

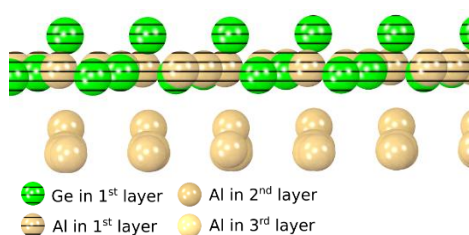
# SIMULATIONS NUMERIQUES DE CRISTAUX 2D ET DE NANORUBANS 1D SUR DIFFERENTS SUBSTRATS

DIRECTEURS DE THESE : PHILIPPE SONNET, REGIS STEPHAN, MARIE-CHRISTINE HANF

IS2M UMR 7361-CNRS/UHA, 15 RUE JEAN STARCKY 68057 MULHOUSE

TEL : 03 89 33 64 24 ; E-MAIL : [PHILIPPE.SONNET@UHA.FR](mailto: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 réalisation de structures bidimensionnelles (2D) [1]. Parmi les nombreux matériaux 2D étudiés, on trouve le germanène et le silicène qui sont des matériaux bidimensionnels formés respectivement à partir d'atomes de Ge et de Si, et dont la structure en nid d'abeilles est analogue à celle du graphène [2]. Cependant, les interactions plus ou moins fortes de cette couche 2D avec son support n'ont pas permis de déterminer leurs caractéristiques intrinsèques. D'autre part, des résultats récents ont montré que le germanène 2D déposé sur Al(111) comportait des atomes d'Al provenant du substrat [3].



Vue de côté d'un modèle atomique d'une couche 2D de type  $\text{Ge}_3\text{Al}_3$  adsorbée sur un substrat d'aluminium relaxé par DFT.

(D'après Zhang et al, Phys. Rev. B 106, 045412, 2022)

Pour pouvoir accéder aux propriétés intrinsèques du germanène (silicène), deux stratégies sont possibles : soit la croissance d'une couche 2D de germanium (Si) sur un substrat semi-conducteur ou isolant, permettant ainsi le découplage électronique du système 2D vis-à-vis du substrat, soit l'obtention d'une structure 1D sur un substrat métallique qui faciliterait son décollement, comme déjà observé pour des nano-rubans de Si sur Ag(110) [4].

Ainsi, en collaboration avec une équipe d'expérimentateurs de l'IS2M, nous nous proposons d'étudier, à l'aide de **codes de calcul basés sur la fonctionnelle de la densité (DFT)**, le dépôt de Ge (Si) sur un substrat d'aluminium, pour lequel la croissance d'objets 1D de germanène (silicène) est attendue. D'autre part, afin de pouvoir découpler électroniquement la couche de germanène (silicène) du substrat métallique, nous nous proposons d'étudier la croissance du germanène (silicène) sur des substrats semi-conducteurs avec différents paramètres de maille et valeurs de bande interdite ( $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WSe}_2$ ).

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

[2] M. Derivaz *et al.*, Nanoletters 15, 2510 (2015).

[3] K. Zhang *et al.*, Journal of Physical Chemistry C 125, 24702 (2021)

[4] R. Hiraoka *et al.*, Beilstein J. Nanotechnol 8, 169 (2017)