
Etain bidimensionnel sur différents substrats : Simulations numériques à l'échelle atomique

DIRECTEUR DE THESE : PHILIPPE SONNET

Co-DIRECTEUR DE THÈSE : 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

Les isolants topologiques (IT) bidimensionnels (2D) présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés électroniques uniques, telles que l'effet Hall anormal quantique, ainsi que de leur potentiel en spintronique et en informatique quantique [1]. Ces matériaux sont caractérisés par des états de bord conducteurs protégés topologiquement, ce qui les rend robustes face aux désordres et aux perturbations. Parmi les exemples classiques, on peut citer le graphène et d'autres couches monoéléments en nid d'abeille comme le silicène et le bismuthène, qui sont des IT du premier ordre (FOTI) avec des états protégés de dimension $d-1$, où d est la dimensionnalité du matériau. Récemment, des IT d'ordre supérieur (HOTI) ont émergé, présentant des états protégés de dimension $d-n$, avec $n \geq 2$ [2].

Ce projet vise à étudier l'influence de la structure d'un réseau 2D sur ses propriétés électroniques. Pour ce faire, nous étudierons des réseaux 2D à base d'étain, déposés sur des substrats semi-conducteurs et métalliques. Dans la recherche de nouvelles architectures atomiques aux propriétés topologiques spécifiques, l'étain apparaît comme un candidat très prometteur. Par exemple, un réseau triangulaire d'étain, a déjà été obtenu sur la surface SiC(0001) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ [3]. Le SiC, avec sa large gamme de reconstructions de surface, en fait un substrat idéal pour l'exploration de structures d'étain exotiques. Sur les surfaces de métaux de transition, la grande mobilité des atomes d'étain permet la formation de couches bien ordonnées à des températures suffisamment basses pour empêcher la formation d'un alliage de surface.

La thèse se divisera en deux grandes parties :

-une première partie concernera l'optimisation des configurations de l'étain sur les différents substrats, via des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les images STM (scanning tunneling microscope) calculées seront comparées aux images expérimentales afin de discriminer les différents modèles étudiés.

-une deuxième partie sera dévolue au calcul des propriétés électroniques comme les structures de bande et les densités d'états totales et projetées. Le couplage spin-orbite sera pris en compte pour évaluer l'ouverture du gap. Les états de bord seront quant à eux calculés à l'aide de fonctions MLWFs (maximally localized Wannier functions). Enfin, pour les différentes configurations de Sn obtenues sur les substrats de SiC et métalliques, les propriétés électroniques calculées seront comparées aux mesures expérimentales ARPES (angle-resolved photoemission spectroscopy) et STS (scanning tunnelling spectroscopy).

Ce travail sera réalisé en collaboration avec l'Institut des Nanosciences de Paris pour la partie expérimentale.

[1] Hasan et al. *Rev. Mod. Phys.* 82, 3045–3067 (2010).

[2] Schindler et al. *Sci. Adv.* 4, eaat0346 (2018).

[3] Glass et al. *Phys. Rev. Lett.* 114, 247602 (2015)