

Sujet thèse / PhD subject 2024

|   |   |   |
|---|---|---|
| <b>Titre Thèse</b>  | Transition résistive dans des isolants de Mott bidimensionnels épitaxiés                      |   |
| <b>(Co)-Directeur</b>   | Xavier Wallart  | E-mail : xavier.wallart@univ-lille.fr   |
| <b>(Co)-Directeur</b>   | Pascale Diener  | E-mail : pascale.diener@iemn.fr   |
| <b>(Co)-Encadrant (s)</b>   | David Mele  | E-mail : david.mele@junia.com   |
| <b>Laboratoire</b>  | IEMN  | Web :http://iemn.fr   |
| <b>Groupe(s)</b>  | EPIPHY, PHYSIQUE  | Web :   |
| <b>Projet phare (principal)</b>   | Materials   |   |
| <b>Demande thèse labellisée IEMN</b>  | <b>Oui</b>  |   |
| <b>Financement demandé</b>  | Contrat Doctoral Etablissement  | ULille <input checked="" type="checkbox"/> Centrale Lille <input type="checkbox"/> JUNIA <input type="checkbox"/>   |
|   | <b>Région – Autre</b> <input checked="" type="checkbox"/><br>Préciser : <b>ANR Femtojoule</b> | Co financement (Préciser l'origine, demande en cours, acquis ou pas) : ANR Femtojoule (demande en cours)  |
| <b>Financement acquis</b> <input type="checkbox"/><br><b>Financement partiellement acquis</b> <input checked="" type="checkbox"/> | Contrats de Recherche <input type="checkbox"/><br>Préciser :                                  | Autre <input checked="" type="checkbox"/><br>Si la direction IEMN n'a pas d'objection, ½ thèse possible sur fonds propres groupe Physique, suite aux versements prévus Junia-Nanodyn. |

Résumé du sujet :

Les **matériaux de Mott** sont des matériaux dans lesquels les fortes corrélations électroniques donnent lieu à des propriétés fascinantes : supraconductivité à haute température critique dans les cuprates, magnétorésistance géante dans les manganites, **transition de phase isolant métal sous impulsion électrique dans les isolants de Mott à petit gap ( $< 0.5$  eV)**. Ces transitions isolant-métal sont à l'origine de **switchs résistifs de typiquement deux ordres de grandeurs**, et sont à l'origine de plusieurs brevets qui soulignent le potentiel de la Mottronique, dont l'objet est d'utiliser les semiconducteurs de Mott pour la réalisation de dispositifs mémoires et de composants neuromorphiques.

Récemment, les progrès en **épitaxie par jets moléculaires** ont permis de synthétiser de **nouveaux matériaux dichalcogénures bidimensionnels, 1T-NbSe<sub>2</sub> et 1T-TaSe<sub>2</sub>, dans lesquels une phase de Mott à petit gap a été identifiée** [1]. L'étude d'isolants de Mott bidimensionnel présente un fort intérêt à divers niveaux : il peut notamment permettre de mieux comprendre la phase de Mott de composés quasi 2D, et l'interaction entre la phase de Mott et l'ordre électronique d'onde de densité de charge qui cohabitent dans les dichalcogénures bidimensionnels tout comme dans les cuprates. Par ailleurs, l'obtention de switch résistif dans des matériaux bidimensionnels est à fort potentiel pour la Mottronique : certains résultats récents suggèrent que **l'énergie de switch dépend du volume** de matériau actif soumis au champ électrique, conduisant à des dispositifs mémoires dont **l'énergie d'opération serait probablement dans la gamme femtojoule**, avec des performances accrues par rapport aux dispositifs à l'état de l'art actuels.

Les premières caractérisations de monocouches d'isolant de Mott chalcogénures ont été obtenus sur des couches déposés sur graphène. L'utilisation d'un substrat métallique limite fortement les applications puisqu'il court-circuite le matériau actif. **A l'IEMN, le bâti MBE dédié aux chalcogénures installé en 2021, a été mis à profit pour réaliser des monocouches de 1T-TaSe<sub>2</sub> sur un substrat semi-isolant, le phosphure de gallium GaP.** Les premiers résultats sont très prometteurs, avec notamment la preuve de la continuité électrique des monocouches sur plusieurs millimètres, et une première signature de switch résistif mis en évidence par microscopie en champ proche [2]. Ce travail a été notamment mené par la doctorante Houda Koussir, dont la thèse se termine en janvier 2024. Il ouvre plusieurs perspectives que nous voudrions explorer dans le cadre de la thèse qui fait l'objet de la présente demande.

La première partie porte sur le développement et la compréhension de la **croissance de matériaux dichalcogénures de Mott sur substrat III-V, et leur encapsulation**, nécessaire pour éviter l'oxydation des monocouches. Nous ciblons notamment la synthèse de monocouches et de bicouches de **1T-NbSe<sub>2</sub>, sur substrat GaP et GaAs, avec encapsulation sélénium**.

La deuxième partie porte sur la réalisation de dispositifs élémentaires à base de 1T-TaSe<sub>2</sub> et 1T-NbSe<sub>2</sub>. L'objectif est de développer un procédé de fabrication **d'électrodes planaires à la surface des couches épitaxiées**, avec une optimisation de l'encapsulation.

Enfin, nous visons une **caractérisation des propriétés de switch résistif multiéchelle**. Les monocouches seront étudiées par microscopie tunnel et à l'aide du Nanoprobe. Les dispositifs élémentaires seront étudiés par des techniques de caractérisation standards de composants à switches résistifs à température ambiante, ainsi que par mesures cryogéniques sous impulsions électriques entre 2 et 500 kelvins, grâce aux dispositifs cryogéniques et l'électronique dédiée qui a été récemment mise en place.

L'enjeu est d'établir les propriétés de switch résistif dans ces nouveaux matériaux de Mott 2D et de **mettre à jour et comprendre les grandeurs caractéristiques de cette transition**, comme le champ électrique seuil, le ratio de résistance avant et après transition, le temps, l'énergie et le volume minimal de switch. **Cette thèse permettra ainsi d'évaluer le potentiel de ces nouveaux isolants de Mott bidimensionnels et leur possible intégration dans des dispositifs Mottronique à grande efficacité énergétique.**

[1] Nakata, Y.; Sugawara, K.; Chainani, A.; Oka, H.; Bao, C.; Zhou, S.; Chuang, P.-Y.; Cheng, C.-M.; Kawakami, T.; Saruta, Y.; Fukumura, T.; Zhou, S.; Takahashi, T.; Sato, T. *Robust Charge-Density Wave Strengthened by Electron Correlations in Monolayer 1T-TaSe<sub>2</sub> and 1T-NbSe<sub>2</sub>*. **Nat Commun** **2021**, *12* (1), 5873. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-26105-1>.

[2] Koussir, H.; Chernukha, Y.; Sthioul, C.; Haber, E.; Peric, N.; Biadala, L.; Capiod, P.; Berthe, M.; Lefebvre, I.; Wallart, X.; Grandidier, B.; Diener, P. *Large-Area Epitaxial Mott Insulating 1T-TaSe<sub>2</sub> Monolayer on GaP(111)B*. **Nano Lett.** **2023**, *23* (20), 9413–9419. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c02813>.