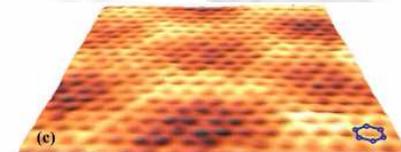
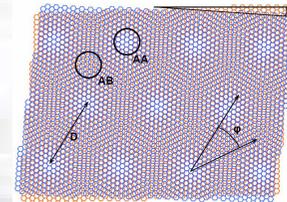
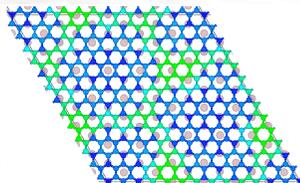
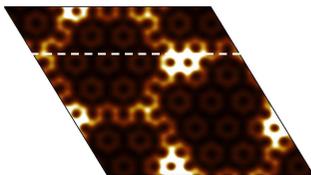
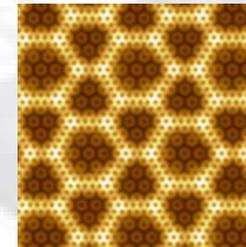
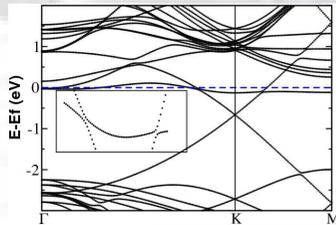


Propriétés électroniques et structurales du graphène sur carbure de silicium

Soutenance de thèse de

François Varchon



Cadre

- **Institut Néel, Département MCMF, équipe TSNPE**

- **Encadrement :**

Laurence Magaud (*ab initio*, MCMF)
Pierre Mallet (STM, NANO)

- **Équipe :**

Jean-Yves Veullen (STM, NANO)
Fanny Hiebel (STM, NANO)
Cécile Naud (transport, NANO)

- **Collaboration :**

D.Mayou, V. Olevano, P. Darancet, P.Trevisanutto (IN)
Groupe de K. Kern (MPI, Stuttgart)
Groupe de W. de Heer (Gatech, Atlanta, USA)

Plan

I. Introduction

- **Graphène idéal**
- **Expériences pionnières**
- **Graphène sur carbure de silicium**

II. Techniques utilisées

- **Calculs *ab initio***
- **Microscopie à effet tunnel (STM)**

Plan

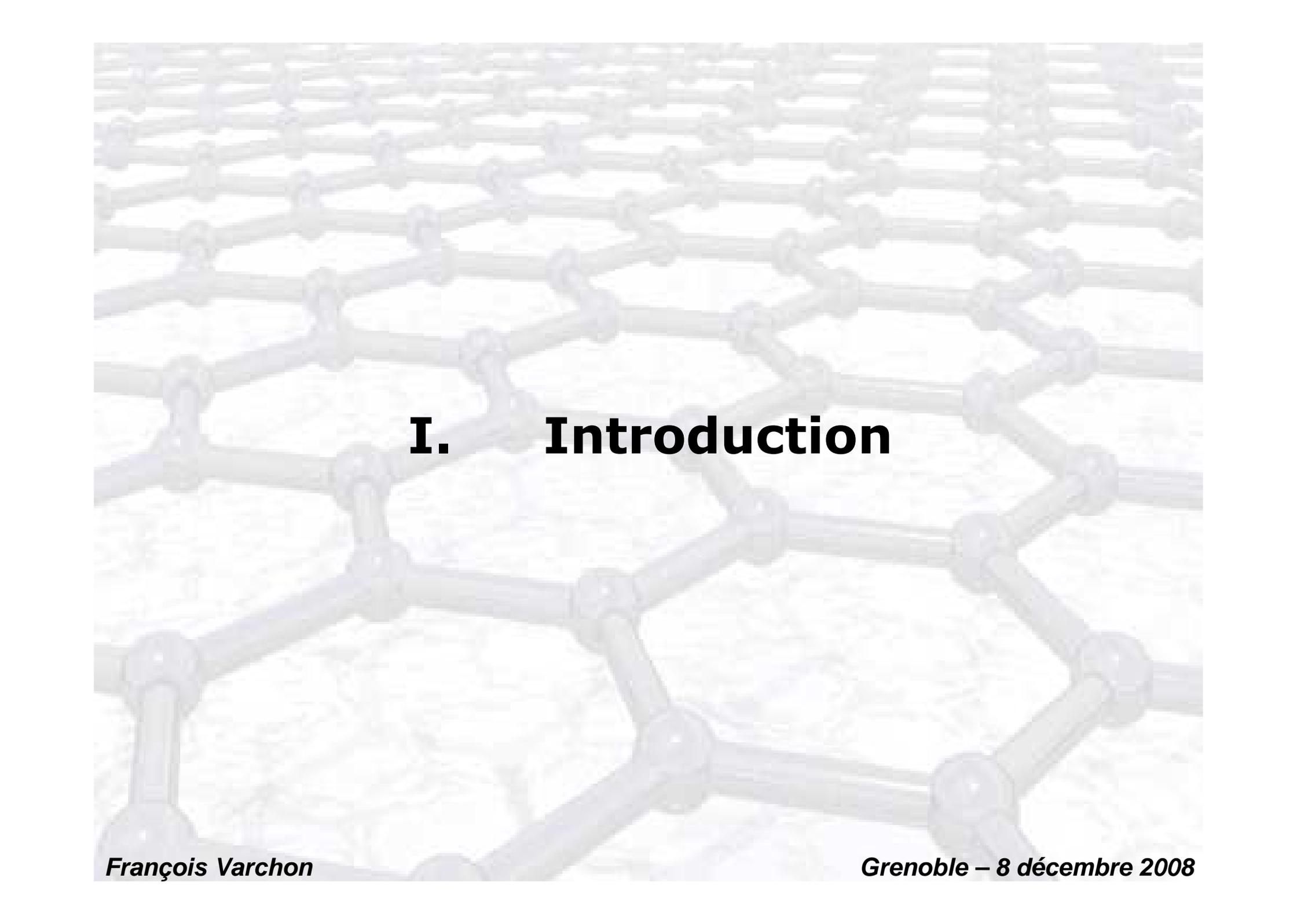
III. Graphène sur SiC(0001) (face Si)

- **Résultats numériques**
- **Résultats expérimentaux**

IV. Graphène sur SiC(000-1) (face C)

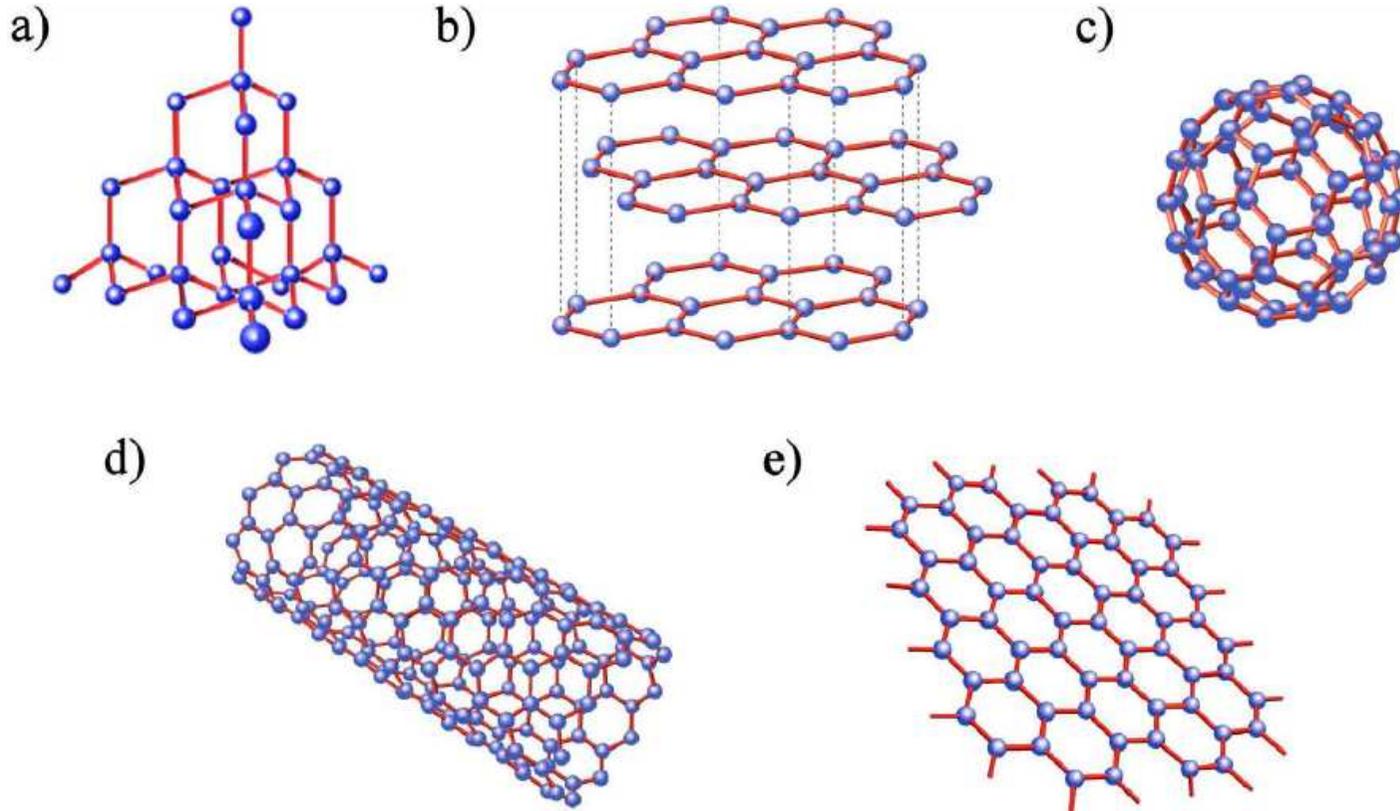
- **Existence et conséquence du désordre rotationnel**
- **Etude par STM de quelques plans de graphène sur SiC(000-1)**

V. Conclusion



I. Introduction

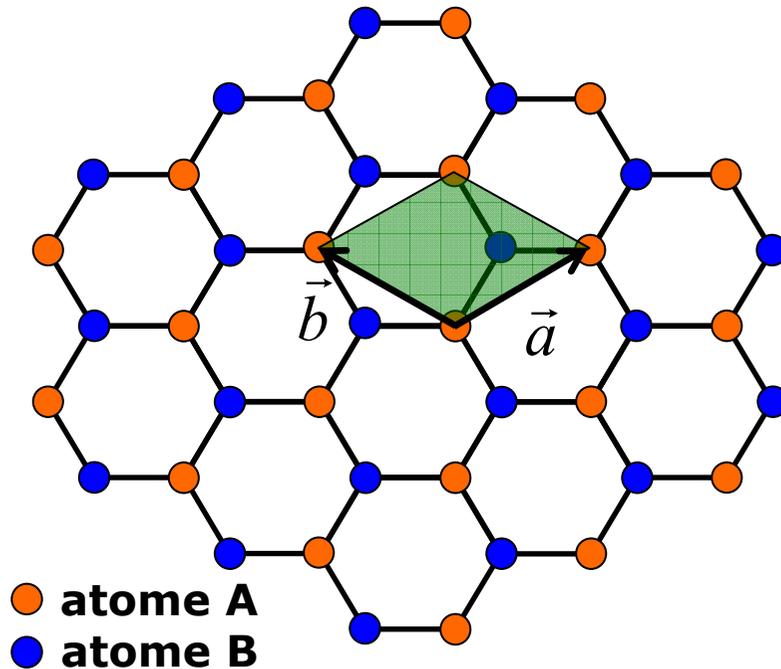
Allotropes du carbone



- 3D : diamant, graphite ...
 - **2D : graphène (2004)**
 - 1D : nanotubes (1991)
 - 0D : fullerènes (1985)
- } naturelle
} nanotechnologie

Le graphène idéal

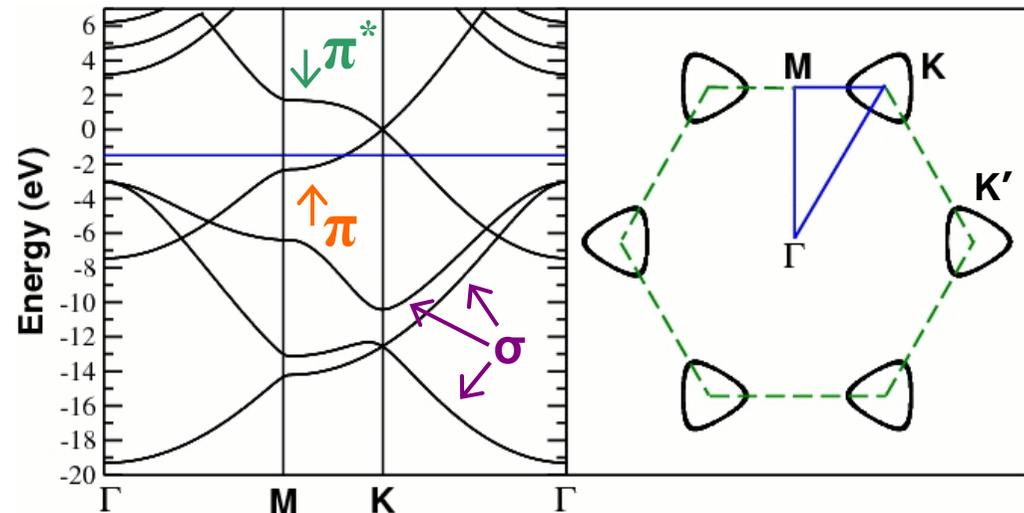
Structure cristallographique



Le graphène est un plan unique d'atomes de carbone en arrangement nid d'abeilles

- 2 sous-réseaux atomiques (atomes A et B)
- $d_{A-B} = 1,418 \text{ \AA}$
- $a = b = 2,456 \text{ \AA}$

Structure électronique



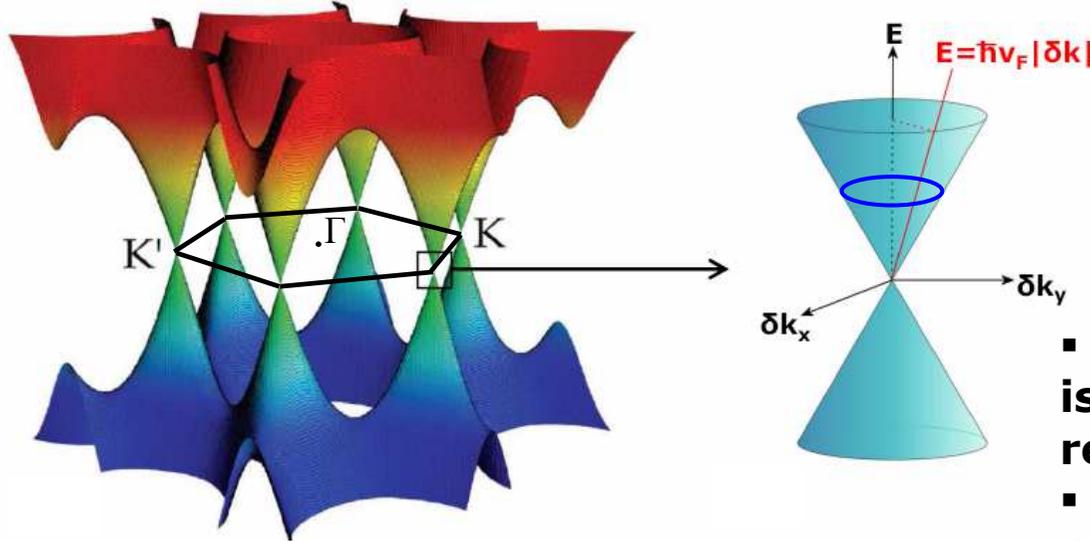
P.R. Wallace, *Phys. Rev.*, 9 71, (1947)

Les bandes π et π^* se touchent au niveau de Fermi aux points K et K' de la première zone de Brillouin (PZB)

- dispersion linéaire autour de K et K'
- **semi-conducteur à gap nul**

Propriétés « exotiques »

Cône de Dirac :



Pour

$$\mathbf{k} = \Gamma\mathbf{K} + \delta\mathbf{k}$$

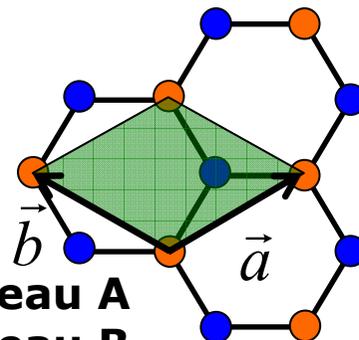
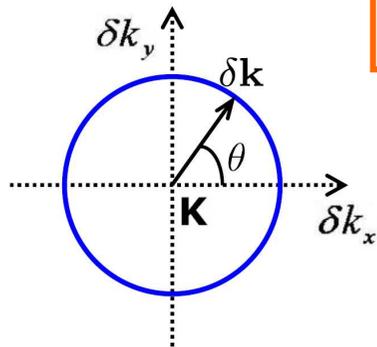
$$|\delta\mathbf{k}| \ll |\Gamma\mathbf{K}|$$

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) \simeq \pm \hbar v_F |\delta\mathbf{k}|$$

- dispersion linéaire et isotrope dans l'espace réciproque.
- « fermions de Dirac de masse nulle » $v_F \simeq c/300$

Symétrie de la fonction d'onde :

$$\Psi_{I\pm}^{\mathbf{K}+\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta} \end{pmatrix}$$



- sous-réseau A
- sous-réseau B

- déphasage entre les contributions des sous-réseaux A et B.
- pseudo-spin, chiralité

→ Analogie avec l'électrodynamique quantique

M.I. Katsnelson et al., *Nature Phys.* 2, 620 (2006)

Différence mono/multiplan de graphène

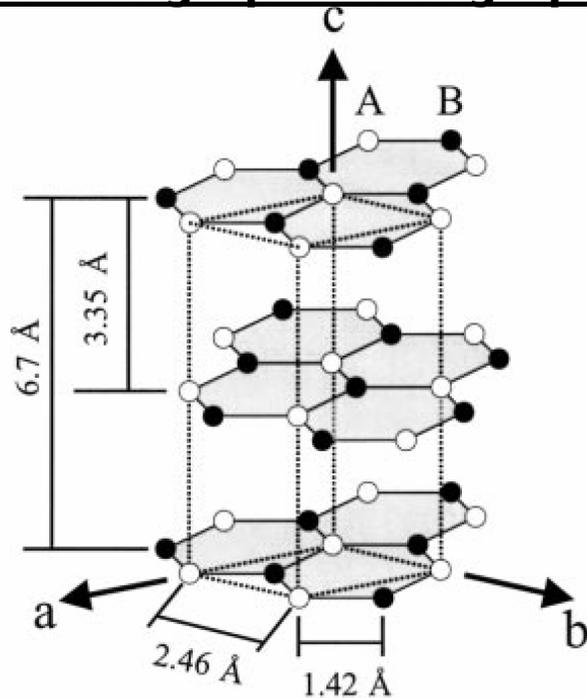
Propriétés intrinsèques au monoplan de graphène :

- dispersion linéaire
- pseudo-spin
- ...



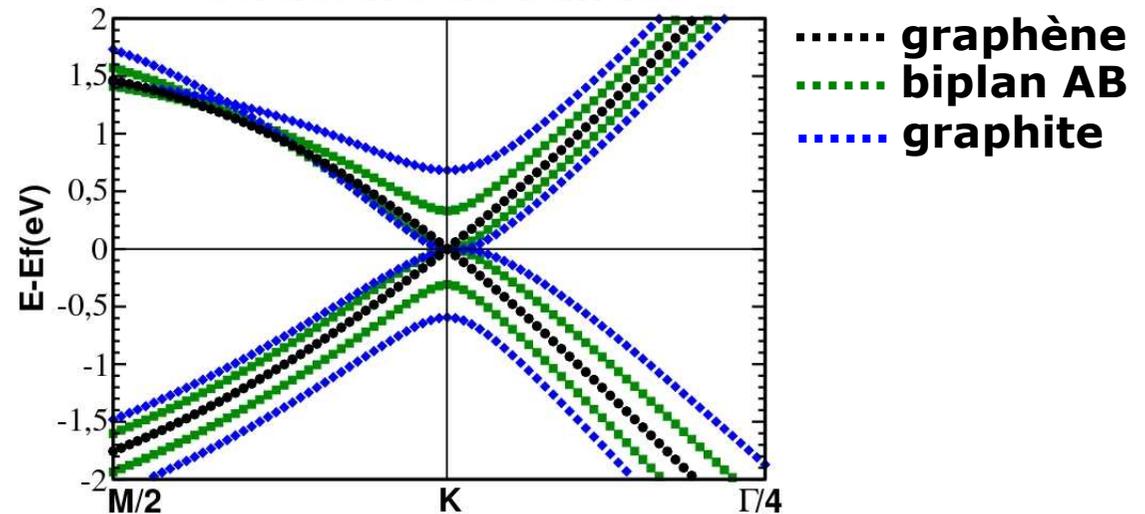
Signature expérimentale particulière (effet Hall quantique demi-entier, ...)

Biplan de graphène et graphite :



Empilement de type graphite (AB, Bernal)

Structure de bandes



Du biplan AB au graphite :

- propriétés différentes de celles du monoplan de graphène

Expériences pionnières

1) Graphène exfolié

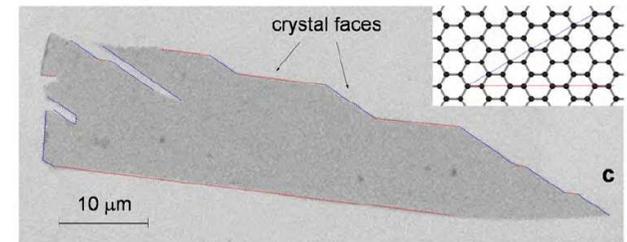
A. Geim (Manchester) et P. Kim (Columbia Univ):

K. S. Novoselov et al, Science **306**, 666-669, (2004)

K. S. Novoselov et al, Nature **438**, 197, (2005)

Y. Zhang et al, Nature **438**, 201, (2005)

- effet Hall quantique demi-entier
- EHQ à 300 K
- très grandes mobilités électroniques pour le graphène suspendu ($\mu \sim 200000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)



A. Geim and K.S. Novoselov, *Nature Materials* **6**, 183-191, (2007)

2) Graphène sur carbure de silicium

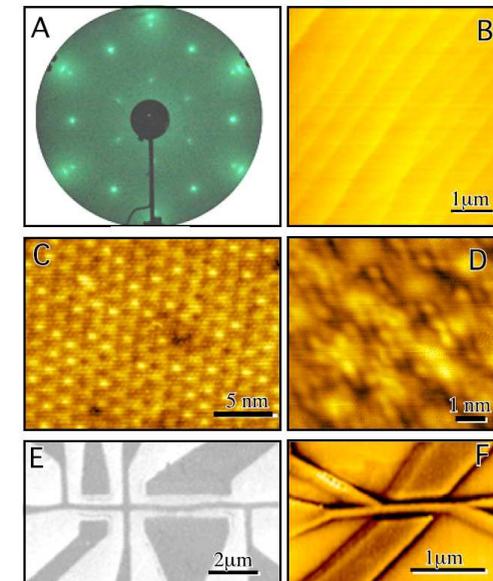
C. Berger and W. de Heer:

C. Berger et al., J.Phys. Chem.B **108**, 19912 (2004)

C. Berger et al., Science **312**, 1191, (2006)

La croissance des plans de graphène/graphite s'effectue par recuit d'une surface de SiC

- oscillations de Shubnikov-de Haas anormales
- anti-localisation faible
- mobilités électroniques ($\mu \sim 27000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)



C. Berger et al., Science **312**, 1191, (2006)

Graphène sur SiC (4H, 6H)

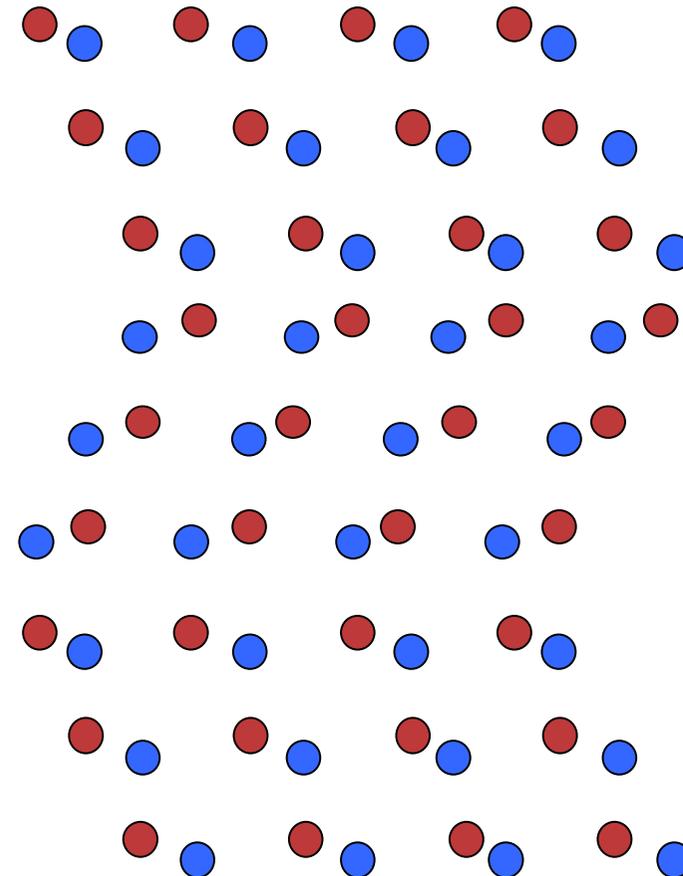
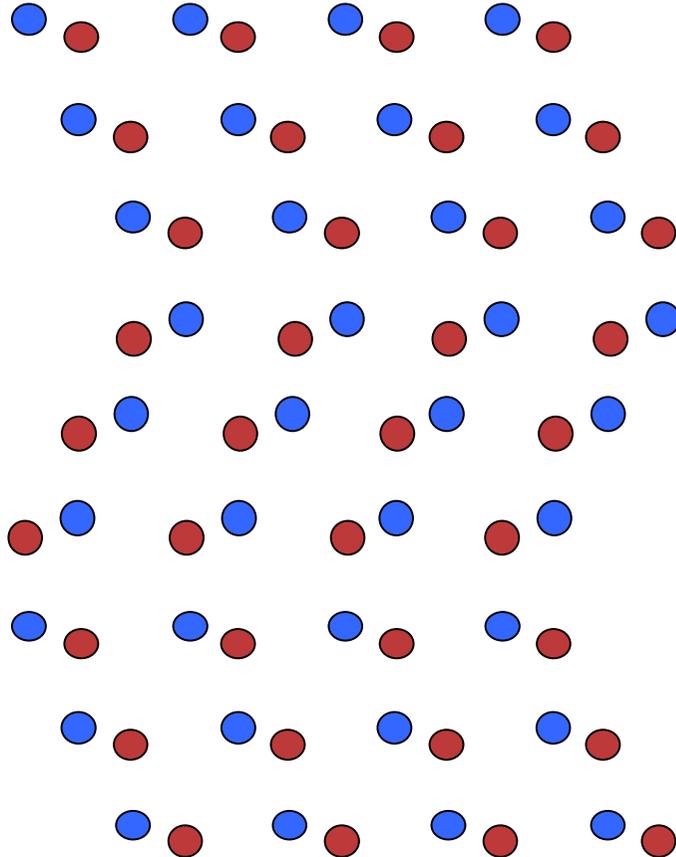
SiC(000-1)
terminée C



SiC(0001)
terminée Si



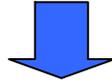
● C
● Si



} 2.5 Å

Graphène sur SiC (4H, 6H)

SiC(000-1)
terminée C

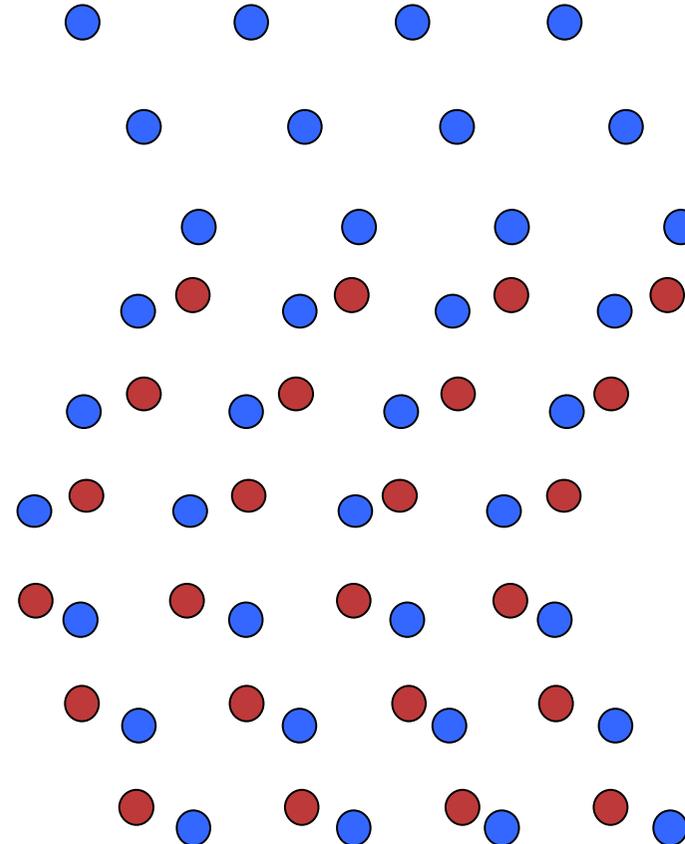
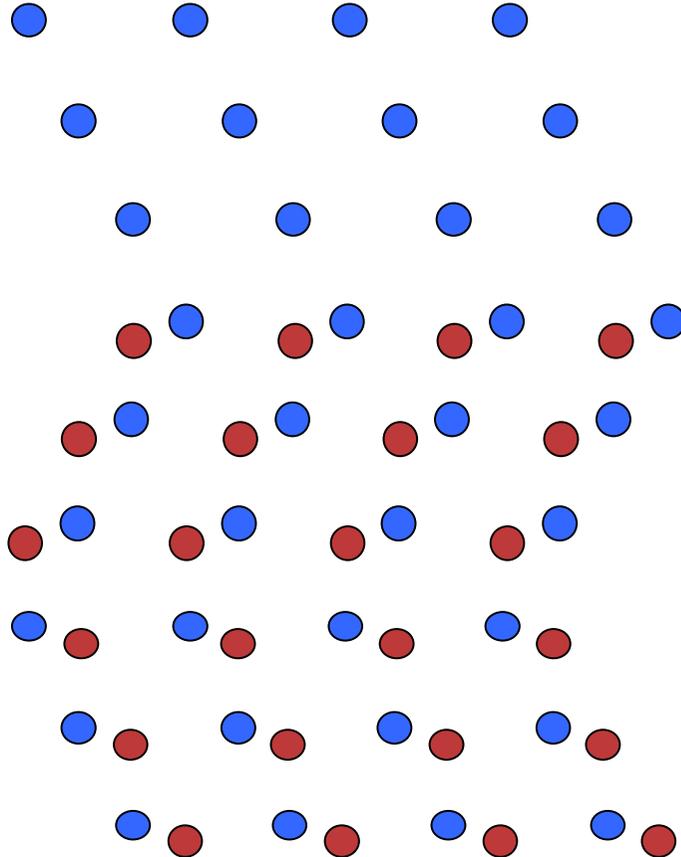


SiC(0001)
terminée Si



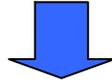
● C
● Si

T ↗
t ↗



Graphène sur SiC (4H, 6H)

SiC(000-1)
terminée C

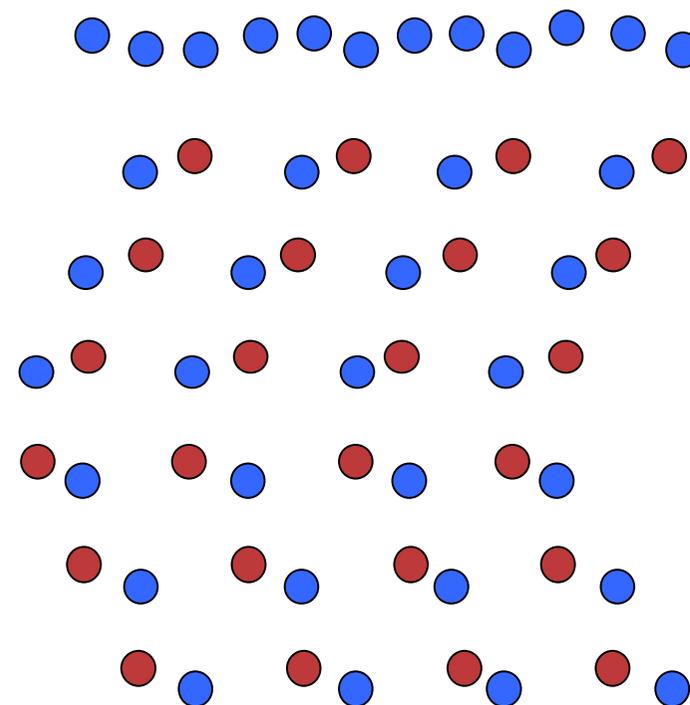
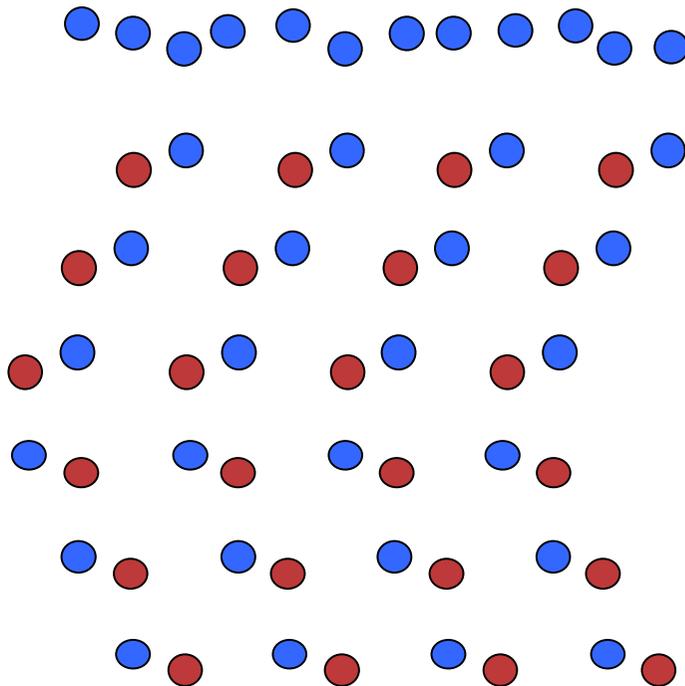


