

Titre Thèse Title	Epitaxie et caractérisation d'hétérostructures de dichalcogénures de métaux de transition pour dispositifs tunnel Epitaxial growth and characterization of transition metal dichalcogenide heterostructures for tunnel devices	
(Co)-Directeur	Xavier Wallart	E-mail : xavier.wallart@univ-lille.fr
(Co)-Directeur		E-mail :
(Co)-Encadrant (s)	Emiliano Pallecchi	E-mail : emiliano.pallecchi@univ-lille.fr
Laboratoire(s)	IEMN	Web : https://www.iemn.fr/
Groupe(s)	Epiphy - Carbon	Web : https://www.iemn.fr/la-recherche/les-groupes/epiphy https://www.iemn.fr/la-recherche/les-groupes/carbon
Financement demandé	Contrat Doctoral Etablissement	ULille <input type="checkbox"/> Centrale Lille <input type="checkbox"/> Yncrea <input type="checkbox"/>
	Région – Autre <input type="checkbox"/> Préciser :	Co-financement acquis Oui / non <input type="checkbox"/> Préciser :
Financement acquis ? <input checked="" type="checkbox"/> Financement partiellement acquis ? <input type="checkbox"/>	Contrats de Recherche <input checked="" type="checkbox"/> Préciser : Contrat ANR Tunne2D ANR-21-CE24-0030	Autre <input type="checkbox"/> Préciser :

Résumé :

Les matériaux bidimensionnels (2DM) offrent des propriétés uniques principalement liées à leur structure cristallographique composée de couches faiblement couplées constituées de quelques plans atomiques (1 à 4) dans lesquels les atomes sont liés de manière covalente. Cette structure particulière entraîne l'absence de liaisons pendantes en surface et permet donc la formation d'hétérostructures qui ne nécessitent pas d'adaptation de paramètre de maille et rend possible une intégration sans contrainte. Parmi les 2DMs, les dichalcogénures de métaux de transition (TMDs) de formule MX_2 (M =atome métallique, X =S, Se ou Te) sont particulièrement intéressants car, contrairement au graphène, ils présentent des bandes interdites significatives dans la gamme de 0,5 à 2 eV et une variété d'alignements de bandes. Ces propriétés font des TMDs des candidats prometteurs pour de nombreuses applications, notamment la spintronique, le grappillage d'énergie, les sources quantiques et les dispositifs électroniques. Dans ce travail, nous nous concentrerons sur les dispositifs à effet tunnel (TDs) inter-bandes, qui ne souffrent pas des limitations dues à l'activation thermique des porteurs de charge et peuvent conduire à une résistance différentielle négative (NDR), caractéristique unique et différenciatrice pour le développement, par exemple, de sources et de détecteurs haute fréquence. Des résultats prometteurs ont été obtenus récemment mais sur des dispositifs fabriqués à partir de couches ou de flocons exfoliés ou transférés. Ces derniers, d'une taille de quelques μm^2 , posent d'importants problèmes concernant l'intégrité de l'interface, l'alignement rotationnel précis entre les couches successives et la fiabilité du processus.

Le doctorat proposé vise à répondre à ces questions en étudiant la croissance de couches et d'hétérostructures de TMDs à base de sélénium en utilisant l'épitaxie par jets moléculaires (MBE) grâce à une nouvelle machine récemment mise en service dans la salle blanche de l'IEMN. La croissance suivra soit l'approche MBE standard, soit une approche plus innovante basée sur la décomposition de précurseurs à source unique, contenant à la fois des atomes de sélénium et de métal, à la surface. Dans un premier temps, un accent particulier sera mis sur la qualité cristalline des couches et interfaces obtenues en fonction des conditions de croissance. À cette fin, elles seront caractérisées de manière approfondie afin d'évaluer : *i*) leur morphologie par microscopie à force atomique (AFM) et microscopie électronique à balayage (SEM) ; *ii*) leur cristallographie et leur caractère 2D par spectroscopie Raman, diffraction d'électrons et de rayons X (XRD) et *iii*) leurs propriétés électroniques par spectroscopies électroniques X et UV (XPS/UPS). Toutes les techniques susmentionnées sont entièrement disponibles à l'IEMN. Des caractérisations complémentaires, notamment la microscopie à effet tunnel (STM) et la microscopie électronique à transmission (TEM), seront également disponibles si nécessaire. Dans un deuxième temps, les meilleures couches et hétérostructures obtenues seront

processées pour effectuer une caractérisation électrique et évaluer leurs potentialités pour les dispositifs à effet tunnel.

