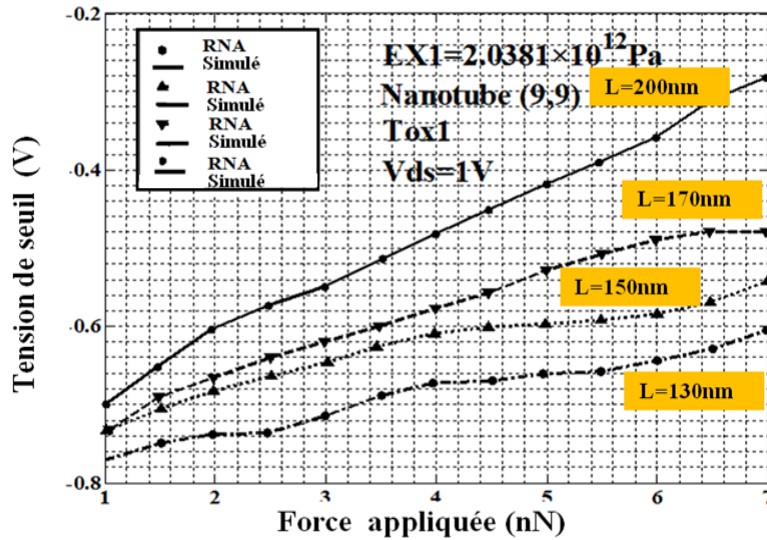


Figure IV.29: Performe du modèle neuronale directe

Les résultats obtenus montrent une très bonne concordance expliquée par un coefficient de corrélation élevé pour la phase d'apprentissage ($R_{tr} = 0.9981$) la phase de test ($R_{test} = 0.9071$) et la phase de validation ($R_{val} = 0.9069$). Ce qui indique que ces résultats sont très satisfaisants.

IV.6.1.2 Implémentation du modèle neuronales dans PSPICE

L'implantation d'un tel modèle dans PSPICE a été possible grâce aux améliorations apportées sur les dernières versions de ce logiciel, celui-ci permet aujourd'hui une grande souplesse dans la description des modèles. Il est en effet possible de décrire ceux-ci à l'aide de blocs fonctionnels modules «modules ABM » dans lesquels tout type d'équation liant les grandeurs d'entrée à la sortie est envisageable. Ces outils vont nous permettre d'implanter facilement notre modèle neuronale de nano capteur de force dans le simulateur PSPICE. Les blocs « ABMs » de la bibliothèque du simulateur PSPICE et les résultats obtenus pendant la phase de conception et d'optimisation (architecture optimale, bias et poids du réseau) sont utilisés pour la mise en œuvre du modèle comme un composant dans la bibliothèque du simulateur PSPICE.

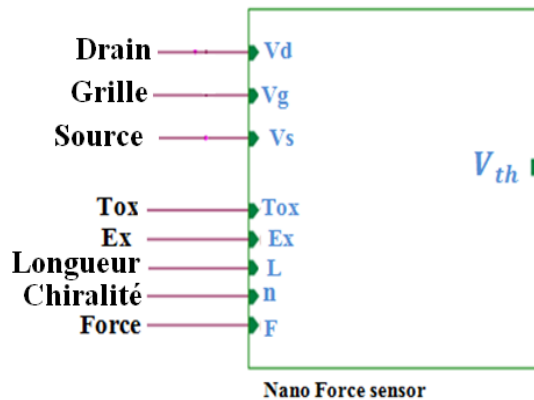
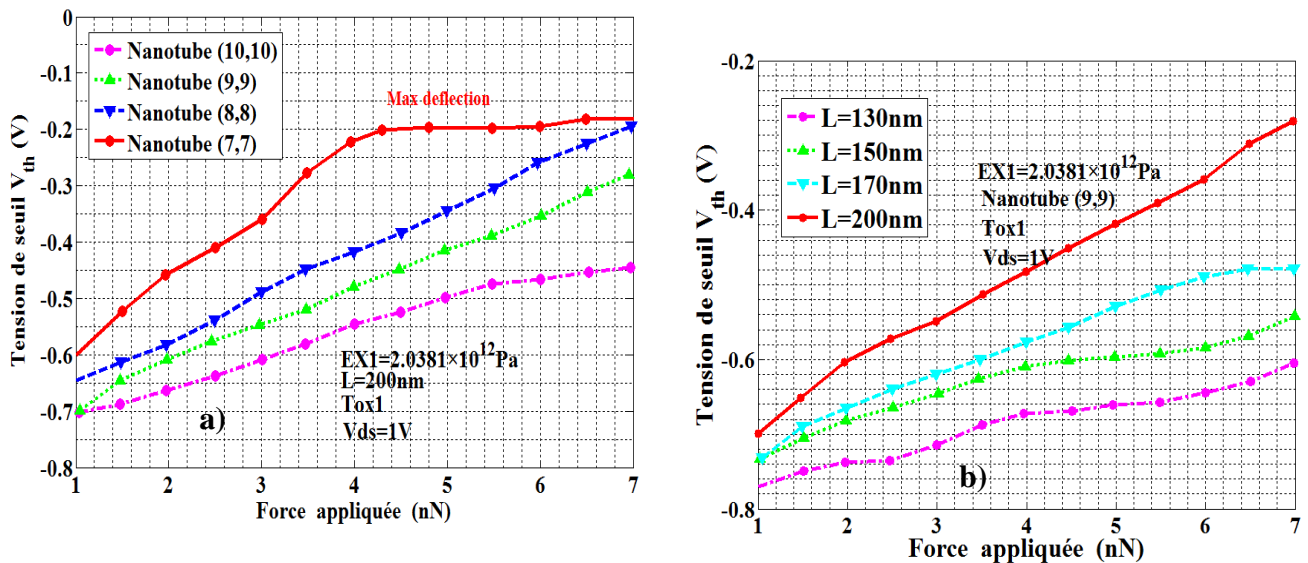


Figure IV.30: Le modèle neuronal implanté en tant que composant dans le simulateur PSPICE

IV.6.1.3 Résultats de simulation sous PSPICE

La validation du modèle consistera à simuler notre modèle neuronale dans environnement électrique, Les résultats de la simulation sont représentés dans la figure IV.31.



Selon les résultats précédentes, il est clair que le modèle conçu et implanté dans le simulateur PSPICE exprime fidèlement le comportement du nano capteur de force dans un environnement électrique on tient compte de la non linéarité de la réponse. Les résultats de la simulation montrent que le nouveau modèle du capteur de force peut être implémenté comme un composant dans la bibliothèque du PSPICE.

La non linéarité de la réponse de capteur pose un problème de mesure, dans ce contexte la linéarisation de la réponse de nano capteur de force est primordiale pour éviter les erreurs de mesure ; ce qui fera l’objet de la partie suivante.

IV.6.1.4 Modèle intelligent (INV-RNA) du nano capteur de force

Dans le but d’avoir une réponse linéaire de notre capteur, il nous faut un modèle inverse INV-RNA, dit aussi modèle intelligent. Pour le développement de ce modèle on commence par la linéarisation de la réponse de capteur en utilisant les réseaux de neurones ; on choisit une base de données caractérisée. On va procéder à la formation de la base de test et de validation en séparant la base d’apprentissage, puis on fait l’entraînement d’un réseau de neurones sur la base d’apprentissage avec l’algorithme de rétropropagation et finalement on vérifie la performance du modèle obtenu avec la base de test.

La figure IV.32 illustre l’évolution de l’erreur globale sur la base d’apprentissage en fonction du nombre d’itérations.

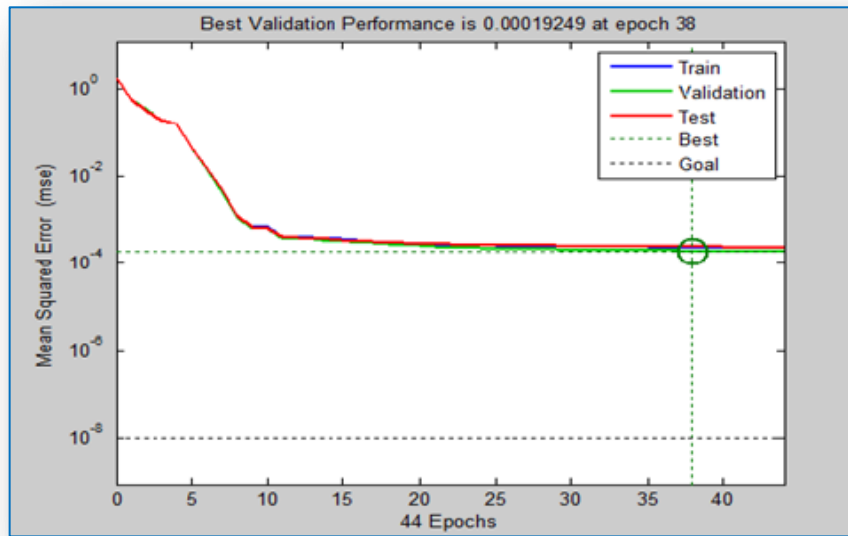


Figure IV.32: Evolution de l'erreur EOM en fonction du nombre d'itérations

Dans le but de tester les performances du modèle intelligent développé dans un environnement électrique nous l'avons implanté comme composant électrique dans la bibliothèque du simulateur PSPICE.

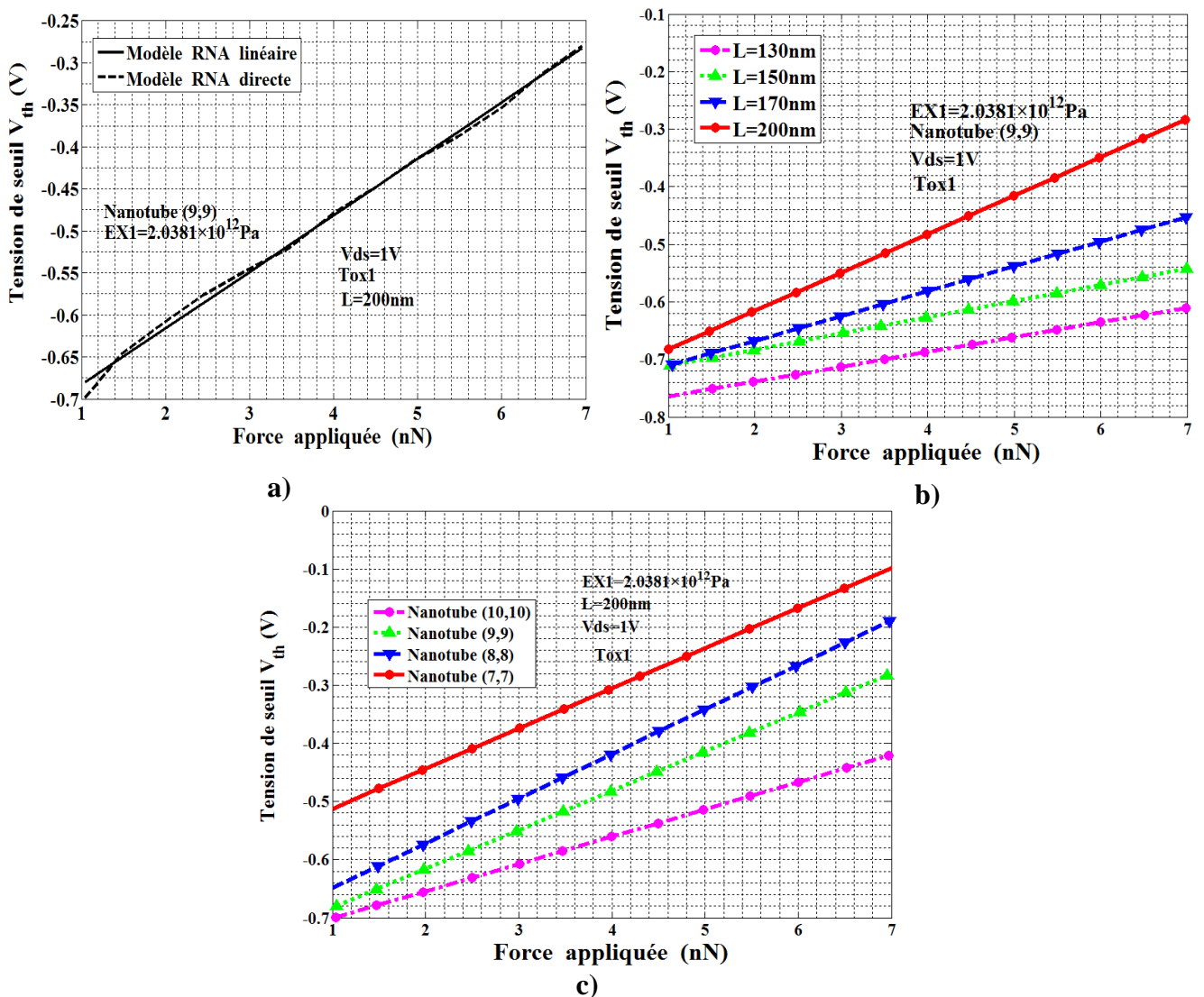


Figure IV.33: Réponse du modèle correcteur

La figure IV.33-a représente la courbe de sortie du modèle Direct-RNA avec la courbe de linéarisation obtenue après l'apprentissage de « INV-RNA » pour montrer la performance du modèle obtenu.

En examinant les résultats obtenus qui sont présentés dans la figure IV.33-b et la figure IV.33-c, nous pouvons dire qu'ils donnent d'excellents résultats, en effet, ils délivrent une sortie linéaire par rapport à la force appliquée.

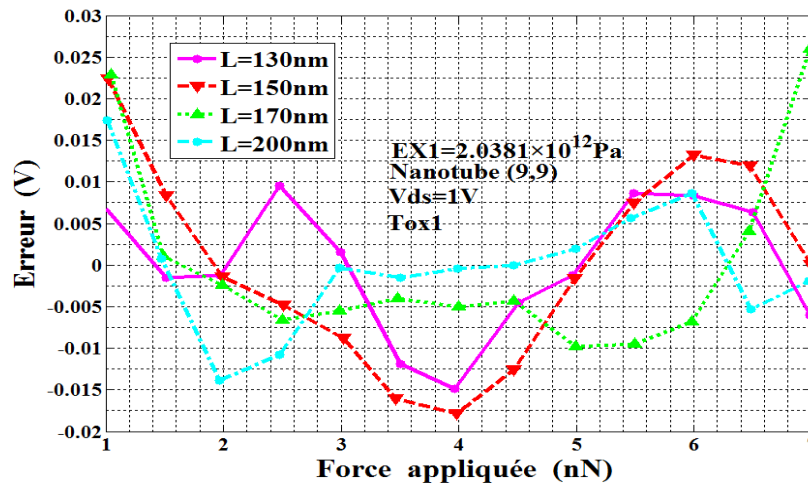


Figure IV.34: Erreur de linéarisation pour différentes valeurs de la force appliquée

La figure IV.34 montre l'écart entre la correction désirée et celle obtenue par le réseau conçu, cet écart présente l'erreur de linéarisation' pour différent valeur de la force appliquée.