SiC(0001)
terminée Si



● C
● Si

T ↗
t ↗



Graphène sur SiC (4H, 6H)

SiC(000-1)
terminée C

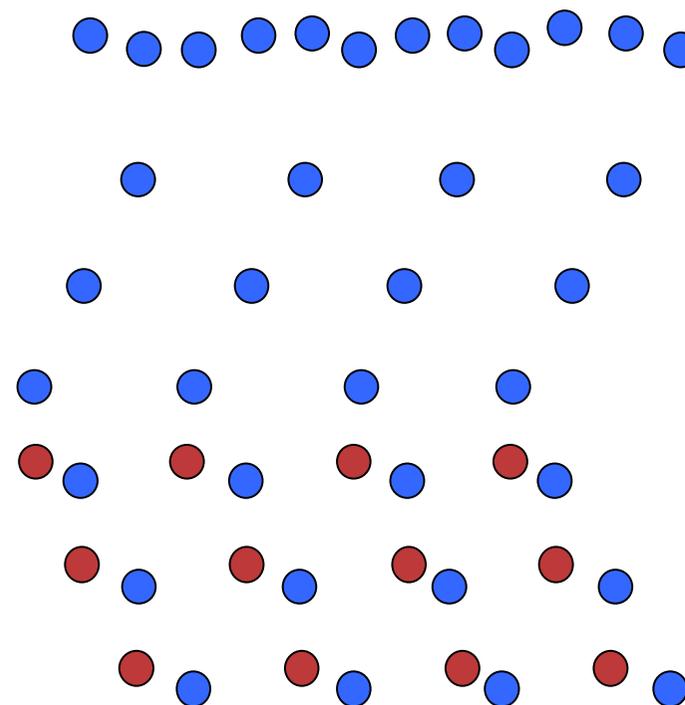
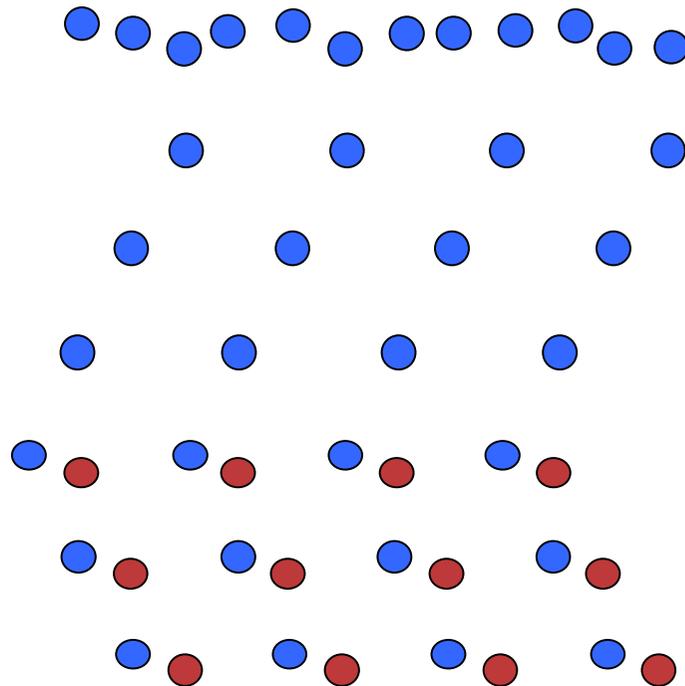


SiC(0001)
terminée Si



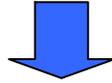
● C
● Si

T ↗
t ↗



Graphène sur SiC (4H, 6H)

SiC(000-1)
terminée C

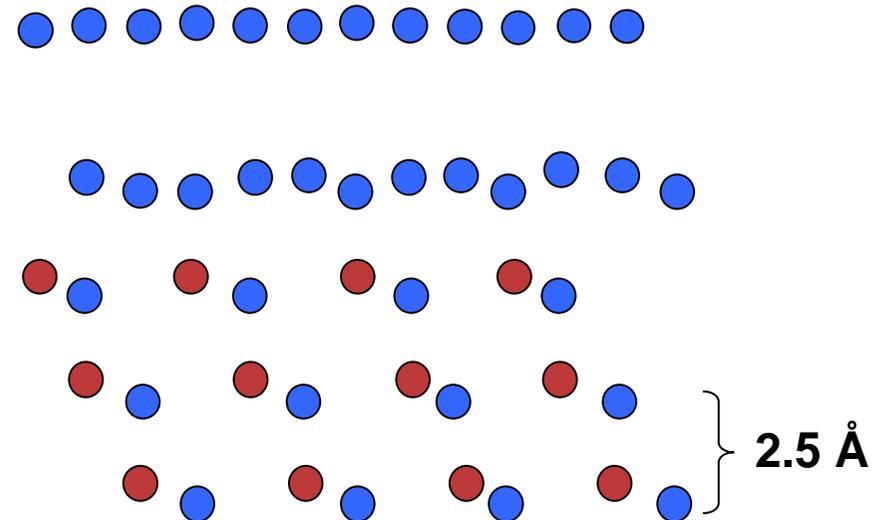
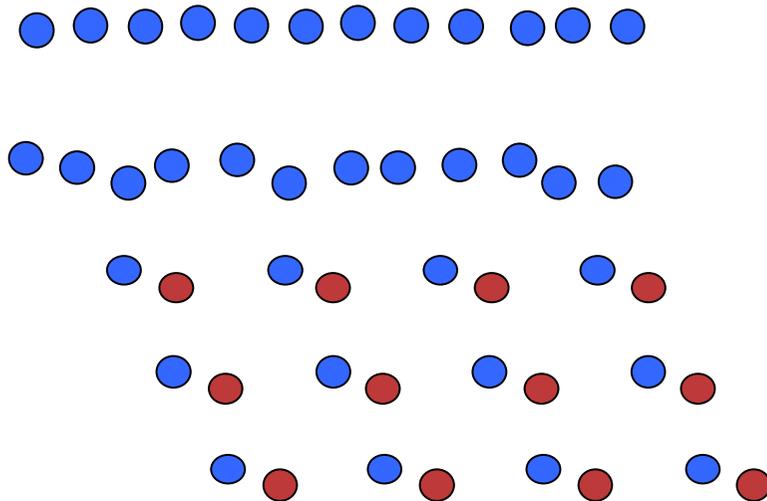


SiC(0001)
terminée Si



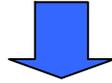
● C
● Si

T ↗
t ↗



Graphène sur SiC (4H, 6H)

SiC(000-1)
terminée C



Signature du graphène :

- magnéto-transport (SdH, anti-localisation faible)
- transmission infrarouge

Propriétés de transport :

- forte mobilité électronique ($\mu \sim 27000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
- un plan domine (dopage)

Propriétés structurales :

- pas d'épitaxie
- désordre rotationnel
- croissance rapide

SiC(0001)
terminée Si



Signature du graphène :

- ARPES
- magnéto-transport (SdH)

Propriétés de transport :

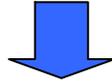
- plus faible mobilité électronique ($\mu \sim 1100 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
- un plan domine (dopage)

Propriétés structurales :

- graphène épitaxié
- empilement de type graphite
- croissance plan par plan

Graphène sur SiC (4H, 6H)

SiC(000-1)
terminée C



Signature du graphène :

- magnéto-transport (SdH, anti-localisation faible)
- transmission infrarouge

Propriétés de transport :

- forte mobilité électronique ($\mu \sim 27000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
- un plan domine (dopage)

Propriétés structurales :

- pas d'épitaxie
- désordre rotationnel
- croissance rapide

SiC(0001)
terminée Si



Signature du graphène :

- ARPES
- magnéto-transport (SdH)

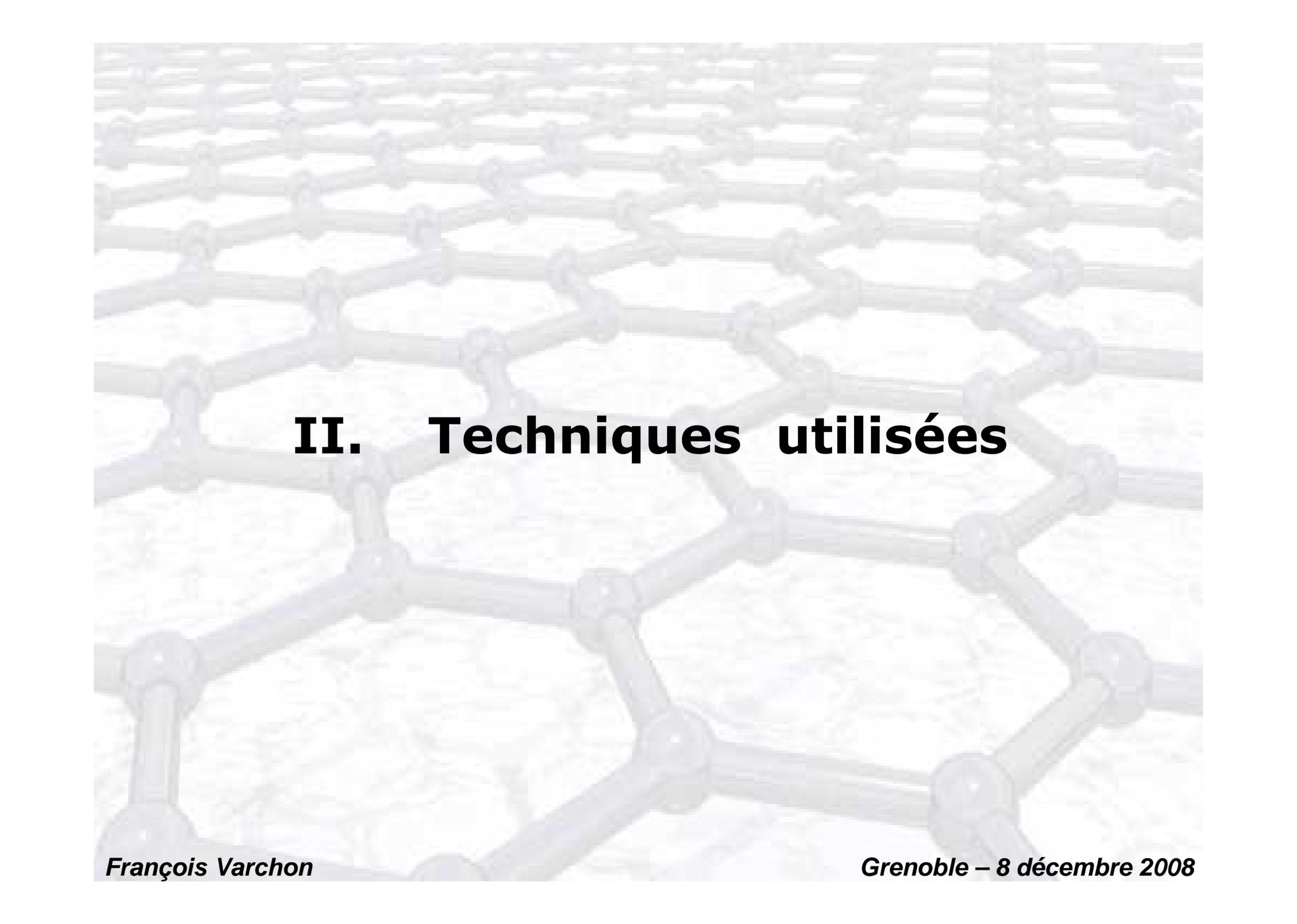
Propriétés de transport :

- plus faible mobilité électronique ($\mu \sim 1100 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
- un plan domine (dopage)

Propriétés structurales :

- graphène épitaxié
- empilement de type graphite
- croissance plan par plan

Comment un plan de carbone en interaction avec un substrat de SiC et d'autres plans de C peut-il présenter les propriétés électroniques d'un plan de graphène isolé ?



II. Techniques utilisées

Calculs *ab initio*

Résolution de l'équation de Schrödinger pour un système de N atomes en interaction sans paramètre ajustable.

Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :

- **Théorèmes d'Hohenberg-Kohn :** P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev., **136**, B864 (1964)
- **Équations de Kohn-Sham :** W. Kohn, L. Sham, Phys. Rev., **140**, A1133 (1965)

→ procédure itérative pour trouver la densité électronique de l'état fondamental

→ codes de calcul DFT

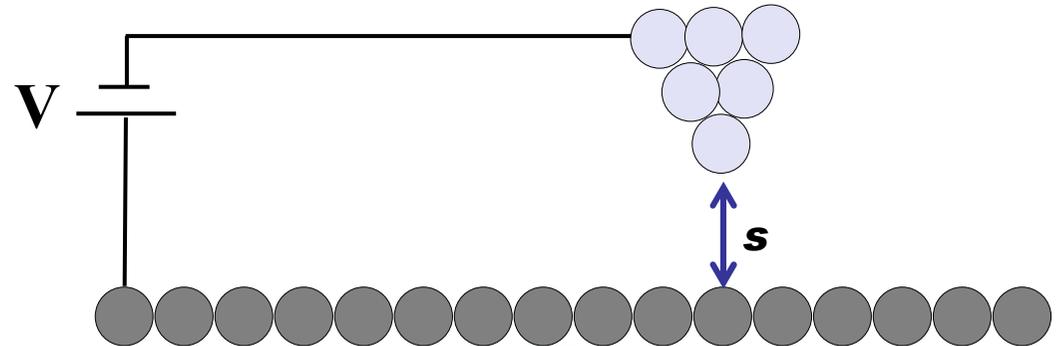
Propriétés électroniques et structurales :

- maille composée de plus d'une centaine d'atomes
- structure cristallographique relaxée
- énergie totale
- densité électronique
- structure de bandes (via les énergies de Kohn Sham)

Microscope à effet tunnel (STM)

G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, E. Weibel, APL **40**, 178 (1982)

Microscopie à effet tunnel est basée sur un effet purement quantique, appelé l'effet tunnel.



$$I(\mathbf{r}, V) = \frac{e\beta}{\hbar} N_T(E_F) e^{-2\kappa s} \int_{E_F}^{E_F + eV} \rho_s(r_{//}, E) dE$$

Le courant tunnel :

- décroît exponentiellement avec la distance pointe-surface
- est proportionnel pour une faible tension tunnel à la densité d'états locale (LDOS) de la surface au niveau de Fermi et évaluée au centre de courbure de la pointe

Informations :

- **topographie** de la surface (hauteur de marche, taille des domaines, ...)
- **structure électronique au niveau de Fermi** de la surface (contraste atomique, interférences quantiques, ...)
- résolution inférieure au nanomètre

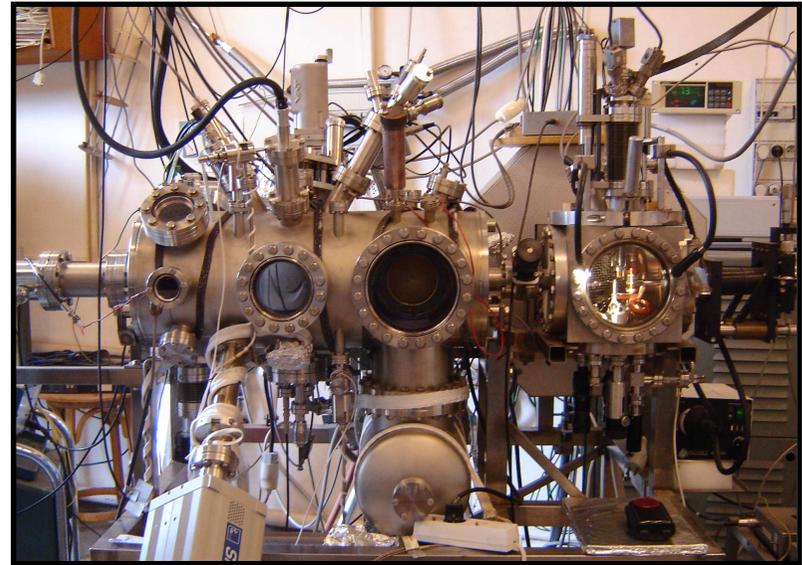
Techniques

Calcul DFT :



- code VASP (*Vienna Ab Initio Simulation Package*)
- système périodique : technique de supercellule
- base d'ondes planes $E_{\text{cut-off}}=211$ eV
- pseudopotentiels ultradoux
- fonctionnelle d'échange et corrélation GGA-PW91

Microscope à effet tunnel :



- STM conçu et fabriqué au laboratoire
- Ultra Vide (UHV $\rightarrow P \leq 10^{-10}$ mbar)
- recuit se déroule sous UHV
- diffraction d'électrons lents (DEL) et spectroscopie Auger
- température variable de 300 K à 40 K



III. Graphène sur SiC face Si



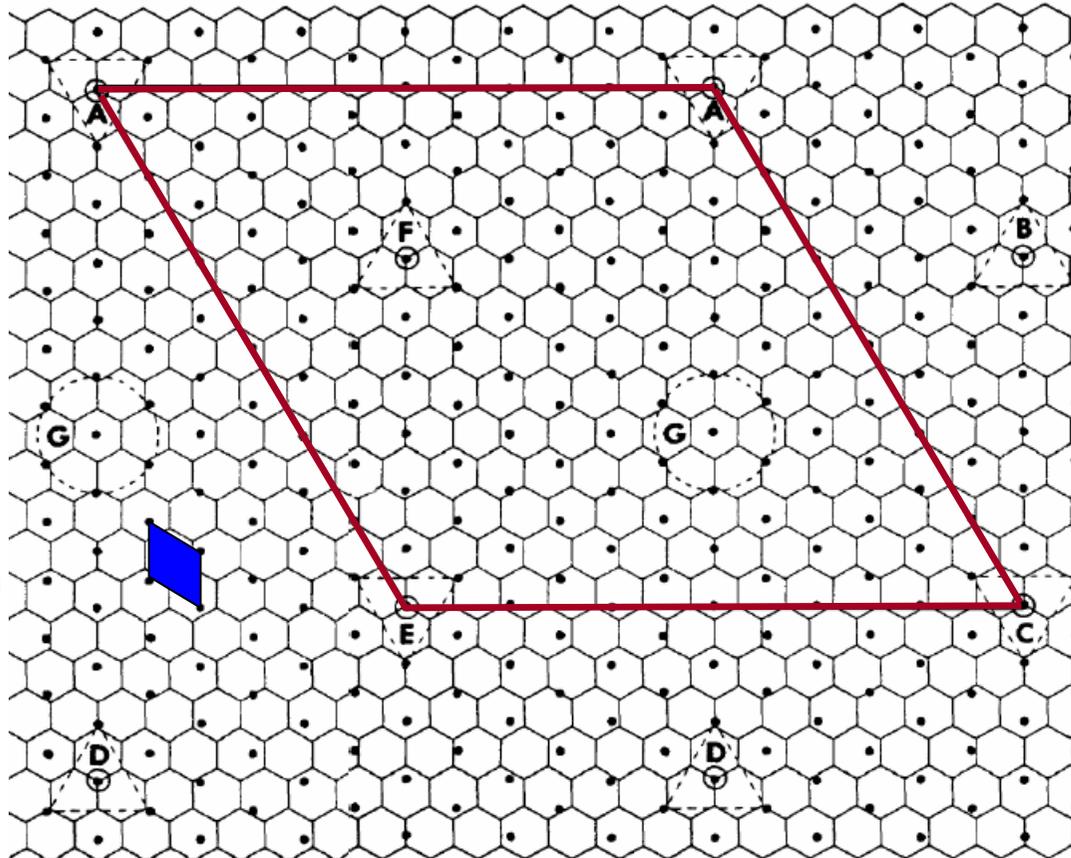
III. Graphène sur SiC face Si
1) Résultats numériques

Interface

Géométrie de l'interface

Le graphène et la surface du SiC(0001) sont presque commensurables pour une maille en $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ (ou $6R3$) par rapport au SiC (= 13×13 par rapport au graphène).

- Si (substrat)
-  1 plan de C
-  $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$
-  1 x 1 du SiC(0001)



▪ En accord avec les données DEL

A.J. Van Bommel et al., Surf. Sci., **48**, 463 (1975)

F.Owman et al., Surf. Sci. **369**, 126 (1996)

François Varchon

??

▪ Données STM : 6 x 6 !

M.-H.Tsai et al. Phys. Rev. B, **45**, 1327 (1992)

W.Chen et al. Surf.Sci., **596**, 176 (2005)

Grenoble – 8 décembre 2008

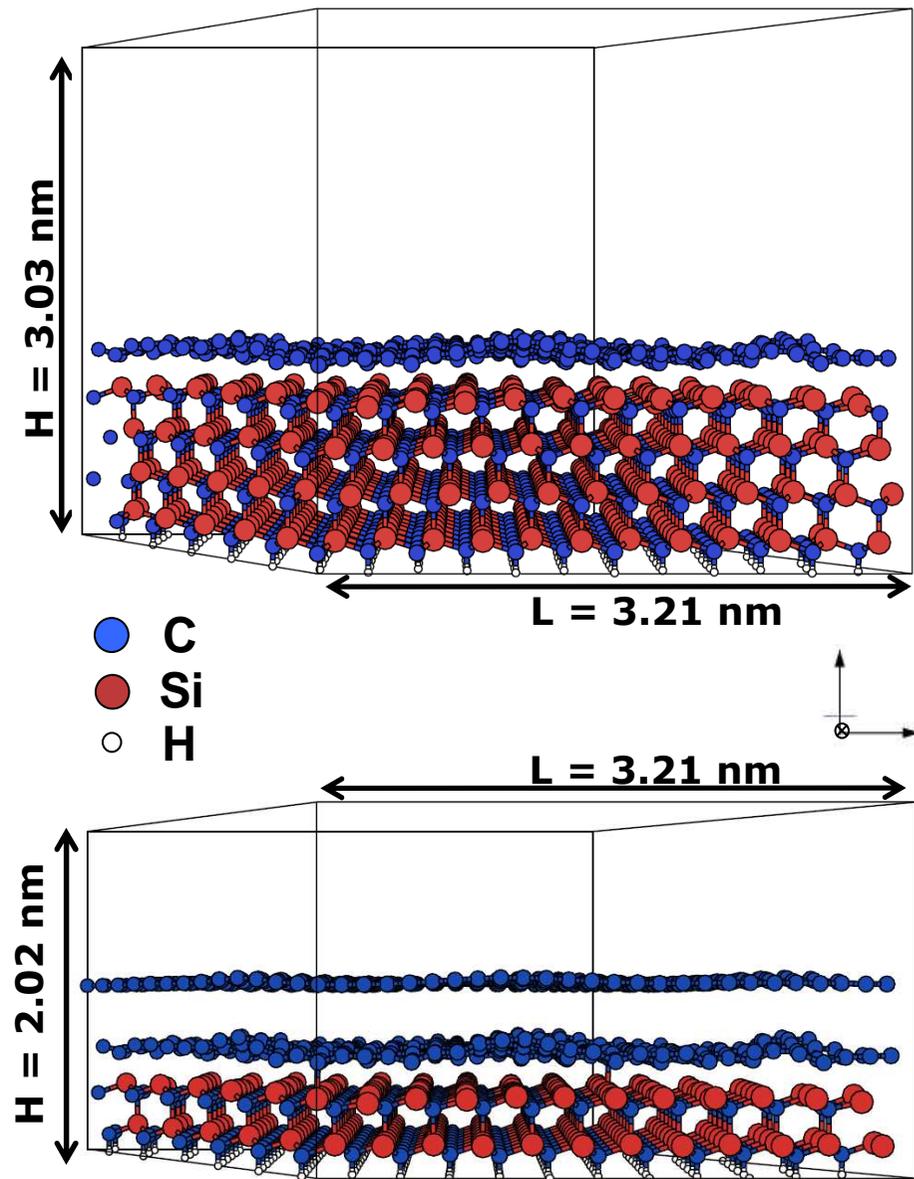
Techniques de calcul

Supercellules en $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ R30° :

- 1310 ou 1216 atomes
- 1 plan ou 2 plans de C nid d'abeilles en empilement AB
- 4 biplans ou 2 biplans de SiC
- 1 plan d'H
- vide

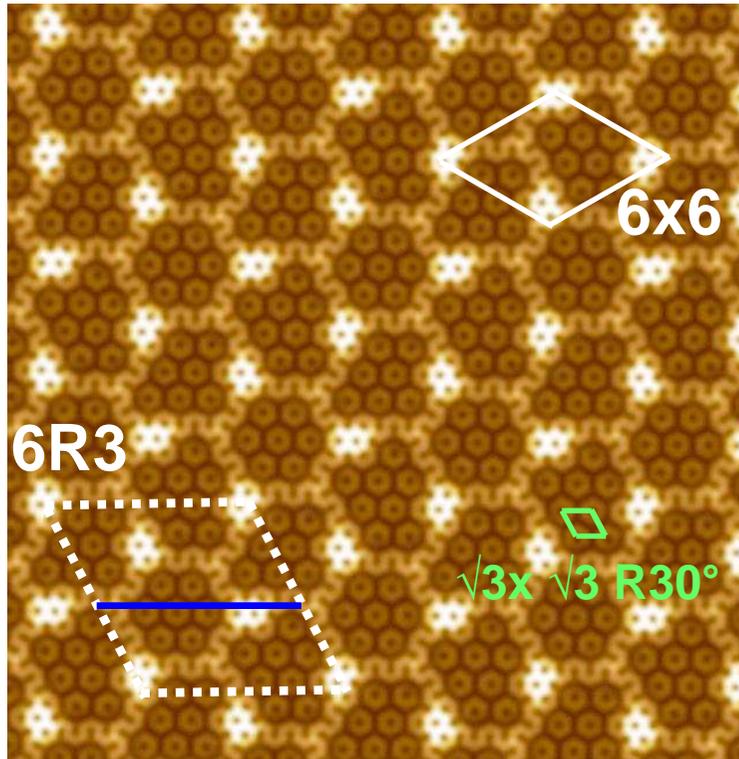
- défi technique pour un code d'ondes planes
- calcul très long (plusieurs mois)
- forces résiduelles inférieures à $0.015 \text{ eV/\text{Å}}$

- 1 plan proche du substrat (2.1 \AA)
- modulation des positions atomiques pour les 2 plans



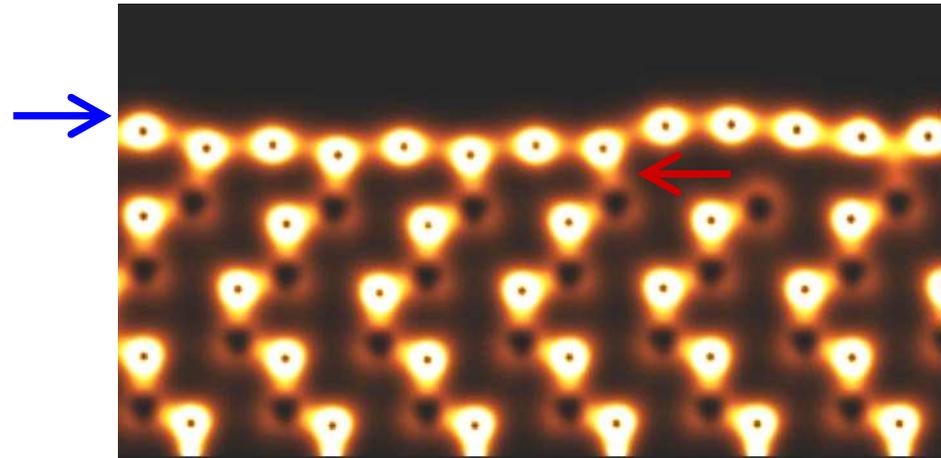
Nanostructuration du premier plan

Premier plan de C (*ab initio*)



11x11nm², densité de charge totale

- reconstruction apparente en 6x6
- structure en mosaïque composée de grains (zones sombres) séparés par des frontières
- corrugation : 1.2 Å



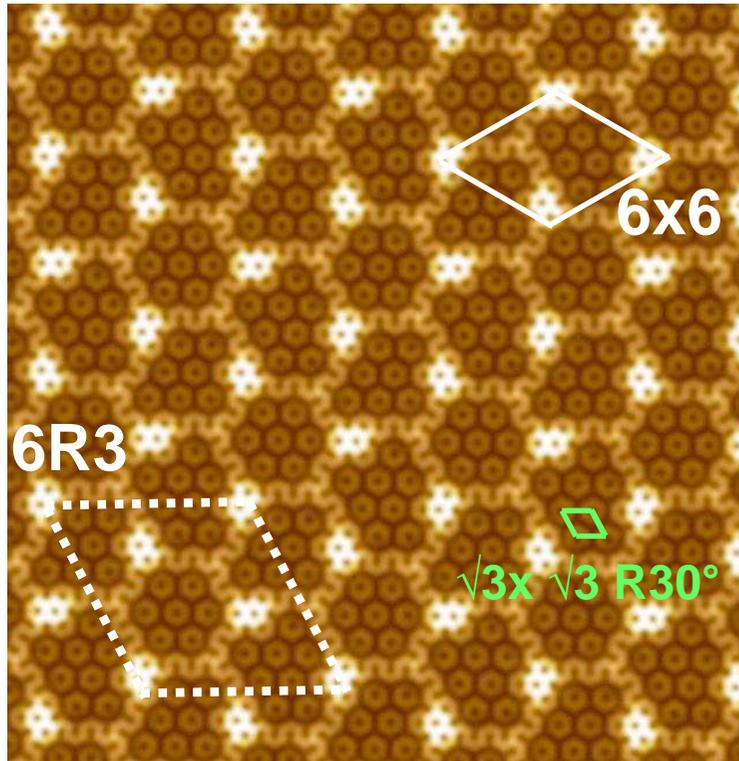
Coupe transversale de la densité de charge totale

Premier plan en nid d'abeilles est nanostructuré :

- grains : réseaux de SiC(0001) et du premier plan de C correspondent localement à une symétrie en $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$
- **liaisons covalentes Si - C entre le substrat et le premier plan**
- frontières : atomes de C qui ne sont pas en correspondance avec le substrat (pas de liaison covalente)

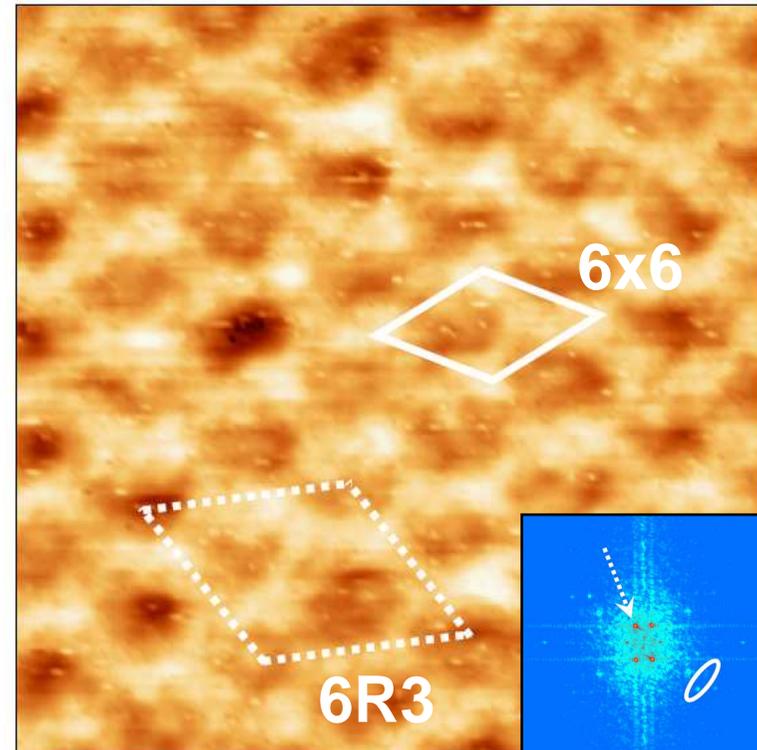
Comparaison avec les images STM

Premier plan de C (*ab initio*)



11x11nm², densité de charge totale

Premier plan de C (image STM)



