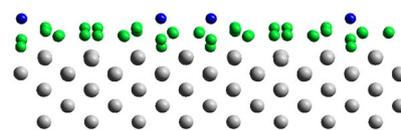

REACTIVITE DES XENES SUR DIFFERENTS SUBSTRATS : SIMULATIONS NUMERIQUES A L'ECHELLE ATOMIQUE

DIRECTEURS DE THÈSE : PHILIPPE SONNET, REGIS STEPHAN
IS2M UMR 7361-CNRS/UHA, 15 RUE JEAN STARCKY 68057 MULHOUSE
TEL : 03 89 33 64 24 ; E-MAIL : PHILIPPE.SONNET@UHA.FR

Ces dernières années, l'un des développements les plus importants dans les semi-conducteurs, tant du point de vue de la physique que pour la réalisation de dispositifs électroniques, a été la synthèse de structures bidimensionnelles (2D) [1]. Parmi les nombreux matériaux 2D étudiés, on trouve les Xènes, qui sont des matériaux bidimensionnels formés à partir d'atomes de Si (silicène), Ge (germanène), Sn (stanène) ou Pb (plombène), dont la structure en nid d'abeilles est analogue à celle du graphène. La caractérisation de ces systèmes passe par l'étude de leurs propriétés électroniques, en particulier leur réactivité, qui dépend à la fois de la structure atomique du cristal 2D, et de l'interaction de ce dernier avec son substrat.

Nous nous proposons d'étudier, à l'aide de **codes de calcul basés sur la fonctionnelle de la densité (DFT), l'adsorption de molécules sur des Xènes déposés sur un substrat métallique ou semi-conducteur.**



Modèle atomique du silicène dumbbell

- Si
- Si adatome
- Ag

Plus précisément, dans un premier temps, et en collaboration avec des expérimentateurs de l'INSP (Institut des NanoSciences de Paris), de petites molécules seront adsorbées sur le silicène dit dumbbell, synthétisé sur une surface d'Ag(110). Ce dernier présente des adatoms [2] susceptibles de conférer à la couche une réactivité particulière. Les positions d'adsorption les plus favorables seront examinées, et comparées avec les résultats obtenus par microscopie tunnel.

Dans un deuxième temps, au moyen d'une étude prédictive et exploratoire, nous étudierons la stabilité et la structure d'une couche de Xène (silicène, germanène, stanène) sur une surface de silicium dopée au bore (SiB [3]) permettant ainsi une intégration dans la technologie silicium. Nous utiliserons en particulier la méthode du recuit simulé, ainsi que la dynamique moléculaire, pour obtenir une couche 2D stable sur ce type de substrat. Ensuite, les mêmes molécules sonde que pour Silicène/Ag(110) seront adsorbées à la surface, afin d'analyser les propriétés structurales, énergétiques et électroniques de ces systèmes.

[1] F. Zhao *et al.*, *InfoMat.* 2022 , e12365

[2] T. Leoni *et al.*, *J. Phys.Chem. C* 2021, 125, 17906-17917

[3] T. Stimpel *et al.*, *Appl. Surf. Sci.* 2000, 162-163, 384-389