IV.7 Conclusion

Dans cette étude nous avons proposé un nouveau nano capteur intelligent conçu spécifiquement pour détecter et mesurer la force à l'échelle nano-newton, en utilisant une structure constituée d'un nanotube de carbone suspendu, dont ses deux extrémités sont encastrées, et un transistor SOIMOSFET. Ce nanotube de carbone est utilisé comme une grille suspendu de transistor MOSFET.

Deux approches sont proposées pour détecter la force appliquée, la première est basée sur le changement de courant de drain dans le régime de saturation, par contre la deuxième est basée sur le changement de la tension de seuil de transistor.

La sensibilité obtenue par notre modèle développé peut atteindre jusqu'à $230.68 \ln(A)/\text{pN}$ pour la première approche et de 0.12431V/nN pour la deuxième approche cette sensibilité est plus importante par rapport aux résultats de la littérature.

A travers cette étude nous avons montré que les réseaux de neurones artificiels (RNAs) substituent notre nano capteur de force du fait qu'ils reproduisent fidèlement son comportement. En se basant sur des résultats réalisés dans la première partie, nous avons formé deux bases de données, la première pour l'apprentissage des réseaux par l'algorithme de la rétropropagation des erreurs et la deuxième pour le test et la validation du modèle. Le modèle à base des réseaux de

neurones du nanoforce (modèle RNA), ainsi obtenu, a été implanté sur le simulateur PSPICE, ce qui nous a permis de simuler son fonctionnement sur un environnement électrique et par conséquent évaluer ces performances. Nous avons également présenté, les réseaux de neurones comme un composant de correction (modèle inverse) pour le nano capteur de force. Le but assigné à ce composant est la correction du signal de sortie du capteur (rendre le capteur linéaire). Il est à noter que la différence entre les deux modèles développés, est que le premier est une modélisation comportementale du capteur de force capacitif (nano capteur de force), par contre le deuxième modèle joue le rôle d'un composant de correction.

IV.8 Références bibliographiques

- [1] P. Rougeot, S. Régnier, N. Chaillet, “ Forces analysis for micro-manipulation , “Proceedings international symposium on computational intelligence in robotics and automation”, IEEE, pp. 105-110, Espoo, Finland, 27-30 June 2005, (IEEE, 2005).
- [2] Maxime Girot ; Mehdi Boukallel ; Stephane Regnier, “Towards a non-destructive in vitro biomechanical characterization”, in the International conference of the Bio Micro and Nanosystems), IEEE, San Francisco, CA, USA, 15-18 Jan. 2006, (IEEE, 2006).
- [3] N. Kato, I. Suzuki, H. Kikuta, K. Iwata, “Force-balancing microforce sensor with an optical fiber in terferometer ”, Review of scientific instruments, Vol. 68, pp. 2475-2478, juin 1997.
- [4] F. Arai, D. Andu, Y. Nonoda, T. Fukuda, H. Iwata, K. Itoigawa, “Micro endeffector with micro pyramids and integrated piezoresistive force sensor”, proc. of int. conf on Intelligent Robots and Systems, IROS 96, Osaka, Japan, Japan , 8-8 Nov. 1996, Vol. 2, pp. 842-849, (IEEE, 1996).
- [5] F. Arai, A. Kawaji, T. Sugiyama, Y. Onomura, M. Ogawa, T. Fukuda, H. Iwata, K. Itoigawa, “3D micromanipulation system under microscope”, International symposium on micromechatronics and human science (MHA'98,1998), IEEE, Nagoya, Japan, Japan, 25-28 Nov. 1998, pp. 127-134, (IEEE, 1998).
- [6] W. Li, N. Xi, « Novel micro gripping, probing and sensing devices for single-cell surgery, “ Proceedings of the 26th international conference of the IEEE EMBS San Francisco, CA, USA, p. 2591-2594, September, 2004.
- [7] Y. Sun, Kai-Tak, W. K. Roberts, J. Bischof, J. Bradley, “Mechanical property characterization of mouse zona pellucida ”, IEEE Transactions on Nanobioscience, Vol. 2, n° 4, pp. 279-285, December, 2003.
- [8] Y. Sun, N. Fry , D. Potasek , D. Bell, B., Nelson , “Characterizing fruit fly flight behaviour using a microforce sensor with a new comb-drive configuration”, Journal of Microelectromechanical Systems, Vol. 14, pp. 4-11, 2005.
- [9] E. Peiner and L. Doering. , “Force calibration of stylus instruments using silicon microcantilevers”, Sensors and Actuators A, Vol. 123, pp. 137-145, 2005.
- [10] R. Perez, N. Chaillet, K. Domanski, P. Janus, and P. Grabiec. Fabrication, “modeling and integration of a silicon technology for sensor in a piezoelectric micromanipulator”, Sensors and actuators A : Physical, Vol. 128, pp. 367–375, 2006.
- [11] Giorgio Mattana, Danick Briand, “ Recent advances in printed sensors on foil”, Materials today, Vol. 19, n° 2, pp. 88-99, March 2016.
- [12] I. H. Song, P. K. Ajmera. , “ A laterally movable gate field effect transistor”, Journal of Microelectromechanical Systems, Vol. 18, n° 1, pp. 208–216, 2009.
- [13] S. Prabhu, S. Bhaumik, B. K. Vinayagam. , “element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube”, Journal of Mechanical Engineering Research, Vol. 4, n° 8, pp. 260–266, 2012.
- [14] Atlas User’s Manual, SILVACO TCAD, 2012.
- [15] Z. Wang, et al., “Enhancing sensitivity of force sensor based on a ZnO tetrapod by piezo-phototronic effect”, Appl. Phys. Lett., Vol.103, n° 14, id. 143125 (4 pages), 2013.
- [16] S. Lu, J. Qi, Z. Wang, P. Lin, S. Liu, Y. Zhang, “ Size effect in a cantilevered ZnO micro/nanowire and its potential as a performance tunable force sensor”, RSC Adv., Vol. 3, n° 42, pp. 19375–19379, 2013.
- [17] F. Djeflal, A. Abdi, Z. Dibi, M. Chahdi and A. Benhaya, “A neural approach to study the scaling capability of the undoped Double-Gate and cylindrical Gate All around MOSFETs”, Materials Sciences & Engineering B., Vol. 147, pp. 239-244, 2008.
- [18] F. Djeflal, Z. Dibi, M.L. Hafiane and D. Arar, “Design and simulation of a nanoelectronic DG MOSET current source using artificial neural networks”, Materials Sciences & Engineering C., Vol. 27, pp.1111-1116, 2007.
- [19] F. Menacer, A. Kadri, F. Djeflal, Z. Dibi, H. Ferhati, “Modeling of boron nitride-based nanotube biological sensor using neural networks,” The 17th international conference (STA'2016), IEEE, Sousse, Tunisia, December 2016.

- [20] F. Menacer, A . Kadri, F. Djeflal, Z. Dibi, H. Ferhati , “Modeling and investigation of smart capacitive pressure sensor sing artificial neural networks”, 6th International Conference on Systems and Control (ICSC 2017),IEEE, Batna, Algeria, May 2017.
- [21] Farid Menacer, Abdelmalek Kadri, Zohir Dibi, “Modeling of a Smartnanoforce Sensor Using Finite Elements and Neural Networks”, International Journal of Automation and Computing, pp.1-13, December 2018.
- [22] F. Menacer, Z.Dibi, A. Kadri, F. Djeflal, “A new smart nanoforce sensor based on suspended gate SOIMOSFET using carbon nanotube”, Measurement, Vol. 125,pp. 232-242, September 2018.
- [23] Yu Sheng Zhou , Ronan Hinchet et al, “Nano-Newton Transverse Force Sensor Using a Vertical GaN Nanowire based on the Piezotronic Effect”, advanced materials, Vol. 25,n° 6, pp. 793-933,2013.

*Chapitre V : Modélisation d'un
capteur d'acétone à base de
SWCNT en utilisant les éléments
finis et les réseaux de neurones
artificiels*

Résumé

L'objectif de cette partie de l'étude est modélisé et simulé le comportement d'un biocapteur permettant de détecter, de façon automatique et autonome, la présence des molécules d'acétone. Les nanotubes de carbone sont particulièrement adaptés pour la détection ultra-sensible de la molécule d'acétone, qui existe dans l'échantillon d'haleine des patients diabétiques et peut être utilisé pour le diagnostic du diabète. La méthode de détection est basée sur la variation de la fréquence de résonance de résonateur, le changement dans la masse effective du résonateur induit par la masse ajoutée entraîne une modification de sa fréquence de résonance. Nous avons élaboré une étude du comportement dynamique du nanotube, par l'approche des éléments finis pour les deux structures encastré-encastré (Clamped-Clamped) et encastré-libre (Clamped-Free), en déterminant le décalage de la fréquence propre du nano-résonateur qui varie en fonction de la masse de molécule d'acétone attachée. Nous avons constaté que le résonateur à nanotubes peut détecter une seule molécule d'acétone

Les résultats obtenus montrent une influence considérable des paramètres structuraux du SWCNT (longueur, diamètre, chiralité, la position de molécule et la distribution de ces molécules) sur le comportement dynamique du capteur d'acétone

En se basant sur les résultats de la simulation obtenue par l'approche FE, on a utilisé les réseaux de neurone multicouches à rétro propagation du gradient pour modélisation comportementale de notre capteur d'acétone. Le modèle neuronal est implanté sur le simulateur SPICE, ce qui nous a permis de simuler son fonctionnement dans un environnement électrique et par conséquent évaluer ses performances.

V.1 Introduction

La course à la miniaturisation en microélectronique et les progrès réalisés dans le domaine des nanotechnologies ont permis l'émergence dans les années 2000 de nouveaux dispositifs de dimensions plus réduites : les Nano-Systèmes Electromécaniques (NEMS). Le passage de la micro à la nano-échelle a permis une amélioration significative des performances de ces dispositifs, ouvrant ainsi la voie à de nouvelles perspectives applicatives allant du biomédical à l'étude de phénomènes quantiques. Avec des sensibilités accrues et des limites de détection pouvant atteindre le yocto-gramme (10^{-24} g), les NEMS apparaissent comme des candidats particulièrement prometteurs pour des applications de bio-détection ultra-sensible.

L'intérêt potentiel des bio-NEMS comme outils de bio-détection est multiple. Avec des performances de détection ultimes en termes de sensibilité et de limite de détection, un développement s'appuyant sur des technologies de fabrication directement issues du domaine de la micro-électronique, et offrant une détection en temps réel et sans marquage, il répond ainsi à de nombreux critères exigés pour le développement de nouveaux biocapteurs.

Pour des applications de bio-détection, les bio-NEMS peuvent être opérés selon deux modes de fonctionnement, un mode statique et un mode dynamique. Dans le mode statique, une interaction du matériau de l'absorbeur avec la substance chimique à détecter perturbe le bilan des forces (des moments) agissant dans le transducteur et, par conséquent induit un mouvement mécanique d'un élément mobile qui permet au transducteur d'atteindre un nouvel état d'équilibre mécanique. L'écart entre cet état et celui initial est utilisé ensuite pour quantifier le stimulus à détecter (figure V.1).

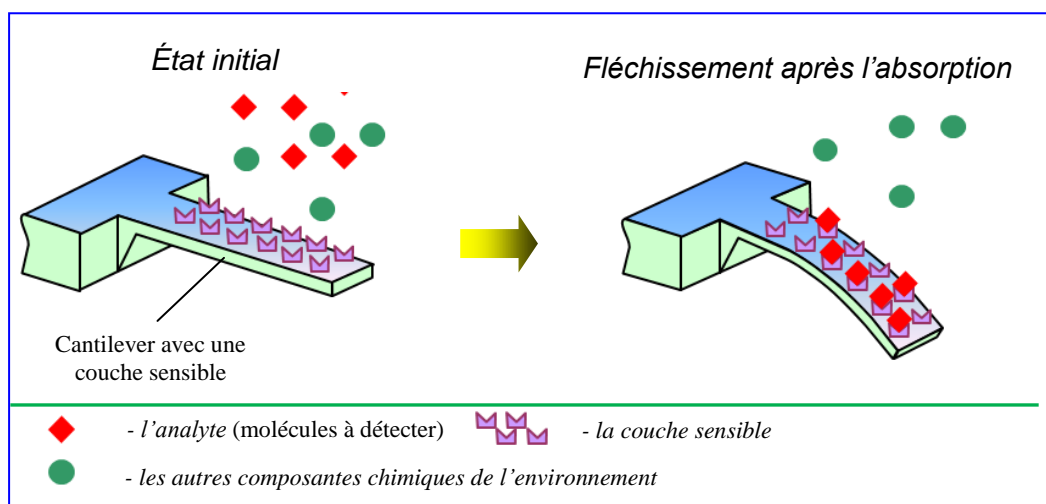


Figure V.1: Bio-détection en mode statique

Dans le cas du mode dynamique de détection, cette interaction modifie l'une des propriétés physiques du cantilever (la raideur, la masse équivalente, etc.) et, par conséquent induit un décalage de la fréquence de vibration propre du transducteur. Ce décalage varie en fonction de la quantité des molécules ciblées capturée par le transducteur et, par conséquent, peut être utilisé pour quantifier la composition chimique de son environnement (la concentration de gaz à détecter par exemple).

Dans les applications pratiques, les transducteurs plus répandus sont les transducteurs à cantilever qui apparaissent être les plus simples par leur structure géométrique. Comme son nom l'indique, ce transducteur présente un ressort à lame encastrée à une extrémité appelé « cantilever » (figure V. 2), qui assure le retour du transducteur à son état initial après avoir effectué une mesure (dans le mode statique) ou l'excitation de vibrations propres (dans le mode dynamique) à une fréquence choisie. Pour pouvoir varier l'état du transducteur en fonction du stimulus à détecter, une partie de ce ressort est faite sensible à l'état physique ou chimique de son environnement (par exemple, à la concentration d'une espèce chimique ou à une réaction chimique à détecter, à la température, etc.). Cette partie est connue sous les noms de « corps ou couche sensible », « absorbeur », « couche matrice ».