12x12nm², V = -2.0V

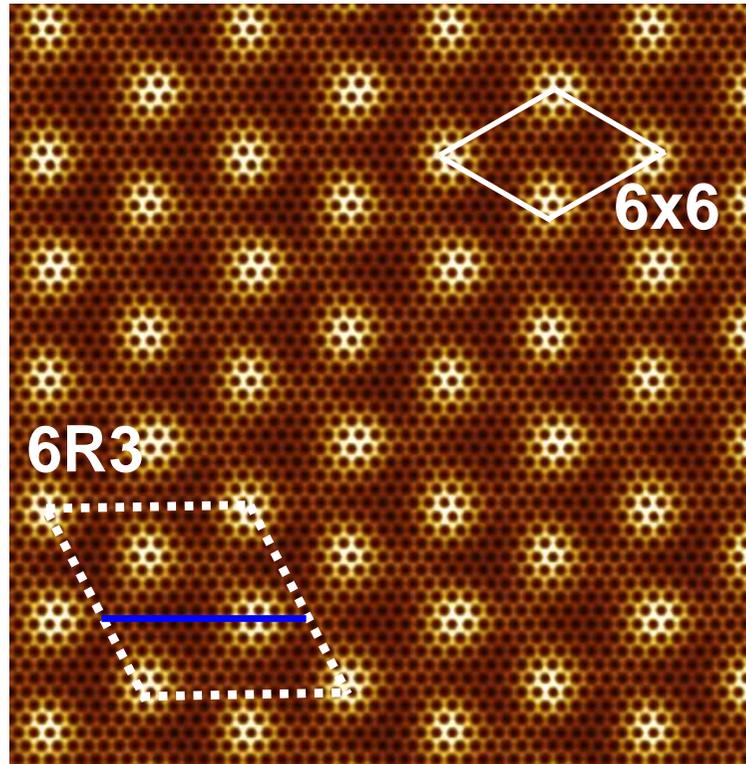
- même reconstruction apparente en 6x6
- signature de la $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ au centre des grains
- corrugation : 1.2 Å (*ab initio*) ~ 1-1.5 Å (STM)

F. Varchon *et al.*, PRB 77, 235412 (2008)

S. Kim *et al.*, PRL 100, 176802 (2008)

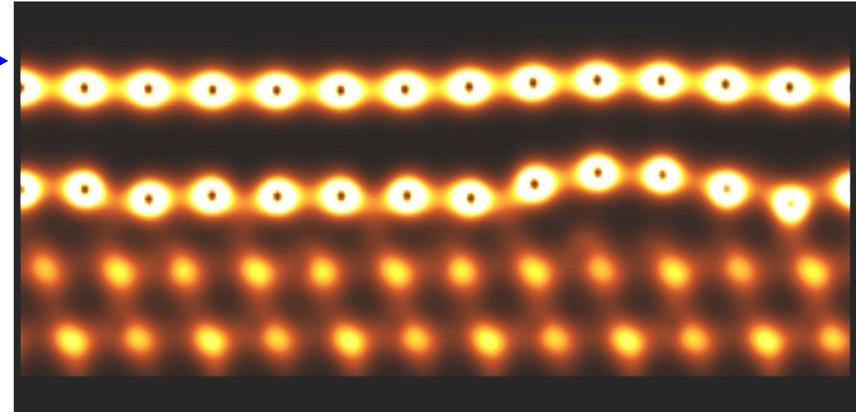
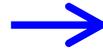
Modulation du second plan de C

Second plan de C (*ab initio*)



11x11nm², densité de charge totale

- **structure en nid d'abeilles ; épitaxie avec le substrat**
- **reconstruction apparente en 6x6**
- **faible modulation : 0.4 Å**

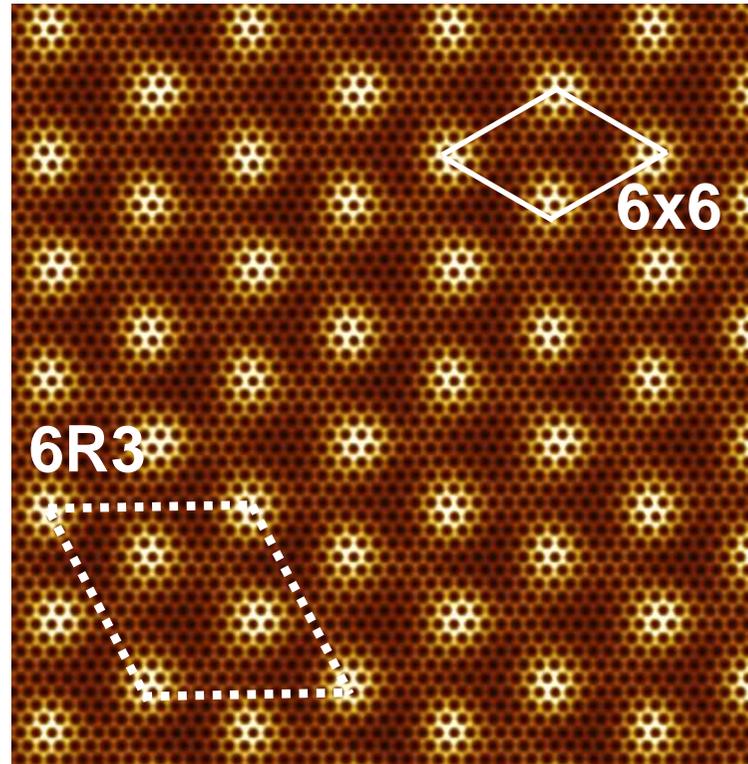


Coupe transversale de la densité de charge totale

- le second plan suit la morphologie du premier plan
- **aucune liaison covalente n'est visible entre le plan tampon et le second plan**
- la modulation ne discrimine pas les sous-réseaux A et B

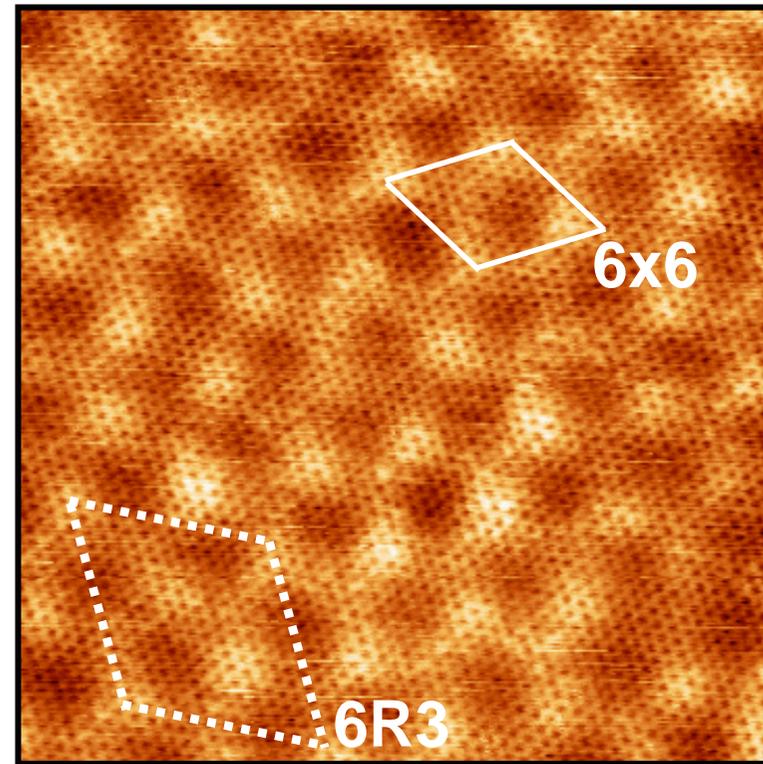
Comparaison avec les images STM

Second plan de C (*ab initio*)



11x11nm², densité de charge totale

Second plan de C (image STM)



12x12 nm², V = - 0.5 V

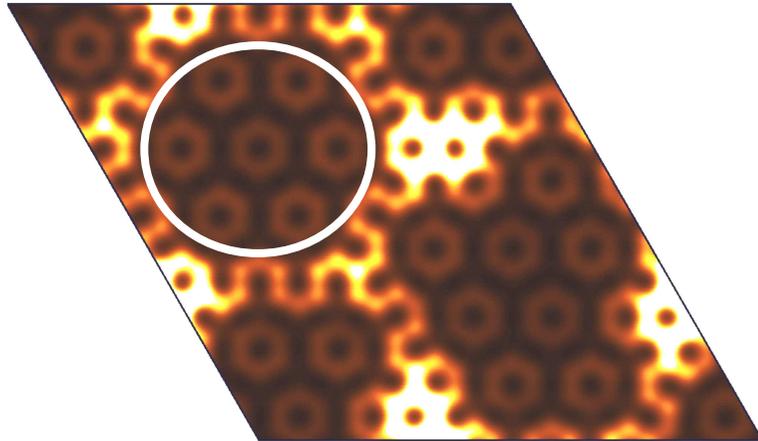
- même symétrie apparente en 6x6
- corrugation : 0.4 Å (*ab initio*) ~ 0.2-0.4 Å (STM)

F. Varchon *et al.*, PRB 77, 235412 (2008)

S. Kim *et al.*, PRL 100, 176802 (2008)

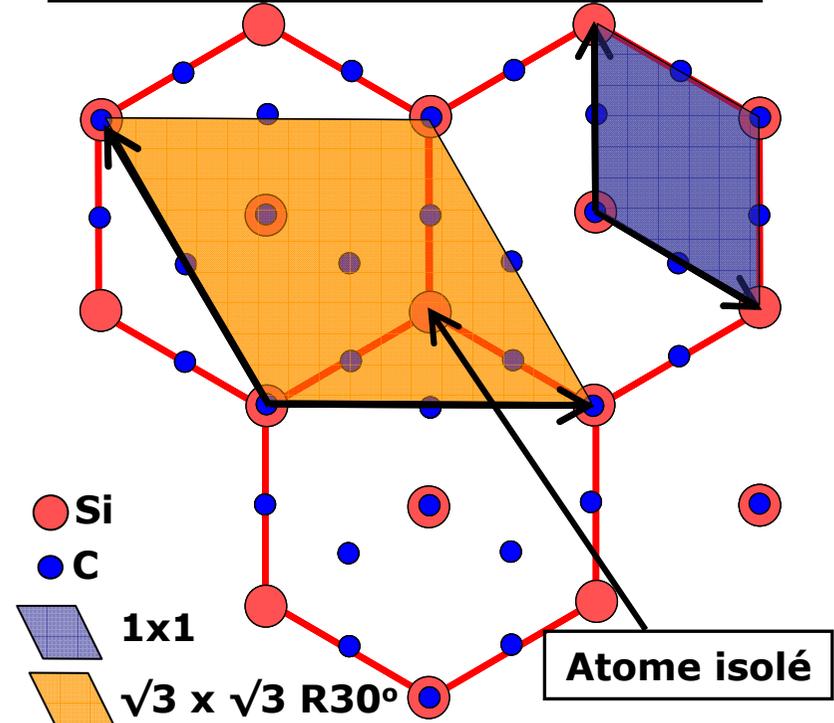
Approximation géométrie simplifiée

$\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ locale



Maille 6R3, densité de charge totale au-dessus du premier plan de C

Interface en $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$

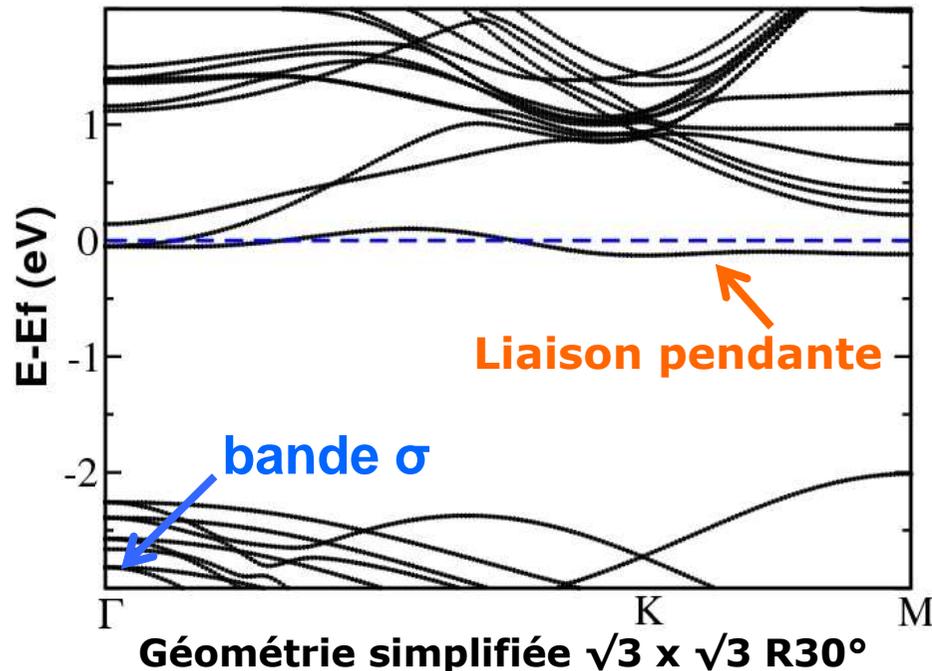


Géométrie simplifiée : $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$

- Calcul de 1, 2 ou 3 plans de graphène en empilement AB sur 8 biplans de SiC en géométrie 4H-SiC (0001)
- 2 X 2 pour le réseau du graphène
- paramètre de maille du graphène étiré de 8% (pas de changement qualitatif)
- 1/3 atome de Si dans le plan de SiC de surface susceptible de donner une liaison pendante

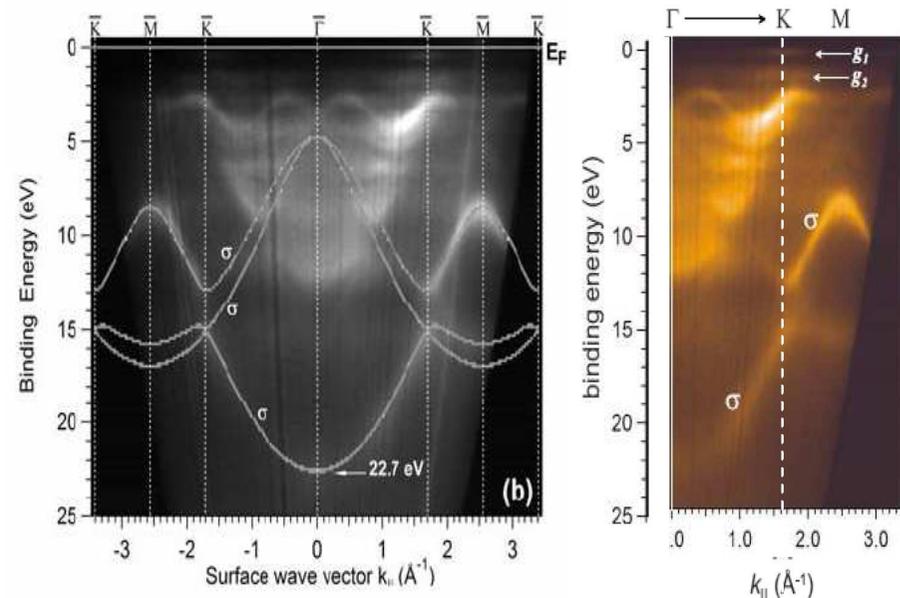
Structure de bandes *ab initio*

Premier plan de C sur SiC(0001)



- pas de dispersion linéaire au point K
- large gap (2 eV)
- état peu dispersif qui fixe le niveau de Fermi, issu de la liaison pendante de l'atome de Si isolé
- les bandes σ du graphène sont présentes (voir ARPES)

ARPES



E.K.Emtsev et al. Phys. Rev. B, **77**, 155303, (2008)
E.K.Emtsev et al. Mater. Sci. Forum **556-557**, 525 (2007)

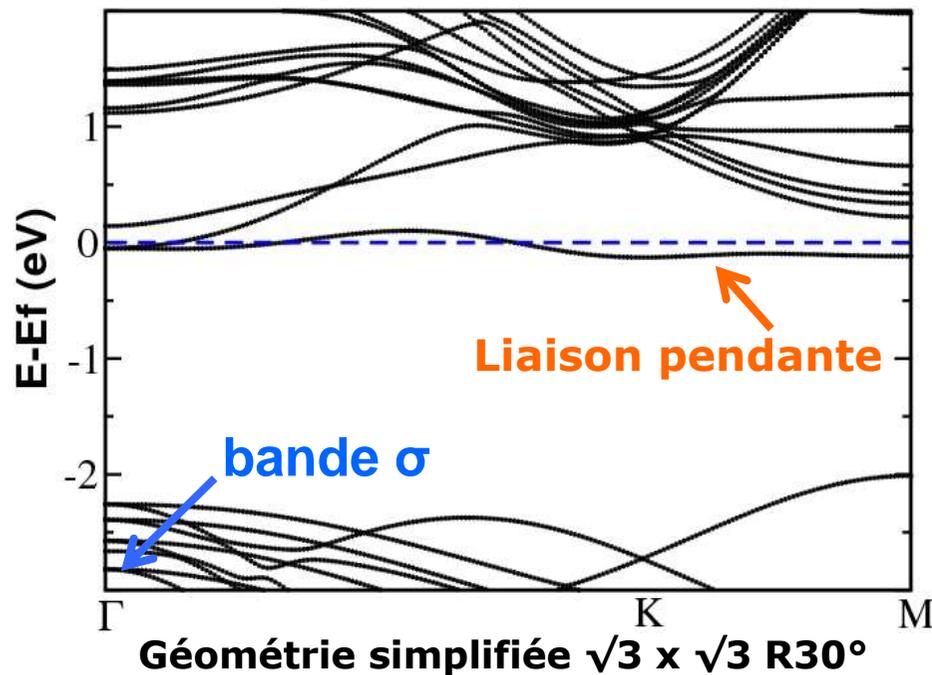
Les liaisons covalentes Si-C détruisent les bandes π :

**Premier plan de C
=
Plan tampon**

F. Varchon *et al.*, PRL **99**, 126805 (2007)
A. Mattausch and O. Pankratov, PRL **99**, 076802 (2007)

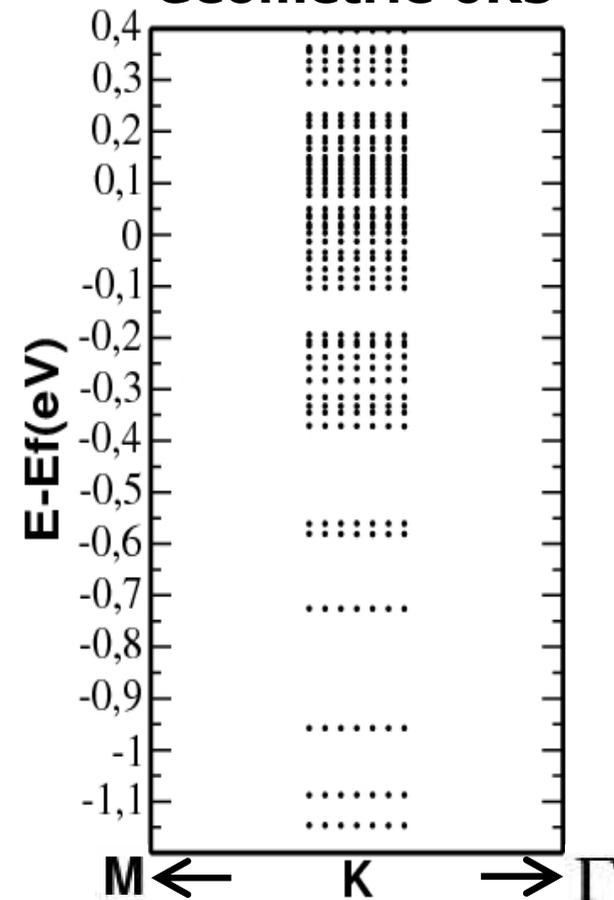
Structure de bandes *ab initio*

Premier plan de C sur SiC(0001)



- pas de dispersion linéaire au point K
- large gap (2 eV)
- état peu dispersif qui fixe le niveau de Fermi, issu de la liaison pendante de l'atome de Si isolé
- les bandes σ du graphène sont présentes (voir ARPES)

Géométrie 6R3

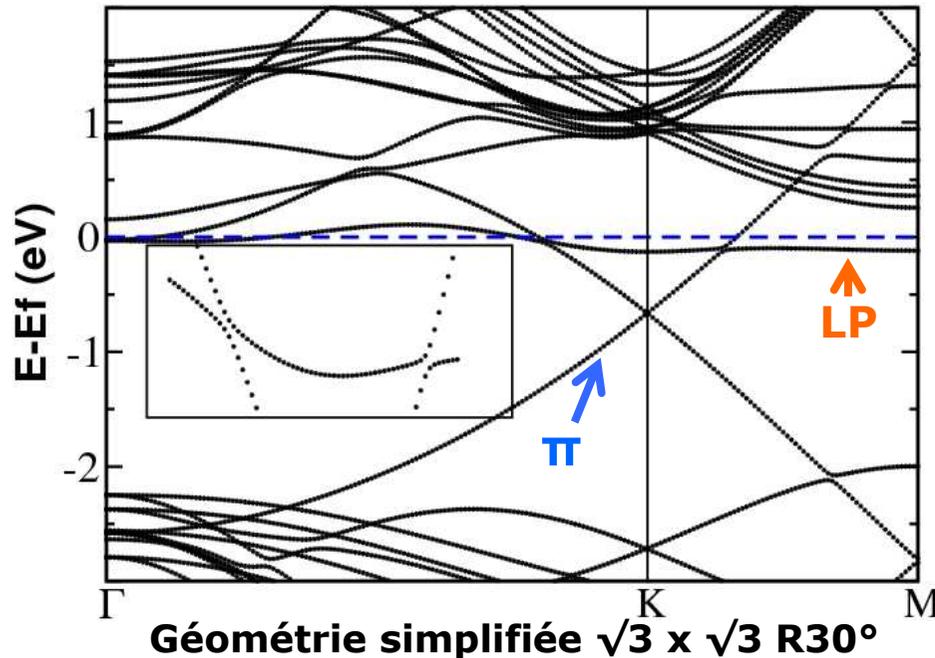


- pas de dispersion linéaire au point K
- états peu dispersifs

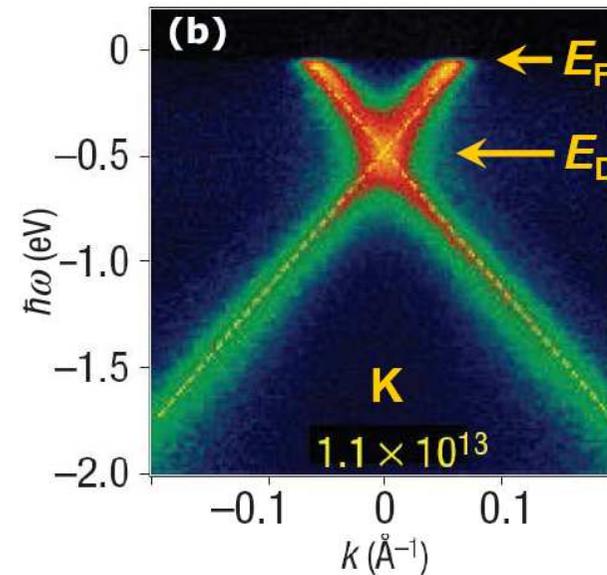
Calcul en cours

Structure de bandes *ab initio*

2 plans de C sur SiC(0001)



ARPES



A. Bostwick et al., Nature Phys. 3, 36 (2007)

- dispersion linéaire au point K
- le point de Dirac est sous le niveau de Fermi (0.65 eV) , **le graphène est dopé en électrons** (cf ARPES : 0.45 eV) (transfert de charge de l'interface)
- état peu dispersif (liaison pendante) fixe le niveau de Fermi
- interaction LP et graphène : impact sur le transport (faible mobilité)?

François Varchon

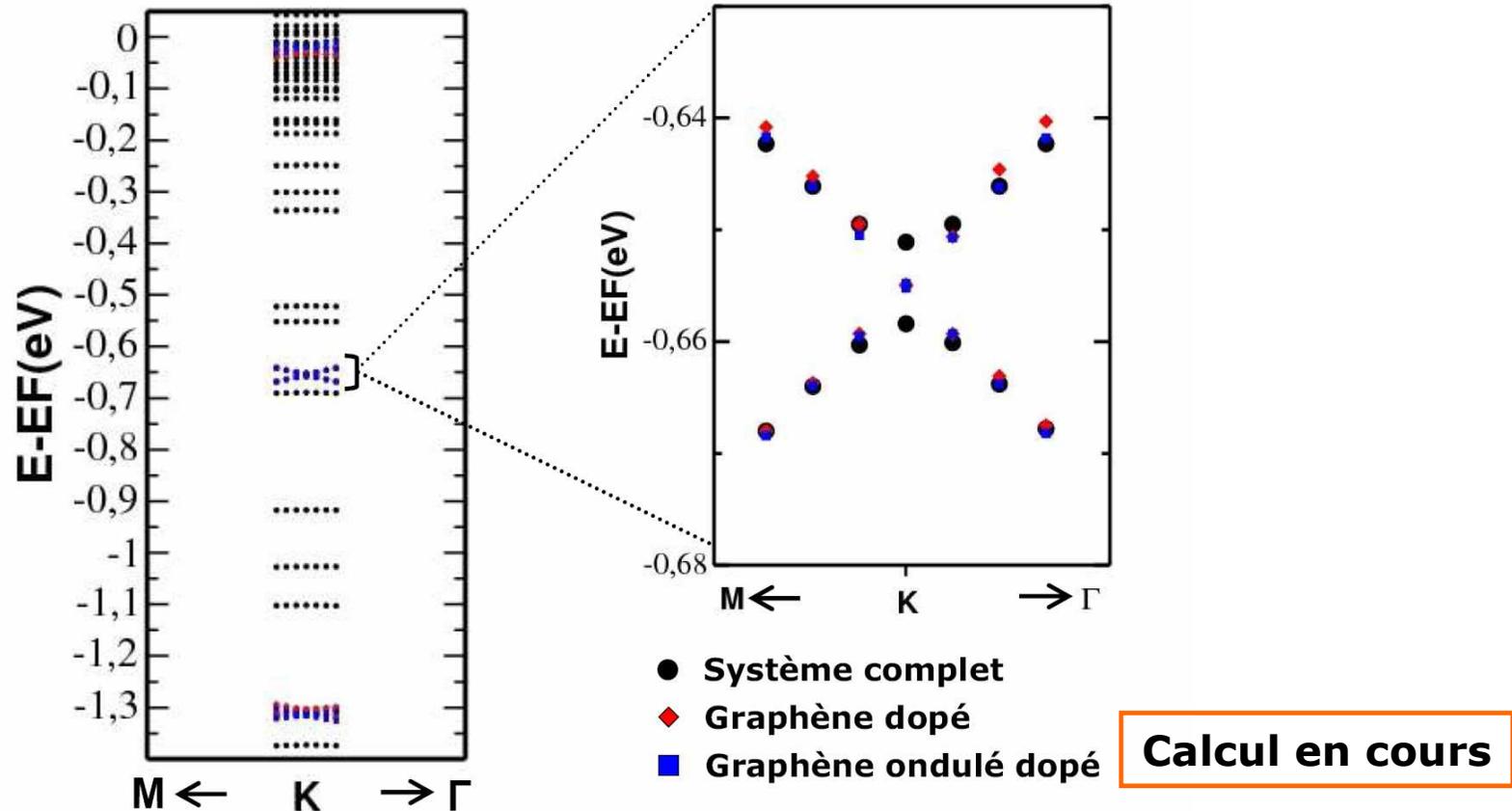
Second plan de C
=
plan de graphène

F. Varchon et al., PRL 99, 126805 (2007)
A. Mattausch and O. Pankratov, PRL 99, 076802 (2007)

Grenoble – 8 décembre 2008

Structure de bandes *ab initio*

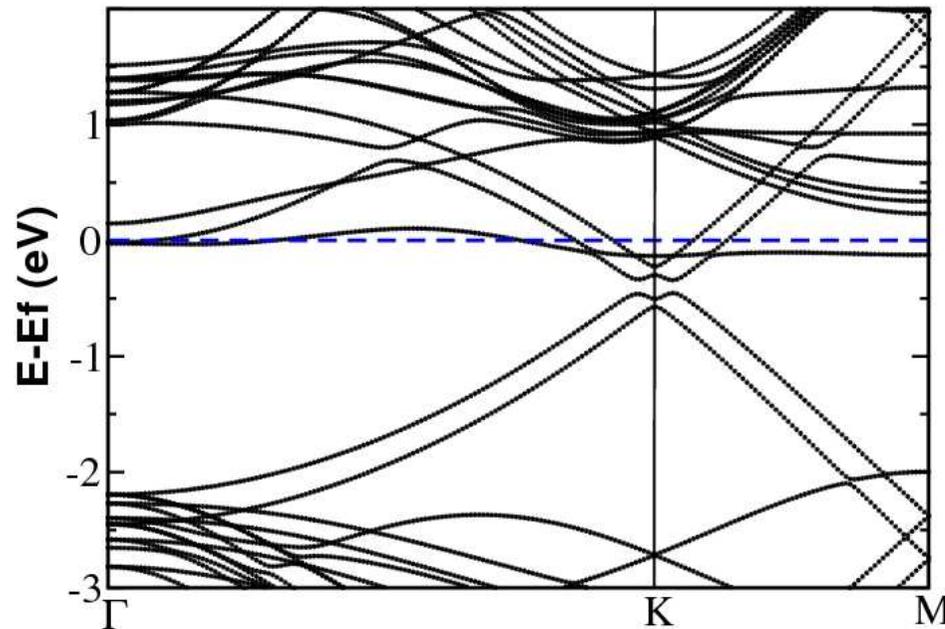
2 plans de C sur SiC(0001) en géométrie 6R3



- dispersion linéaire au point K
- le point de Dirac est sous le niveau de Fermi (0.65 eV) ,
le graphène est dopé en électrons (cf ARPES : 0.45 eV)
- nombreux états peu dispersifs (liaisons pendantes)
- existence d'un gap ~ 8 meV au point de Dirac

Structure de bandes *ab initio*

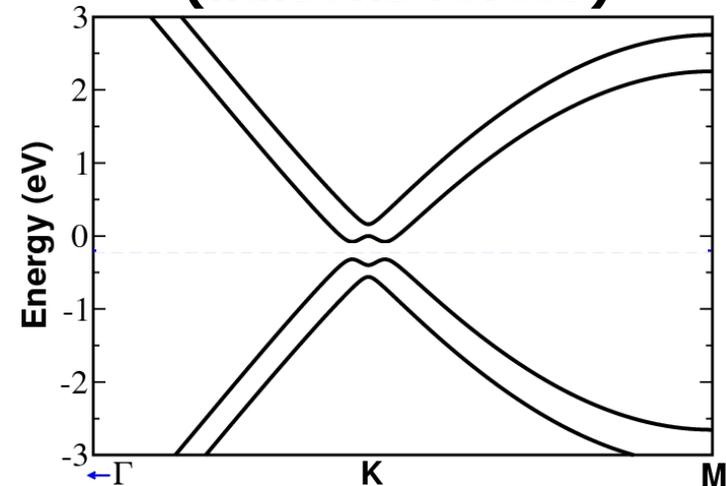
3 plans de C sur SiC(0001)



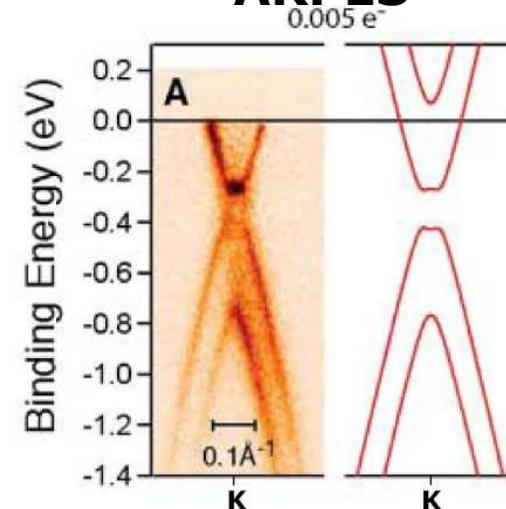
Géométrie simplifiée $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$

- biplan de graphène dopé en électrons ($E_F - E_D = 0.38$ eV ARPES : 0.30 eV)
- **biplan asymétrique** (gap 0.2 eV) : un plan est plus dopé que l'autre
- état peu dispersif (liaison pendante) fixe le niveau de Fermi

Biplan asymétrique (liaisons fortes)



ARPES



T. Ohta et al., Science 313,951 (2006)

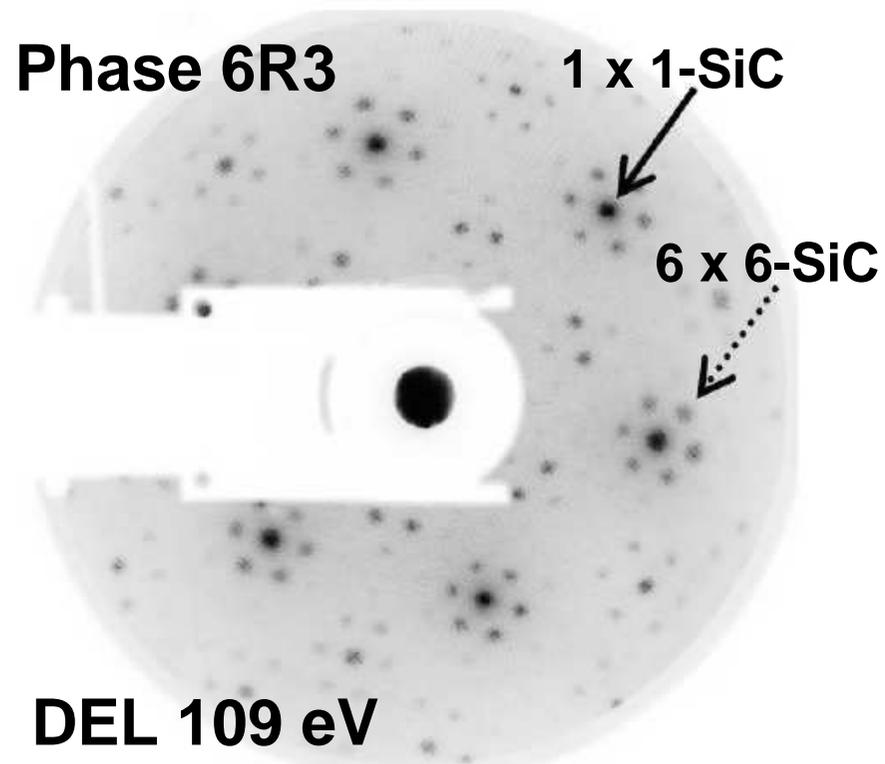


III. Graphène sur SiC face Si
2) Résultats expérimentaux

Synthèse du premier plan de C

La préparation de l'échantillon est effectuée par recuit sous UHV sous contrôle du DEL et de la spectroscopie Auger.

