Découverte et fonctionnalisation de nouveaux cristaux bidimensionnels

DIRECTEUR DE THESE : CARMELO PIRRI
IS2M UMR 7361 CNRS-UHA
TEL : 03 89 33 64 35 ; E-MAIL : CARMELO.PIRRI@UHA.FR

Le silicène, le germanène et le stanène sont des cristaux bidimensionnels monoatomiques de Si, de Ge et de Sn, dont la structure en nid d'abeille, analogue à celle du graphène, a été prédite théoriquement. L'élaboration de ces matériaux et leur existence sont envisagées dans de nombreux calculs théoriques qui s'accordent pour conférer à ces cristaux bidimensionnels des propriétés électroniques de transport très particulières (grande mobilité des porteurs de charge, ouverture du gap -ou bande interdite- en énergie) qui permettront le développement de futurs dispositifs nanoélectroniques à des tailles extrêmement faibles [1].

A la différence du graphène qui existe dans la nature sous forme d'empilements de couches donnant le graphite, ces cristaux bidimensionnels de Si, de Ge et/ou de Sn n'existent pas. Leur élaboration, déjà avérée pour le silicène et le germanène dans notre groupe, nécessite des dépôts sur substrats spécifiques ayant une faible interaction avec les atomes de Si, Ge ou Sn déposés. Seuls deux groupes en France et trois groupes au monde ont annoncé avoir réalisé la formation d'un cristal bidimensionnel à base de germanium, le germanène. Rappelons ici que pour l'instant ont été essentiellement réalisées la croissance de silicène sur Ag(111) [2], et celle du germanène sur Pt(111) [3], Al(111) [4,5] et Au(111) [6]. Aucun groupe n'a à ce jour reporté l'élaboration d'un cristal bidimensionnel d'étain, le stanène. Sa réalisation au sein de l'IS2M constituerait une première mondiale et permettrait d'ancrer au niveau national et international le laboratoire comme l'un des acteurs majeurs dans le domaine des cristaux bidimensionnels.

Le programme de recherche comporte deux volets qui sont :

1) La croissance et caractérisation des cristaux 2D : silicène, germanène et stanène à l'IS2M et en rayonnement synchrotron

2) La fonctionnalisation des cristaux 2D silicene et germanene, dont l'élaboration est maitrisée, pour des applications dans le solaire.

La détermination de la structure atomique et électronique des cristaux bidimensionnels, fonctionnalisés ou non, sera assistée par des calculs DFT (Density Functional Theory) ainsi que des simulations des spectres d'intensité I(V) LEED et de diffraction de photoélectrons (XPD).

[1] Tao et al., Nature Nanotechnology 2015, 10, 227–231
[2] Johnson et al., Adv. Funct. Mater. 2014, 24, 5253.
[3] Li et al.,Adv. Mater 2014, 26, 4820–4824.
[4] Derivaz, et al., Nano Letters 2015, 15, 2510-2516.
[5] Stephan et al.,J. Phys. Chem. C 2016, 120, 1580-1585.
[6] D´avila et al., New J. Phys.2014, 16, 095002.

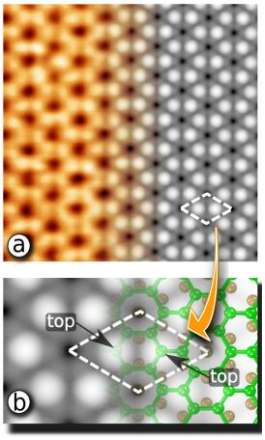

Image STM du germanene et calculs DFT

Co-directeurs :

Mickael Derivaz, MCF, IS2M UHA – Mulhouse

Didier Dentel, MCF HDR, IS2M UHA - Mulhouse