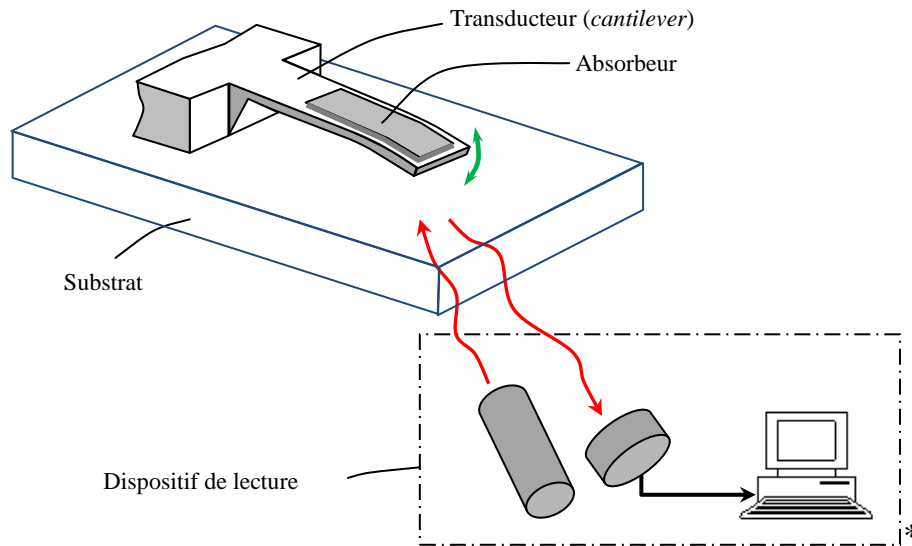


Figure V.2: Vue schématique d'un capteur bio-NEMS

V.2 Principe de détection par résonance

Grâce à ce principe, Mo Li et al. [1] ont obtenu des mesures de masses inférieures à l'attogramme ; un exemple de résonateur qu'ils ont utilisé est donné en figure V.3.

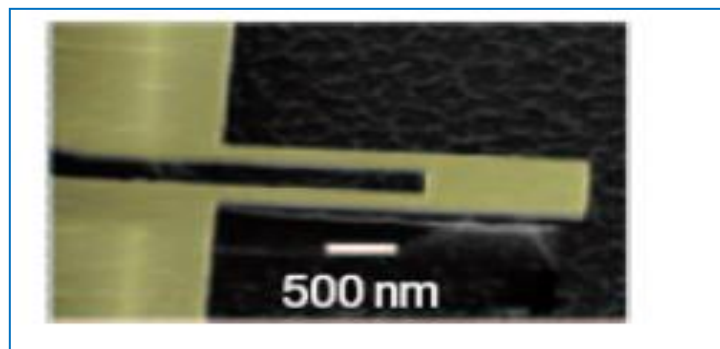


Figure V.3: Résonateur électromécanique

Sur cet exemple, le résonateur vibre selon une direction perpendiculaire au plan du wafer, on parle alors de vibration hors plan. Une couche de métal est déposée sur la surface du résonateur, un actionneur va faire vibrer le résonateur à sa fréquence de résonance ω_0 . Cette vibration va modifier la géométrie de la couche métallique et engendrer une variation de résistance de la couche. Par un dispositif électronique adéquat, on pourra ainsi mesurer cette variation et obtenir un signal de fréquence ω_0 . Supposons maintenant qu'une petite masse δm vienne s'accréter sur le résonateur. Si l'accrétion d'une petite masse n'affecte pas notablement la raideur k , la masse effective va se trouver modifiée si bien qu'au premier ordre la fréquence de résonance va se décaler d'un terme

$$\delta\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{M+\delta m}} - \sqrt{\frac{K}{M}} \approx \frac{\delta m}{2M} \omega_0 \quad (\text{V.1})$$

La réponse en fréquence du résonateur mécanique est donnée en figure V.4, on remarquera que l'accrétion d'une masse s'accompagne toujours d'un abaissement de la fréquence de résonance.

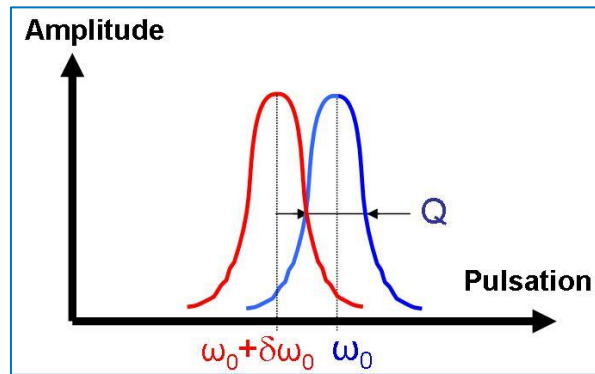


Figure V.4: Réponse en fréquence du résonateur électromécanique. En bleu, lorsqu'aucune masse n'est présente. En rouge, lorsqu'une masse m s'est accrétée.

V.3 Capteur d'acétone à base de nanotubes de carbone

Il y a eu un intérêt croissant des nanotubes de carbone dans des applications biologiques [2,3], en particulier dans la technologie médicale [4] et des capteurs biologiques [5,6] qui peuvent être classés en deux catégories [7,8]: capteurs chimiques [9] et biocapteurs [10,11]. L'application de nanotubes de carbone ont été explorés pour le développement de capteurs ultrasensibles nano-biologiques [12,13], des dispositifs à base de nanotubes électro-analytiques [14] et des actionneurs électromécaniques pour les muscles artificiels [15]. Le développement de capteurs nano-bio [16] et de systèmes de bioréacteurs nanométriques à base de nanotube de carbone à simple paroi SWCNT (Single-walled Carbon Nanotubes) a été motivé par les preuves expérimentales que des entités biologiques telles que protéines, enzymes, bactéries peuvent être immobilisées dans la cavité ou à la surface de nanotubes de carbone. Les capteurs basés sur la résonance offrent le potentiel le plus profond d'atteindre l'exigence de haute fidélité de nombreuses applications de détection.

Dans la présente étude, nous explorons le potentiel d'utilisation de nanotubes de carbone comme un nano résonateur mécanique pour la détection des molécules d'acétone (capteur d'acétone). Des formules analytiques simples sont dérivées pour les nano résonateur à base de nanotube de carbone pour deux configurations encastré-encastré (Clamped-Clamped) et encastré-libre (Clamped-Free) avec des masses attachée, représentant la relation entre la fréquence de résonance de résonateur et la masse attachées. Pour l'analyse de la fréquence de résonance des résonateurs à base de nanotube de carbone, nous adoptons la méthode de la mécanique des milieux continus, qui est combinée avec un logiciel d'éléments finis commercial (ANSYS).

V.3.1 Fréquences de résonance de SWCNT avec masse attachée

Les modèles continus basés sur la poutre ont été largement utilisés pour les nanotubes de carbone à une ou plusieurs parois, voir par exemple [17-18]. Afin d'obtenir des expressions analytiques simples de la masse des entités biochimiques ou biologique attachées, nous modélisons le nanotube de carbone à simple paroi comme une tige en se basant sur la théorie des poutres d'Euler-Bernoulli [19]. L'équation du mouvement de la vibration libre peut être exprimée comme :

$$EI \frac{\delta^2 y}{\delta x^2} + \rho A \frac{\delta^2 y}{\delta t^2} = 0 \quad (\text{V.2})$$

Où E est le module de Young, I est le moment d'inertie de la surface de section transversale A, et ρ la densité du matériau. Supposons que la longueur du SWCNT est L, selon la condition aux limites du SWCNT et l'emplacement de la masse attachée, la fréquence de résonance du système combiné peut être dérivée. Nous considérons seulement à la fréquence de résonance fondamentale, qui peut être exprimée comme :

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K_{eq}}{m_{eq}}} \quad (\text{V.3})$$

K_{eq} et m_{eq} sont respectivement la rigidité équivalente et la masse de nanotubes de carbone avec la masse attachée dans le premier mode de vibration. Deux types de contraintes d'extrémité sont considérés (encastré-libre et ponté). Pour le résonateur encastré-libre (cantilever) la masse supplémentaire est supposée fixée dans l'extrémité libre comme représenté sur la figure V.5. Pour le résonateur ponté, la masse attachée est supposée être fixée au milieu de la longueur du nanotube comme représenté sur la figure V.6

V.3.1.1 Cantilever à base SWCNT avec des masse ajoutées à la pointe

Supposons que la valeur de la masse ajoutée est M, comme le montre la figure V.5. Nous donnons une force virtuelle à l'emplacement de la masse, de sorte que la déflexion sous la masse devient unité. Pour ce cas, il peut être montré que $F_{eq} = 3EI/L^3$ [19] de sorte que:

$$K_{eq} = 3EI/L^3 \quad (\text{V.4})$$

La forme de la déflexion sur la longueur de nanotubes de carbone peut être obtenue à partir de l'équation V.5:

$$Y(x) = \frac{x^2(3L-x)}{2L^3} \quad (\text{V.5})$$

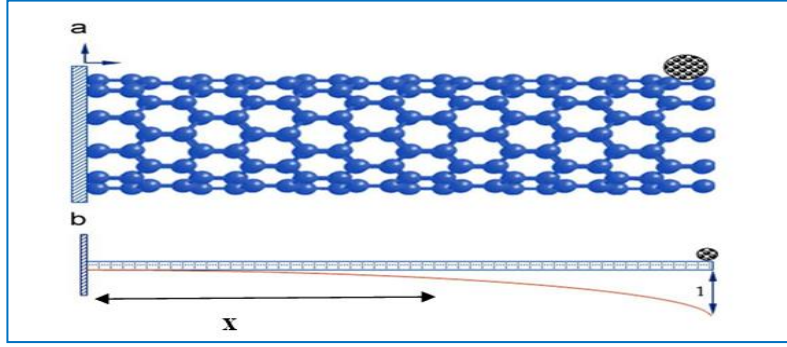


Figure V.5: Résonateur à nanotubes en cantilever avec une masse attachée à l'extrémité de la longueur du nanotube. (a) configuration d'origine; (b) l'idéalisation mathématique

En supposant un mouvement harmonique, c'est-à-dire $y(x, t) = Y(x)\exp(i\omega t)$ où ω est la fréquence, l'énergie cinétique de nanotubes de carbone peut être obtenue comme:

$$T = \frac{\omega^2}{2} \int_0^L \rho A Y^2(x) dx + \frac{\omega^2}{2} M Y^2(L) = \rho A \frac{\omega^2}{2} \int_0^L Y^2(x) dx + \frac{\omega^2}{2} M L^2$$

$$= \frac{\omega^2}{2} \left(\frac{33}{140} \rho A L + M \right) \quad (V.6)$$

Donc

$$m_{eq} = \frac{33}{140} \rho A L + M \quad (V.7)$$

La fréquence de résonance peut être obtenue en utilisant l'équation V.3 comme suit:

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K_{eq}}{m_{eq}}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{3EI/L^3}{\frac{33}{140} \rho A L + M}} \quad (V.8)$$

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{140}{11}} \sqrt{\frac{EI}{\rho A L^4}} \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{M}{\rho A L} \frac{140}{33}}} = \frac{1}{2\pi} \frac{\alpha^2 \beta}{\sqrt{1 + \Delta M}} \quad (V.9)$$

$$\alpha^2 = \sqrt{\frac{140}{11}}, \quad \alpha = 1.88, \quad \beta = \sqrt{\frac{EI}{\rho A L^4}} \quad (V.10)$$

$$\Delta M = \frac{M}{\rho A L} \mu, \quad \mu = \frac{140}{33} \quad (V.11)$$

Il est clair que la fréquence de résonance pour un nano résonateur de type cantilever sans masse de pointe ajoutée est obtenue en substituant $\Delta M = 0$ dans l'équation V.9 comme :

$$f_{0n} = \frac{1}{2\pi} \alpha^2 \quad (V.12)$$

De la combinaison des équations V.9 et V.12, on obtient la relation entre les fréquences de résonance et la masse attaché comme suit:

$$f_n = \frac{f_{0n}}{\sqrt{1 + \Delta M}} \quad (V.13)$$

Ainsi, le décalage de fréquence de résonance dû à la masse attachée est:

$$\Delta f = f_n - f_{0n} = f_{0n} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{140M}{33\rho A L}}} \right) \quad (V.14)$$

Le pourcentage de décalage de la fréquence de résonance par rapport à la fréquence de résonance originale est:

$$\frac{\Delta f}{f_{0n}} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{140M}{33\rho AL}}} \quad (\text{V.15})$$

Ainsi, en mesurant le pourcentage de décalage de la fréquence de résonance ($\frac{\Delta f}{f_{0n}}$), la masse attachée peut être calculée comme suit:

$$\frac{140M}{33\rho AL} = \frac{1}{\left(1 - \frac{\Delta f}{f_{0n}}\right)^2} - 1, \quad M = \frac{33\rho AL}{140} \left(\frac{1}{\left(1 - \frac{\Delta f}{f_{0n}}\right)^2} - 1\right) \quad (\text{V.16})$$

En mesurant le décalage relatif de la fréquence de résonance ($\frac{\Delta f}{f_{0n}}$), nous connaissons la quantité de molécule d'acétone attachée. C'est le principe de fonctionnement de l'utilisation du résonateur à nanotubes de carbone comme un nano capteur d'acétone.

V.3.1.2 SWCNT ponté avec des masses ajoutées placées au milieu du nanotube

Ce cas est illustré à la figure V.6. Nous donnons à nouveau une force virtuelle à l'emplacement de la masse, de sorte que la déflexion sous la masse devient unité. Pour ce cas, il peut être montré que $F_{eq} = 192EI/L^3$ de sorte que [20] :

$$K_{eq} = 192EI/L^3 \quad (\text{V.17})$$

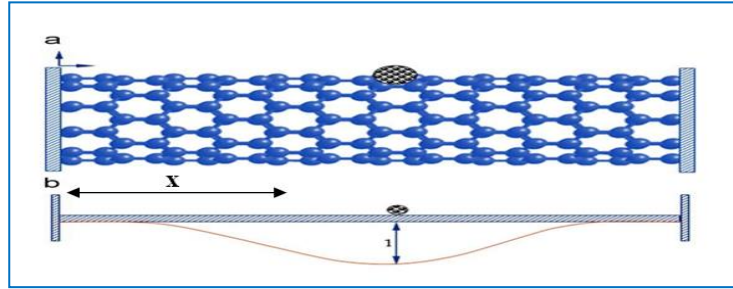


Figure V.6: Résonateur à nanotubes ponté avec une masse attachée au centre de la longueur du nanotube. (a) configuration d'origine; (b) l'idéalisation mathématique.

La forme de la déflexion sur la longueur du SWCNT peut être obtenue :

$$Y(x) = \begin{cases} \frac{32\left(\frac{x^3}{2} - \frac{3x^2L}{8}\right)}{L^3}, & x < L/2 \\ \frac{32\left(\frac{x^3}{2} - \frac{3x^2L}{8} - \left(x - \frac{1}{2}L\right)^3\right)}{L^3}, & x > L/2 \end{cases} \quad (\text{V.18})$$

En supposant un mouvement harmonique, l'énergie cinétique du SWCNT peut être exprimée par :

$$T = \frac{\omega^2}{2} \int_0^L \rho AY^2(x) dx + \frac{\omega^2}{2} MY^2(L) = \frac{\omega^2}{2} \left(\frac{13}{35} \rho AL + M\right) \quad (\text{V.19})$$

La première intégrale a été calculée en divisant l'intégrale en deux parties et en choisissant les expressions appropriées de $Y(x)$ à partir de l'équation V.14. La masse équivalente est donnée par l'équation suivante :

$$m_{eq} = \frac{13}{35} \rho AL + M \tag{V.20}$$

La fréquence de résonance peut être obtenue en utilisant l'équation V.2 comme :

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\frac{192EI}{L^3}}{\frac{13}{55} \rho AL + M}} = \frac{1}{2\pi} \frac{\alpha^2 \beta}{\sqrt{1 + \Delta M}} \tag{V.21}$$

Où β est donné par l'équation V.10 et

$$\alpha^2 = \sqrt{\frac{6720}{13}} \text{ ou } \alpha = 4.768 \tag{V.22}$$

$$\Delta M = \frac{M}{\rho AL} \mu, \mu = \frac{35}{13} \tag{V.23}$$

Ces équations sont maintenant utilisées pour obtenir la masse attachée sur la base du décalage de la fréquence de résonance .