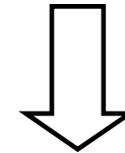
- substrat : 6H-SiC(0001) dopé de type n (dopage azote $1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$)
- procédure de graphitisation standard : A.J. Van Bommel et al., Surf. Sci., **48**, 463 (1975)
F.Owman et al., Surf. Sci. **369**, 126 (1996)
I. Forbeaux et al., PRB **58**, 16396, 1998



1) Recuit à 900°C sous flux Si :
3 x 3 -SiC

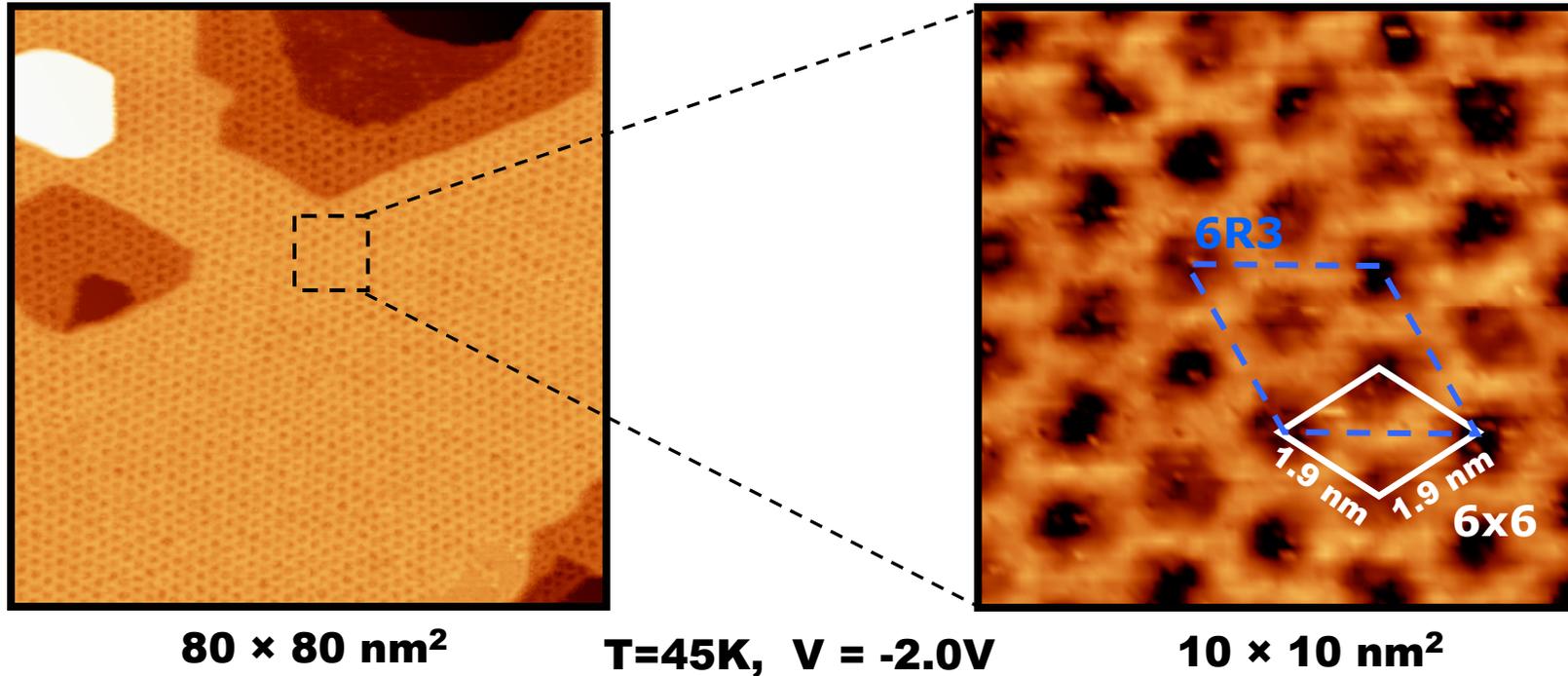
2) Recuits successifs de 900°C à
1100°C :

- **phase R3**
- puis **$6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$** (phase
6R3) riche en C



**Première phase riche
en C**

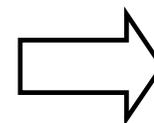
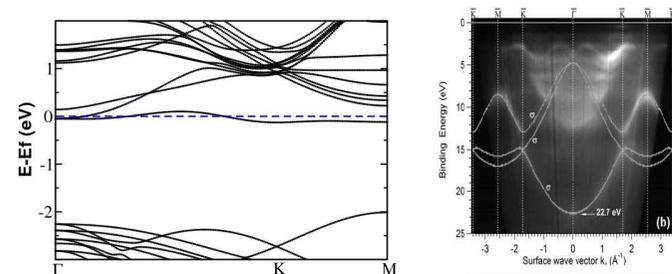
Images STM sur la phase 6R3 : plan tampon



Difficulté pour imager cette surface à basse tension tunnel :

- peu d'états conducteurs au niveau de l'énergie de Fermi (plan tampon DFT et ARPES)
- reconstruction apparente en 6 x 6 compatible avec nanostructuration du plan tampon trouvée en DFT

François Varchon

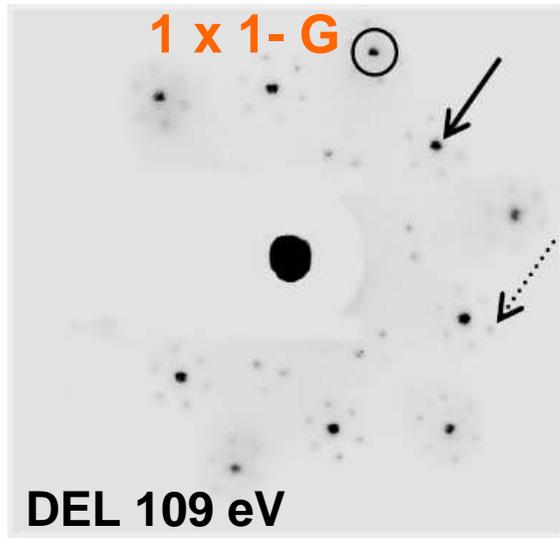


Plan tampon

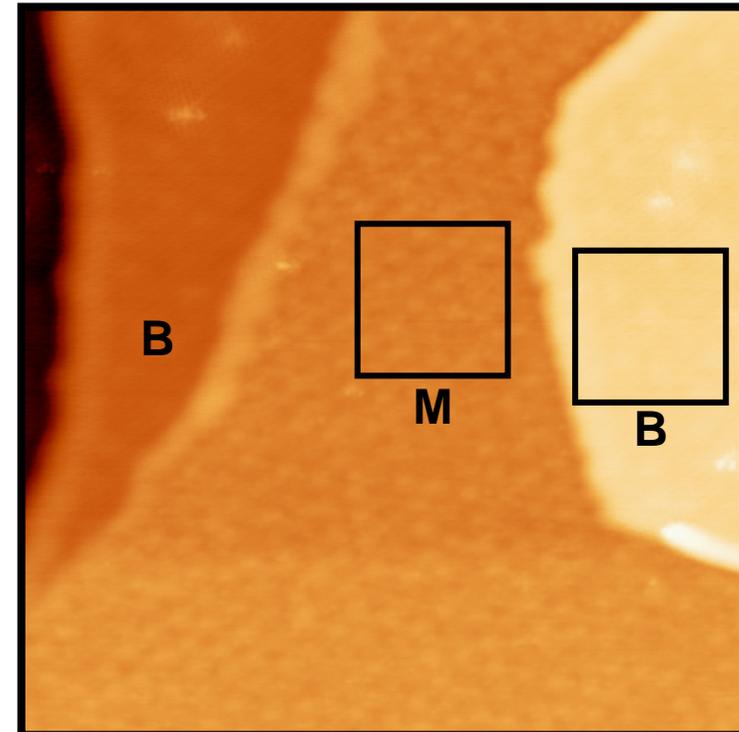
Grenoble – 8 décembre 2008

Plans de C au-dessus du plan tampon

Après recuit à 1300-1350°C pendant plusieurs minutes :



LEED + Auger :
qqs plans de Gr
supplémentaires



40 × 40 nm² , +0.5V, T = 43K

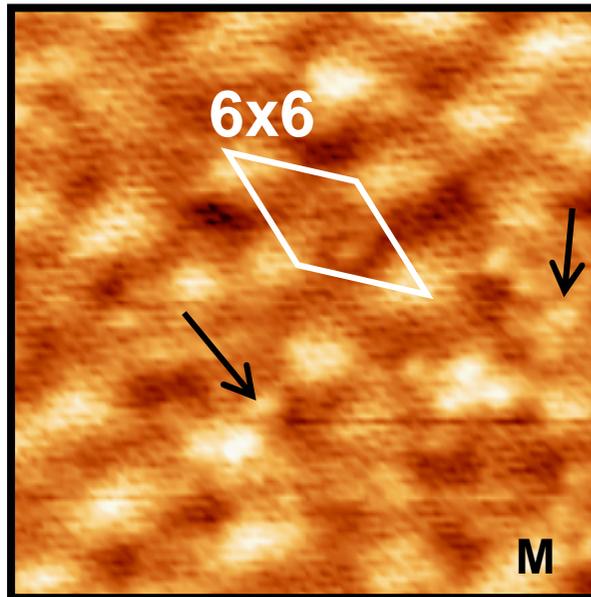
On peut imager à basse tension tunnel (qqs mV) :

- surface métallique
- compatible avec calculs DFT de 1 ou 2 plans de graphène au-dessus du plan tampon

Deux types de terrasses :
M et B

Images des terrasses M et B à basse tension

Terrasse M



10 × 10 nm², +0.5 V

- réseau en 1x1-G du graphène/graphite ($2.4 \pm 0.2 \text{ \AA}$)
- modulation en 6x6 (suit la morphologie du plan tampon DFT)
- présence d'états localisés

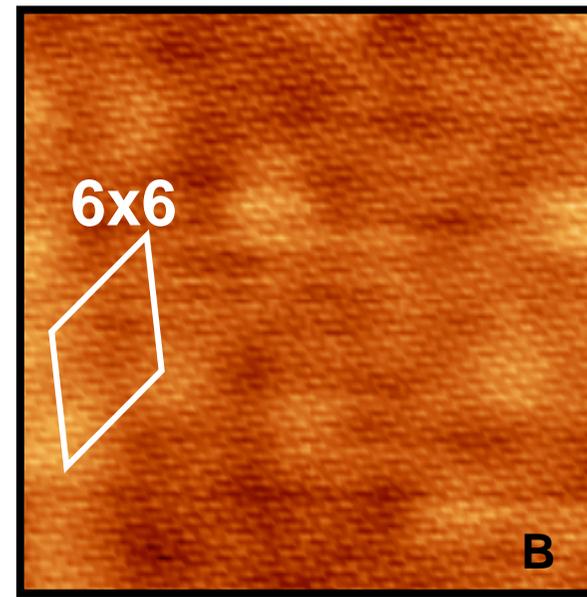
Terrasse M

=

Monoplan de graphène

François Varchon

Terrasse B



10 × 10 nm², +0.5 V

- réseau en 1x1-G du graphène/graphite
- modulation en 6x6 atténuée
- peu ou pas d'états localisés

Terrasse B

=

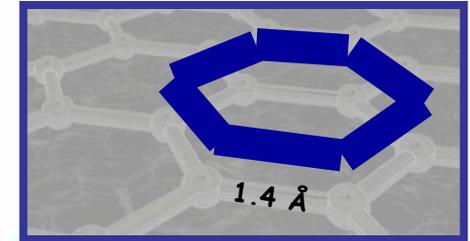
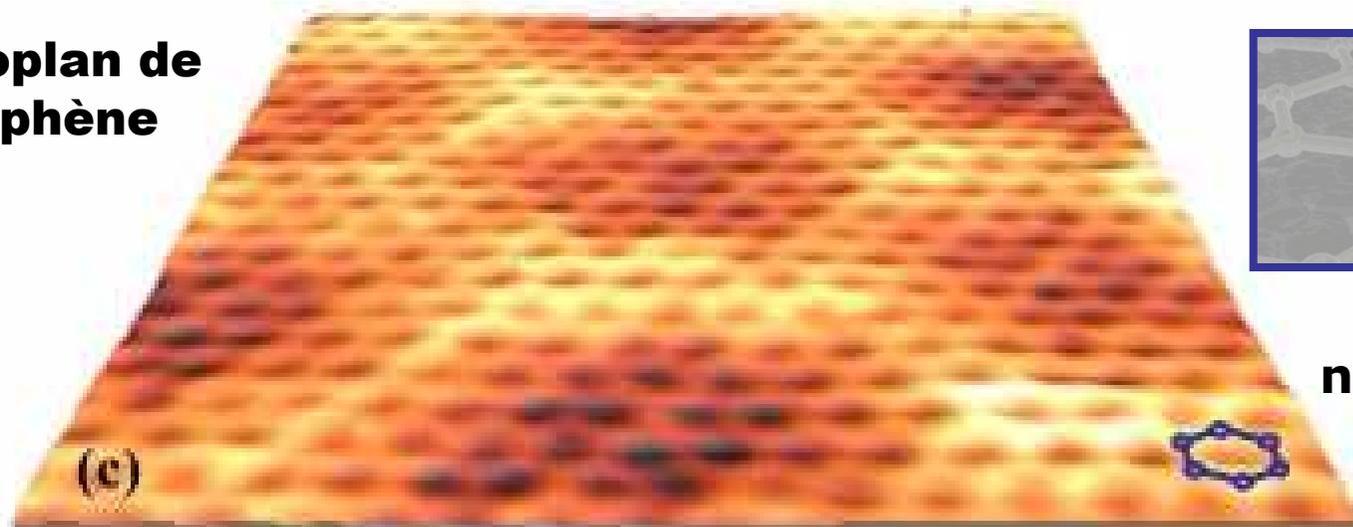
Biplan de graphène

Grenoble – 8 décembre 2008

Contraste atomique : différence entre M et B

4 x 4 nm², +0.2V

Monoplan de
graphène



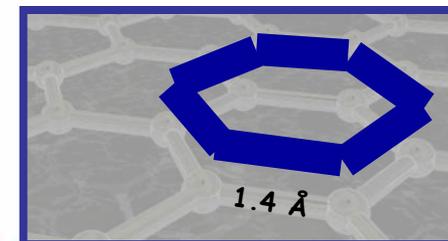
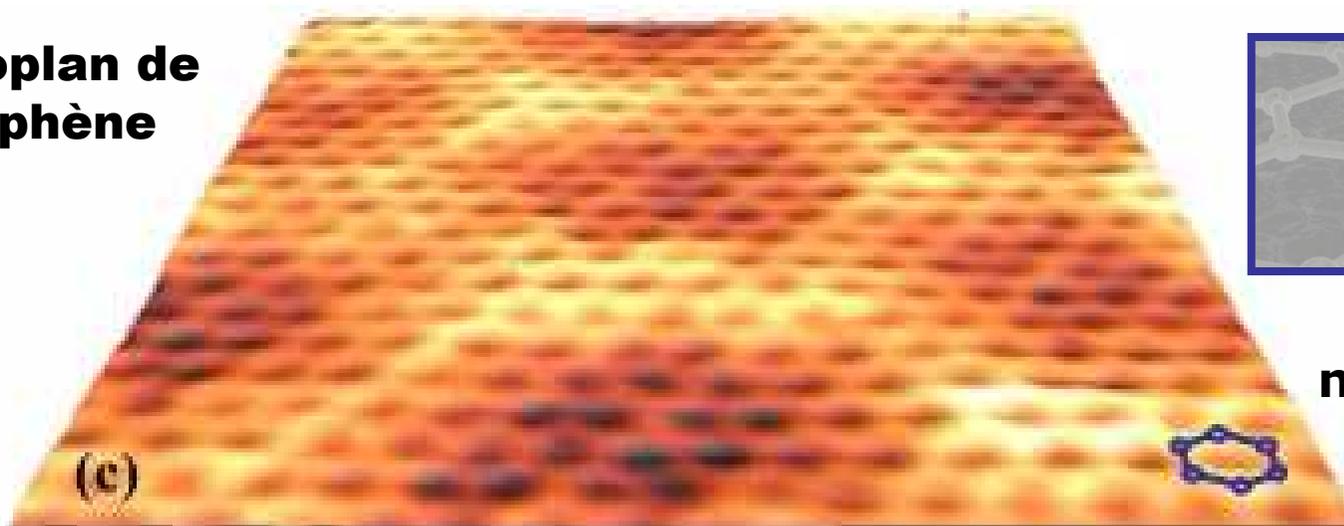
Contraste
nid d'abeilles

P. Mallet, F. Varchon *et al.*, PRB **76**, 041403(R) (2007)

Contraste atomique : différence entre M et B

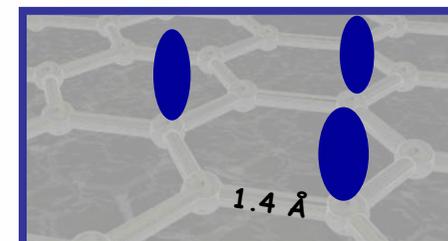
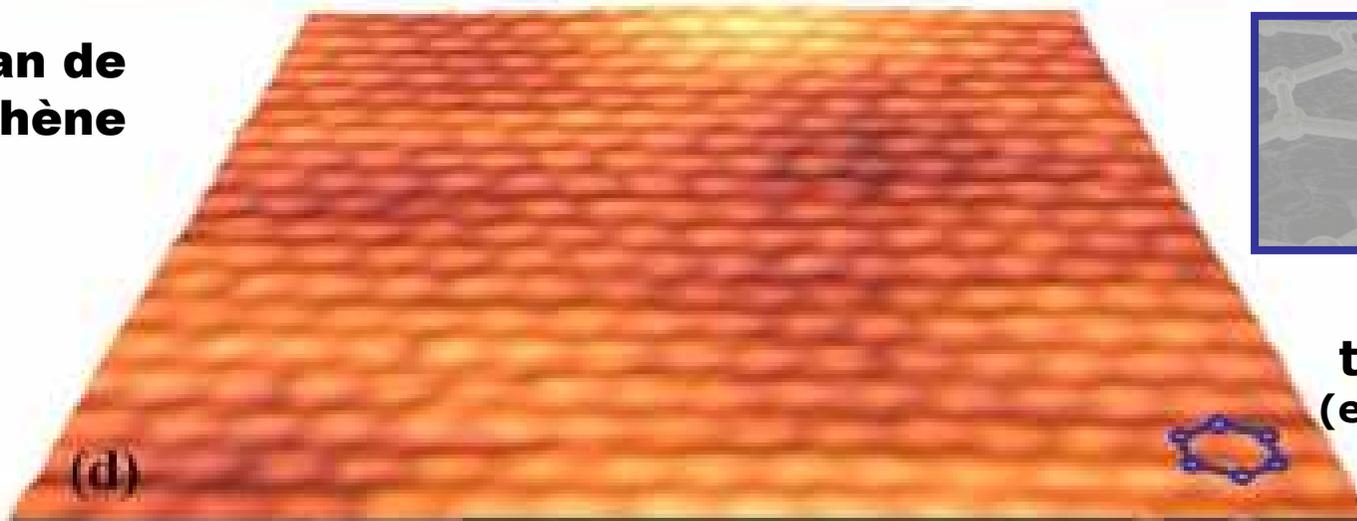
4 x 4 nm², +0.2V

Monoplan de graphène



Contraste nid d'abeilles

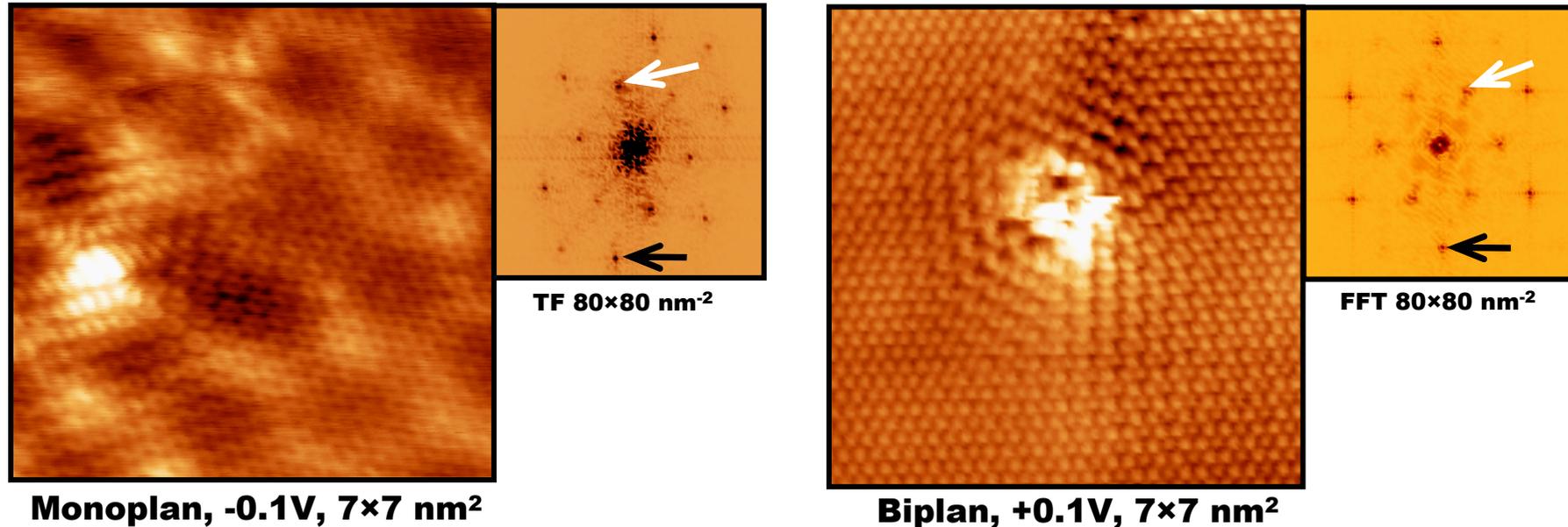
Biplan de graphène



Contraste triangulaire (empilement AB)

P. Mallet, F. Varchon *et al.*, PRB **76**, 041403(R) (2007)

Interférences quantiques, diffusion intervallée



P. Mallet, F. Varchon *et al.*, PRB 76, 041403(R) (2007)

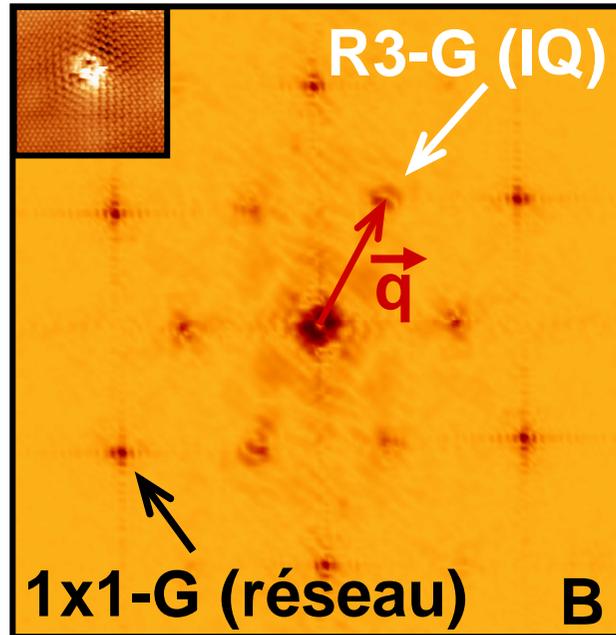
G.M. Rutter *et al.*, Science 317, 219-222 (2007)

Existence d'interférences quantiques (IQ) autour de défauts statiques :

- superstructure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ R30° (R3-G) (aussi observé sur la surface du graphite autour d'impuretés)
- phénomène d'interférences quantiques causé par l'interaction entre l'impureté et des états électroniques de vecteur d'onde proche des points K de la PZB (processus de diffusion intervallée).

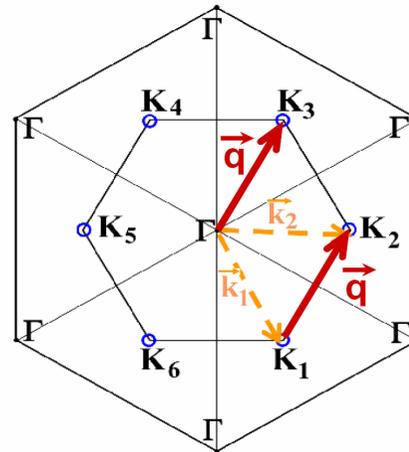
A faible tension tunnel, le STM sonde **une structure électronique compatible avec celle du monoplan ou du biplan de graphène** (états de type π)

Interférences quantiques, diffusion intervallée



TF, +0.1V, 80×80 nm⁻²

Processus de diffusion intervallée



SF mono/multiplan de graphène dopé en e⁻

Diffusion élastique
entre k_1 et k_2



Modulation spatiale de
la LDOS d'un vecteur

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$$

Existence d'interférences quantiques (IQ) autour de défauts statiques :

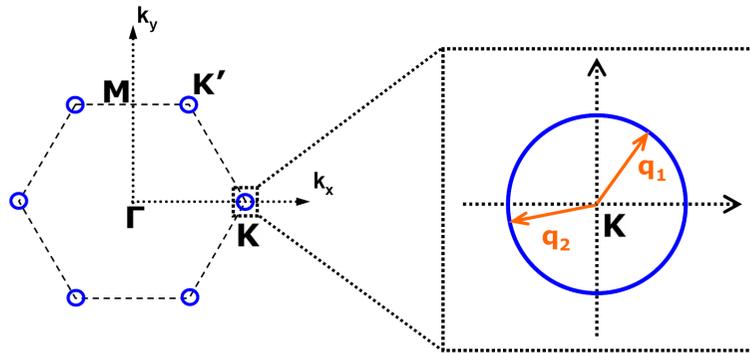
- superstructure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ R30° (R3-G) (aussi observé sur la surface du graphite autour d'impuretés)
- phénomène d'interférences quantiques causé par l'interaction entre l'impureté et des états électroniques de vecteur d'onde proche des points K de la PZB (processus de diffusion intervallée).

A faible tension tunnel, le STM sonde **une structure électronique compatible avec celle du mono- ou du biplan de graphène** (états de type π)

Interférences quantiques, diffusion intravallée

Collaboration avec le groupe de K. Kern (MPI Stuttgart) et C. Bena (CEA Saclay)

Processus de diffusion intravallée



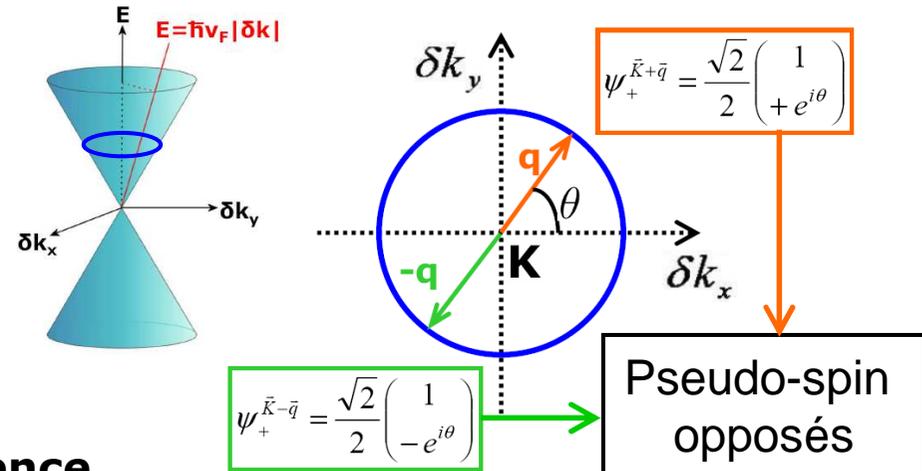
Surface Fermi mono/multiplan de graphène dopé en e⁻

Dans le monoplan de graphène l'existence du pseudo-spin (ou chiralité) induit des règles de sélection pour un processus de diffusion élastique (différentes pour le biplan de graphène) :

Retrodiffusion interdite dans le graphène pour un potentiel lentement variable.

T. Ando et al., J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2857 (1998)

Pseudo-spin et chiralité dans le monoplan de graphène



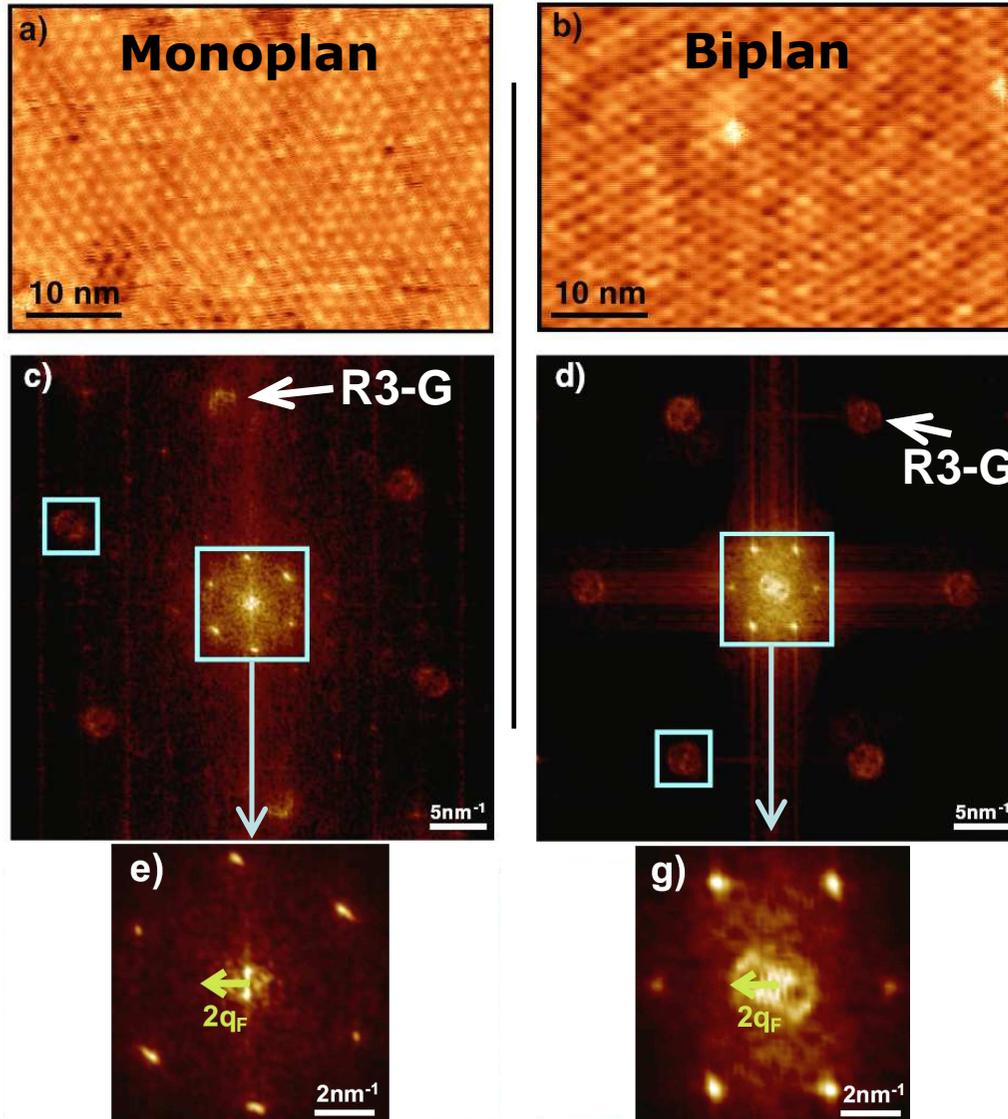
De manière générale les effets liés à la chiralité des électrons vont induire une signature spécifique des interférences quantiques, différente pour le monoplan et le biplan de graphène, visible en STM

C. Bena, Phys. Rev. Lett., **100**, 076601 (2008)

Interférences quantiques, diffusion intravallée

Collaboration avec le groupe de K. Kern (MPI Stuttgart) et C. Bena (CEA Saclay)

Image STM à basse tension (qqqs mV) réalisées à Stuttgart



Résultats

Mise en évidence d'effets de chiralité dans la signature des interférences quantiques pour la diffusion intravallée (monoplan : absence de cercle à $2q_F$ au centre).

Différencier le monoplan du biplan de graphène par la simple analyse des IQ.

Prouve que la structure électronique du graphène épitaxié sur SiC(0001) est en bon accord avec celle d'un plan de graphène idéal dopé n.

