

Modélisation des propriétés électroniques et optiques
des heterostructures latérales 2D

Soutenance de thèse – Elisa SERRANO RICHAUD

19 novembre 2024 – 14h00

Salle Pierre Contensou - ONERA Châtillon

Lien visio-conférence : demande du lien d'accès auprès de elisa.serrano_richaud@onera.fr

Devant le jury composé de :

Maurizia PALUMMO, Professeur, INFN Università di Roma Tor Vergata	Rapporteur
Jean-Christophe CHARLIER, Professeur, IMCN UCLouvain	Rapporteur
Odile STÉPHAN, Professeur, LPS Université Paris-Saclay	Présidente
Giorgia FUGALLO, Chargé de Recherche, LTEN, Université de Nantes	Examinatrice
Lorenzo SPONZA, Chargé de Recherche, LEM, Université Paris-Saclay, ONERA, CNRS	Co-encadrant de thèse
Sylvain LATIL, Directeur de Recherche, SPEC CEA, CNRS	Directeur de thèse

Résumé

Le graphène (Gr) et le nitrure de bore hexagonal (hBN) ont un paramètre de maille similaire (décalage de $\sim 1,5\%$) et des propriétés très différentes. Le Gr est un métal connu pour sa bonne conductivité électrique et le hBN est un semi-conducteur à large gap (~ 7 eV) avec une forte émission d'UV. En raison de ces deux caractéristiques, ils sont des candidats parfaits pour être empilés côte à côte dans une hétérostructure latérale. Cependant, lors de la synthèse de ce type d'hétérostructures, des défauts, tels que des rugosités ou des défauts non hexagonaux, peuvent apparaître à l'interface et affecter les propriétés du système. Dans cette thèse, je m'intéresserai à la modélisation des propriétés électroniques et optiques des hétérostructures latérales composées de nanorubans successifs de graphène et de nitrure de bore (AGBN) ainsi qu'à caractériser l'impact des défauts à l'interface.

Plus précisément, j'ai examiné les caractéristiques générales des AGBNs à partir de techniques ab-initio (Density Functional Theory, GW et Bethe-Salpeter Equation) ; du rôle de chaque matériau et notamment la forte dépendance des propriétés des AGBNs par rapport à la taille de Gr, jusqu'à les propriétés excitoniques comme le confinement caractéristique de l'exciton dans la partie Gr de l'hétérostructure. Cependant, les techniques ab-initio sont très exigeant en termes de calcul et ne peuvent pas être appliqué pour étudier des AGBN avec défauts. C'est pourquoi parallèlement j'ai paramétré un modèle TB semi-empirique et fixé ses limites de validité pour décrire le spectre d'absorption des AGBNs (dans l'approximation des particules indépendantes). Avec ce modèle TB j'ai pu caractériser l'impact d'une faible rugosité à l'interface ou de défauts non-hexagonaux comme les *Stone-Wales* et *double-vacancy* 585. Une faible rugosité ne produit pas des effets notables sur le gap ainsi que sur des excitations à basse énergie, par contre les défauts non-hexagonaux ferment le gap et déplacent le spectre d'absorption vers des plus basses énergies.

Mots clés

Hétérostructures latérales, Graphène, Nitrure de Bore hexagonale, exciton, défauts à l'interface, Density Functional Theory, GW, Bethe-Salpeter Equation et Tight-Binding.