V.4 Etude numérique et paramétrique du nano-résonateur à base SWCNT

Cette étape s'intéresse à l'étude du comportement dynamique du nano-résonateur à base de modèle du nanotube de carbone développé, pour deux configurations encastré-encastré C-F (figure V.7-a) et encastré-libre C-C (figure V.7-b). En déterminant le décalage de la fréquence propre du nano-résonateur, qui varie en fonction de la quantité des molécules d'acétone attachées.

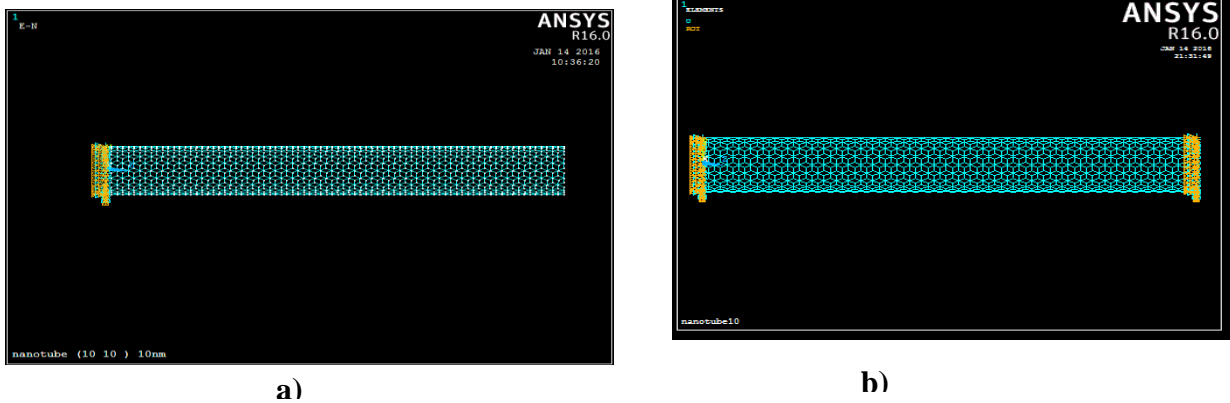


Figure V.7: Modèle de résonateur à base de SWCNT en utilisant ANSYS
 a) encastré-libre b) encastré-encastré

Le simulateur tridimensionnel d'éléments finis ANSYS est conçu pour calculer la fréquence de résonance du nano résonateur à base du modèle des éléments finis de nanotube de carbone développé . Les caractéristiques du nanotube sont données comme suit : le module d'élasticité est de 2.038 Tpa , le coefficient de Poisson est de 0.30 et la densité de masse volumique est 2180 kg/m³ [21,22]. On peut noter que la masse d'une molécule de l'acétone (CH_3COCH_3) est de $58.08 \times 1.66 \times 10^{-27} Kg = 9.64 \times 10^{-14} ng$.

Pour démontrer que notre capteur d'acétone à base de nanotube de carbone peut détecter des petites quantités de molécules d'acétone (même une seule molécule d'acétone), il est nécessaire d'avoir un nanotube de carbone qui a une chiralité aussi grande que possible et une longueur de nanotube aussi petit que possible (par exemple $L = 6\text{nm}$ et chiralité $n = 12$).

Si une quantité de k molécules d'acétone est attachée à l'extrémité du nanotube de carbone, pour la configuration encasturé-libre, la fréquence naturelle du nano-résonateur sera décalée de f_{0n} à $f_{0n} + \Delta f$. Le pourcentage de décalage de la fréquence est donné par l'équation suivante:

$$\frac{\Delta f}{f_{0n}} \times 100\% = \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{140km}{33\rho\pi r^2 L}}}\right) \times 100\% \quad (\text{V.24})$$

Où: L , r et ρ sont respectivement la longueur, le rayon et la densité volumique du nanotube de carbone; k est le nombre de molécules d'acétone attachées et m est la masse d'une molécule d'acétone.

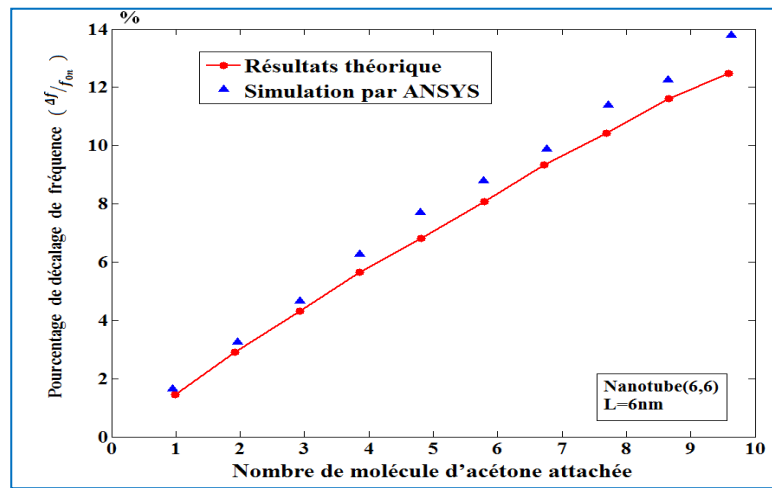


Figure V.8: Relation entre le nombre de molécules d'acétone attachées et le pourcentage de décalage de fréquence

Dans le cas d'une petite quantité de molécules d'acétone attachées, la relation de cette dernière et le pourcentage de décalage de la fréquence est approximativement linéaire. A partir de la figure V.8 et du tableau V.1, on constate qu'il y a un bon accord entre les résultats de simulation par ANSYS et les résultats théoriques. On constate aussi que le capteur d'acétone proposé peut atteindre une sensibilité extrêmement élevée au niveau moléculaire (Tableau V.1)

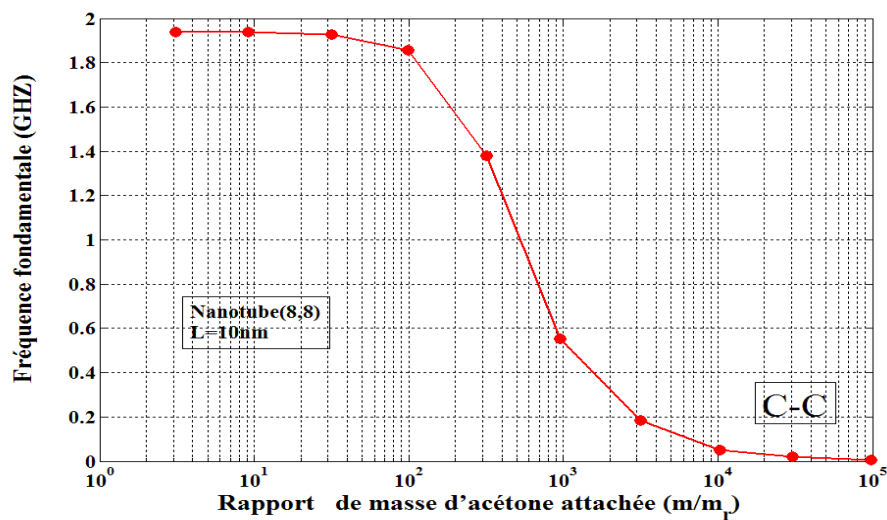
Tableau V.1: Résultats de simulation par ANSYS et les résultats théoriques de pourcentage de décalage de fréquence

Nombre de molécules d'acétone attachées (k)	Décalage de la fréquence en pourcentage (Simulation par ANSYS)	Décalage de la fréquence en pourcentage (résultats théoriques)	Erreur relative %
1	1.6498 %	1.5013 %	9.088
2	3.2633 %	2.9370 %	10.0001
3	4.6362 %	4.3116%	7.0006
4	6.1863 %	5.6295%	8.0006
5	7.5762 %	6.8944%	6.9995

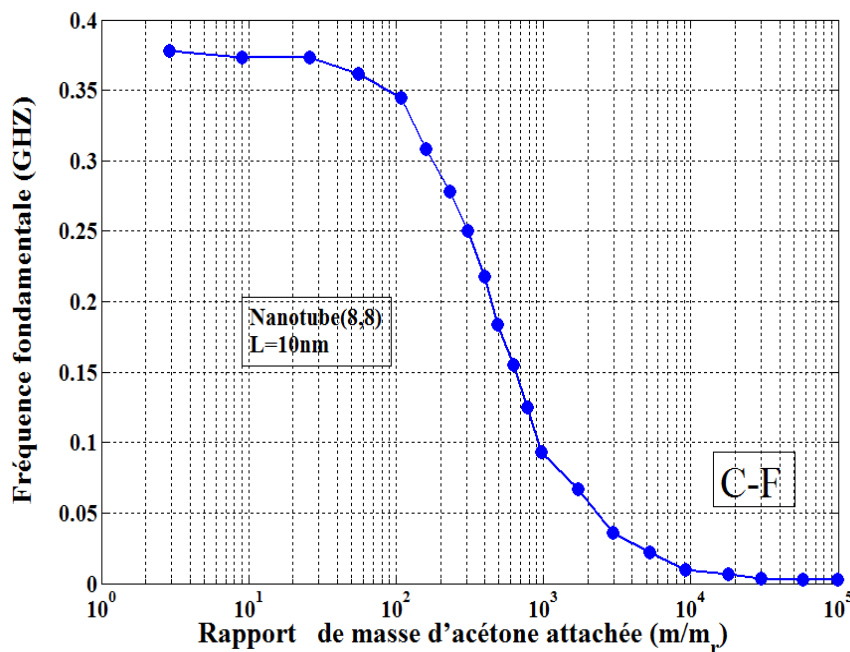
6	8.8149 %	8.1097%	7.9997
7	9.8709 %	9.2787%	5.9994
8	11.4331 %	10.4041%	8.9997
9	12.2220 %	11.4887%	8.022

V.4.1 L'influence de rapport de masse d'acétone attachée sur la fréquence fondamentale du nano-résonateur

La figure V.8 représente la variation de la fréquence fondamentale du nanotube en fonction de rapport de masse d'acétone attachée α ($\alpha = m/m_r$), m_r indique la masse d'une molécule d'acétone et m indique la masse attachée. Dans cette partie d'étude on a supposé que les molécules d'acétone s'attachent au bout du nanotube dans la configuration encastré-libre (figure V.6) et en milieu du nanotube dans la configuration encastré-encastré (figure V.5).



a)



b)

Figure V.9: Variation de la fréquence fondamentale du nanotube en fonction de rapport de masse d'acétone $\alpha = \left(\frac{m}{m_r}\right)$ a) configuration encastré- encastré b) configuration encastré- libre

La figure V.9 indique clairement que la fréquence fondamentale du nano-résonateur diminue avec l'augmentation de la quantité de la masse attachée. On constate d'après la figure V.8 que la quantité des molécules attachées avait un effet important sur la fréquence fondamentale de nano-résonateur pour les deux configurations (C-C) et (C-F), cela est dû au changement de la distribution de masse de la structure de nanotube de carbone, c.-à-d en attachant une particule d'acétone au SWCNT, la masse totale du système augmente mais la rigidité reste inchangée et par conséquent la fréquence diminue. Les résultats de simulation dans les deux configurations indiquent que la fréquence fondamentale du nano résonateur diminue avec l'augmentation de rapport de masse d'acétone α .

Les troisième, quatrième et cinquième fréquences naturelles de notre modèle de nano-résonateur, pour les différentes valeurs de rapport de masse d'acétone α , sont représentées dans la figure V.10.

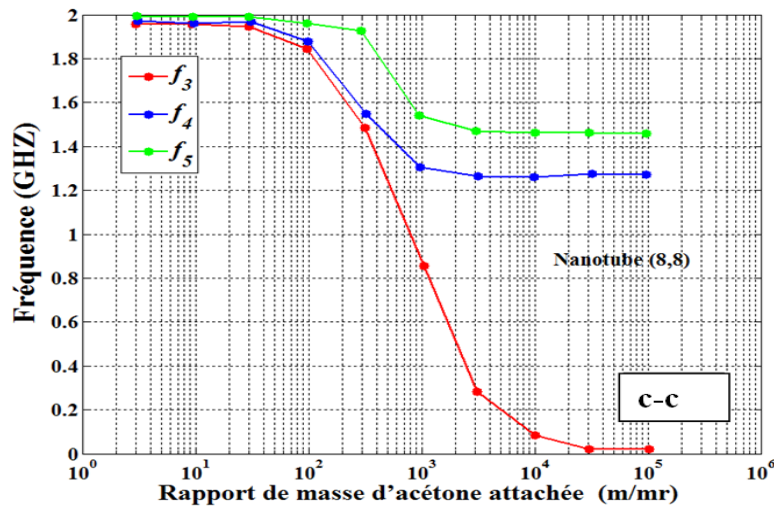


Figure V.10: Troisième, quatrième et cinquième fréquences naturelles de nano-résonateur pour différentes valeurs de rapport de masse d'acétone α (Configuration C-C)

Les résultats de la simulation indiquent également que les troisièmes, quatrième et cinquièmes fréquences naturelles du résonateur à nanotubes de carbone diminuent avec l'augmentation de rapport de masse d'acétone α .

V.4.2 Effet de la longueur de SWCNT sur le décalage de la fréquence fondamentale du nano résonateur

Une première série de calcul correspondant à un nanotube de carbone de chiralité 10 ($n=m=10$) avec différentes longueurs ($L=8\text{nm}$, $L=10\text{nm}$ et $L=12\text{nm}$). Figure V.11 illustre le décalage de la fréquence fondamentale de nano résonateur à base de nanotube de carbone due aux masses d'acétone attachées.