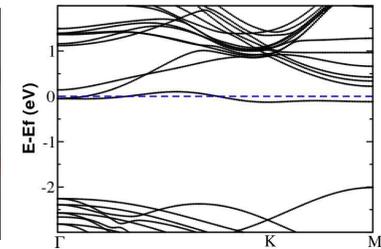
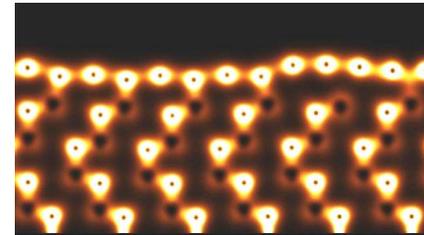
I. Brihuega *et al.*, PRL 101, 206802 (2008)

Graphène épitaxié sur SiC face Si

Résultats numériques :

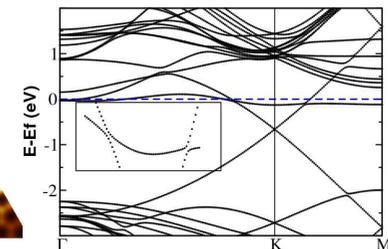
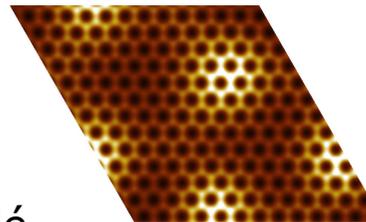
A) 1 plan sur SiC(0001) : plan tampon

- forte interaction avec le substrat (nanostructuration, liaisons covalentes)
- absence de dispersion linéaire
- il permet aux autres plans qui le recouvrent d'avoir la structure électronique de type monoplan/multiplan de graphène



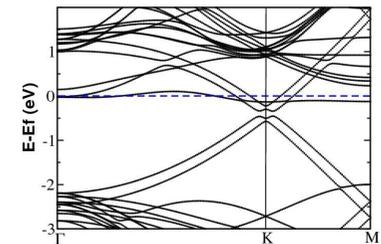
B) 2 plans sur SiC(0001) : plan de graphène

- faiblement modulé (il suit la morphologie du plan tampon)
- cône de Dirac : graphène pratiquement découplé
- dopé en électrons par transfert de charges
- états peu dispersifs à E_F (liaisons pendantes de l'interface)



C) 3 plans sur SiC(0001) : biplan de graphène

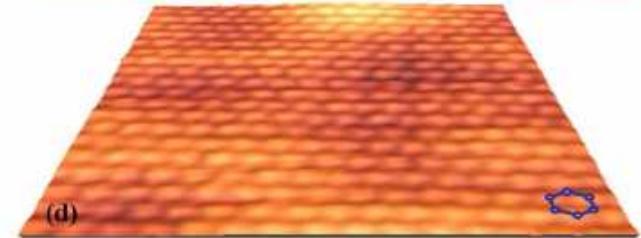
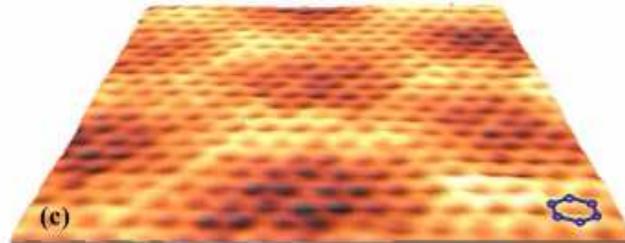
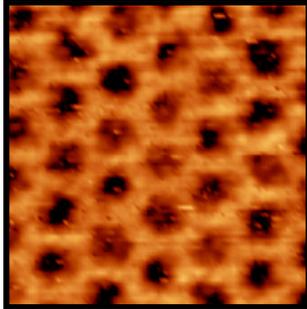
- biplan de graphène asymétrique
- un plan est plus dopé que l'autre (ouverture d'un gap)
- présence d'états peu dispersifs à E_F



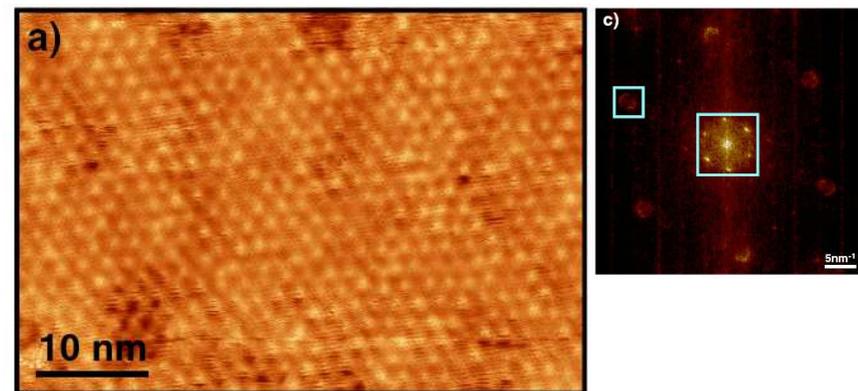
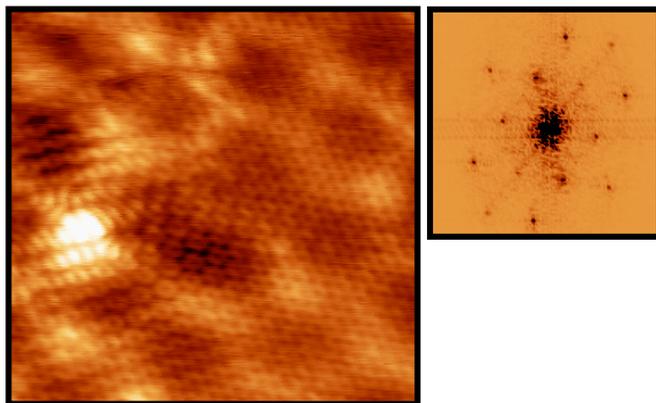
Graphène épitaxié sur SiC face Si

Résultats expérimentaux :

A) Identification par STM pour différentes étapes de la croissance, du plan tampon, du monoplan de plan de graphène et du biplan en empilement AB.

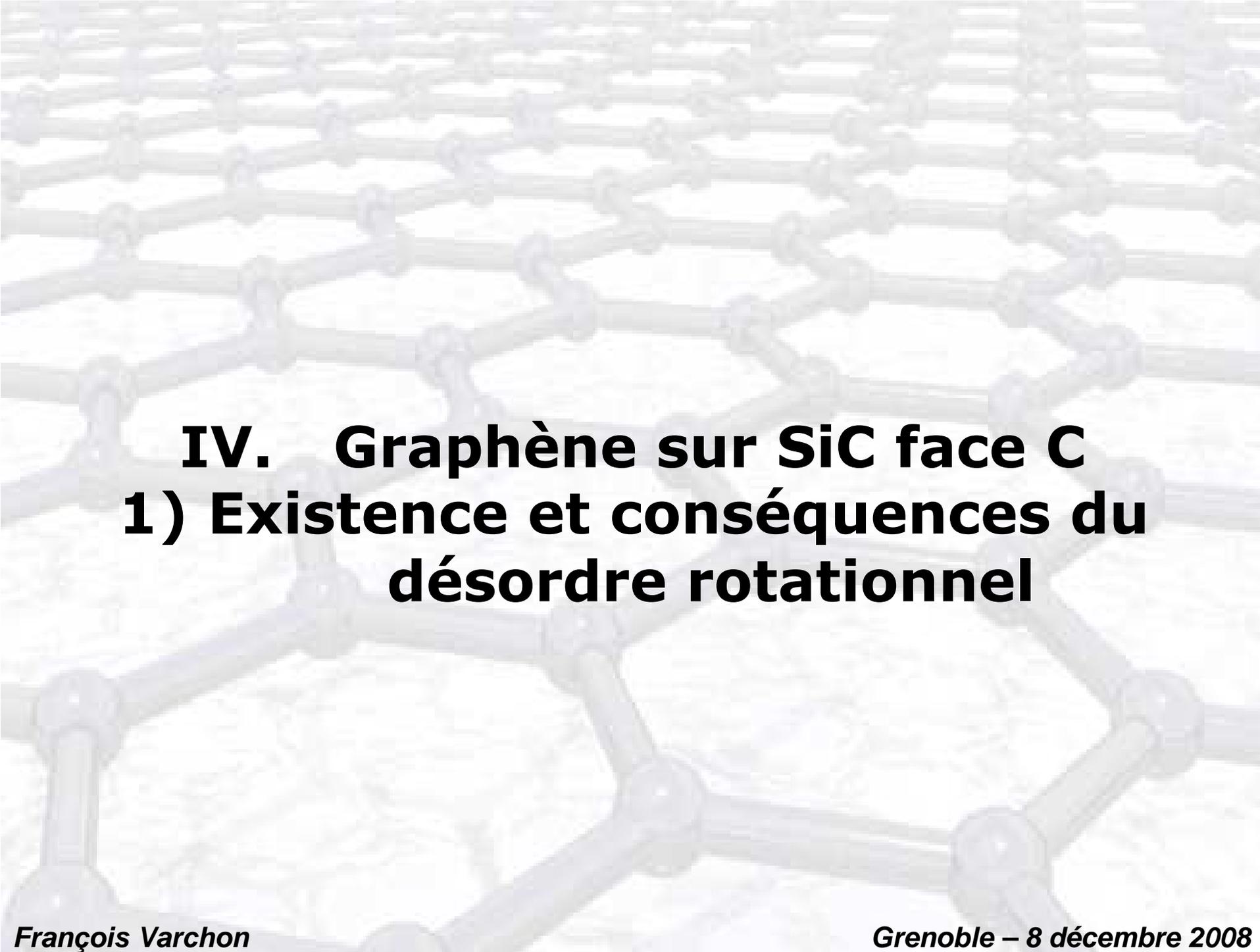


B) Étude des interférences quantiques démontre qu'à faible tension tunnel, le STM sonde une structure compatible avec celle du monoplan et du biplan de graphène (surface de fermi, chiralité).





IV. Graphène sur SiC face C



IV. Graphène sur SiC face C
1) Existence et conséquences du désordre rotationnel

Paradoxe apparent

Les mesures de magnéto-transport et de transmission infrarouge mettent en évidence **un comportement de type monoplan de graphène pour des systèmes composés d'au moins une dizaine de plans de carbone sur SiC(000-1)**

Magnéto-transport :

- **oscillations de SdH anormales**

C.Berger et al., Science **312**, 1191, (2006)

- **anti-localisation faible**

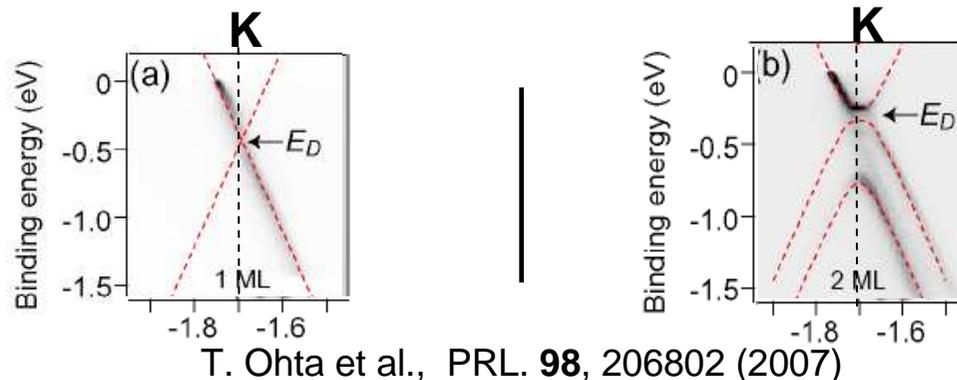
X. Wu et al., PRL, **98**, 136801, (2007)

Transmission infrarouge :

- **dispersion linéaire du monoplan**

M.L. Sadowski et al., PRL, **97**, 266405, (2006)

Or on a vu que l'empilement de type graphite (AB) détruit certaines des propriétés intrinsèques au monoplan (cône de Dirac au point K)



P.Mallet et al., PRB, **76**, 041403(R) (2007)

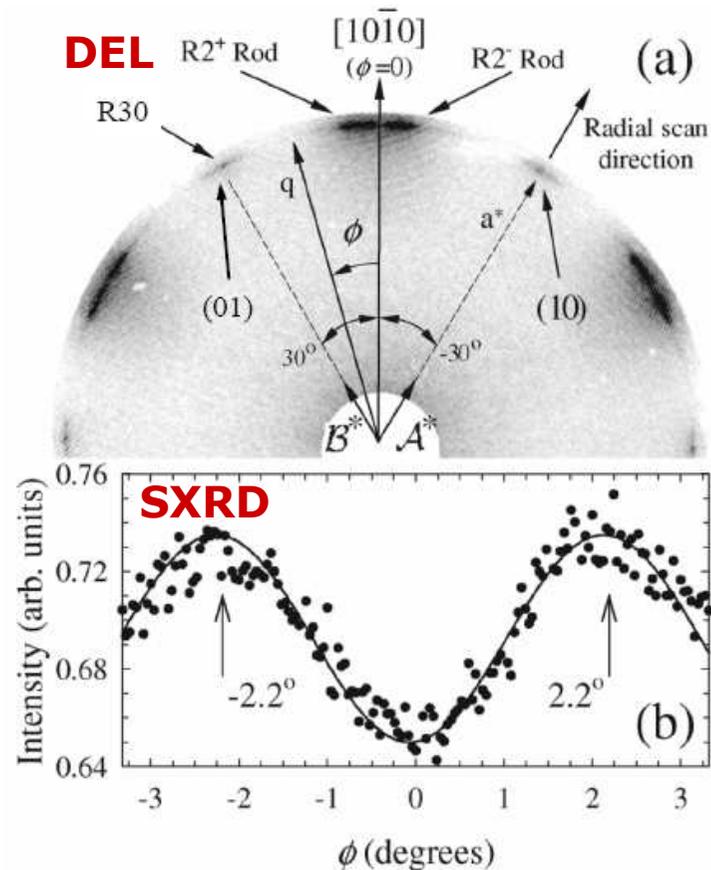


Mécanisme de découplage ??

Existence d'un désordre rotationnel

Collaboration avec l'équipe de E. Conrad (GATECH Atlanta)

Étude du désordre azimutal pour un échantillon de 4H-SiC(000-1) graphitisé dans un four de recuit (~ 10 plans de C).

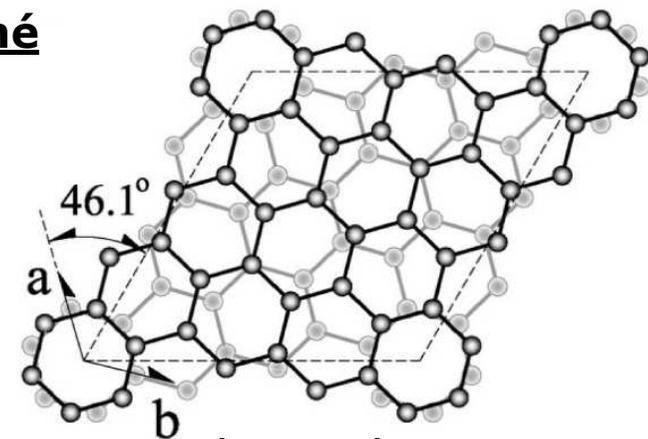


Les résultats DEL et SXR D mettent en évidence entre les plans de C adjacents dans un même grain.



Désorientation possible :
Rotation de $30 \pm 2.204^\circ$ entre deux plans de graphène voisins

Biplan tourné

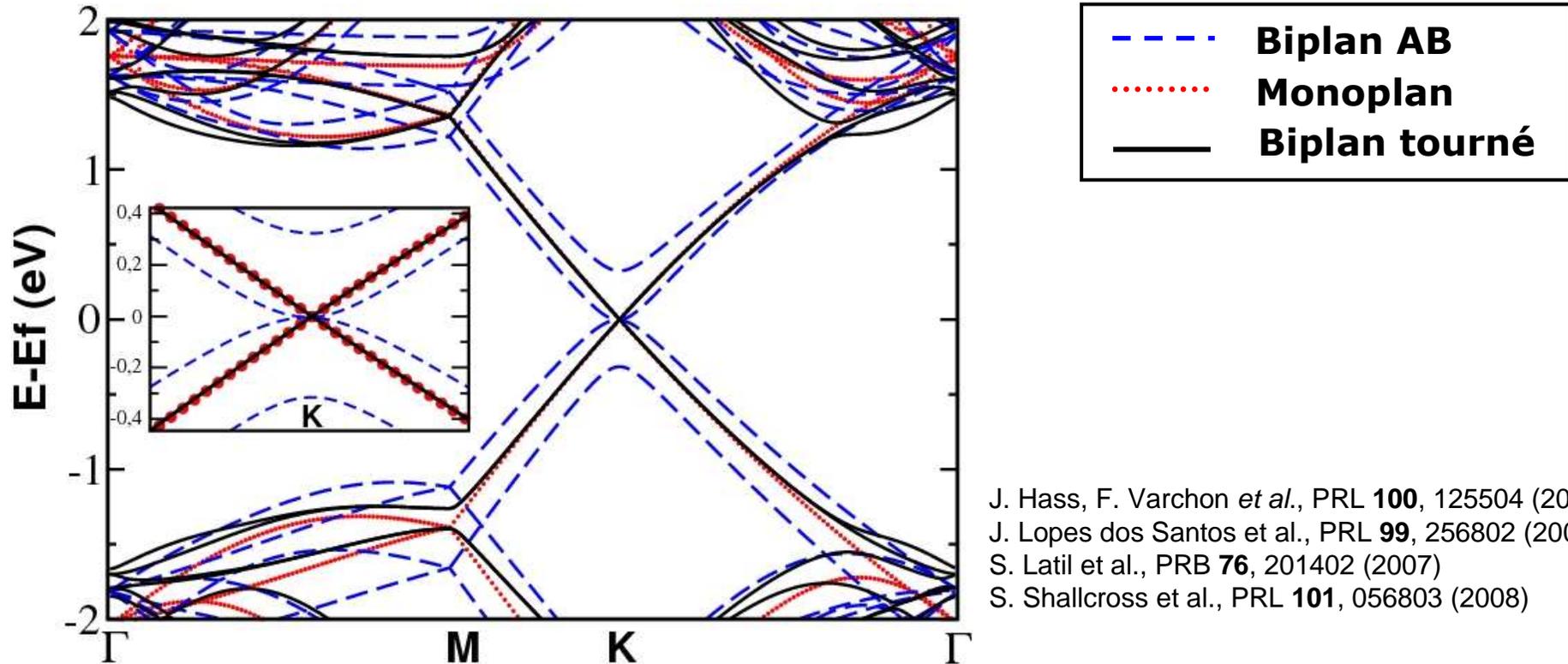


maille commune : $\sqrt{13} \times \sqrt{13} R \pm 46.1^\circ$

Grenoble – 8 décembre 2008

Effet sur la structure électronique

Structure de bande DFT



- La rotation entre les plans préserve la dispersion linéaire aux points K et K' à proximité du niveau de Fermi (cône de Dirac)

→ **découplage électronique**

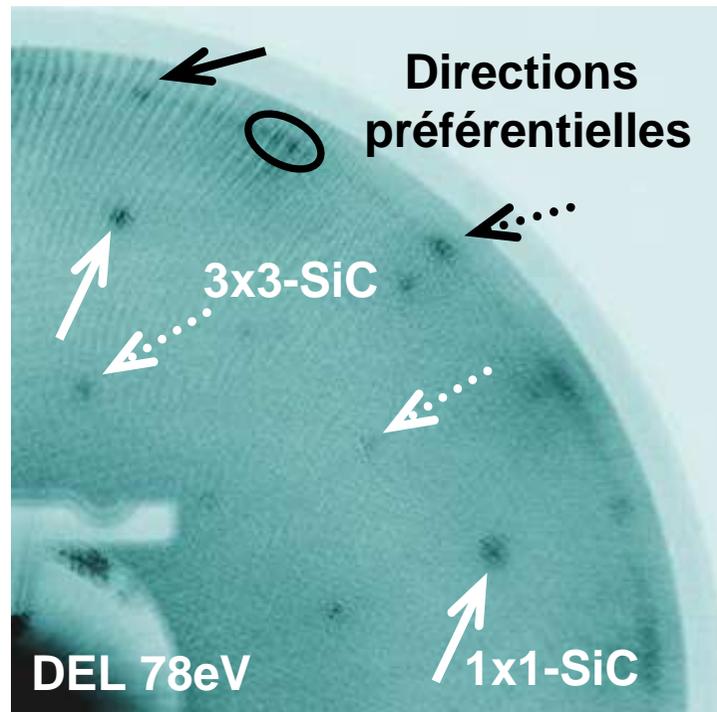
- signatures du monoplan de graphène pour ~ 10 graphène/SiC(000-1)
- même résultat pour une rotation quelconque entre 2 plans
- seul l'empilement graphite ne donne pas de dispersion linéaire



IV. Graphène sur SiC face C
2) Résultats expérimentaux

Synthèse des plans de graphène

- **substrat : 6H-SiC(000-1) dopé de type n (dopage azote $1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$)**
- **procédure de graphitisation standard** : A.J. Van Bommel et al., Surf. Sci., **48**, 463 (1975)
I. Forbeaux et al., Surf. Sci., **442**, 9, (1999)



Graphitisation à 1150° C (UHV)

Spectroscopie Auger :

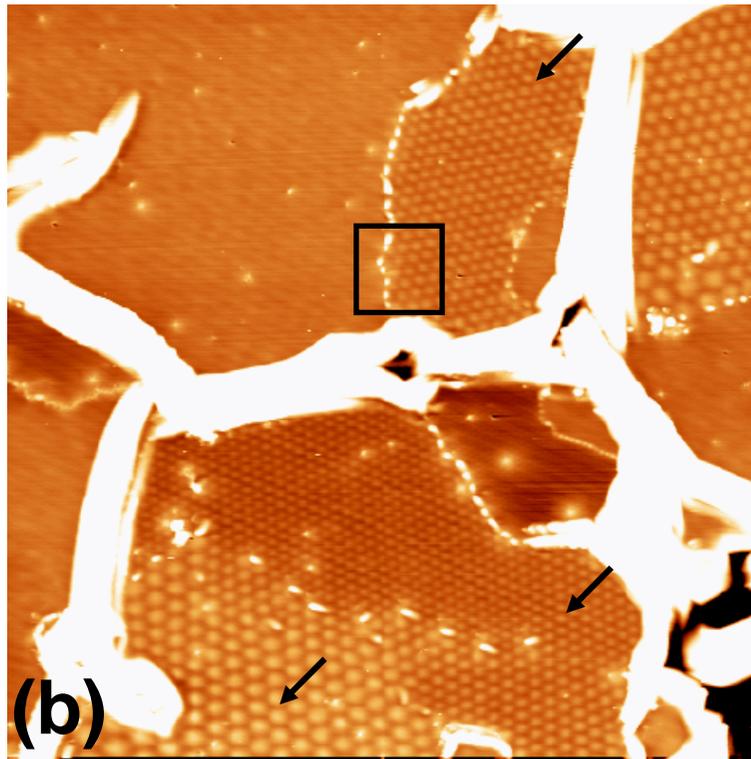
- 3 à 5 plans de graphène

Diffraction d'électrons lents :

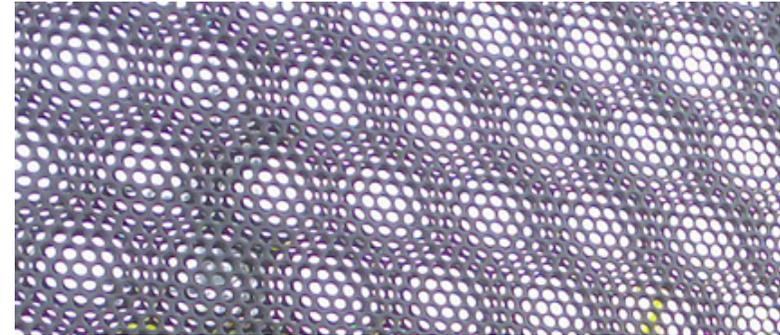
Directions préférentielles du cercle graphitique (par rapport à 1x1-SiC) :

- 30°, 0° et ~15° → différences entre croissance UHV et four de recuit

Figures de moiré



150x150 nm², +1V, T = 300K

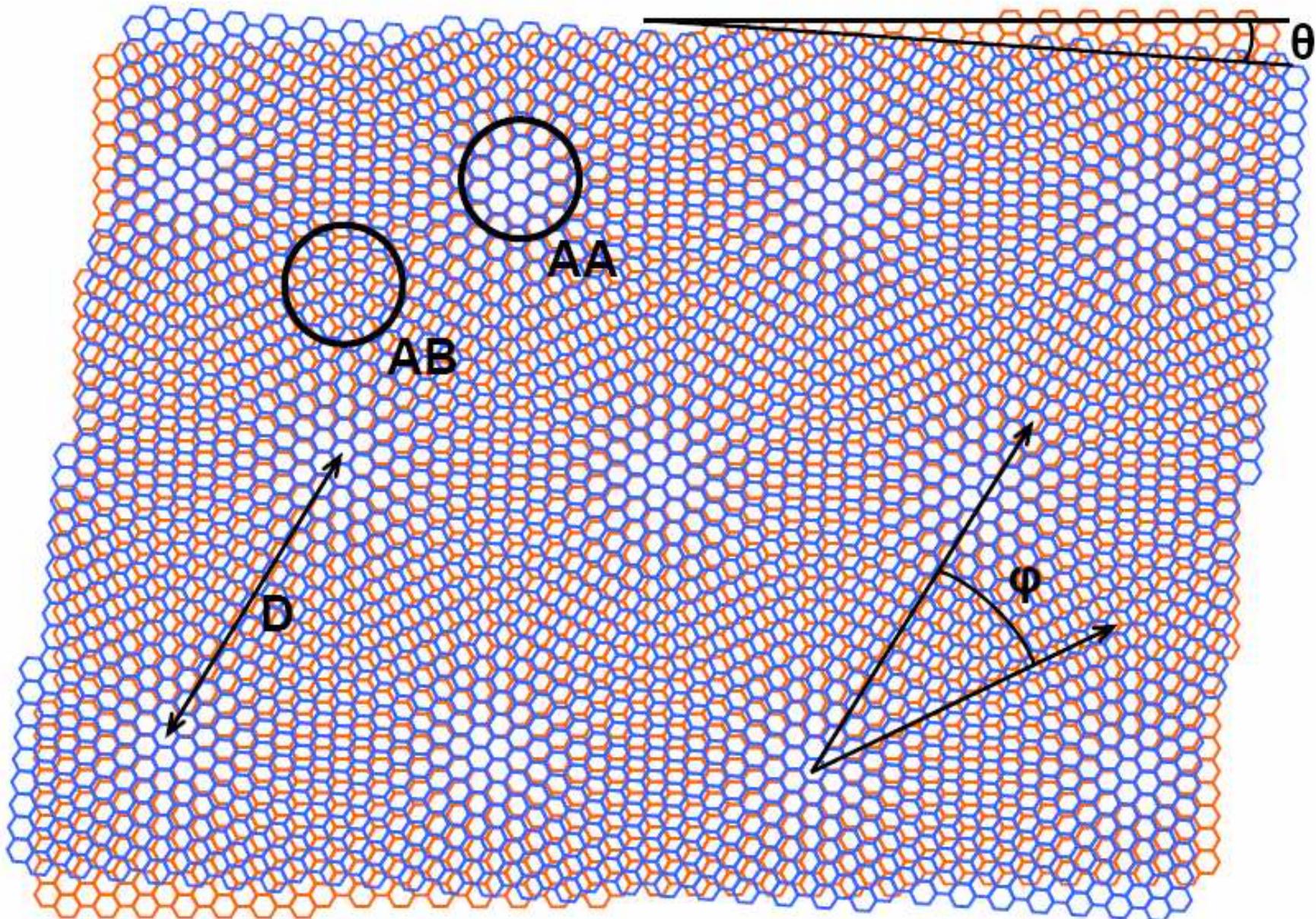


Un **moiré** est une figure d'interférences spatiales entre deux réseaux soit lorsque leur période sont légèrement différentes ou lorsque **les réseaux sont tournés l'un par rapport à l'autre d'un certain angle (moiré rotationnel)**.

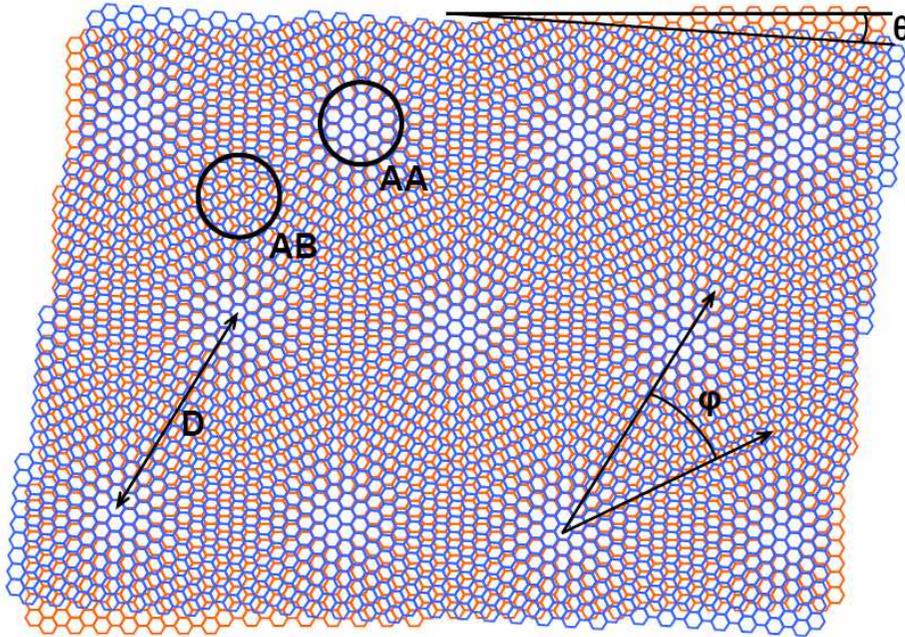
Superstructures de symétrie hexagonale
(période : qqs nm, corrugation 0.2 - 0.4 Å)

A cette échelle les figures de moiré sont générées par la périodicité du réseau atomique et ont pour origine la rotation d'un angle θ des deux plans de C les plus proches de la surface (moiré rotationnel)

Moiré rotationnel



Moiré rotationnel



Origine de la figure de moiré sur une image STM :

Effet électronique causé par les différences de LDOS à E_F entre les zones d'empilement relatives (AA doivent apparaître plus distinctement) :

- J.M. Campanera et al., Phys. Rev B **75**, 235449 (2008)
- J.-C. Charlier et al., Phys. Rev B **46**, 4540 (1993)

Pour un angle de rotation θ entre deux plans de graphène de période ($a = 0.246$ nm):

- période D du moiré :

$$D = a / (2 \sin(\theta/2)) \quad (1)$$

- angle φ entre le moiré et le réseau atomique :

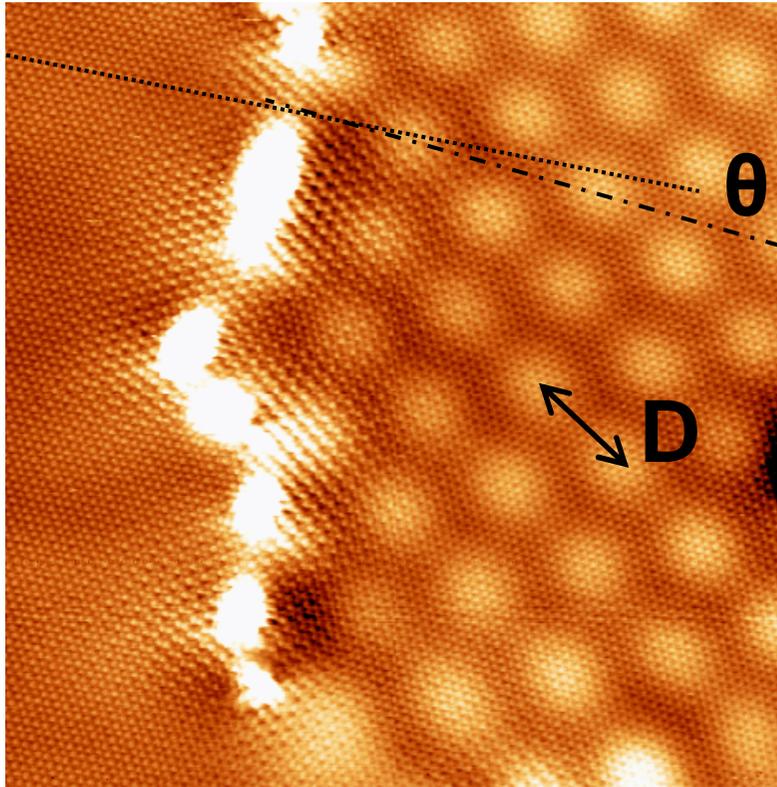
$$\varphi = 30^\circ - (\theta/2) \quad (2)$$

Interprétation de type moiré déjà validée en STM à la surface du graphite :

- M. Kuwabara et al., APL, **56**, 2396 (1990)
- J. Xhie et al., PRB **47**, 15835, (1993)
- Z.Y. Rong, PRB **48**, 17427, (1993)
- W-T. Pong, C. Durkam, J. Phys. D **38**, R329 (2005)

Vérifier ce scénario pour quelques plans de graphène sur SiC(000-1).

