

## Master 2: *International Centre for Fundamental Physics*

### **INTERNSHIP PROPOSAL**

*(One page maximum)*

Laboratory name: Laboratoire d'étude des Microstructures (LEM)

CNRS identification code: UMR104

Internship director's surname: Lorenzo Sponza

e-mail: [lorenzo.sponza@onera.fr](mailto:lorenzo.sponza@onera.fr)

Phone number: 01 46 73 44 64

Web page: <https://lem.onera.cnrs.fr/>

Internship location: LEM (Châtillon, Île-de-France)

Thesis possibility after internship: YES

Funding: YES (source of funding : ONERA)

#### **Approches mixte pour les hétérostructures 2D latérales**

Le contrôle à l'échelle nanométrique de la composition et de la morphologie des matériaux a permis l'émergence de nouvelles propriétés structurales, électroniques et chimiques, qui sont à la base de nombreux progrès technologiques récents. Parmi les nanostructures, les matériaux 2D forment une classe constituée par des matériaux cristallisant en couches d'épaisseur atomique. Depuis l'envol du graphène (Gr) dans les années 2000, la famille des matériaux 2D s'est enrichie de nouveaux éléments comme le nitrure de bore hexagonal (hBN) ou des chalcogénures.

En vertu de leur infime épaisseur, les matériaux 2D présentent souvent des propriétés électroniques très différentes de celles de leur homologues massifs. En outre, celles-ci sont fortement influencées par l'interaction avec l'environnement proche, par exemple, par des modifications du support du matériau 2D ou de son épaisseur. Les hétérostructures 2D latérales consistent à connecter deux matériaux 2D différents par les bords, permettant ainsi de combiner plusieurs propriétés dans un même système bidimensionnel. Evidemment, les propriétés de ces structures découlent des effets d'interface qui ont lieu dans le bord des feuillets connectés.

Dans ce contexte, la famille d'hétérostructures considérée dans ce stage comportera des feuilles de hBN et/ou de Gr/ Pour étudier d'un point de vue théorique ces systèmes, nous allons élaborer une approche mixte, qui combine des développements analytiques et numériques de type liaisons fortes à des simulations ab-initio. Ces dernières seront faites sur des systèmes simples de référence, afin d'établir une base quantitative pour la paramétrisation des modèles liaisons fortes. Ainsi, l'étude de systèmes de plus grand taille et avec des défauts aux interfaces deviendra possible en liaisons fortes.

Please, indicate which speciality(ies) seem(s) to be more adapted to the subject:

Condensed Matter Physics: YES      Soft Matter and Biological Physics: NO

Quantum Physics: YES                      Theoretical Physics: YES