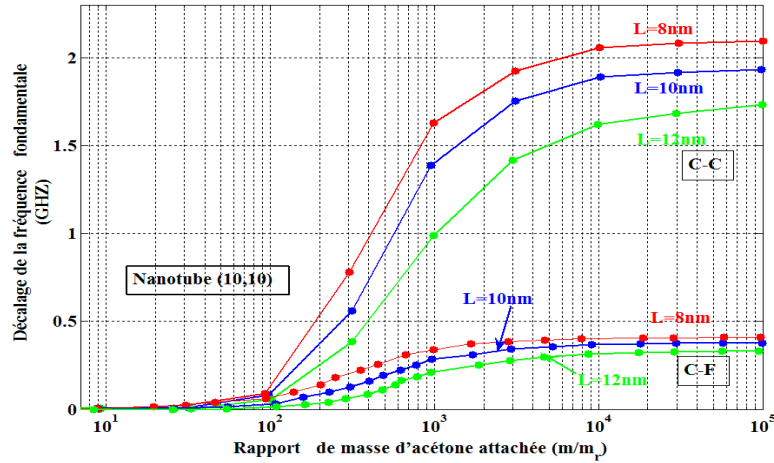


Figure V.11: Décalage de la fréquence fondamentale de nano-résonateur en fonction du rapport de masse d'acétone α avec différentes longueurs de nanotubes

La figure V.11 indique clairement que le décalage de la fréquence du nano résonateur augmente avec l'augmentation de la quantité de la masse attachée. Le décalage de la fréquence devient plus grand quand la longueur de nanotube est plus courte cela pour les deux configurations C-C et C-F. Le résultat peut être expliqué comme suit, pour un SWCNT plus court, sa rigidité est la même en comparant avec les autres mais sa masse volumique est plus petite.

On constate que le décalage de la fréquence du nano-résonateur converge à une certaine valeur pour une quantité de molécules d'acétone attachée très élevés, Cependant, cette stabilité de décalage de fréquence n'a aucun impact négatif sur les capacités de sensation du nano résonateur car ces masses sont beaucoup plus grandes que celle du nanotube, et donc on n'a pas besoin de les détecter.

V.4.3 L'influence de la chiralité du nanotube sur le décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur

Une deuxième série de calculs correspondant à un nanotube de longueur 10 nm et à différente valeur de chiralité ($n=m=10$, $n=m=8$ et de nanotube $n=m=10$), figure V.12 illustre le décalage de la fréquence de SWCNT dû aux masses d'acétone supplémentaires attachée.

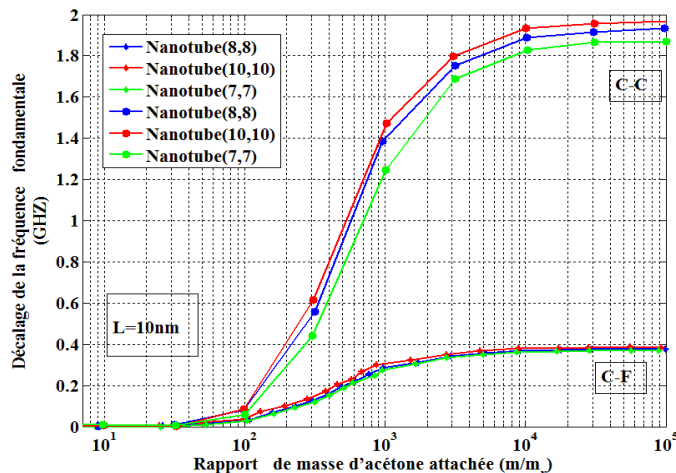


Figure V.12 Décalage de la fréquence fondamentale de nano-résonateur en fonction du rapport de masse d'acétone α avec différentes chiralités de nanotubes

Le schéma V.12 indique clairement que le décalage de fréquence du nano résonateur devient plus élevé quand le diamètre de nanotube de carbone est plus grand, cela est validé pour les deux configurations C-C et C-F.

D'après la figure V.11 et la figure V.12, il est clair que pour une quantité de molécule d'acétone attachées fixe, plus la longueur de nanotube de carbone aussi petite que possible et une chiralité aussi grande que possible, plus le décalage de la fréquence du nano résonateur est important. À partir des figures V.11 et V.12 on peut constater, si le rapport de masse attaché $\alpha \geq 10^2$, la relation entre le décalage de la fréquence naturelle et le logarithmique de rapport de masse d'acétone ($\log(\alpha)$) devient linéaire, ce qui est représenté par la relation suivante :

$$\Delta f = A * \log(\alpha) + B \tag{V.25}$$

Où A et B sont des constantes liées aux conditions limite de nano résonateur à base de nanotube de carbone (type de configuration du résonateur à nanotubes (C-C ou C-F) et aux valeurs de la longueur et de diamètre des nanotubes). L'effet de la chiralité et de la longueur du nanotube sur la sensibilité de la détection d'acétone attachée pour $\alpha \geq 10^2$, pour les deux configurations C-C et C-F, sont représentées sur la figure V.13-a et la figure V.13-b respectivement.

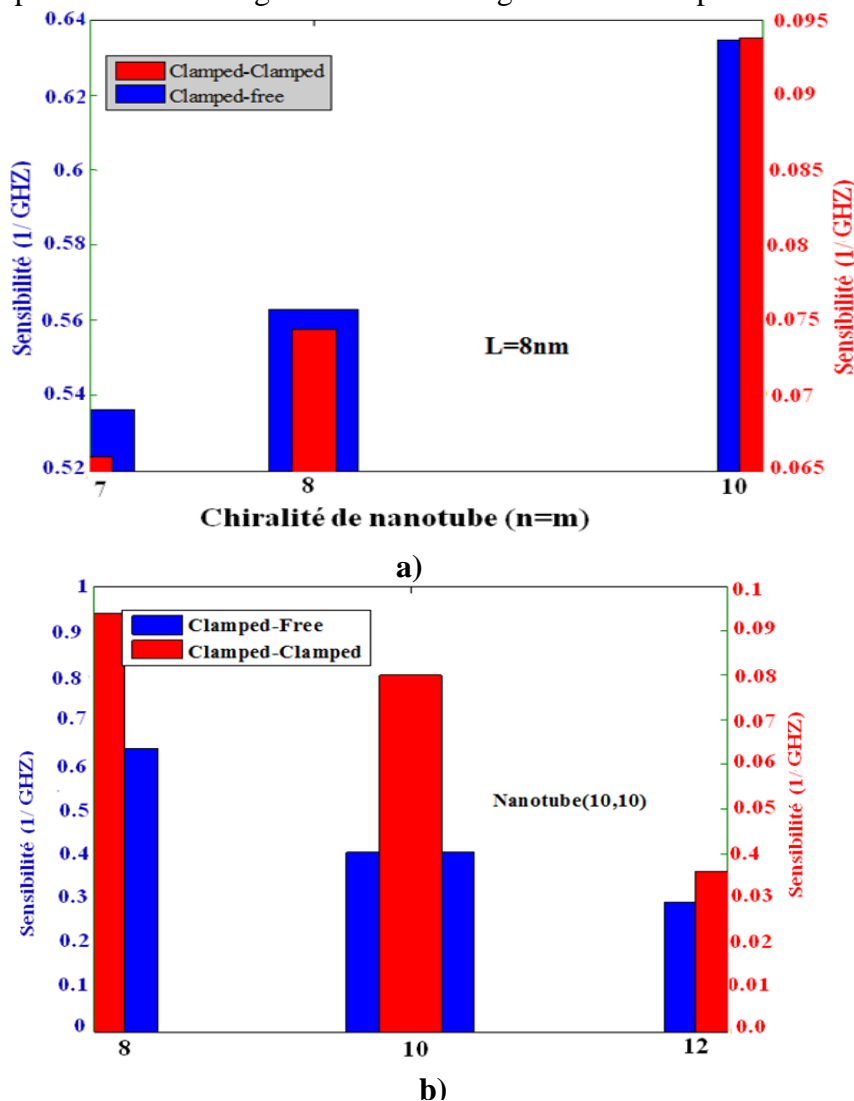


Figure V.13: La sensibilité de détection pour $\alpha \geq 10^2$ a) l'effet de chiralité b) l'effet de longueur

On constate que la sensibilité du capteur augmente avec la diminution de la longueur des nanotubes de carbone et l'augmentation du diamètre des nanotubes de carbone pour les deux configurations C-C et C-F. Il est évident d'après la figure V.13 que l'effet de la chiralité sur la sensibilité de capteur est beaucoup plus faible que celle de la longueur. On constate que la sensibilité du capteur est plus grande dans la configuration encastré-libre (C-F) que dans la configuration encastré-encastré (C-C).

V.4.4 L'influence de la position de la masse attachée sur la fréquence fondamentale du nano-résonateur

L'endroit de la masse d'acétone attachée peut influencer sur la fréquence fondamentale du nano résonateur.

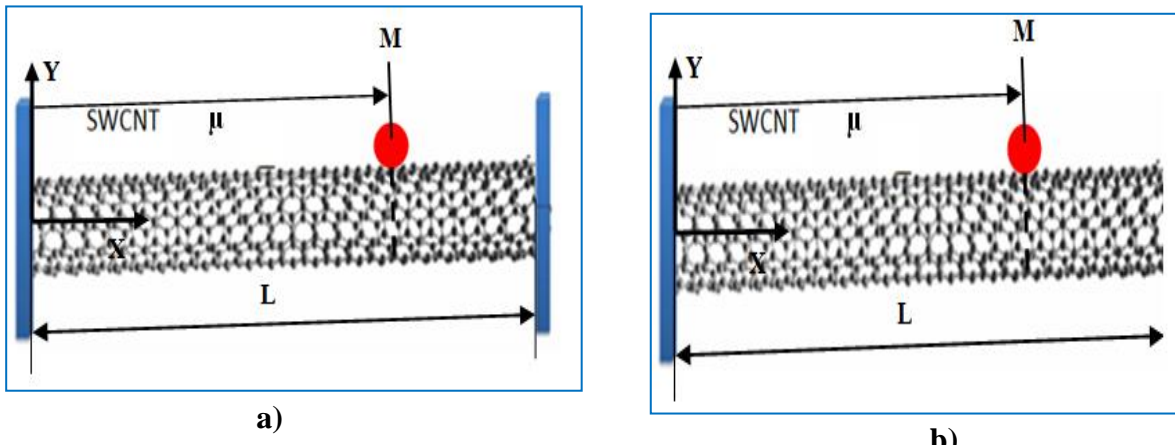
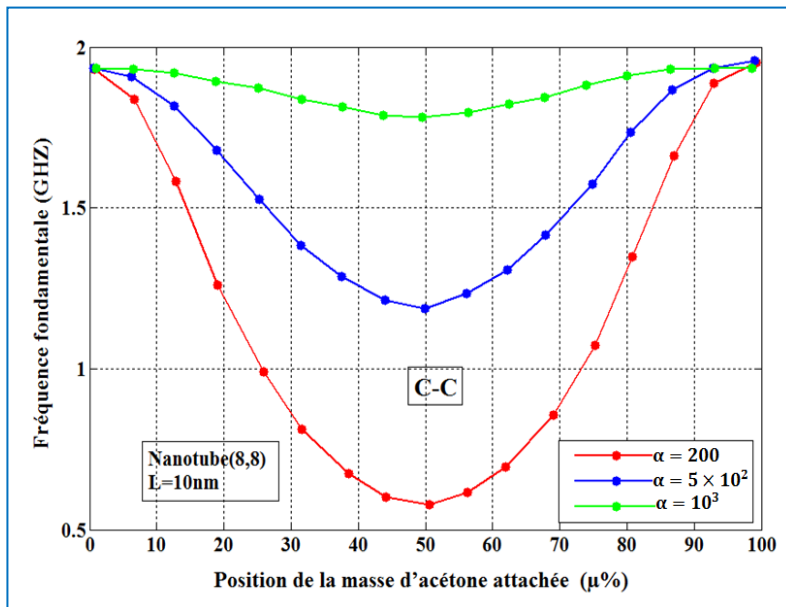
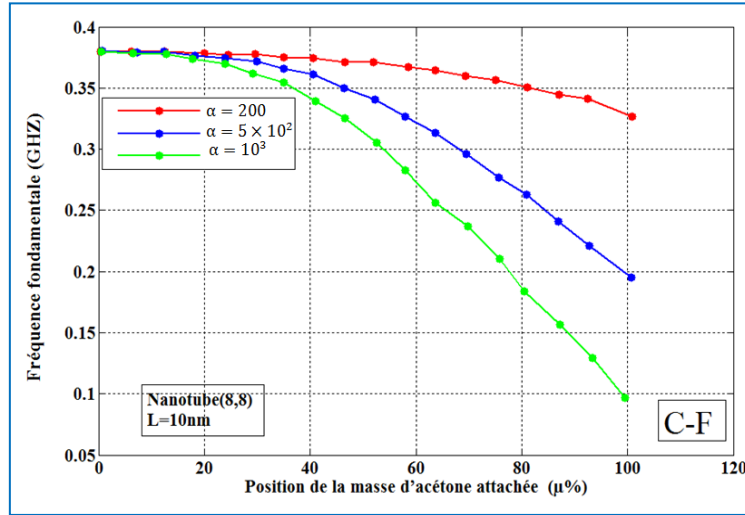


Figure V14: Position de la masse d'acétone attachée a) configuration encastré-encastré (C-C). b) configuration encastré-libre (C-F)

La figure V.15 représente la variation de la fréquence fondamentale du nano-résonateur pour deux structures, encastré-encastré (figure V.14-a) et encastré-libre (figure V.14-a), paramétrée en rapport de masse d'acétone attachée, en fonction de la position axiale μ de cette masse sur le nanotube.



a)



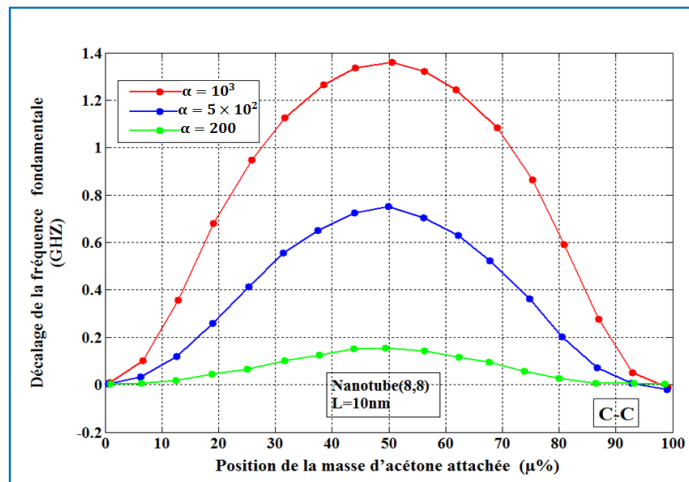
b)

Figure V.15: Variation de fréquence fondamentale du nano-résonateur en fonction de la position de la masse d'acétone attachée a) configuration encasté-encasté (C-C). b) configuration encasté-libre (C-F)

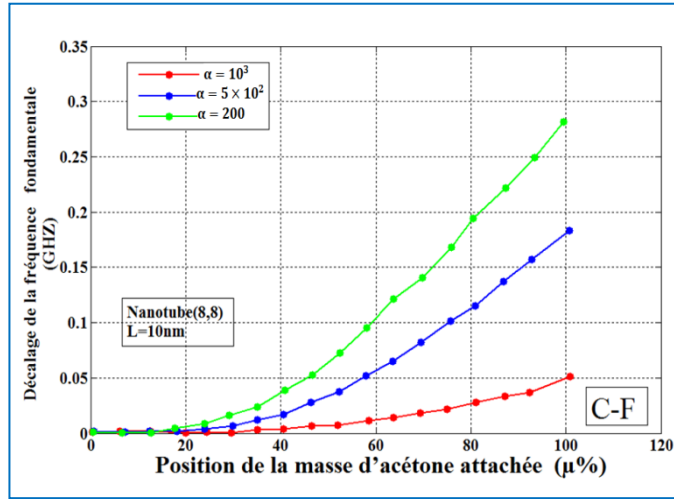
La figure V.15 indique clairement que la fréquence fondamentale du nano résonateur diminue avec l'augmentation de la quantité de la masse attachée. On peut voir aussi que la valeur de la fréquence fondamentale de nano résonateur est importante quand les molécules d'acétone attachées sont plus proches de l'extrémité encasté. La plus faible valeur de la fréquence fondamentale du nano résonateur est obtenu quand les molécules d'acétone attachée est en milieu du nanotube pour la configuration (C-C) (c.-à-d. $\mu=50\%$) et à l'extrémité libre pour la configuration C-F (c.-à-d. $\mu=100\%$). On remarque aussi qu'il ya une symétrie de la fréquence fondamentale dans la structure (C-C) dont l'axe de symétrie se trouve au milieu de nanotube. On constate que l'emplacement de la masse attachée a un effet important sur la fréquence fondamentale du nanotube.