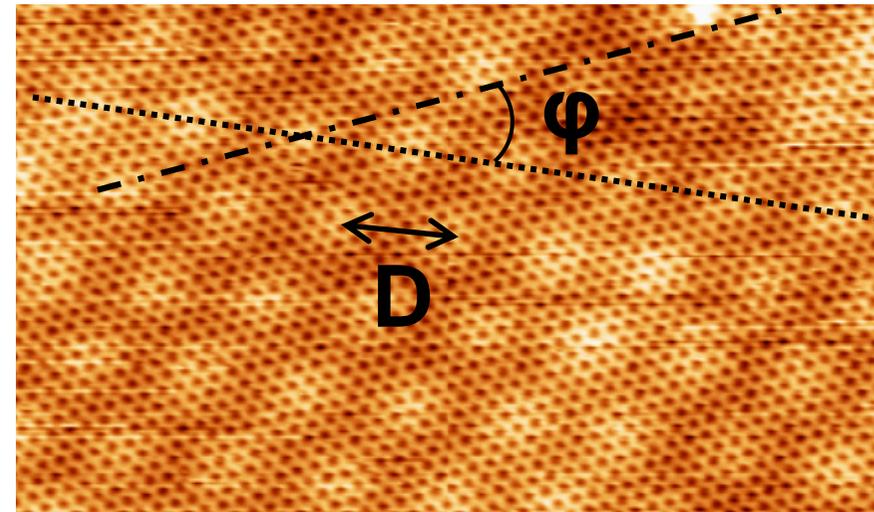
Présence de moiré



20x20 nm², -0.25 V

En supposant que le plan du dessous est continu, on mesure :

- $D = 2.8 \text{ nm}$
 - $\theta = 5^\circ$
- } $D = a / (2 \sin(\theta/2))$
- avec $a = 0.246$ pour le graphène



12x7 nm², -0.5 V

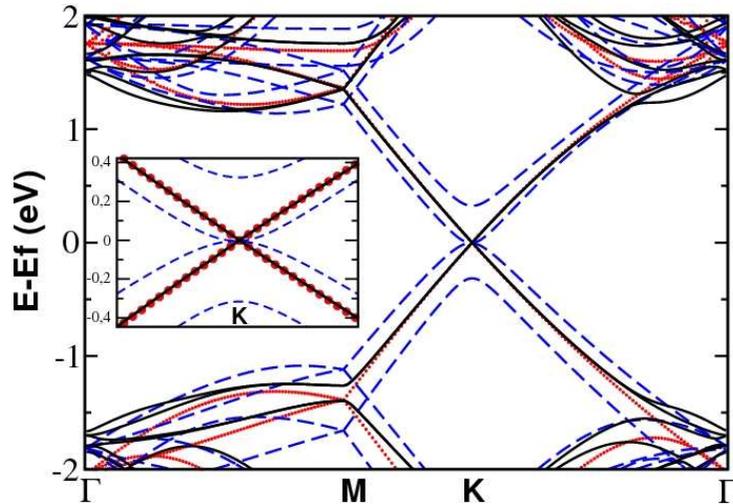
On mesure :

- $D = 1.5 \text{ nm} \rightarrow \theta = 5^\circ$ via (1)
 - $\varphi = 25 \pm 2^\circ$
- $\varphi = 30^\circ - (\theta/2)$

Nous avons vérifié la cohérence de D , θ et φ à différents endroits et pour différentes valeurs de V_{tunnel} et I_{tunnel} .

- Existence de moiré
- Désordre rotationnel pour le système de qqs graphène sur SiC(000-1)

Impact sur le contraste atomique



Rotation entre 2 plans de graphène permet de préserver la structure électronique du monoplan de graphène :

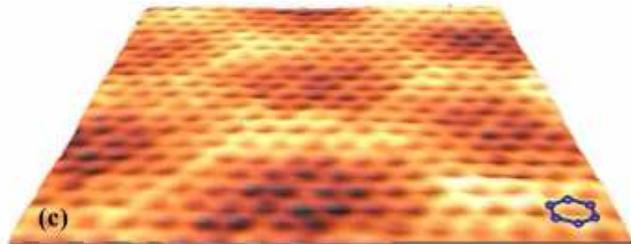
J. Hass, F. Varchon *et al.*, PRL **100**, 125504 (2008)

J. M. B. Lopes dos Santos *et al.*, PRL **99**, 256802 (2007)

S. Latil *et al.*, PRB **76**, 201402 (2007)

S. Shallcross *et al.*, PRL **101**, 056803 (2008)

Différence de contraste atomique entre le monoplan et le biplan de graphène en empilement AB : P.Mallet, F. Varchon *et al.*, PRB, **76**, 041403(R) (2007)



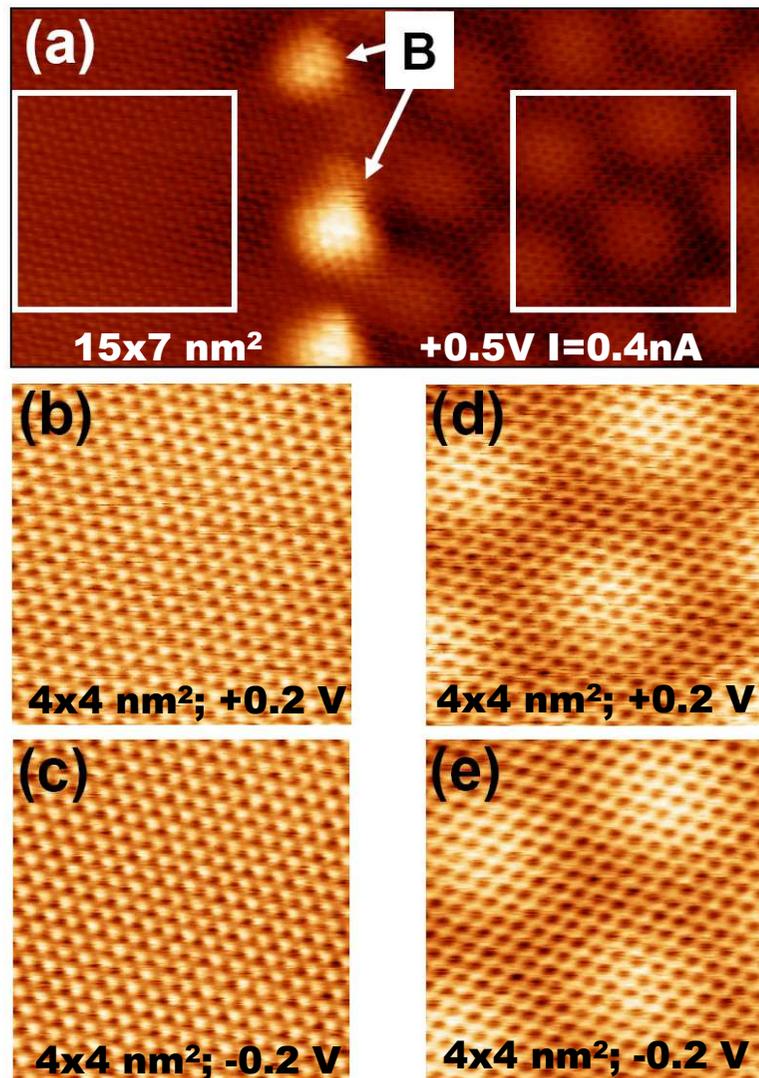
**Monoplan de graphène
sur SiC(0001)**



**Biplan de graphène AB
sur SiC(0001)**

Naïvement on s'attend à retrouver le contraste atomique d'un monoplan de graphène où tous les atomes sont visibles sur les images STM (contraste en nid d'abeilles)

Impact sur le contraste atomique



F.Varchon *et al.*, PRB 77, 165415 (2008)

Nous observons de part et d'autre de E_F :

- contraste atomique nid d'abeilles (ou faiblement asymétrique) sur les figures de moiré
- contraste triangulaire (empilement AB) sur les zones plates

Ce n'est pas une preuve définitive d'un découplage électronique.

Empilement sous le plan de surface ?

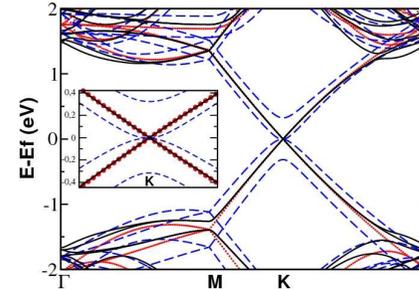
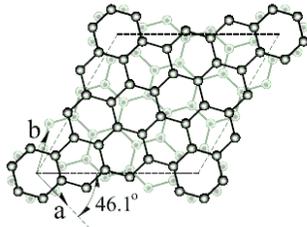
Calculs DFT : S. Latil *et al.*, PRB 76, 201402 (2007)

Indication valable qu'un comportement de type monoplan de graphène peut être trouvé sur un système de plusieurs plans désorientés.

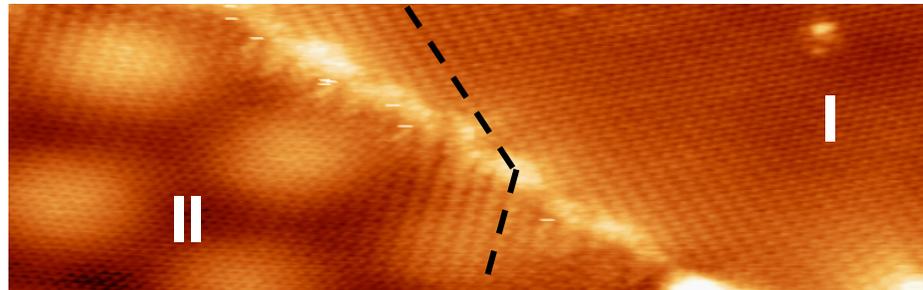
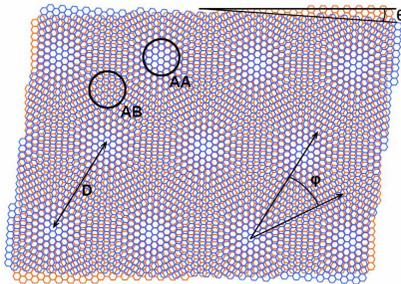
Graphène sur SiC(000-1)

Désordre rotationnel pour quelques plans de graphène/SiC(000-1) :

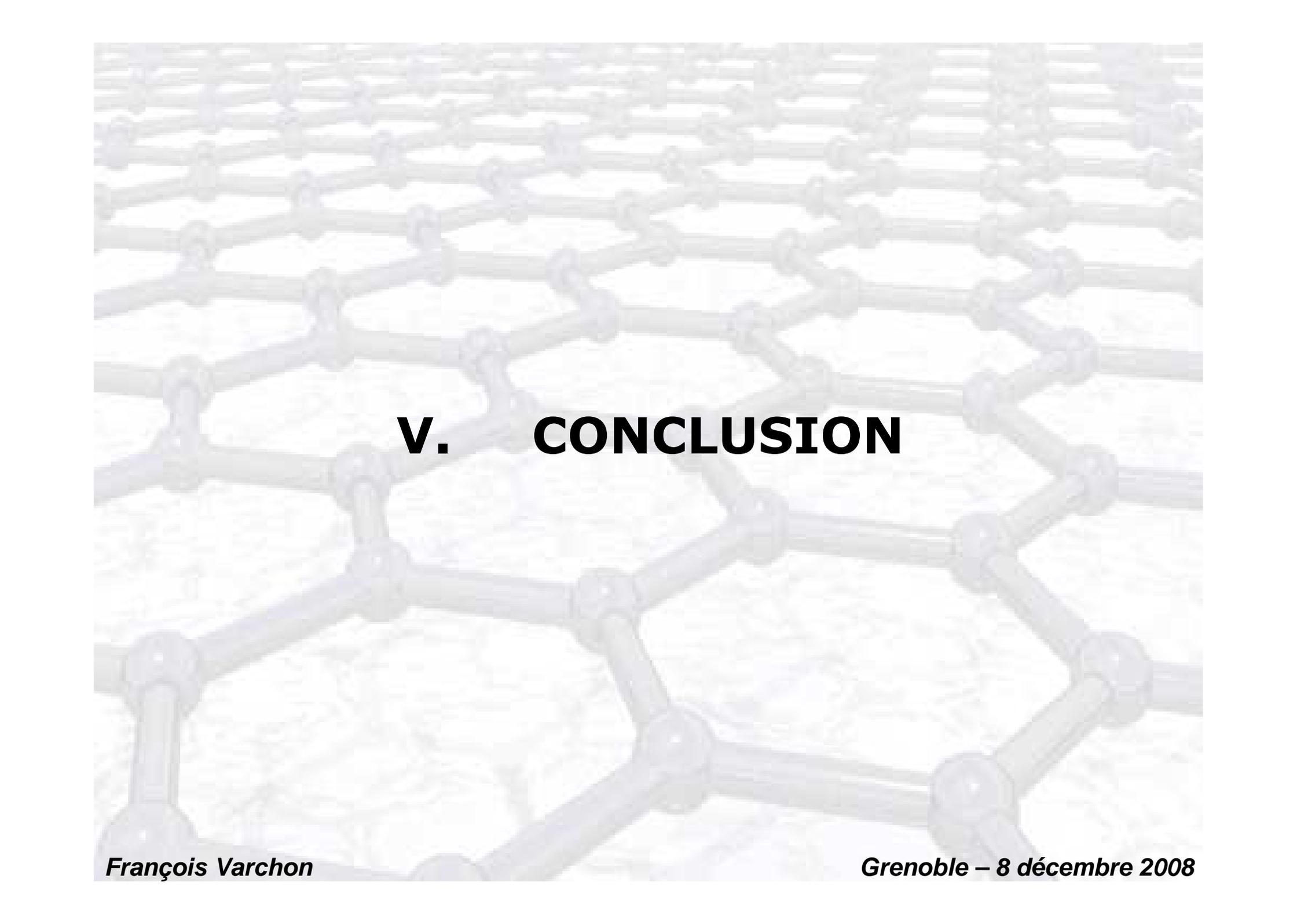
A) Rotation entre deux plans de graphène préserve la structure électronique en cône de Dirac.



B) L'étude STM nous permet d'identifier, via la présence de figures de moiré, des zones de désorientation entre plans de graphène successifs.



C) Le contraste atomique sur les zones de moiré semble confirmer le découplage électronique prédit entre autres par les calculs DFT.



V. CONCLUSION

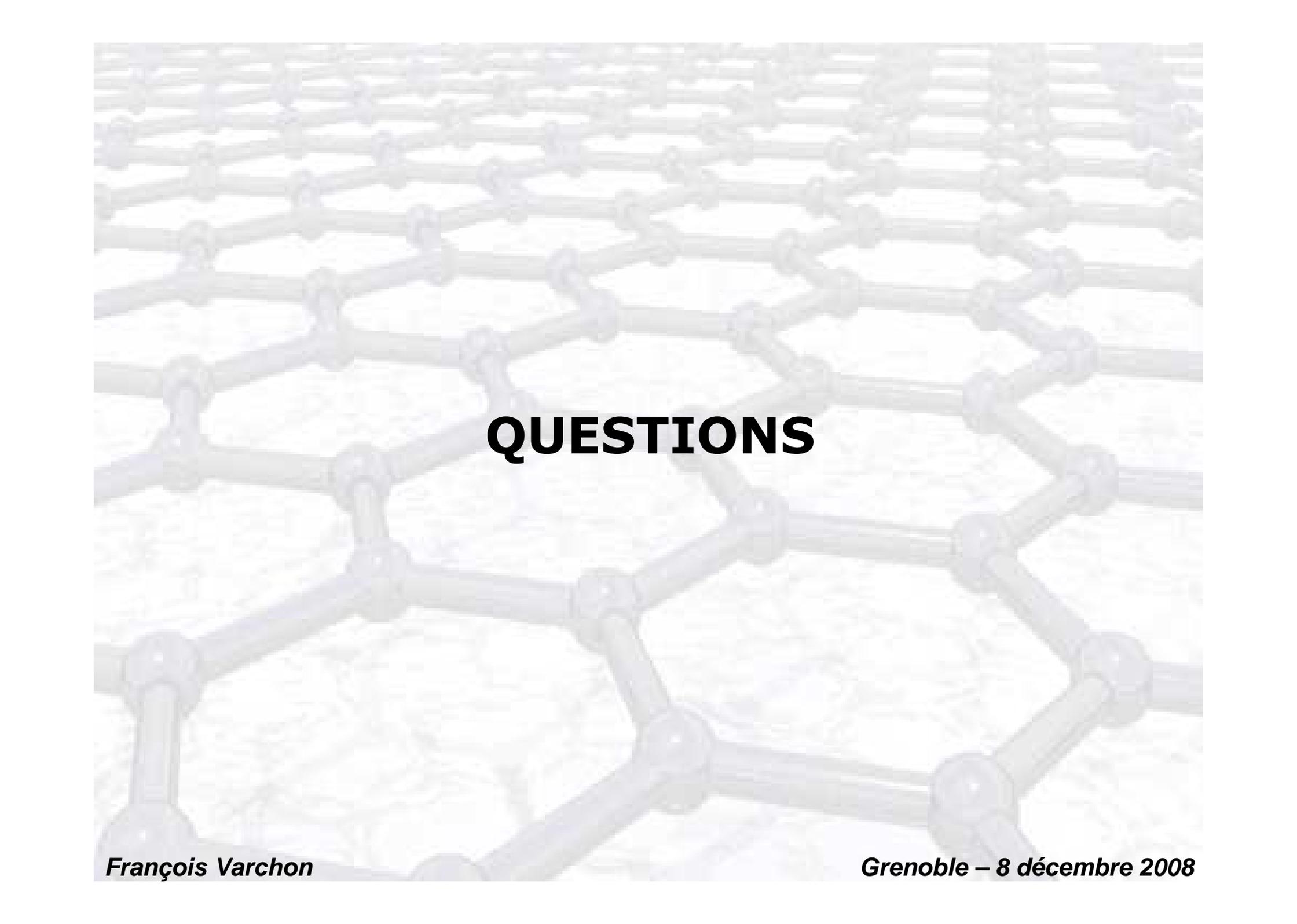
Graphène sur carbure de silicium

Utilisation conjointe des calculs DFT et des expériences STM révèlent :

- **graphène sur carbure de silicium est beaucoup plus complexe que le cas du graphène idéal (couplage avec l'environnement).**
- **mécanismes de découplage (plan tampon sur la face SiC(0001), découplage électronique par une rotation entre 2 plans successifs)**

▪ **développements dans la continuité de cette thèse :**

- 1) structure électronique du graphène sur SiC(0001) dans la maille 6R3**
- 2) interface graphène/SiC(000-1) (existence d'un plan tampon ?)**
- 3) découplage des plans sur la face SiC(000-1) (STM chiralité)**
- 4) compréhension du mécanisme de croissance et optimisation**

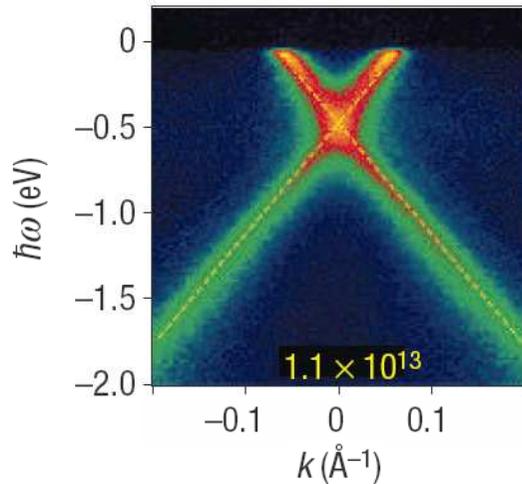


QUESTIONS

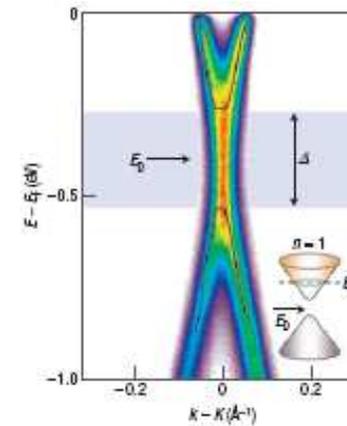
Le problème du gap

ARPES :

- A. Bostwick et al., Nature Phys. **3**, 36 (2007)
- S.Y. Zhou et al., Nature Mat. **6**, 771 (2007)



Pas de gap au point de Dirac



Gap au point de Dirac

Origins of anomalous electronic structures of epitaxial graphene on silicon carbide

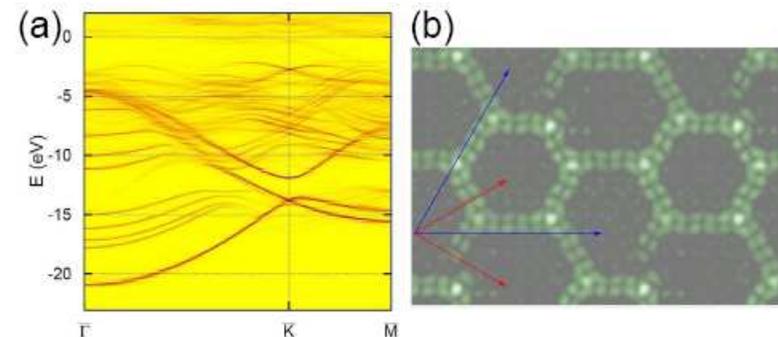
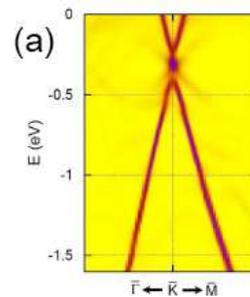
Seungchul Kim,¹ Jisoon Ihm,¹ Hyung Joon Choi,² and Young-Woo Son^{3,*}

¹Department of Physics and Astronomy, Seoul National University, Seoul 151-747, Korea

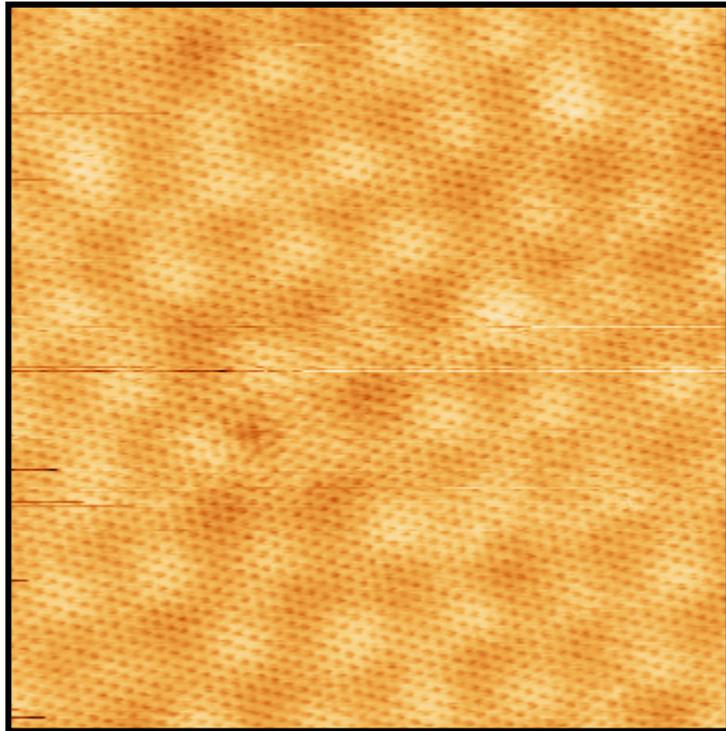
²Department of Physics and IPAP, Yonsei University, Seoul 120-749, Korea

³Department of Physics, Konkuk University, Seoul 143-701, Korea

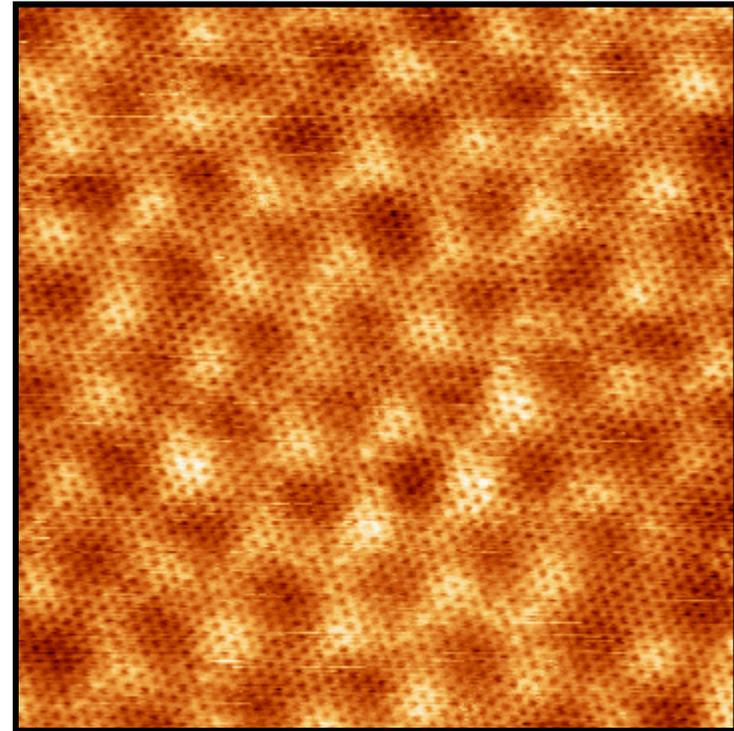
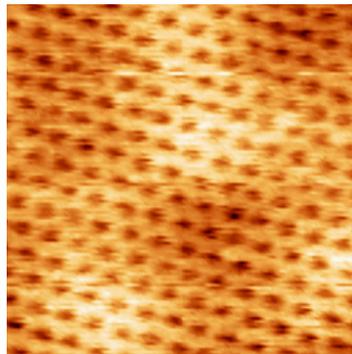
S. Kim *et al.*, PRL **100**, 176802 (2008)



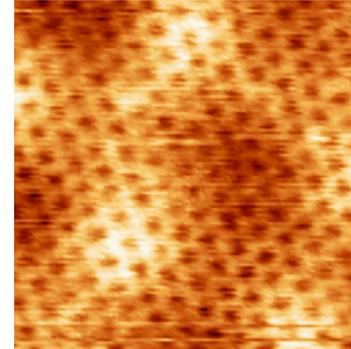
Contraste atomique symétrique pour le monoplan



12 x 12 nm², -0.2V

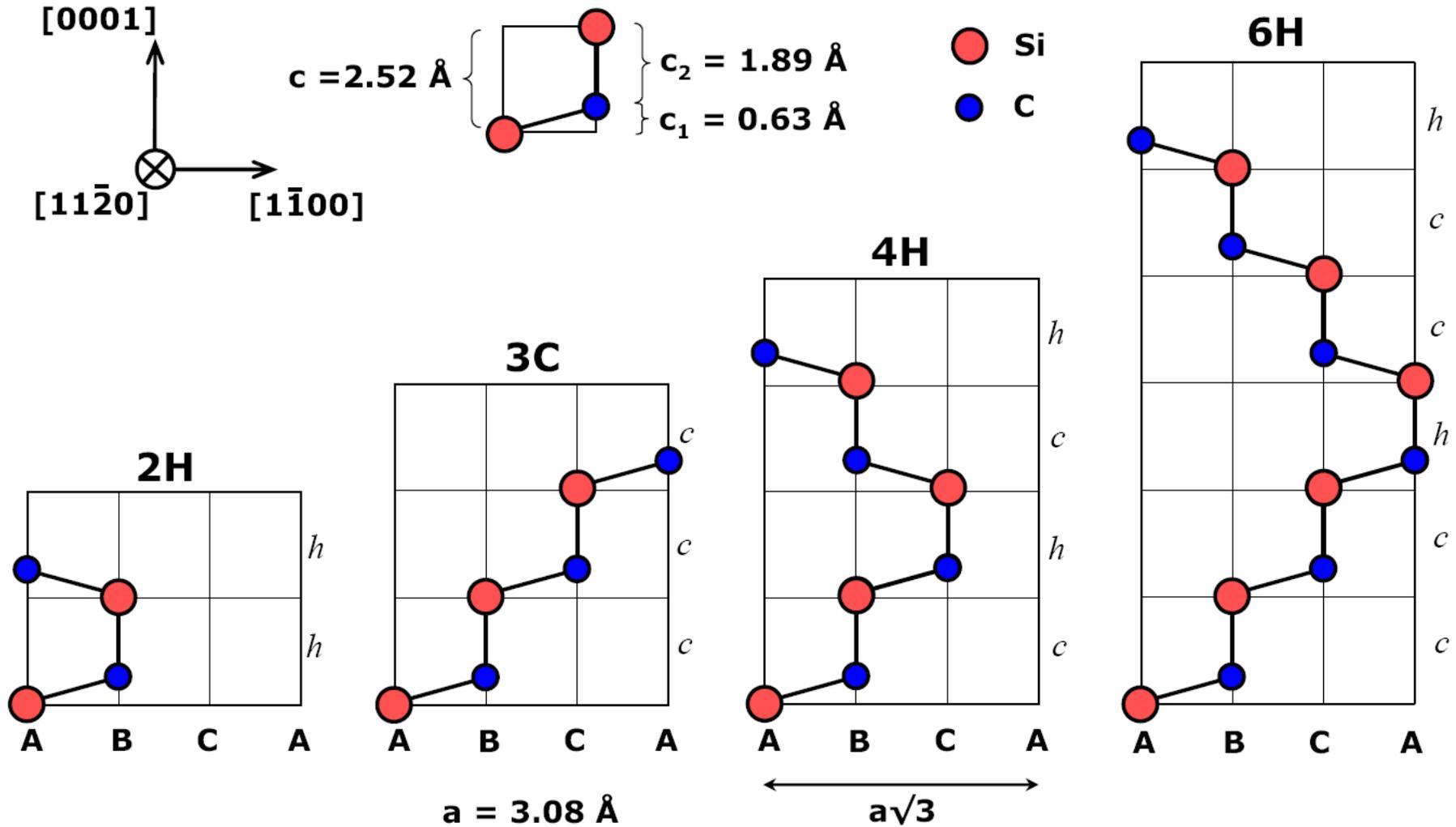


12 x 12 nm², -0.5V

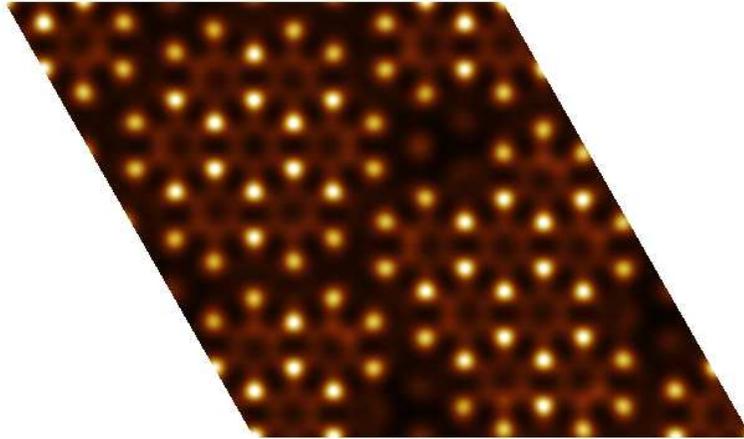


Le carbure de silicium (SiC)

Le carbure de silicium (SiC) est une céramique composée exclusivement d'atomes de C et de Si.