Cette étude fait partie du projet Tunne2D récemment financé par l'ANR et lancé en janvier 2022, qui vise la fabrication de dispositifs à effet tunnel utilisant des semi-conducteurs TMD. Le doctorat offrira au candidat l'opportunité de collaborer avec les partenaires de ce projet, à savoir CINTRA (Singapour), le C2N (France) et le C2PM (France).

Le travail sera effectué dans la centrale de micro et nano fabrication et dans la plateforme de caractérisation multi physique du Laboratoire central de l'IEMN.

Le candidat devra être lauréat d'un master en physique ou en science des matériaux, ou avoir un diplôme d'ingénieur dans ces domaines. Il/elle doit avoir une solide expérience en physique du solide, et une forte motivation pour travailler dans un environnement de recherche. Étant donné la nature collaborative du projet, l'autonomie et les compétences en communication sont également attendues.

Abstract:

Two-dimensional materials (2DMs) offer some unique properties mainly related to their crystallographic structure composed of weakly coupled layers made of a few atomic planes (1 to 4) in which atoms are covalently bounded. This peculiar structure results in the absence of surface dangling bonds and therefore allows the formation of heterostructures, which do not require lattice matching and make strain-free integration possible. Among 2DMs, the transition metal dichalcogenides (TMDs) of formula MX_2 (M =metal atom, X =S, Se or Te) are particularly appealing since, contrarily to graphene, they exhibit sizeable band gaps in the 0.5 - 2 eV range and a variety of band alignments. These properties make TMDs promising candidates for many applications including spintronics, energy harvesting, quantum sources and electronic devices. In this work, we will focus on inter-band tunnel devices (TDs), which do not suffer from limitations due to the thermal activation of charge carriers and can lead to negative differential resistance (NDR), which is a unique and differentiating feature for the development of, for instance, high-frequency sources and detectors. Promising results have been obtained recently but on devices relying mainly on exfoliated or transferred layers or flakes, several μm^2 wide, with severe issues regarding the interface integrity, the precise rotational alignment between successive layers and the process reliability when working on flakes.

The proposed PhD aims at addressing these issues by studying the growth of Selenium-based TMD layers and heterostructures using molecular beam epitaxy (MBE) thanks to a new machine recently launched in the IEMN clean room. Growth will follow either the standard MBE approach or a more innovative one based on the decomposition of Single Source Precursors containing both Selenium and metal atoms on the surface. As a first step, a particular emphasis will be placed on the crystalline quality of the resulting layers and interfaces according to the growth conditions. To this end, they will be thoroughly characterized to assess: *i*) their morphology by atomic force microscopy (AFM) and Scanning Electron Microscopy (SEM); *ii*) their crystallography and 2D character by Raman spectroscopy, electron and X-ray diffraction (XRD) and *iii*) their electronic properties by X-ray and UV electron spectroscopies (XPS/UPS). All the above-mentioned techniques are fully available at IEMN. Complementary characterization including Scanning Tunneling microscopy (STM) and Transmission Electron Microscopy (TEM) will be also available if needed. As a second step, the best resulting layers and heterostructures will be processed to perform electrical characterization and assess their potentialities for tunneling devices.

This study is part of the project Tunne2D recently funded by the ANR and launched in January 2022, which targets the fabrication of tunnel devices using TMD semiconductors. The PhD will offer for the candidate the opportunity to collaborate with the partners of this project, i.e. CINTRA (Singapour), C2N (france) and C2PM (France).

The work will be performed in the micro and nano fabrication facility and in the multi physics characterization platform of the 'Laboratoire central de l'IEMN'.

The candidate should be laureate of a master thesis in Physics or material science, or have an engineer diploma in these fields. She/he should have a solid background in solid-state physics, and a strong motivation to work in a research environment. Given the collaborative nature of the project, autonomy and communication skills are also expected.