

- Axe de GANEX : **7 (Matériaux)**
- Titre du sujet : **Transition Gap indirect – Gap direct dans le h-BN**
- Nom et e-mail du porteur du projet : **Abdelkarim Ouerghi**
- Nature du post doc (*effacer les mentions inutiles*)
  - académique : laboratoire bénéficiaire : **LPN**
- Date souhaitée de démarrage : **03/2017**
- Durée : **18 mois**
- Lien avec un projet ANR ou H2020:
- Lien avec un autre partenaire de GANEX : **L2C et Crhea**
- Sujet développé : (*jusqu'au bas de page, police 11-12*)

Le développement des techniques permettant d'obtenir des couches monoatomiques de graphène de haute qualité a permis de mettre en évidence une grande variété de nouvelles propriétés physiques présentant aussi bien un intérêt fondamental que des ouvertures vers des applications potentielles. Par exemple, la dispersion électronique du graphène en forme de cône de Dirac a permis de mettre en évidence l'effet Hall quantique à température ambiante, ou bien encore une absorption optique constante très large bande. Mais, au-delà du carbone, cette découverte a ouvert la possibilité d'étudier sous forme bidimensionnelle une grande variété de matériaux lamellaires (où des couches covalentes typiquement formées d'un ou deux types d'atomes, sont liées entre elles par des liaisons de Van der Waals)<sup>1</sup>. La diversité de ces matériaux est telle qu'il devient possible d'étudier sous forme bidimensionnelle aussi bien des métaux, que des isolants larges bandes ou des semiconducteurs, voire des états électroniques plus exotiques tels que la supraconductivité, ou des effets topologiques. D'une manière générale, ces matériaux vont présenter des propriétés différentes suivant qu'ils sont en monocouche ou en forme « bulk », et la transition de l'un à l'autre va se faire progressivement en fonction du nombre de couches<sup>2</sup>.

Le nitrure de bore de structure hexagonale (h-BN) suscite actuellement un fort intérêt dans cette communauté scientifique. Il possède la même structure cristalline que celle du graphène avec un paramètre de maille quasiment identique<sup>3</sup>. La différence principale entre ces deux systèmes réside dans le fait que h-BN est un très bon isolant (gap indirect de 6 eV<sup>4</sup>), tandis que le graphène est un excellent conducteur. Ces caractéristiques font de h-BN un composant idéal pour des hétérostructures à base de graphène ou bien de matériaux 2D (MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub>...). Pour des épaisseurs supérieures à trois monocouches, h-BN est un excellent diélectrique de grille, avec une tension de rupture de l'ordre de 0.8 V/nm, comparable à SiO<sub>2</sub>. En revanche, pour des épaisseurs plus petites, h-BN se comporte alors comme une barrière tunnel. Cependant les propriétés de h-BN sont encore mal connues jusqu'à présent, à cause de son caractère isolant. Les résultats expérimentaux sont inexistantes en ce qui concerne les propriétés optiques et électroniques de la monocouche vers les multicouches de h-BN.

Dans ce projet, nous souhaitons étudier les propriétés électroniques (structure de bandes) et optiques (gap direct ou indirect) en fonction de l'épaisseur (1ML, 2ML, 3ML et bulk) de h-BN, et combiner ces mesures à des études théoriques. Nos récents calculs pour h-BN en collaboration avec le CEA saclay montrent des propriétés évoluant continûment de la monocouche vers le matériau « bulk ». Nous avons par ailleurs démontré, pour la première fois, qu'il est possible d'effectuer des mesures de spectroscopie par rayons X en utilisant le graphène comme substrat pour h-BN. Ce type de structure h-BN/graphène, nous permet d'exploiter la très bonne conductivité du graphène pour réaliser des mesures de spectroscopie par rayons X (XPS/ARPES) à basse énergie pour les études de la structure de bandes<sup>5</sup>.

Ces expériences seront complétées par des études optiques en collaboration avec le L2C (G. Cassabois, B. Gil), pour déterminer la nature et la valeur du gap. L'ensemble de ces mesures apporteront des informations cruciales pour l'analyse élémentaire et quantitative de l'épaisseur, de la nature du gap, du dopage intrinsèque ainsi que de l'empilement de h-BN.

- (1) Geim, a K.; Grigorieva, I. V. Van Der Waals Heterostructures. *Nature* **2013**, *499*, 419–425.
- (2) Jin, W.; Yeh, P.-C.; Zaki, N.; Zhang, D.; Sadowski, J. T.; Al-Mahboob, A.; van der Zande, A. M.; Chenet, D. a.; Dadap, J. I.; Herman, I. P.; *et al.* Direct Measurement of the Thickness-Dependent Electronic Band Structure of MoS<sub>2</sub> Using Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.* **2013**, *111*, 106801.
- (3) Wang, S.; Wang, X.; Warner, J. H.; Al, W. E. T. All Chemical Vapor Deposition Growth of MoS<sub>2</sub>:h-BN Vertical van Der Waals Heterostructures. *ACS Nano* **2015**, *9*, 5246.
- (4) Cassabois, G.; Valvin, P.; Gil, B. Hexagonal boron nitride is an indirect bandgap semiconductor. To appear in *Nature Photonics*.
- (5) Sediri, H.; Pierucci, D.; Hajlaoui, M.; Henck, H.; Patriarche, G.; Dappe, Y. J.; Yuan, S.; Toury, B.; Belkhou, R.; Silly, M. G.; *et al.* Atomically Sharp Interface in an H-BN-Epitaxial Graphene van Der Waals Heterostructure. *Sci. Rep.* **2015**, *5*, 16465.