

Master 2: *International Centre for Fundamental Physics*

INTERNSHIP PROPOSAL

(One page maximum)

Laboratory name: Laboratoire d'Etude des Microstructures

CNRS identification code: UMR 104

Internship director's surname: Amara and Sponza

e-mail: hakim.amara@onera.fr

Phone number: 01 46 73 48 90

Web page:

Internship location: ONERA / 29 avenue de la Division Leclerc, Châtillon

Thesis possibility after internship: YES

Funding: YES

If YES, which type of funding:

ONERA

Propriétés électroniques de couches fines nanostructurées

Le confinement imposé dans les nanostructures par la réduction de leur dimensionnalité crée une physique riche que les progrès technologiques, accomplis ces dernières années, permettent de mettre en lumière et d'étudier. Parmi ces nanostructures, les matériaux 2D se distinguent dans le développement des nanosciences et nanotechnologies. Ils sont issus de matériaux massifs formés par l'empilement de plans séparés les uns des autres par exfoliation jusqu'à l'obtention d'un seul plan. Depuis l'envol du graphène, exfolié à partir du graphite dans les années 2000, la famille des matériaux 2D s'est enrichie de nouvelles structures comme le nitrure de bore hexagonal (hBN) ou les dichalcogénures (MoS₂, MoTe₂, WSe₂...). Avec une épaisseur quasiment nulle, ces matériaux voient leurs densités électroniques prêtes à interagir avec leur environnement, ce qui modifie profondément leurs propriétés physiques. Cette sensibilité peut être mise à profit dans des hétérostructures, où des matériaux 2D sont associés pour interagir de manière intelligente et contrôlée et permettre de protéger, combiner, exalter leurs propriétés intrinsèques, voire même de générer de nouvelles propriétés.

Dans ce contexte, la famille d'hétérostructures considérée sera constituée d'empilements de feuilles de nitrure de bore (semi-conducteur à grand gap) et de graphène (semi-conducteur à gap nul). Pour étudier ce problème d'un point de vue théorique, nous chercherons à combiner des développements analytiques et des simulations numériques qui reposent essentiellement sur un formalisme de type liaisons fortes. Une étape d'ajustements de paramètres présents dans ces modèles sera nécessaire et validée par des calculs *ab initio* plus précis, dans le cas de systèmes simples. L'étude de grands systèmes, jusqu'au million d'atomes, deviendra alors possible. Plus précisément, il s'agira d'étudier la nature et l'effet des empilements ainsi que la présence de défauts sur les propriétés électroniques et optiques d'hétérostructures graphène/nitrure de bore.

Une originalité de ce travail consistera à coupler grâce à un réseau de collaborations, différentes techniques expérimentales pour aborder cette problématique.

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

Condensed Matter Physics: YES/NO Macroscopic Physics and complexity: YES/NO
Quantum Physics: YES/NO Theoretical Physics: YES/NO