V.4.5 L'influence de la position de la masse attachée sur le décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur

De manière similaire de l'étude précédente, figure V.16 illustre l'effet de l'endroit de la masse d'acétone attachée sur le nano résonateur.



a)



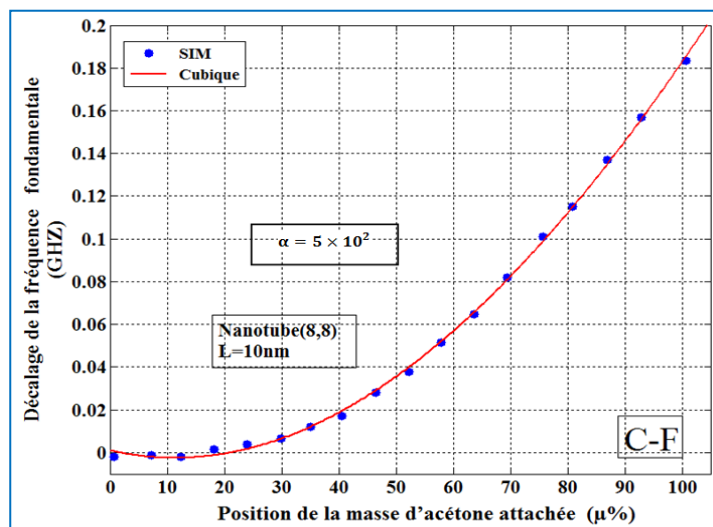
b)

Figure V.16: Variation la valeur de décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur en fonction de la position de la masse d'acétone attachée a) configuration encastré-encastré (C-C). b) configuration encastré-libre (C-F)

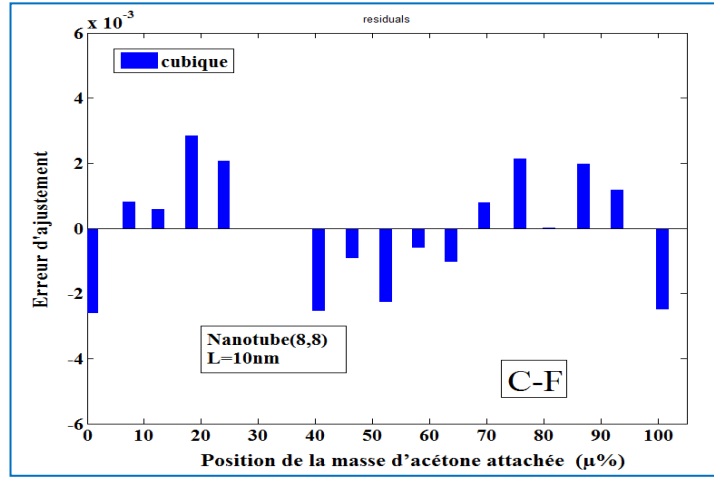
On remarque que le décalage de fréquence fondamentale augmente quand la masse d'acétone attachée est plus proche, de l'extrémité libre pour la configuration encastré-libre ou en milieu du nanotube pour la configuration encastré-encastré. On obtient une valeur maximale de décalage de fréquence quand $\mu=50\%$ pour la configuration (C-C) et quand $\mu=100\%$ pour la configuration (C-F).

On peut voir que l'effet de l'endroit de la masse attachée sur le décalage de fréquence du nano résonateur de masse est significatif. La réponse caractéristique non linéaire du modèle de nano capteur de masse d'acétone peut être développée par des algorithmes d'ajustement de courbe. Les valeurs extrapolées par un polynôme de troisième ordre ont un très bon ajustement aux valeurs originales. La fonction du décalage de fréquence avec la position de la masse jointe est exprimée par :

$$\Delta f = -3.6905 * 10^{-8}x^3 + 2.808 * 10^{-5}x^2 - 0.00061976 * x + 0.00097196 \quad (V.26)$$



a)



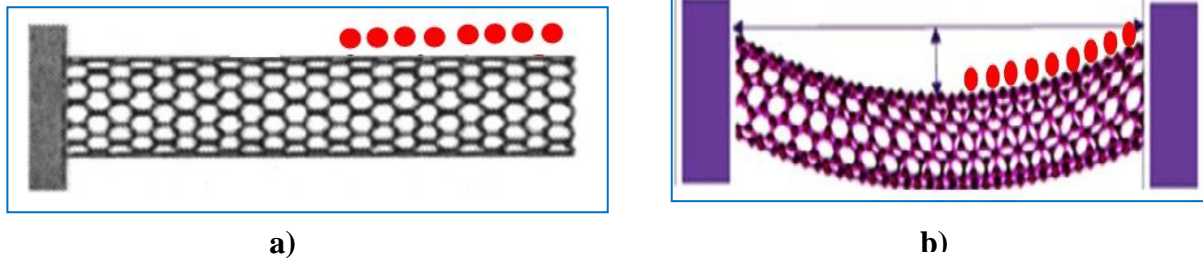
b)

Figure V.17: Le décalage de la fréquence naturelle en fonction de la a) Ajustement de la courbe b) erreur de l'ajustement

La figure V.17-b montre l'erreur entre la courbe d'ajustement et les valeurs originales du modèle de capteur d'acétone, l'erreur maximale est d'environ 0,0032 GHz.

V.4.6 L'effet de la distribution de masse d'acétone attachée sur la fréquence naturelle des résonateurs

Dans cette partie, nous nous intéressons à la variation de la fréquence fondamentale du nano résonateur pour deux structure (C-F) et (C-F), quand la quantité de la masse de molécule d'acétone attachée est distribuée au long du nanotube c'est le cas plus général comme il est représenté sur la figure V.18.



a)

b)

Figure V.18: Nano résonateur à base de nanotube de carbones chargé avec des molécules d'acétone répartie a) Configuration encastré-encastré (C-C). b) Configuration encastré-libre (C-F)

La figure V.19 illustre l'effet de la distribution de molécules d'acétone au long du nanotube sur le décalage de fréquence de résonance du nanotube.

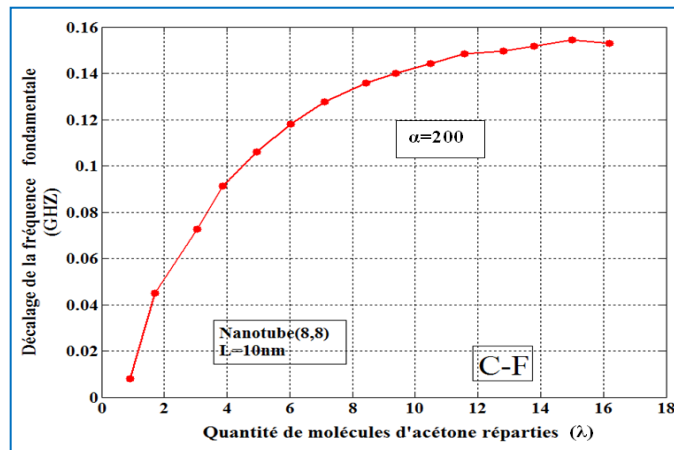


Figure V.19: Effets de la quantité de molécules d'acétone réparties au long du nanotube sur le décalage de la fréquence naturelle du nano-résonateur à base de nanotube de carbones

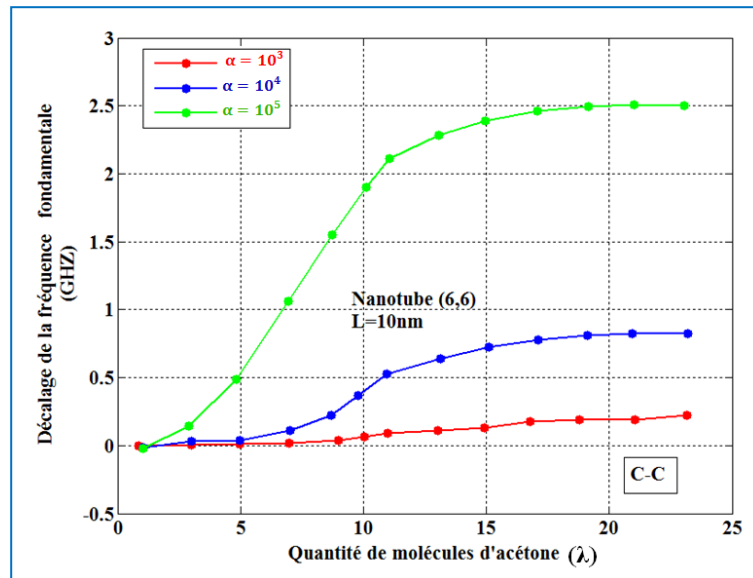


Figure V.20: Décalage de la fréquence naturelle du nano résonateur à base de nanotube de carbones en fonction λ et le rapport de masse α répartie pour la configuration encastré-encastré (C-C)

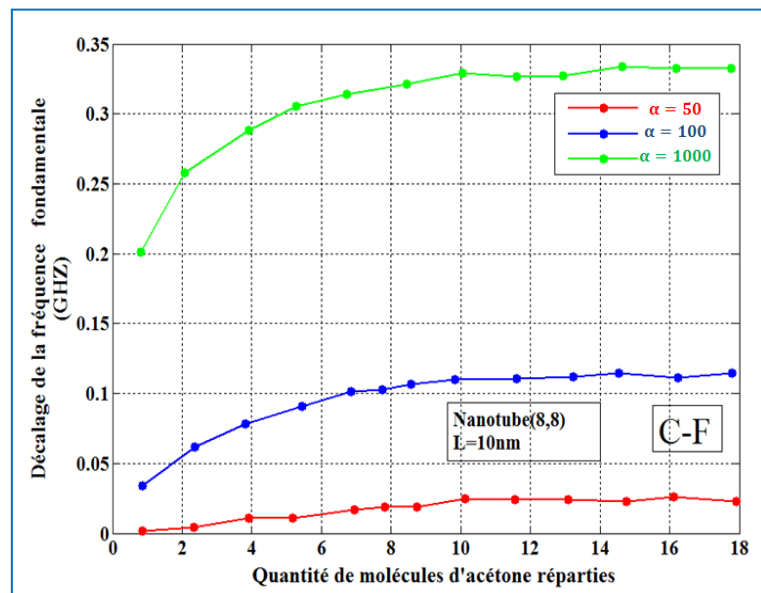


Figure V.21: Décalage de la fréquence naturelle du nano résonateur à base de nanotube de carbones en fonction λ et le rapport de masse α répartie pour la configuration encastré-encastré (C-F)

Figure V.19, figure V.20 et figure V.21 indiquent clairement que le décalage de la fréquence fondamentale du nano résonateur augmente avec l'augmentation de la quantité de la masse attachée distribuée au long de nanotube (λ est le nombre de rapport de masse attachée qui est distribuée).

V.5 Modélisation du capteur d'acétone à base des réseaux de neurone

Un modèle d'un processus est une description mathématique de son fonctionnement, qui permet de rendre compte des relations existantes entre ses entrées et ses sorties. On parle aussi de boîte noire, ce qui est le cas des réseaux de neurones, dont les paramètres peuvent être estimés par apprentissage. Les réseaux de neurones offrent l'avantage de la simplicité d'implantation et un temps de calcul relativement faible par rapport aux modèles numériques [23].

Dans cette partie de l'étude, nous avons choisi un réseau de neurone type Multi Layer Perceptron (MLP) pour modéliser notre nano capteur d'acétone. Le schéma de la figure V.22 représente le système d'apprentissage pour la modélisation du capteur.

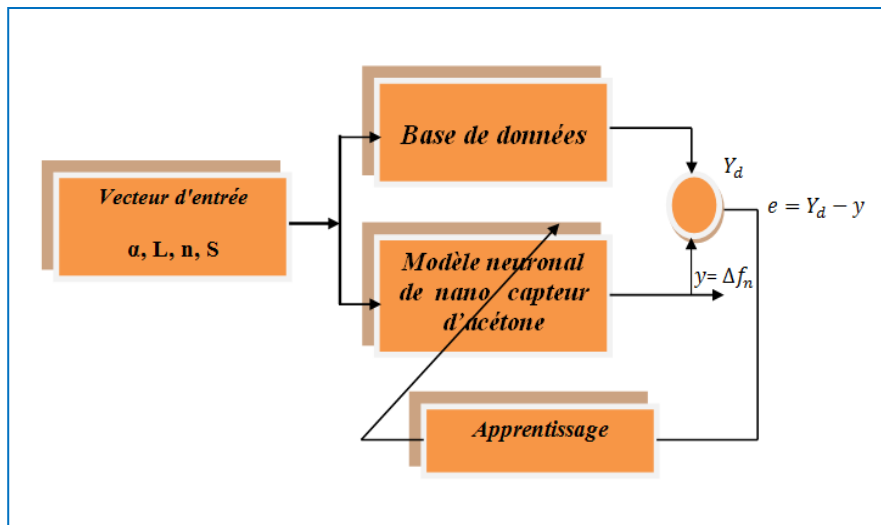


Figure V.22: Système d'apprentissage pour la modélisation du capteur

Le but de cet apprentissage est d'estimer les coefficients (poids et biais) du réseau de neurones. Les paramètres (α , L , n , S) sont considérés comme les variables d'entrée, alors que Δf_n est la variable de sortie, α est le rapport de masse, L est la longueur de nanotube de carbone, n est la chiralité de nanotube de carbone et S est le type de configuration de nano résonateur. S prend 1 si le type de configuration est encastré-libre S prend 2 si le type est encastré-encastré. Les bases de données obtenues par la simulation par éléments finis de la première partie de cette étude ont été utilisées pour créer le modèle neuronal (modèle RNA) en utilisant le logiciel Matlab.