Environnement complexe



Maille 6R3, densité de charge totale
au-dessous du premier plan de C

**Impact sur la
structure
électronique ?**

Interface dans la maille 6R3 :

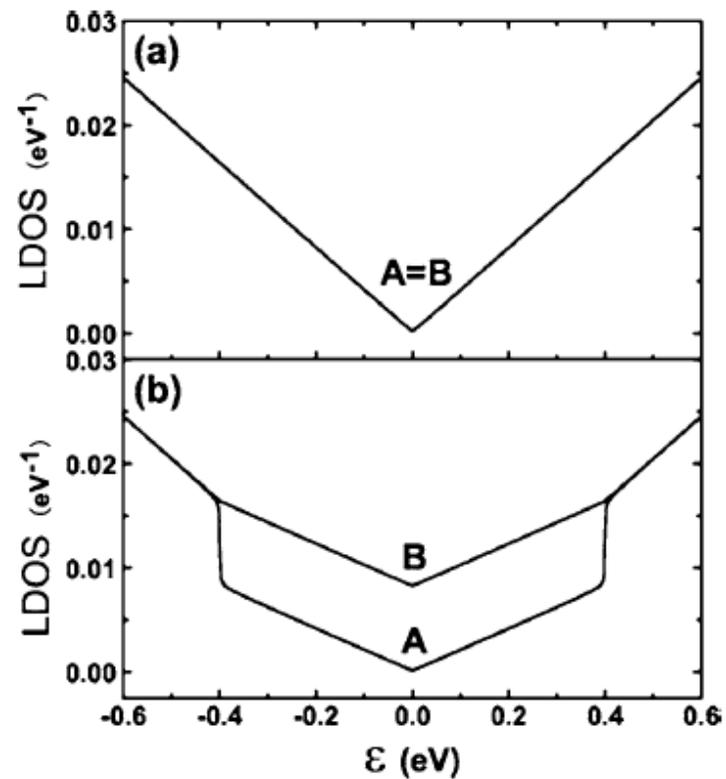
- forte nanostructuration du premier plan de C en nid d'abeilles
- 77 liaisons covalentes Si-C entre SiC(0001) et le premier plan de C
- 31 sur 108 (29%) atomes de Si du dernier plan susceptible de donner une liaison pendante

Biplan de graphène

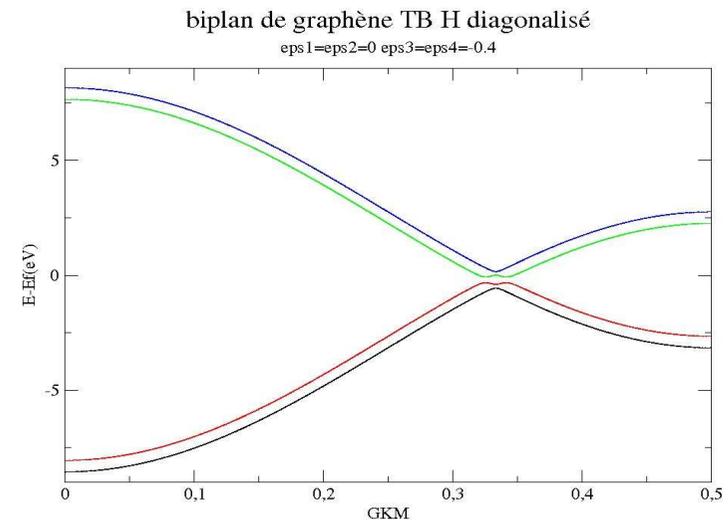
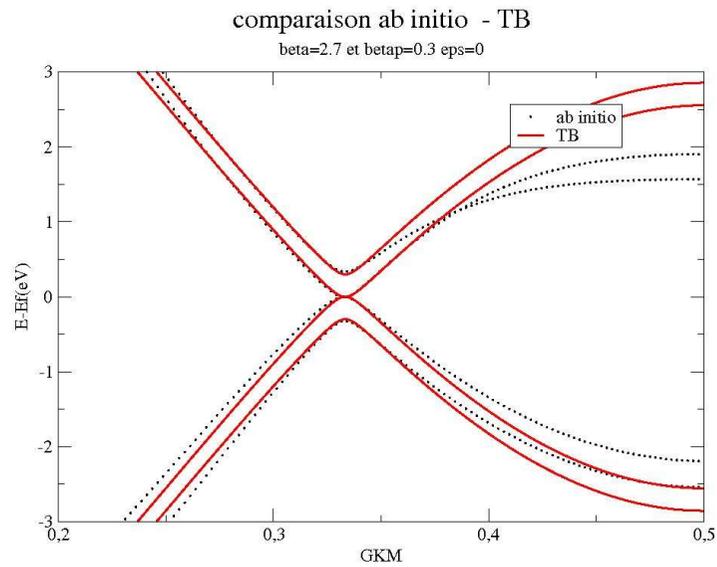
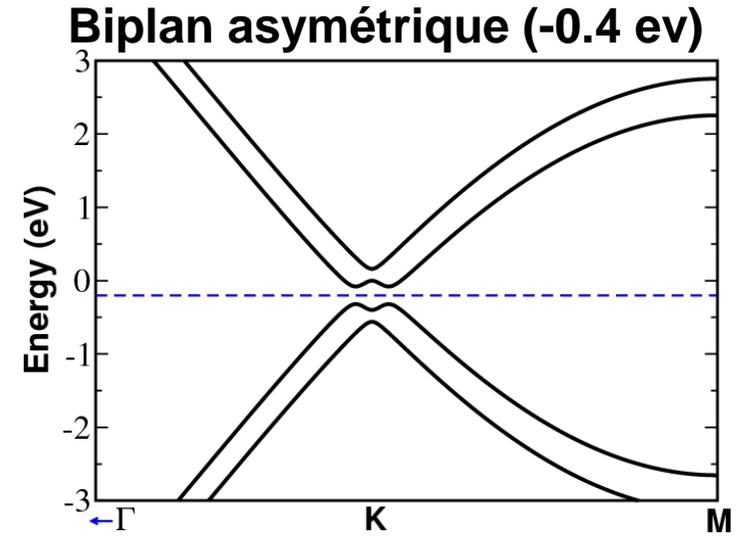
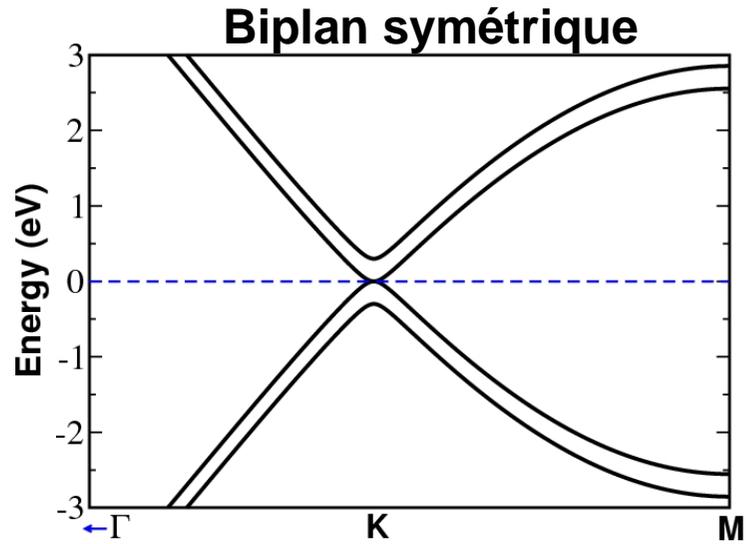
PHYSICAL REVIEW B 75, 085424 (2007)

Electronic structure of bilayer graphene: A real-space Green's function study

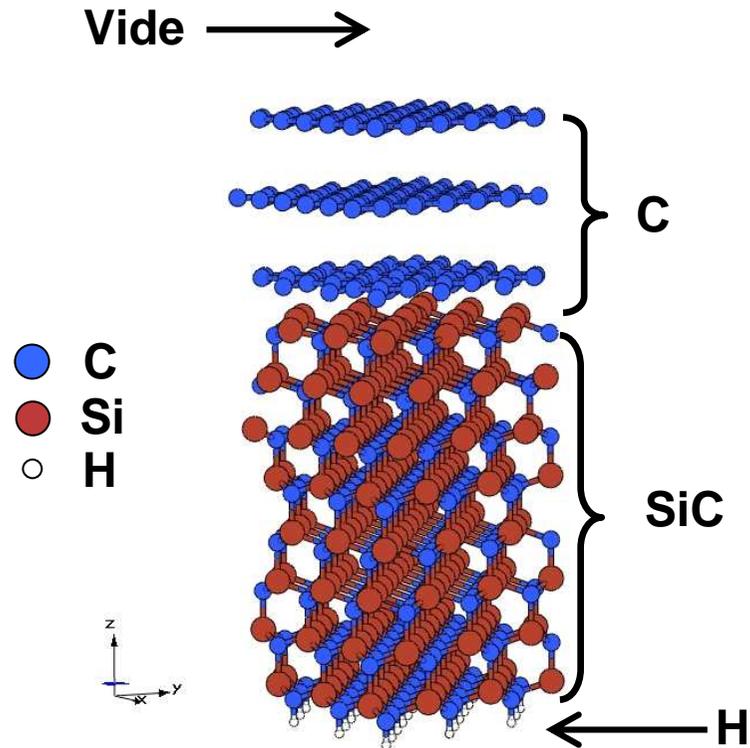
Z. F. Wang,¹ Qunxiang Li,^{1,*} Haibin Su,² Xiaoping Wang,¹ Q. W. Shi,^{1,†} Jie Chen,³ Jinlong Yang,¹ and J. G. Hou¹



Biplan de graphène



Supercellule



Supercellule contient 59 ou 67 ou 75 atomes :

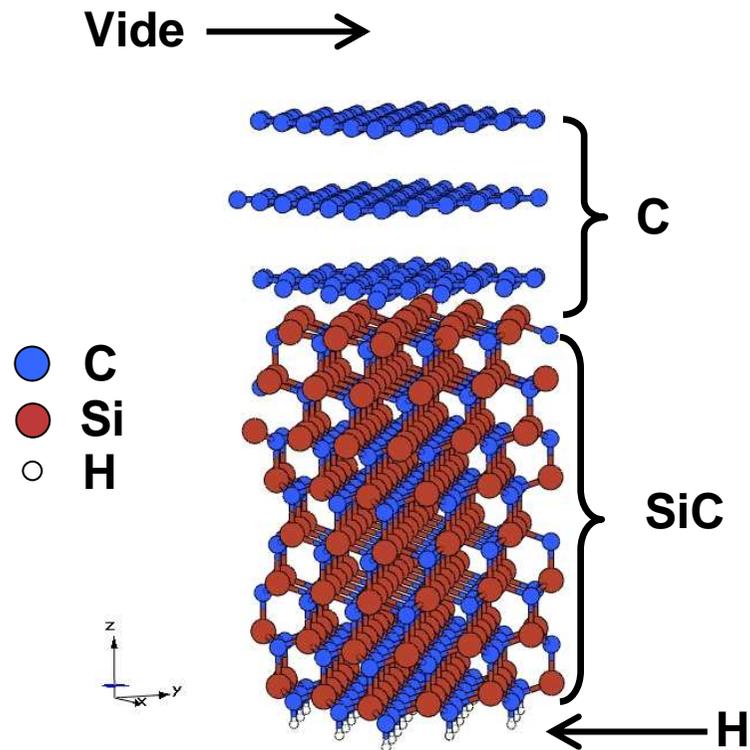
Des plans (1 ou 2 ou 3) du type graphite (en empilement AB)

+ 8 biplans de SiC en géométrie 4H-SiC (0001) ou (000 $\bar{1}$)

**+ 3 atomes d'H sur l'autre face afin de saturer les liaisons pendantes
(destruction de l'état de surface)**

+ vide de 15 à 25 Å (pour simuler la surface)

Relaxation ionique



Relaxation des positions atomiques :

SiC (0001) (-Si) :

$d(\text{SiC-1pl}) = 2.0 \text{ \AA}$

$d(1\text{pl-2pl}) = 3.8 \text{ \AA}$

$d(2\text{pl-3pl}) = 3.9 \text{ \AA}$

} graphite DFT 2 à 5 Å

SiC (000 $\bar{1}$) (-C) :

$d(\text{SiC-1pl}) = 1.66 \text{ \AA}$

$d(1\text{pl-2pl}) = 3.9 \text{ \AA}$

$d(2\text{pl-3pl}) = 3.9 \text{ \AA}$

$1.65 \pm 0.005 \text{ \AA}$

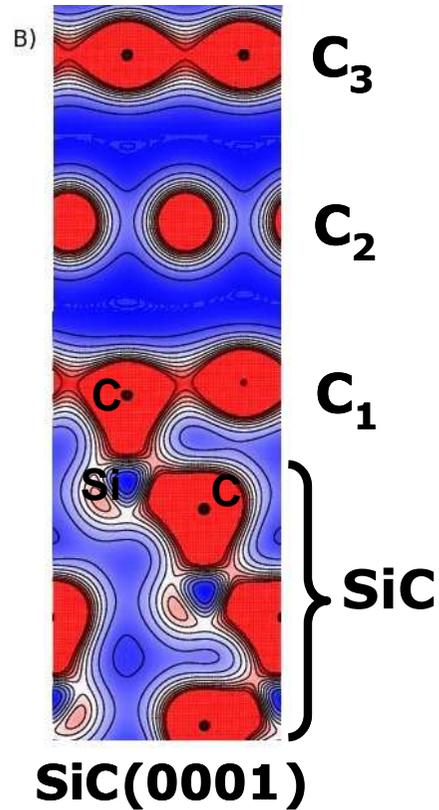
$3.51 \pm 0.1 \text{ \AA}$

$3.370 \pm 0.005 \text{ \AA}$

XRR E.Conrad

Le plan de carbone à l'interface interagit fortement avec la surface du SiC terminée Si ou C.

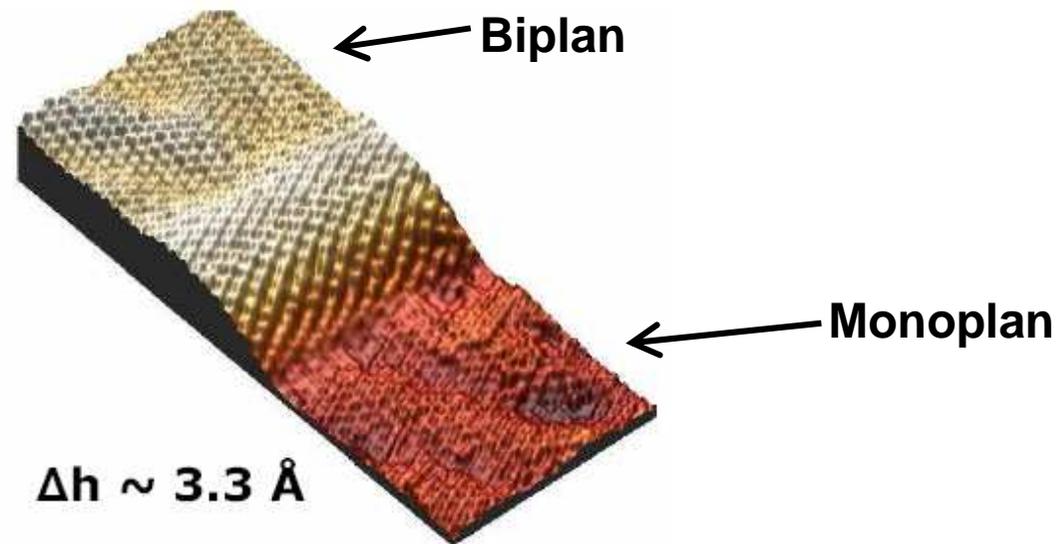
Densité de charge dans R3-SiC



➤ Existence d'une liaison covalente entre le plan tampon et le Si de l'interface

F.Varchon *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 126805 (2007)

Marche monoplan/biplan sur SiC(0001)

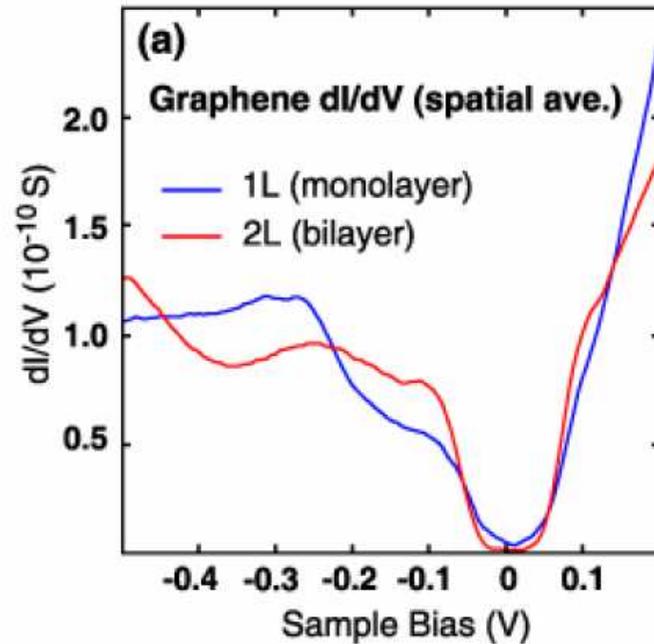


$\Delta h \sim 3.3 \text{ \AA}$

10 x 4 nm², 0.2 V, 0.2 nA

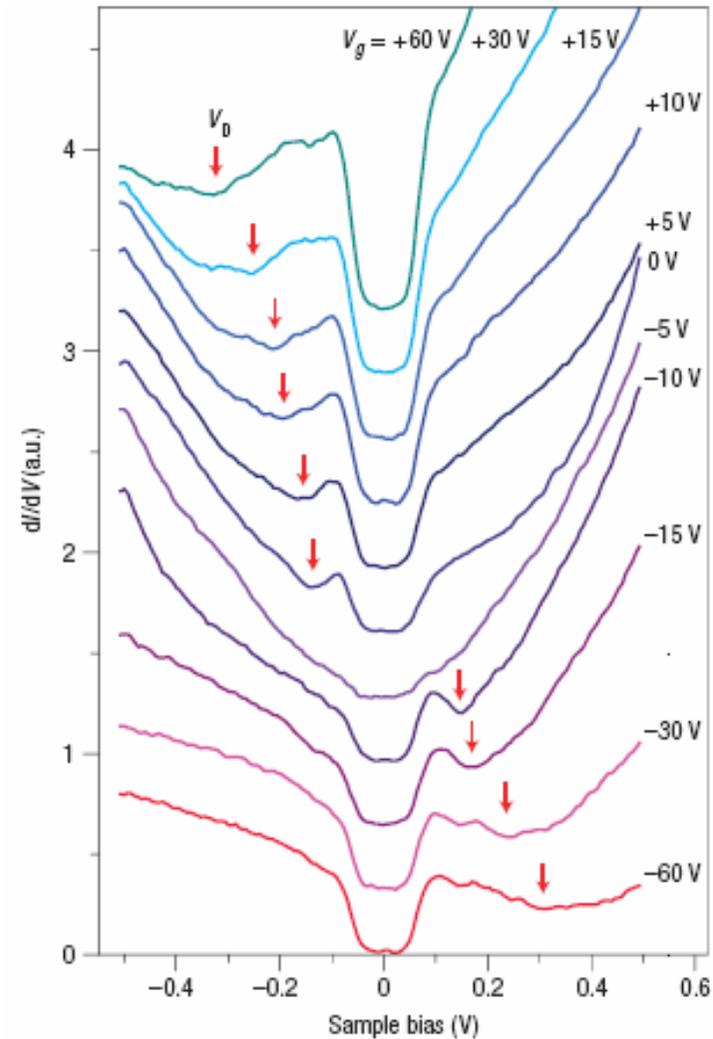
STS

Graphene sur SiC(0001)



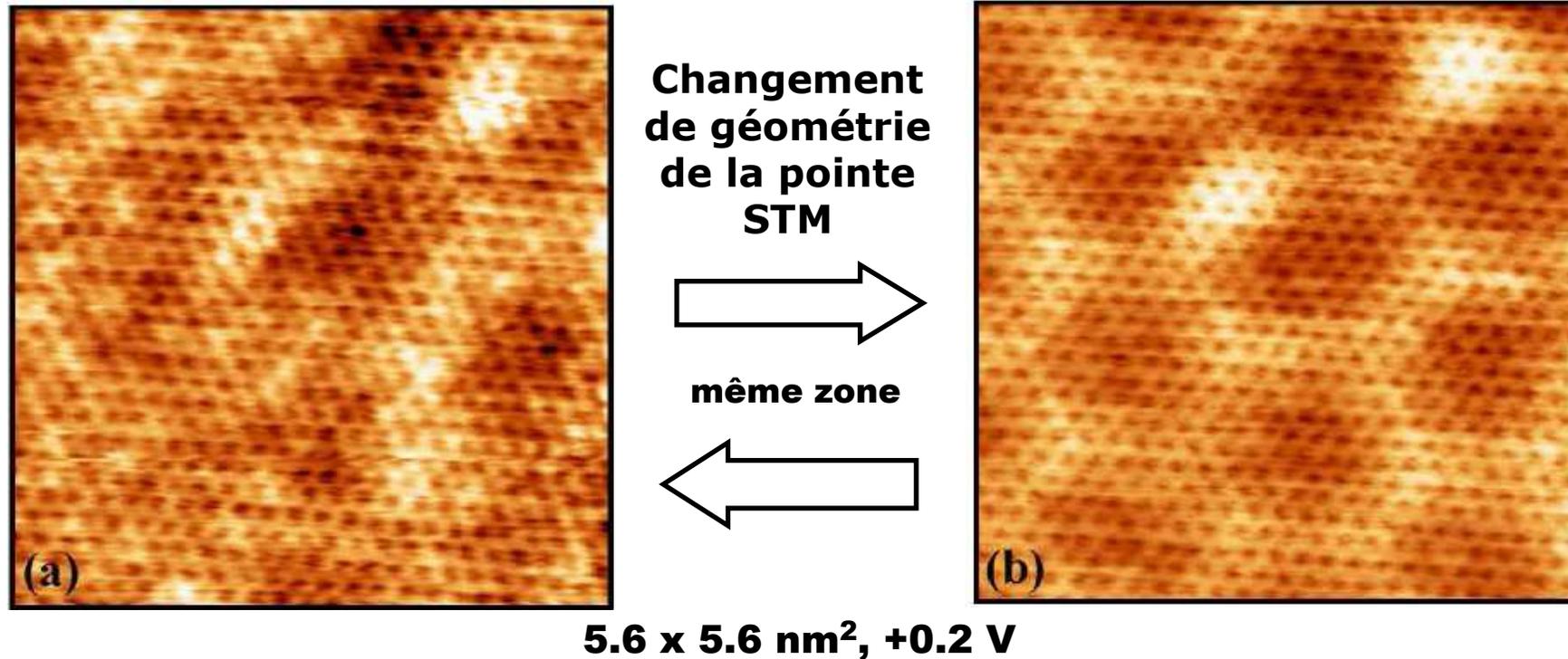
V. W. Brar *et al.*, APL **91**, 122102 (2007)

Graphene exfolié (effet de champ)



Y. Zhang *et al.*, Nature Phys **4**, 627 (2008)

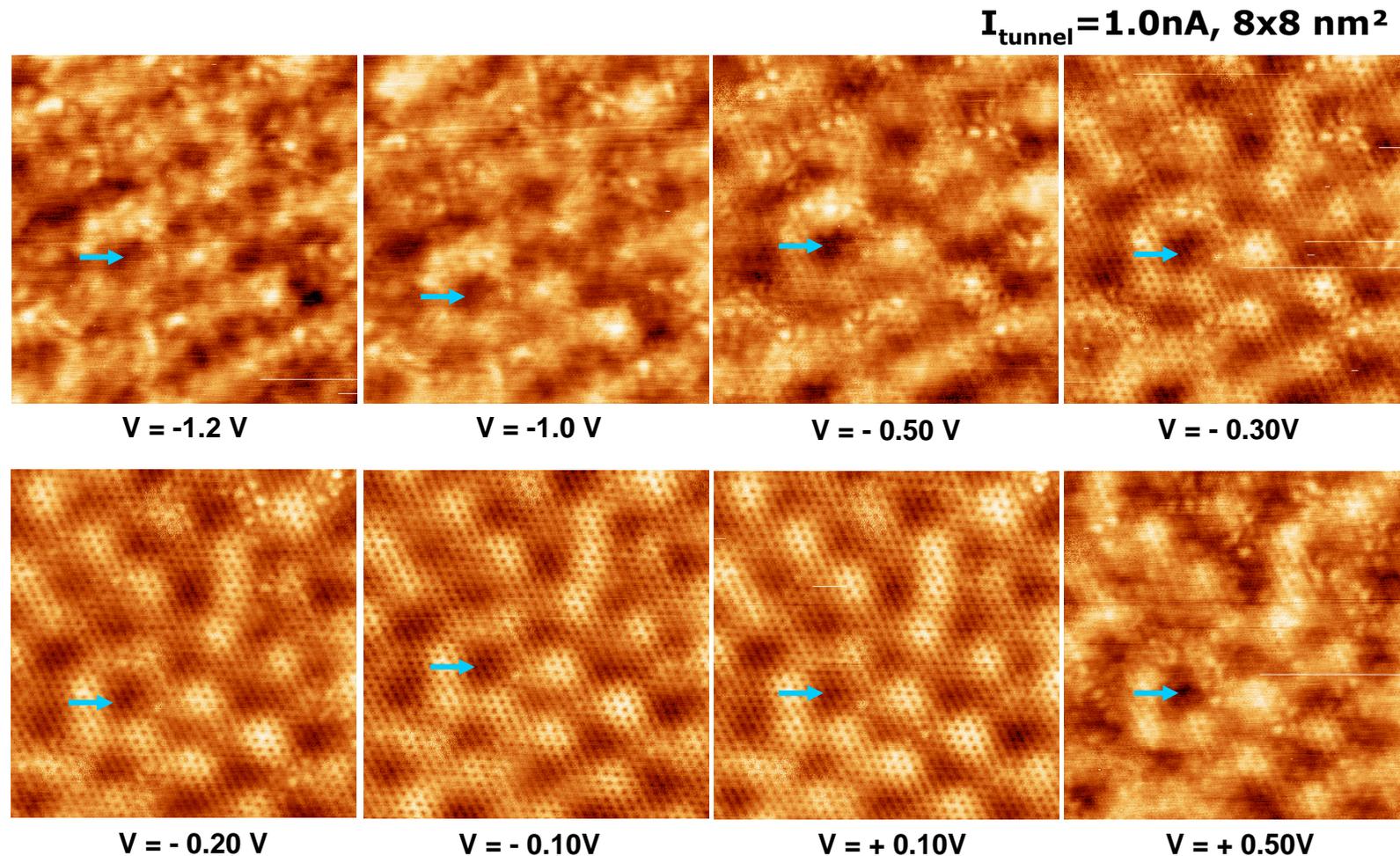
Terrasse M, états d'interface



États d'interface sous le premier plan de graphène :

- peu visible en ARPES Emtsev *et al.*, Phys. Rev B 77, 155303 (2008)
- prédits par les calculs DFT : liaisons pendantes à l'interface ou adatomes sous le plan tampon Rutter *et al.*, Phys. Rev B 76, 235416 (2007)
- **visibles en STM à basse tension (près de E_F) au « travers » du plan de graphène** mais leur contribution varie suivant la géométrie de la pointe.
- pourraient jouer un rôle sur les propriétés de transport (faible mobilité du système graphène/SiC(0001))

États d'interface, transparence du graphène



Le graphène devient « transparent » lorsque la tension augmente.

→ Processus tunnel dans les états d'interface

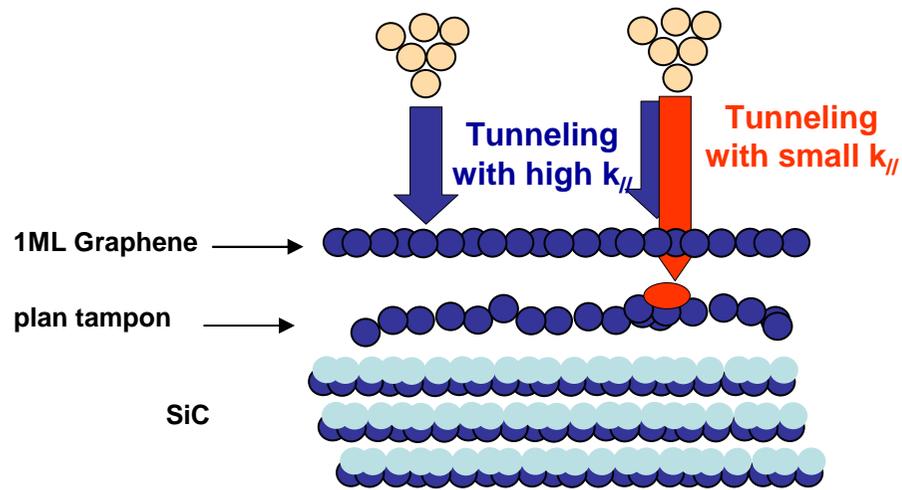
(DOS grande de l'interface + processus tunnel atténué en raison des états électroniques à grands $k//$ du graphène)

États d'interface

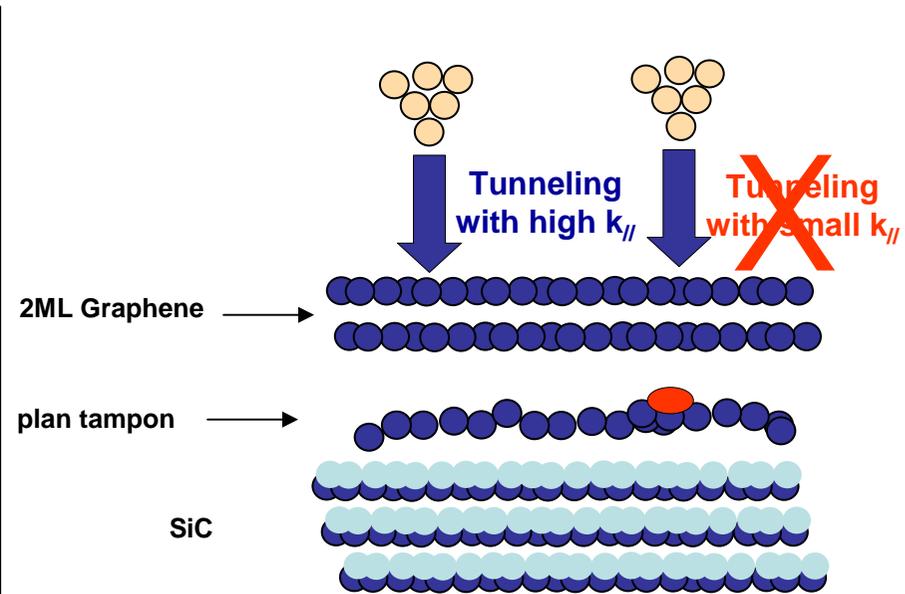
- Pourquoi le STM est-il sensible aux états d'interface ?

Probabilité tunnel entre la pointe et la surface :

$$T_{\vec{k}_{//}} \propto e^{-2z \sqrt{\frac{2m\phi}{\hbar^2} + k_{//}^2}}$$

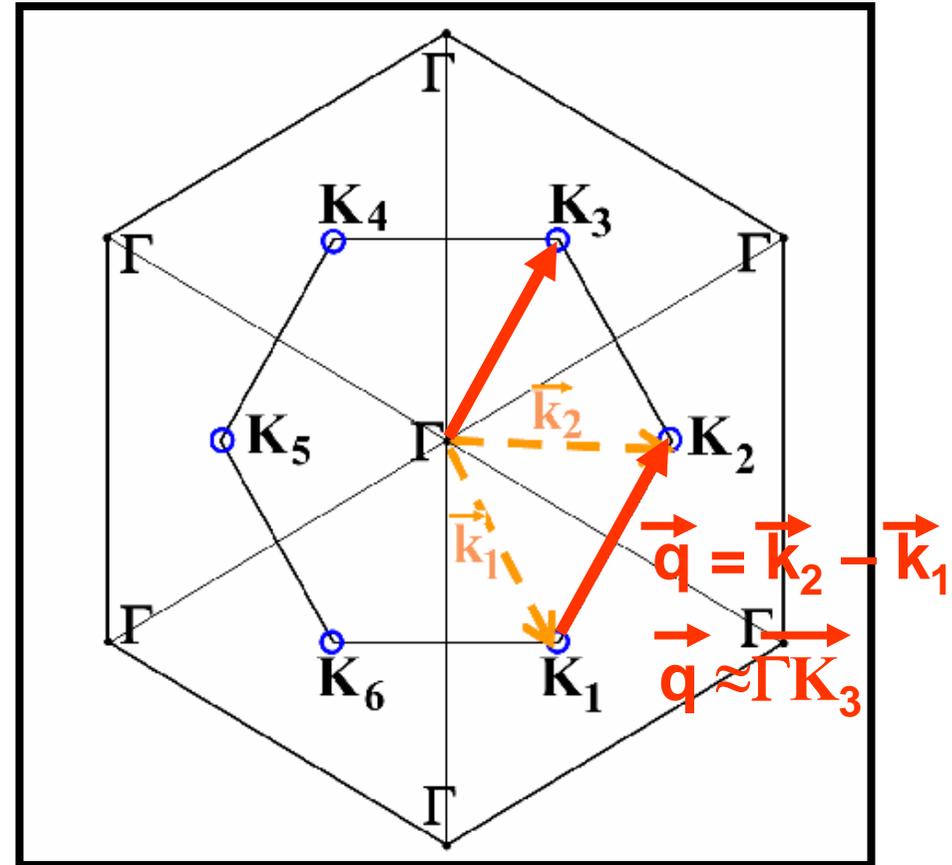
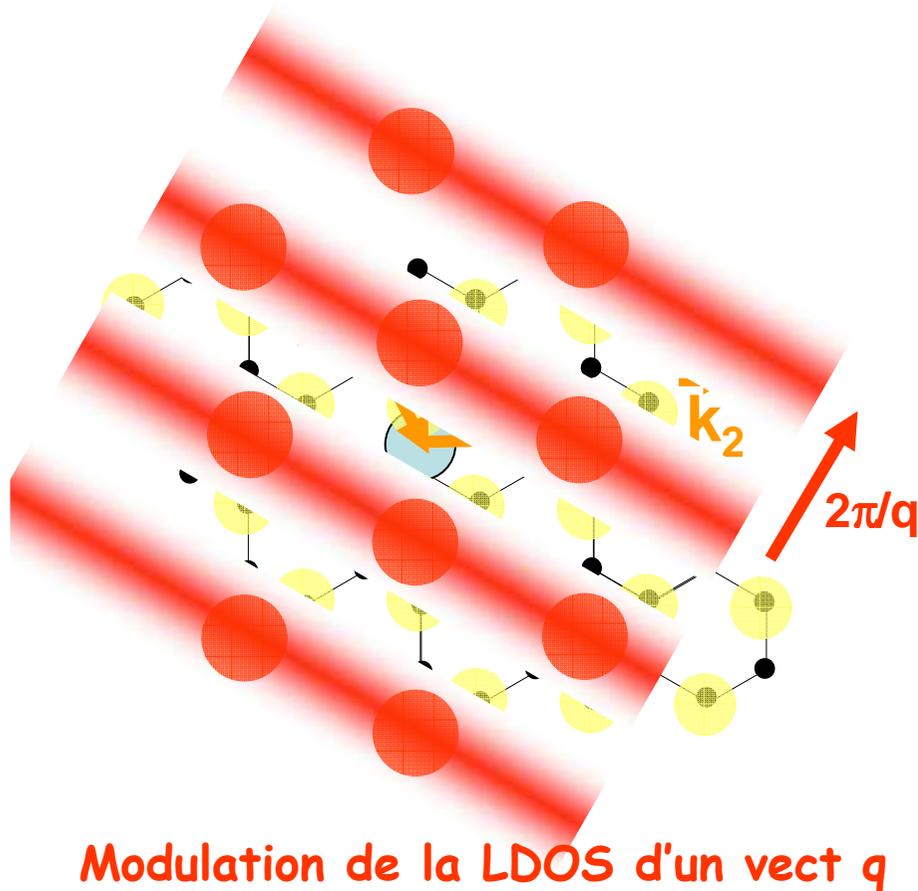


Monoplan



Biplan

Diffusion intervallée au niveau de Fermi

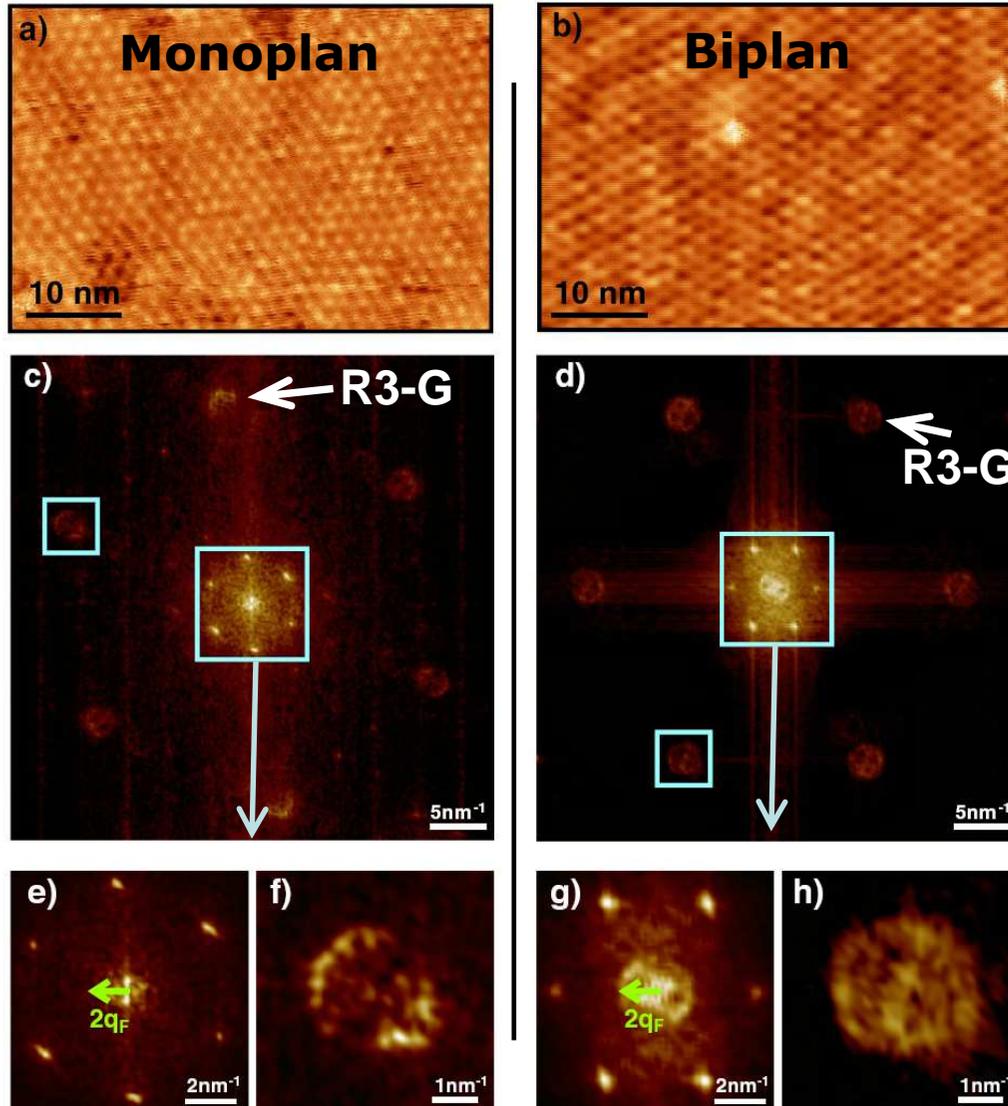


Modulation de la LDOS en R3-G

Interférences quantiques, diffusion intravallée

Collaboration avec le groupe de K. Kern (MPI Stuttgart) et C. Bena (CEA Saclay)

Image STM à basse tension (qqq mV) réalisées à Stuttgart



Résultats

Mise en évidence d'effets de chiralité dans la signature des interférences quantiques pour la diffusion intravallée (monoplan : absence de cercle à $2q_F$ au centre).