Les coefficients sont estimés de manière à minimiser une erreur d'approximation définie à partir de l'écart ($Y_d - Y$). L'architecture la plus optimisée, qui produit la plus petite erreur, est résumée dans le tableau V.2.

Tableau V.2: Paramètres optimisés du modèle de réseaux neuronaux

La base de données	base de données de l'apprentissage		398	
	base de données du test		197	
	base de données de la validation		197	
Nombre de neurones	Couche d'entrée		4	
	Première couche cachée		4	
	Deuxième couche cachée		5	
	La couche de sortie		1	
fonction de transfert	1ère couche cachée		Logsig	
	2ème couche cachée		Logsig	
	Couche de sortie		linear	
L'entrée du modèle neuronal	α	L	n	S
	Max 10^{11}	12nm	10for(10,10)	2
	Min 10^2	8nm	7for(7,7)	1
La sortie du modèle neuronal	Δf			
	Max	2.25GHZ		
	Min	0 GHZ		
MSE de test	$6.6158 \cdot 10^{-5}$			
MSE de l'apprentissage	10^{-5}			

Le réseau de neurones artificiels "MLP" optimisé, qui est représenté dans la figure V.23, se compose d'une couche d'entrées de 4 neurones, de deux couches cachées contenant respectivement 4 neurones et 5 neurones et d'une couche de sortie contenant un seul neurone.

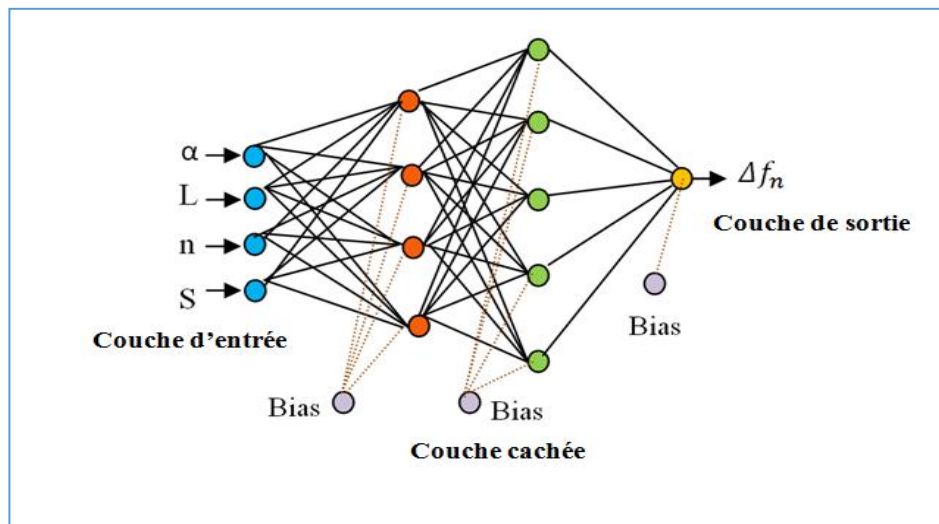
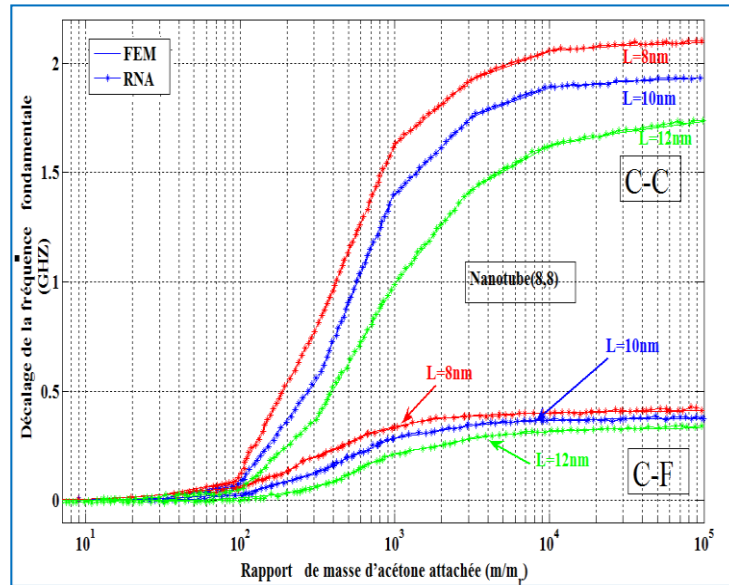


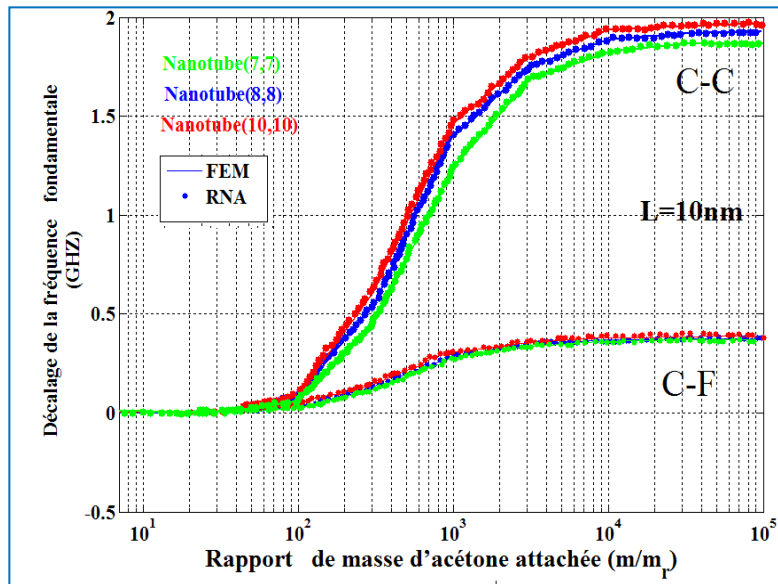
Figure V.23: Notation symbolique du modèle RNA optimisé

Une fois que l'architecture, les poids et les biais du réseau neuronal sont fixés, il est nécessaire de savoir si ce modèle neuronal est susceptible d'être généralisé. La validation de l'architecture neurale [4-4-5-1] consiste donc à juger sa capacité de prédiction du décalage de la

fréquence de nano résonateur à l'aide des poids et biais calculés lors de l'apprentissage, et les appliquer à une autre base de données de 197 échantillons, c'est-à-dire 25% du total des données. D'après les résultats obtenus on peut constater que le modèle MLP a abouti à la plus grande précision par rapport aux données FEM simulées. Une grande précision du facteur de corrélation (0.9978) entre les sorties RNA (prédite, Δf_{nPred}) et les cibles correspondantes (simulé, Δf_{nFEM}) est observée. La comparaison entre la base de données initiale et celle obtenue après l'apprentissage, en utilisant la base de test, indique que notre modèle exprime avec précision la variation de la réponse de notre capteur d'acétone (figure V.24).



a)



b)

Figure V.24: Performance du modèle RNA développé a) effet de longueur de nanotube b) effet de chiralité de nanotube

La figure V.24 présente la performance du modèle, les résultats montrent qu'il y a un bon accord entre les données FEM simulées et les valeurs RNA prédites.

V.5.1 Implantation du modèle neuronal sur ORCAD-PSPICE

L'évaluation des performances d'un circuit avec le logiciel ORCAD-PSPICE avant sa réalisation nous permet d'obtenir un temps de conception réduit et limiter ainsi les coûts de production. La qualité des résultats obtenus de la conception et de la simulation des circuits électroniques dépendent de la précision des modèles utilisés. Dans ce cadre, nous proposons une implantation du modèle RNA sur le simulateur ORCAD-PSPICE, cette implantation va nous permettre de tester les performances du modèle.

V.5.1.1 Implantation du modèle RNA du capteur

Le modèle neuronal peut être utilisé comme interface entre la modélisation numérique du composant et le simulateur électronique comme SPICE pour avoir un simulateur simple des circuits électroniques. Le schéma de notre approche peut être donné par la figure V.25.

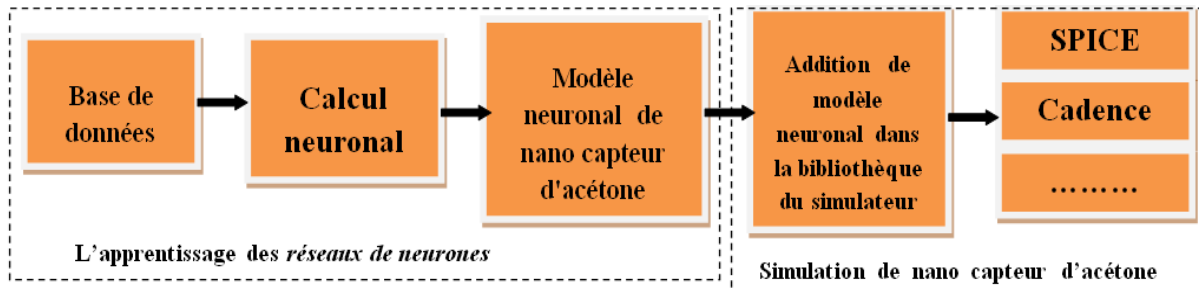


Figure V.25: Diagrammes représentant notre approche pour la simulation du capteur d'acétone

L'utilisation de boîtes ABM "Analog Behavioral Modelling" de la bibliothèque de PSPICE, nous permet d'implémenter le modèle RNA sur ce simulateur. Le modèle RNA de capteur d'acétone a 10 boîtes ABM:

- Les quatre boîtes N11, N12, N13 et N14 pour la première couche cachée.
- Les cinq N21, N22, N23, N24 et N25 pour la deuxième couche cachée.
- La boîte N31 pour la couche de sortie.

La figure V.26 montre la structure du réseau ABM de notre modèle

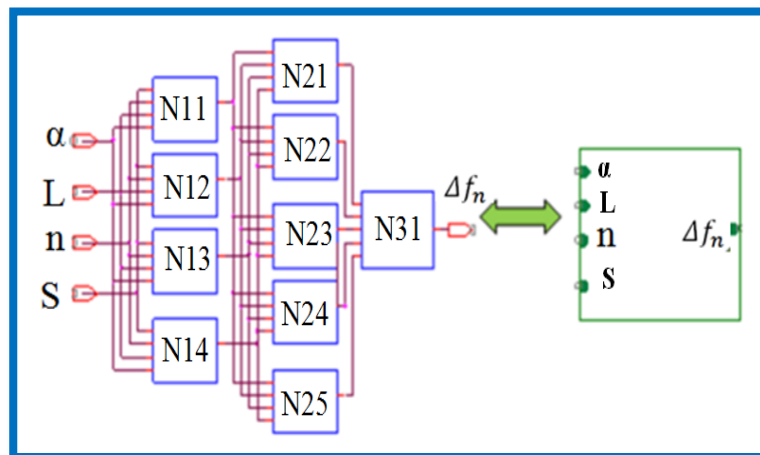


Figure V.26: ABM architecture du modèle établi dans PSPICE

Chaque ABM des boîtes ABM N11 à N14, N21 à N25 et N31 est l'équivalent d'un neurone qui se caractérise par l'équation de ce dernier, l'équation de l'ABM « N11 » par exemple:

$$1/(1+\exp((B11+W111*V(\%IN1)+W112*V(\%IN2)+W113*V(\%IN3)+W114*V(\%IN4))))).$$

V.5.1.2 Résultats de simulation

Le modèle présenté sur la figure V.26 a été mis en œuvre dans un circuit électrique afin de le tester et le valider.

Par une analyse « DC- SWEEP paramétrique », on fait varier la longueur de nanotube de carbone de 8nm jusqu'à 12nm, lorsque le rapport de masse est compris entre 1 et 10⁵ avec une échelle logarithmique, pour les deux types de configuration C-F et C-C. Les résultats obtenus sont montrés sur la figure V.27.

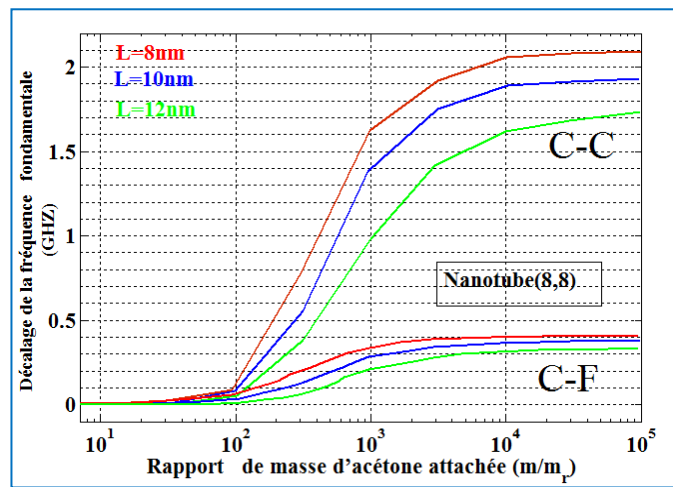


Figure V.27: Sortie du modèle PSPICE par une analyse paramétrique avec différentes longueurs de nanotubes

Par analogie avec le premier test et dans ce cas la longueur de nanotube est fixée cependant, la chiralité du nanotube de carbone prend les valeurs suivantes n = 7, n = 8 et n = 10. Les résultats obtenus sont montrés sur la figure V.28.

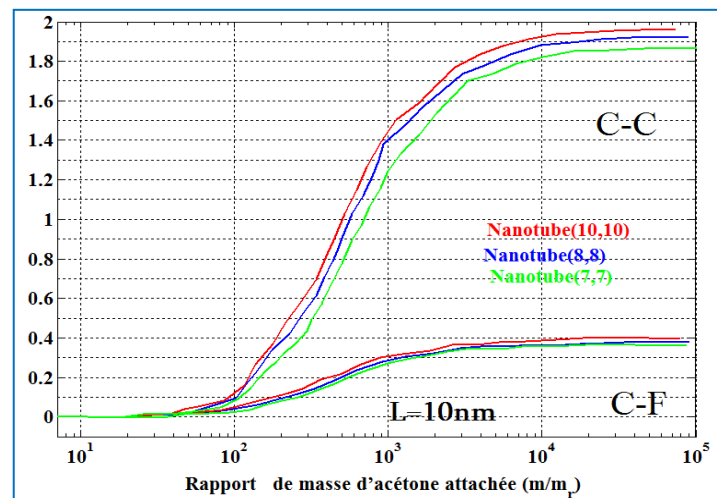


Figure V.28: Sortie du modèle PSPICE pour différentes chiralité de nanotube de carbone

La figure V.27 et la figure V.28 représentent la variation du décalage de la fréquence fondamentale du nano-résonateur Δf_n en fonction de rapport de masse d'acétone attachée α pour deux configurations encastré -encastré (Clamped-Clamped) et encastré-libre (Clamped-Free) par la mise en œuvre de notre modèle RNA proposé dans le simulateur de PSPICE. En analysant les résultats obtenus des tests précédents, on conclue que : le modèle RNA conçu et implanté a pu reproduire les courbes du capteur d'acétone à base de carbone nanotube (modèle FEM) en exprimant fidèlement la non linéarité de la caractéristique $\Delta f = F(\Delta m)$ du capteur d'acétone. Ce modèle neuronal tient en compte la dépendance aux paramètres technologiques du nanotube telles que la longueur et la chiralité.

Plus important encore, la simulation paramétrique indique que notre modèle proposé peut être implémenté comme composant dans une bibliothèque PSPICE et fournir une étude à faible coût et à haut rendement des dispositifs basés sur les résonateurs d'acétone.

V.6 Conclusion

Nous avons proposé un nouveau biocapteur conçu spécifiquement pour détecter les molécules d'acétone, en utilisant un type particulier de résonateur à nanotubes constitué d'un nanotube de carbone suspendu, encastré à une ou aux deux extrémités.

Le capteur d'acétone proposé peut atteindre une sensibilité extrêmement élevée au niveau moléculaire. Il peut être potentiellement utilisé pour détecter la concentration en trace d'acétone dans la respiration humaine, ce qui conduit à un diagnostic de respiration rapide, pratique, précis et indolore des diabétiques. Un tel diagnostic respiratoire peut également réduire considérablement le risque de maladies transmissibles par le sang dans les tests sanguins traditionnels du diagnostic du diabète

La relation entre le décalage de fréquence du résonateur à nanotubes et la masse des molécules d'acétone est établie sur la base de l'approche des éléments finis. Dans cette étude, les résultats de la simulation dans les deux configurations (C-C et C-F) indiquent que la fréquence naturelle du résonateur à nanotubes diminue avec l'augmentation du rapport de masse des molécules d'acétone α .

On constate que la sensibilité du capteur augmente avec la diminution de la longueur des nanotubes de carbone et l'augmentation du diamètre des nanotubes de carbone pour les deux configurations C-C et C-F. On observe aussi que l'effet de la chiralité sur la sensibilité du capteur est très inférieur à celle de la longueur. On constate que la sensibilité du capteur est très élevée dans la configuration (C-F) que dans la configuration C-C. On peut noter que l'emplacement de la molécule d'acétone attachée a un effet important sur les valeurs de la fréquence naturelles du résonateur à nanotubes.

Nous avons développé un modèle optimisé du capteur d'acétone en utilisant des réseaux neuronaux artificiels (RNA). La bonne concordance entre les résultats numériques (FEM) et les résultats obtenus par les approches neuronales a montré l'applicabilité des RNA pour étudier le capteur d'acétone. La simulation paramétrique indique que notre modèle de capteur RNA-acétone proposé peut être implémenté en tant que composant dans la bibliothèque PSPICE et fournir une étude du capteur d'acétone à faible coût et à haute efficacité.

V.7 Références bibliographique

- [1] C. Stampfer, T. Helbling, D. Obergfell, B. Schöberle, M.K. Tripp, A. Jungen, S. Roth, V.M. Bright, and C. Hierold, “Fabrication of single-walled carbon-nanotube-based pressure sensors”, *Nano Lett.*, vol. 6, pp. 233–237, 2006.
- [2] J. Chaste, A. Eichler, J. Moser, G. Ceballos, R. Rurali, and A. Bachtold, “A nanomechanical mass sensor with yoctogram resolution”, *Nature Nanotech.*, vol. 7, pp. 301–304, 2012.
- [3] S.A. Gohari, J. Abdi, M.K. Hafshejani, and A. Arad, “Using HPM for approximating the instability of narrow bio-sensor used in bio-electronic, biology and cancer detection”, *World Applied Sciences Journal*, vol. 18, no. 12, pp. 1749-1759, 2012.
- [4] H. Bridle, W. Wang, D. Gavriilidou, F. Amalou, D.P. Hand, and W. Shu, “Static mode microfluidic cantilevers for detection of waterborne pathogens”, *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 247, pp. 144-149, 2016.
- [5] R. Chowdhury, and S. Adhikari, "Boron nitride nanotubes as zeptogram-scale bio-nano sensors: Theoretical investigations", *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 10, no. 4, pp. 659-667, 2011.
- [6] R. Chowdhury, S. Adhikari, and J. Mitchell, “Vibrating carbon nanotube based bio-sensors”, *Science Direct - Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 42, no. 2, pp. 104-109, 2009.
- [7] I. Mehdipour, A. Barari, and G. Domairry, “Application of a cantilevered SWCNT with mass at the tip as a nanomechanical sensor”, *Computational Materials Science*, Vol. 50, no. 6, pp. 1830-1833, 2011.
- [8] SK. Georgantzinos, and NK. Anifantis, “Carbon nanotube-based resonant nanomechanical sensors: A computational investigation of their behavior”, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 42, no. 5, pp. 1795-1801, 2010.
- [9] I. Mehdipour, A. Erfani-Moghadam, and C. Mehdipour, “Application of an electrostatically actuated cantilevered carbon nanotube with an attached mass as a bio-mass sensor”, *Current Applied Physics*, Vol. 13, no. 7, pp. 1463-1469, 2013.
- [10] J. H. Lee and B. S. Lee, “Modal analysis of carbon nanotubes and nanocones using FEM”, *Computational Materials Science*, vol. 51, no. 1, pp. 30–42, 2012.
- [11] A. Y. Joshi, S. C. Sharma, and SP. Harsha, “Zeptogram scale mass sensing using single walled carbon nanotube based biosensors”, *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 168, no. 2, pp. 275-280, 2011.
- [12] D. Wu, W. Chien, C. Chen, and H. Chen, “Resonant frequency analysis of fixed-free single-walled carbon nanotube-based mass sensor”, *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 126, no. 1, pp. 117–121, 2006.
- [13] C. Li, and T. W. Chou, “A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes”, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 40, no. 10, pp. 2487–2499, 2003.
- [14] Y. Yan, G. Shi, and P. Zhao, “Frequency Study of Single-walled Carbon Nanotubes Based on a Space-frame Model with Flexible Connections”, vol. 6, no. 6, pp. 1125-1130, 2011.
- [15] Z.L. Wang, R.P. Gao, P. Poncharal, W.A. de Heer, Z.R. Dai, and Z.W. Pan, “Mechanical and electrostatic properties of carbon nanotubes and nanowires”, *Mater. Sci. Eng. C*, vol. 16, pp. 3-10, 2001.
- [16] D. H. Wu, W. T. Chien, C. S. Chen and H. H. Chen, “Resonant Frequency Analysis of Fixed-Free Single-Walled Carbon Nanotube-Based Mass Sensor”, *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 126, pp. 117-121, 2006.
- [17] S. Prabhu, S. Bhaumik and B. K. Vnayagam, “Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube”, *Journal of Mechanical Engineering Research*, vol. 4, pp. 260-266, 2012.
- [18] MB. Panchal, SH. Upadhyay, “Boron nitride nanotube-based biosensor for acetone detection: molecular structural mechanics-based simulation”, *Molecular Simulation*, Taylor & Francis, vol. 40, no. 13, pp. 1035-1042, 2013.
- [19] Keun Su Kim and al, “Scalable manufacturing of boron nitride nanotubes and their assemblies: a review”, *Semiconductor Science and Technology*, vol. 32, no. 1, 013003, 2016

- [20] F. Djeflal, Z. Dibi, M. L. Hafiane and D. Arar, “Design and simulation of a nanoelectronic DG MOSFET current source using artificial neural networks”, *Materials Sciences & Engineering C*, vol. 27, no. 1, pp.1111-1116, 2007.
- [21] F. Djeflal, A. Abdi, Z. Dibi, M.Chahdi and A.Benhaya, “A neural approach to study the scaling capability of the undoped Double-Gate and cylindrical Gate All around MOSFETs”, *Materials Sciences & Engineering B.*, vol. 147, pp. 239-244, 2008.
- [22] F. Menacer, A. Kadri, F. Djeflal, Z. Dibi, H. Ferhati, “ Modeling of boron nitride-based nanotube biological sensor using neural networks”, *The 17th international conference (STA'2016)*,IEEE, Sousse, Tunisia, December 2016.
- [23] F. Menacer, A. Kadri, F. Djeflal, Z. Dibi, H. Ferhati, “Modeling and investigation of smart capacitive pressure sensor using artificial neural networks”, *6th International Conference on Systems and Control (ICSC 2017)*,IEEE, Batna, Algeria, May 2017.

Conclusion générale

Conclusion générale

Notre étude est étalée sur plusieurs parties:

Dans la première partie de l'étude nous avons proposé un dispositif conçu spécifiquement pour mesurer la pression. Nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATLAS) pour simuler le comportement du capteur de pression à base de DG-MOSFET où nous avons effectué une relation entre le courant de drain source et la pression appliquée.

Nous avons utilisé l'approche ANFIS pour modéliser notre capteur de pression capacitif proposé et son composant de correction. Selon les résultats obtenus, il est clair que le modèle ANFIS du capteur de pression capacitif conçu et implanté dans le simulateur PSPICE exprime fidèlement le comportement du capteur de pression capacitif, du fait qu'il tient compte de l'effet d'hystérésis. L'insertion de deux modèles (le modèle direct et le modèle de correction INV-ANFIS) dans la bibliothèque du simulateur SPICE nous a permis de simuler le fonctionnement du capteur de pression capacitif dans des conditions dynamiques.

En examinant les résultats obtenus, nous pouvons dire que notre modèle de correction INV-ANFIS donne d'excellents résultats. En effet, il délivre une sortie linéaire par rapport à la pression appliquée, complètement indépendante de la température avec élimination de l'effet d'hystérésis, le modèle ANFIS peut être exploité directement par un processus industriel.

Nous avons effectué une étude comparative entre la modélisation du capteur de pression par l'approche ANFIS et la modélisation du capteur de pression par les approches FL et RNA. La comparaison des résultats de l'approche ANFIS avec les résultats obtenus par la logique floue (FL) et le réseau de neurones (RNA) a permis de valider l'approche (ANFIS) avec une valeur de coefficient de détermination R^2 de l'ordre de 0,9889 acceptable et supérieure à celle trouvée par FL et RNA.

Dans la deuxième partie de l'étude Nous avons utilisé la simulation par éléments finis, en utilisant le simulateur ANSYS, pour modéliser et caractériser numériquement le nanotube de carbone. Cette simulation est basée sur la méthode d'équivalence d'énergie qui permet d'effectuer un passage du modèle énergétique (mécanique quantique) au modèle de la mécanique de structures, la modélisation a été réalisée en utilisant le logiciel de calcul ANSYS. Afin de valider le modèle proposé, les résultats obtenus par voie numérique ANSYS sont comparés à celles obtenus par une étude analytique et expérimentales, les résultats de la comparaison montrent une bonne corrélation.

Conclusion générale

Dans cette étude nous avons proposé aussi un nouveau nano capteur intelligent conçu spécifiquement pour détecter et mesurer la force à l'échelle nano-newton, en utilisant une structure constituée d'un nanotube de carbone suspendu, dont ses deux extrémités sont encastrées, et un transistor MOSFET. Ce nanotube de carbone est utilisé comme une grille suspendu de transistor MOSFET. Deux approches sont proposées pour détecter la force appliquée, la première est basée sur le changement de courant de drain dans le régime de saturation, par contre la deuxième est basée sur le changement de la tension de seuil de transistor. La sensibilité obtenue par notre modèle développé peut atteindre jusqu'à 0.12431V/nN pour la première approche et $230.68 \ln(A)/\text{pN}$ pour la deuxième approche. Cette sensibilité est plus importante par rapport aux résultats de la littérature. A travers cette étude nous avons montré que les réseaux de neurones artificiels (RNAs) substituent notre nano capteur de force du fait qu'ils reproduisent fidèlement son comportement. En se basant sur des résultats réalisés dans la première section de cette partie, nous avons formé deux bases de données, la première pour l'apprentissage des réseaux par l'algorithme de la rétropropagation des erreurs et la deuxième pour le test et la validation du modèle. Le modèle à base des réseaux de neurones d'unanoforce (modèle RNA), ainsi obtenu, a été implanté sur le simulateur SPICE, ce qui nous a permis de simuler son fonctionnement dans un environnement électrique et par conséquent évaluer ces performances. Nous avons également présenté, les réseaux de neurones comme un composant de correction (modèle inverse) pour le capteur nano capteur de force. Le but assigné à ce composant est la correction du signal de sortie du capteur (rendre un capteur linéaire). Il est à noter que la différence entre les deux modèles développés est que : le premier est une modélisation comportemental du capteur de force capacitif (nano capteur de force), par contre le deuxième modèle joue le rôle d'un composant de correction.

Dans la dernière partie de cette étude, nous avons proposé un nouveau biocapteur conçu spécifiquement pour détecter les molécules d'acétone, en utilisant un type particulier de résonateur à nanotubes constitué d'un nanotube de carbone suspendu, encastré à une ou aux deux extrémités. La relation entre le décalage de fréquence du résonateur à nanotubes et la masse des molécules d'acétone est établie sur la base de l'approche des éléments finis.

Dans cette partie de l'étude, les résultats de la simulation dans les deux configurations (C-C et C-F) indiquent que la fréquence naturelle du résonateur à nanotubes diminue avec l'augmentation du rapport de masse des molécules d'acétone α .

Nous notons également que le décalage de fréquence devient plus grand lorsque la longueur du nanotube est plus courte et avec une chiralité élevée que pour les deux

Conclusion générale

configurations C-C et C-F. Nous avons constaté à partir de cette parties de l'étude que ; si le rapport de masse attachée $\alpha \geq 10^2$, la relation entre la fréquence naturelle et $(\log(\alpha))$ devient linéaire.

On constate que la sensibilité du capteur augmente avec la diminution de la longueur des nanotubes de carbone et l'augmentation du diamètre des nanotubes de carbone pour les deux configurations C-C et C-F. On constate aussi, que l'effet de chiralité sur la sensibilité du capteur est très inférieur à celui de la longueur ainsi que la sensibilité du capteur est plus grande dans la configuration (C-F) que dans la configuration C-C. On peut noter que l'emplacement de la molécule d'acétone attachée a un effet important sur les valeurs de fréquence naturelles du résonateur à nanotubes.

Nous avons développé un modèle optimisé du capteur d'acétone en utilisant des réseaux neuronaux artificiels (RNA). La bonne concordance entre les résultats numériques (FEM) et les résultats obtenus par les approches neuronales a montré l'applicabilité des RNA pour étudier le capteur d'acétone. La simulation paramétrique indique que notre modèle de capteur RNA-acétone proposé peut être implémenté en tant que composant dans la bibliothèque PSPICE et fournir une étude du capteur d'acétone à faible coût et à haute efficacité.