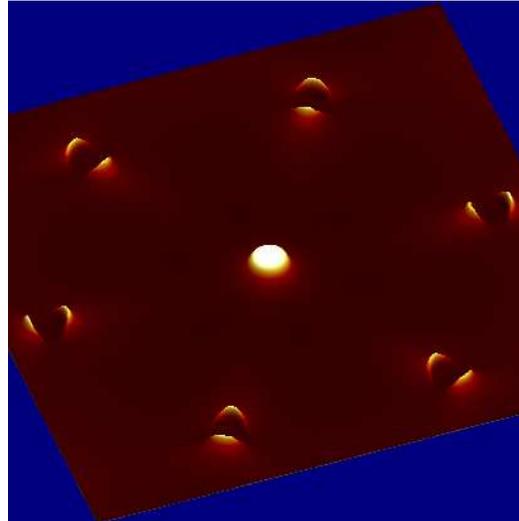
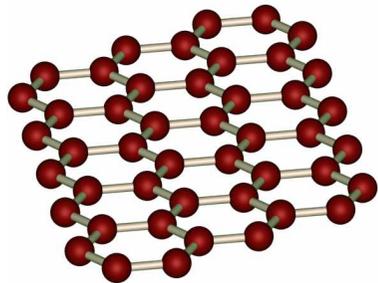
Différencier le monoplan du biplan de graphène par la simple analyse des IQ.

Prouve que la structure électronique du graphène épitaxié sur SiC(0001) est en bon accord avec celle d'un plan de graphène idéal dopé n.

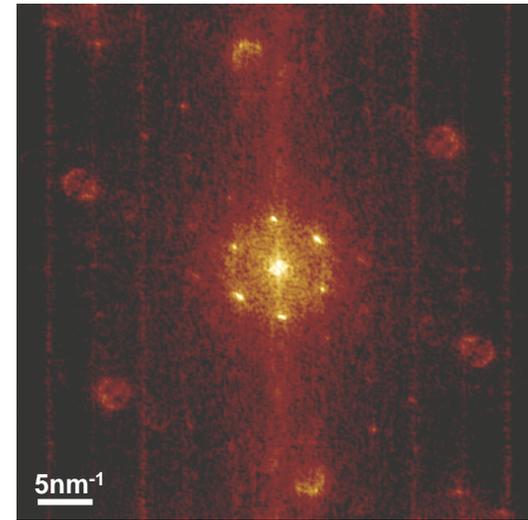
I. Brihuega *et al.*, PRL 101, 206802 (2008)

T-matrix calculation of the STS-Fourier Transform

Monolayer

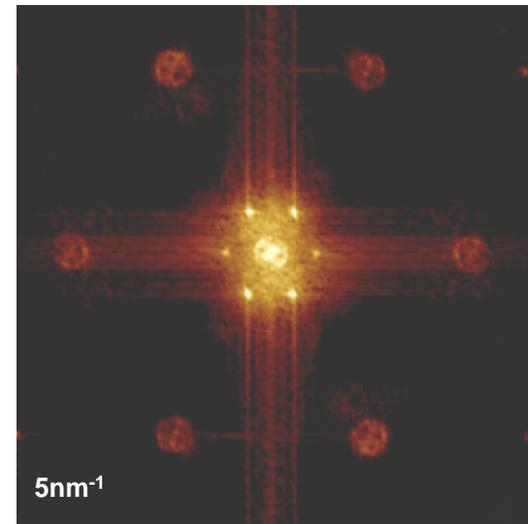
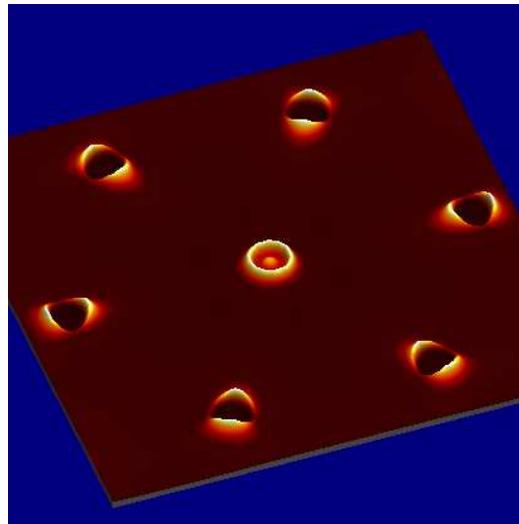
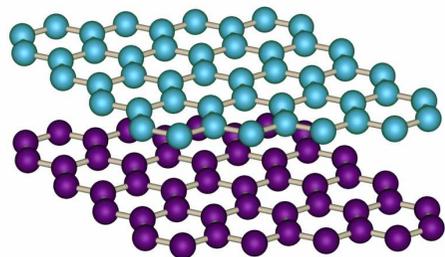


Theory



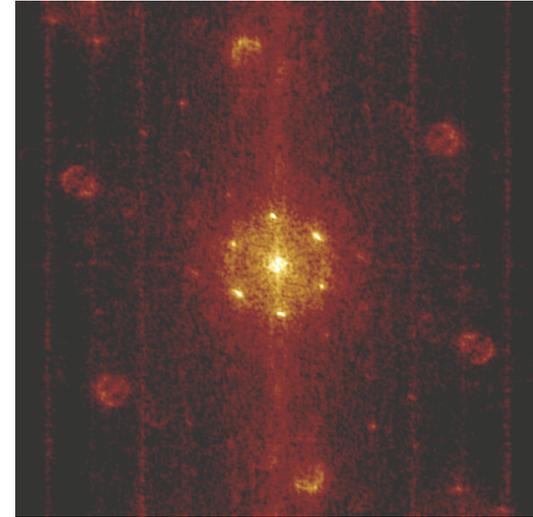
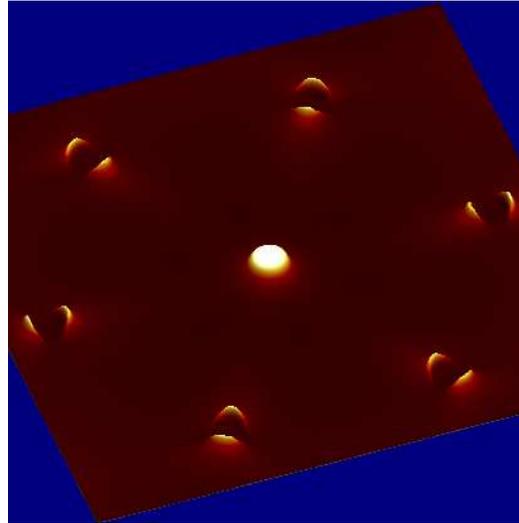
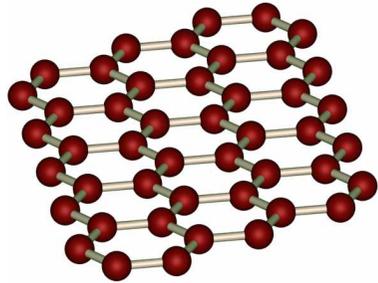
Experiment

Bilayer

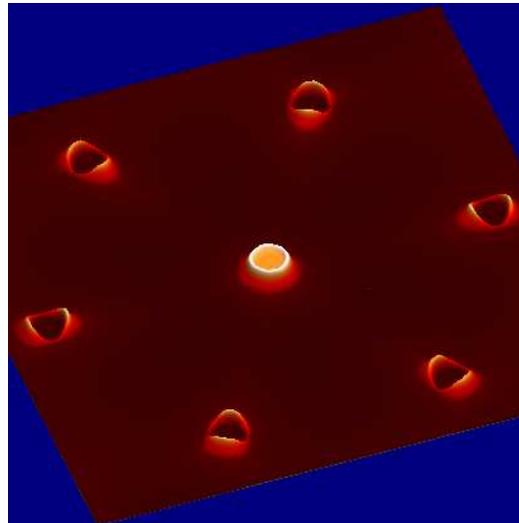
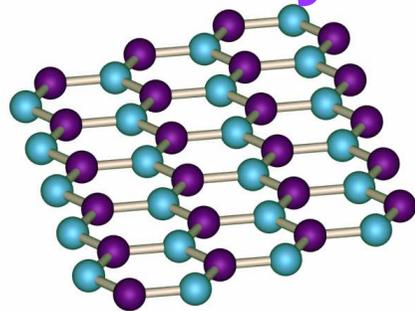


Using Chirality to check Graphene sublattice symmetry

Symmetric Monolayer



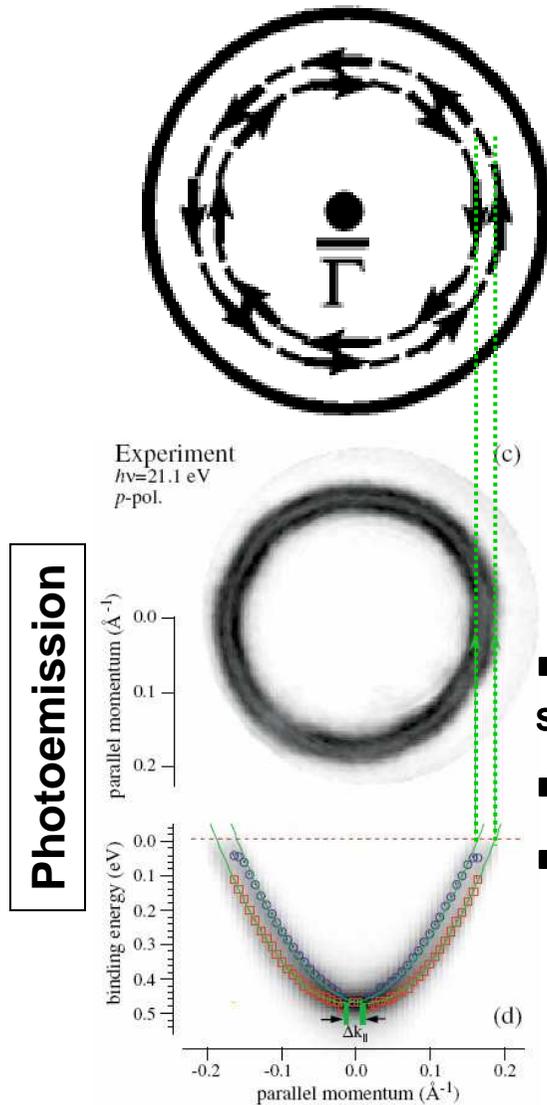
Asymmetric Monolayer



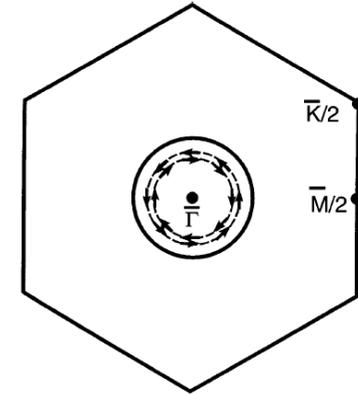
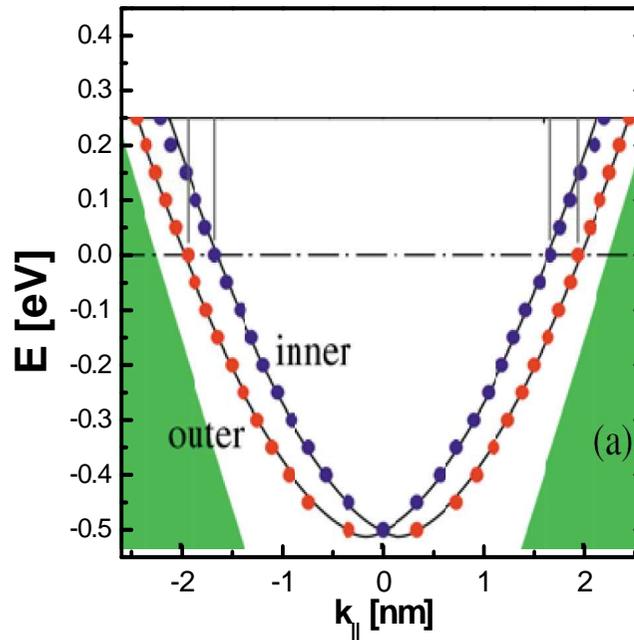
$$E_A - E_B = 0.25 \text{ eV}$$

I. Brihuega *et al.*, PRL **101**, 206802 (2008)

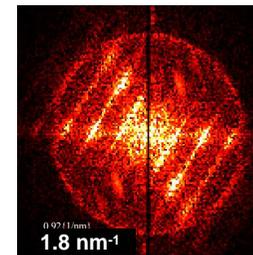
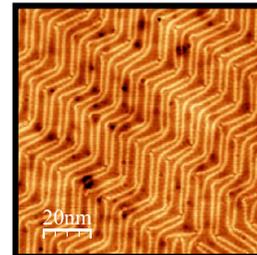
Surface de Fermi de Au(111)



Photoemission



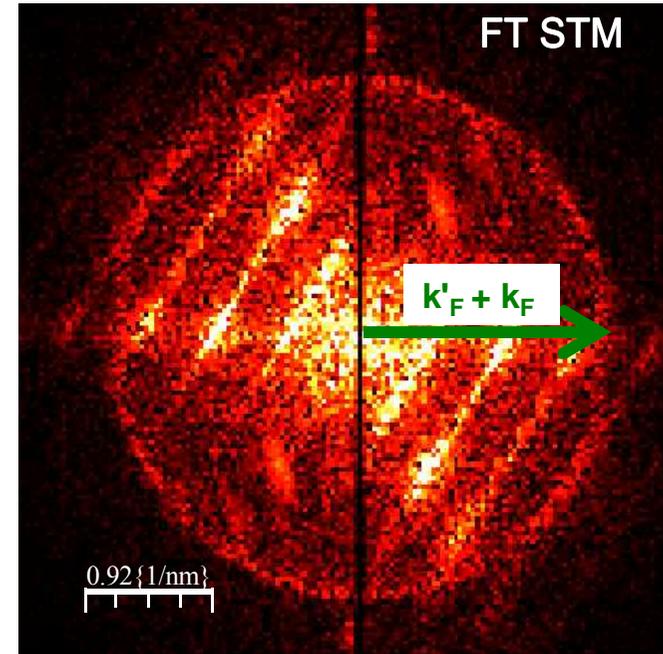
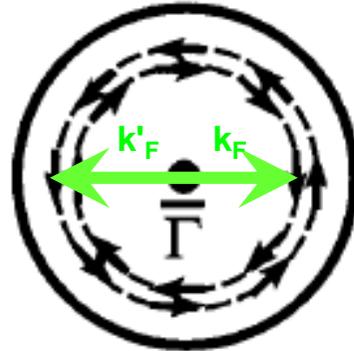
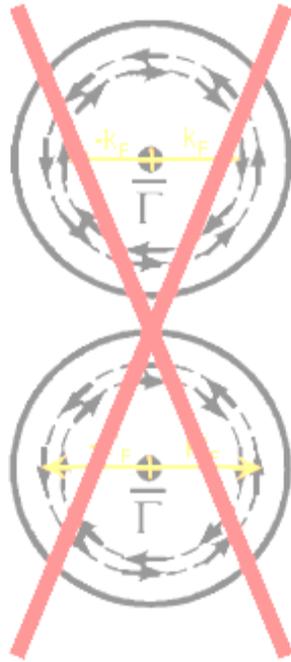
- « Spin splitting » de l'état de surface causé par un fort couplage spin-orbite
- 2 bandes paraboliques et deux cercles SF sondés en ARPES
- 1 seul cercle sur les images FT-STM :



J. Henk *et al* J. Phys.: Condens. Matter 16, 7581 (2004)

Courtesy I. Brihuega, K. Kern, MPI Stuttgart
Also Petersen *et al*, Surface Science 443, 154 (1999)

Spin et Interférences Quantiques



Diffusion avec conservation du spin

Atténuation des IQ associées à la retrodiffusion dans une seule poche

IQ : diffusion entre des états électroniques de même spin

→ Modulation de LDOS de vecteur d'onde $k_F + k'_F$

Théorie (liaisons fortes): Petersen & Hedegaard, Surface Science 459, 49 (2000)

Même effet sur Bi(110) Pascual et al., PRL 93, 196802 (2004)

QED - Paradoxe de Klein

Paradoxe de Klein :

M.I. Katsnelson et al., *Nature Phys.* **2**, 620 (2006)

Electron pénètre une barrière de potentiel $V_0 > mc^2$ (m masse de l'e-). Probabilité de transmission T dépend faiblement de la hauteur de la barrière et tend vers 1 pour les très grandes barrières (paradoxe en regard décroissance expo de T dans le cas non relativiste).

Explication en QED : grande barrière = répulsive pour e-, attractive pour positrons : états e+ dans la barrière aligné en énergie avec les e- de l'extérieur (conjugaison de charge).

Graphene :

Analogie avec les électrons-trous, conservation du pseudo-spin

$\lambda f > \text{bord} > \text{maille}$. D'après les auteurs : compatible avec des expériences

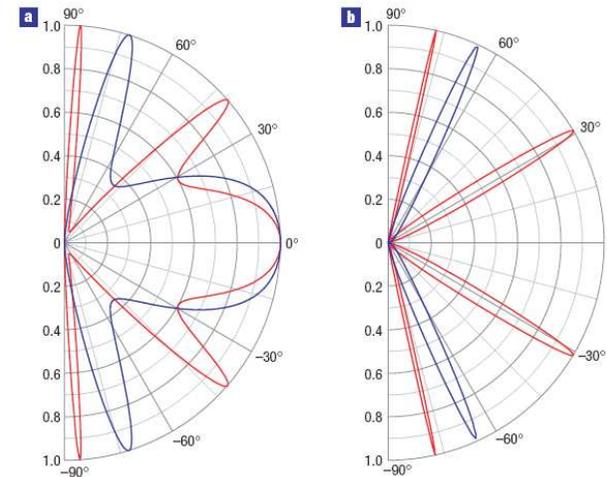
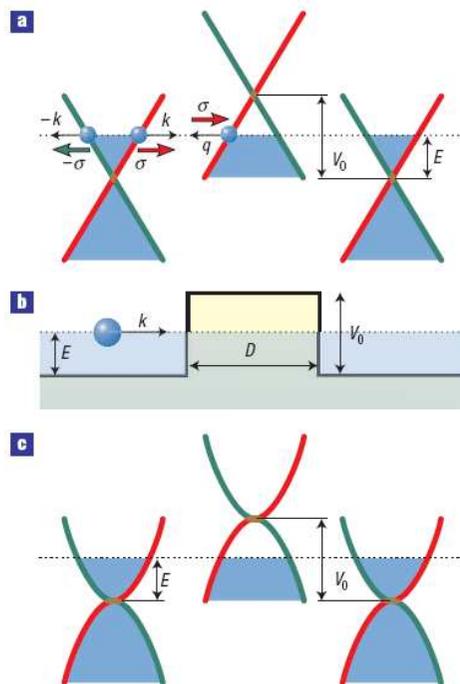


Figure 2 Klein-like quantum tunnelling in graphene systems. **a,b**, Transmission probability T through a 100-nm-wide barrier as a function of the incident angle for single- (a) and bi-layer (b) graphene. The electron concentration n outside the barrier is chosen as $0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ for all cases. Inside the barrier, hole concentrations p are 1×10^{12} and $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ for red and blue curves, respectively (such concentrations are most typical in experiments with graphene). This corresponds to the Fermi energy E of incident electrons ≈ 80 and 17 meV for single- and bi-layer graphene, respectively, and $\lambda \approx 50 \text{ nm}$. The barrier heights V_0 are (a) 200 and (b) 50 meV (red curves) and (a) 285 and (b) 100 meV (blue curves).

QED - Zitterbewegung

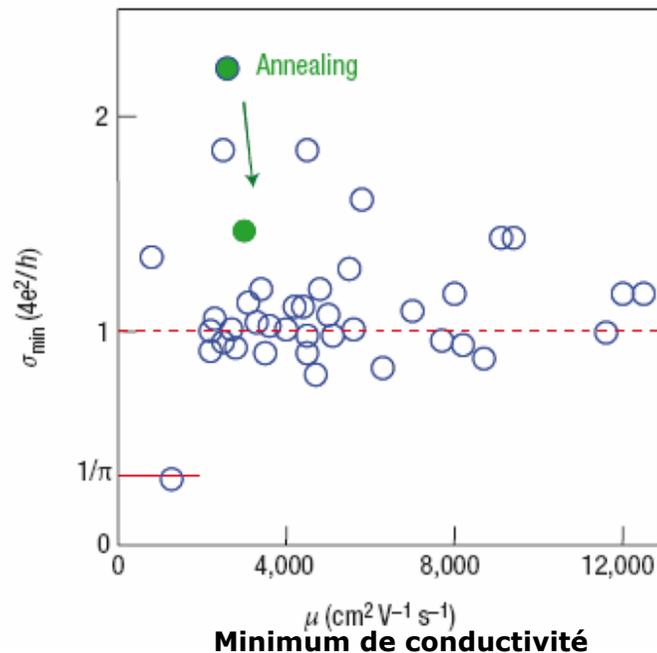
Zitterbewegung ou mouvement de tremblement (electron-trou, paradoxe de Klein, opérateur position) :

M.I. Katsnelson et al., *Solide State Comm.* **143**, 3 (2007) :

« a phenomenon connected with the uncertainty of the position of relativistic quantum particles due to the inevitable creation of particule-antiparticule pairs at the position measurements »

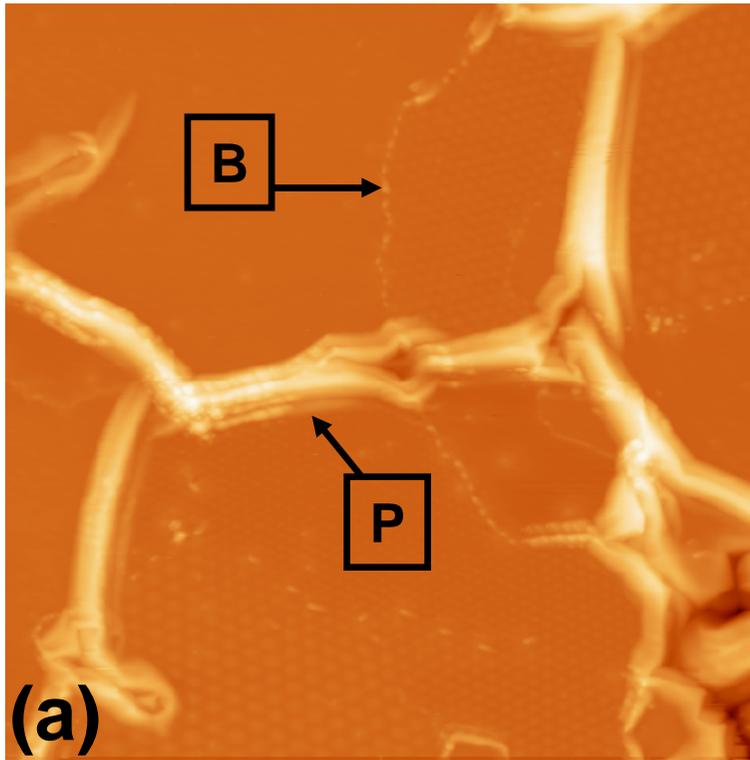
A.K. Geim et al., *Nature Mat.* **6**, 183 (2007) :

« Zitterbewegung is a term describing jittery movements of a relativistic electron due to interference between parts of its wavepacket belonging to positive (electron) and negative (positron) energy states. These quasirandom movements can be responsible for the finite conductivity $\sim e^2/h$ of ballistic devices.

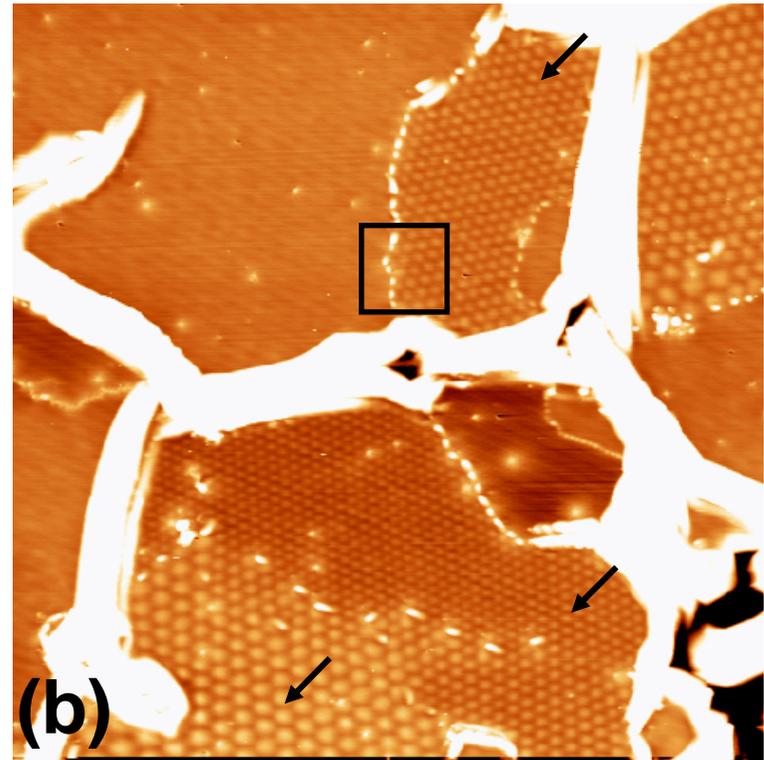


A.K. Geim et al., *Nature Mat.* **6**, 183 (2007)

Morphologie



150x150 nm², +1V, T = 300K



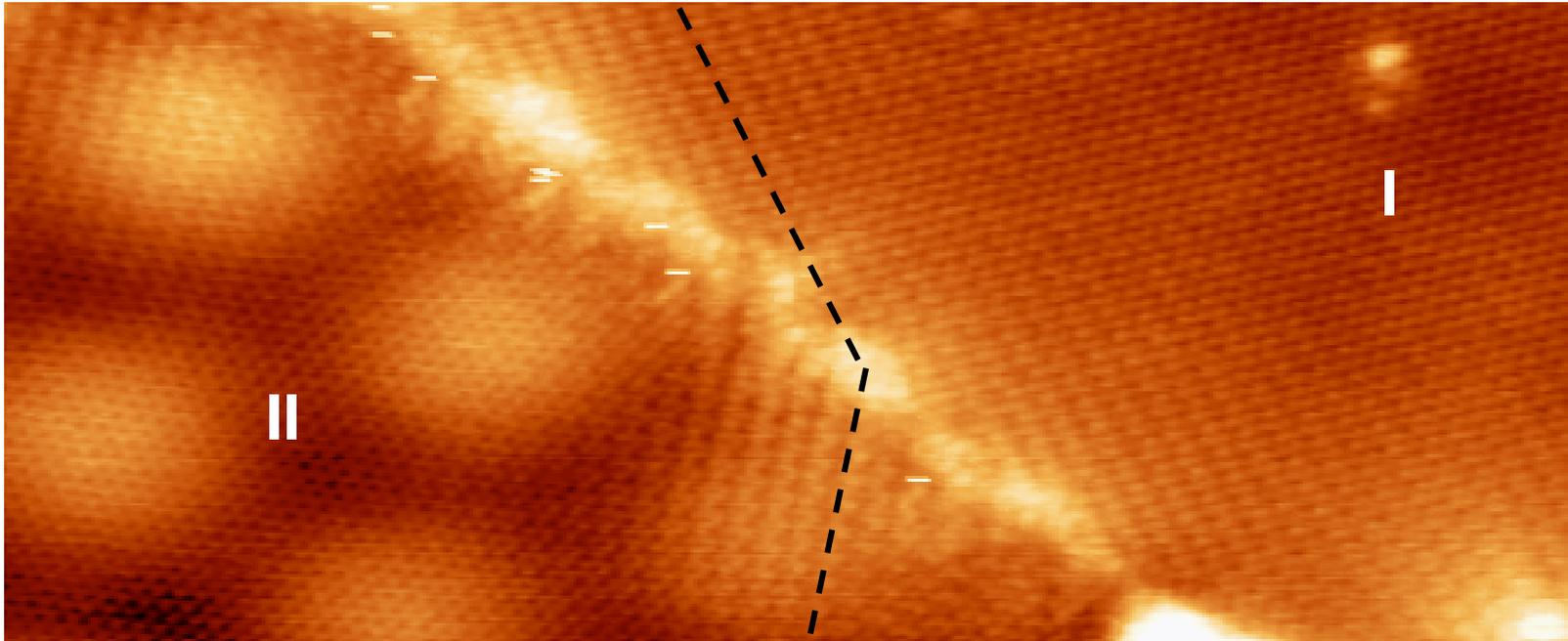
Même image avec contraste saturé

Terrasse atomique sur laquelle on distingue :

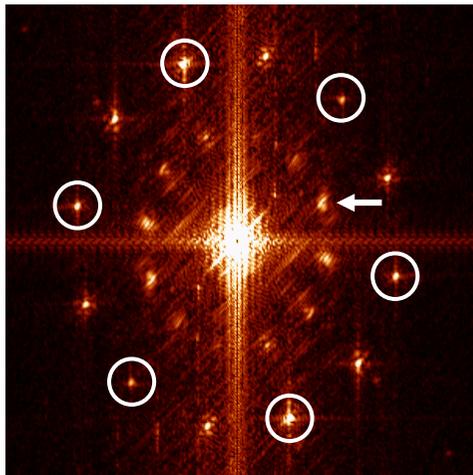
- « plis » (P) (hauteur $\sim 0.5 - 2$ nm)
 - « bosses » (B) (hauteur $\sim 0.2 - 0.4$ nm)
- } un ou plusieurs plans de C courbés à la surface

- **Superstructures de symétrie hexagonale** (période : qqs nm, corrugation $0.2 - 0.4 \text{ \AA}$)

Grande rotation



22x7 nm², Sample bias: 0.1V, I_t: 1 nA



- large rotation angle ($\theta \sim 27^\circ$)
- R3 superstructures induced by electron scattering at the boundary (π -like states)

Simulation of STM images

Simulation of STM images for rotated layers (large angle).

S. Latil et al., PRB 76, 201402(R) 2007.

Band structure for rotated trilayers:
massless fermions

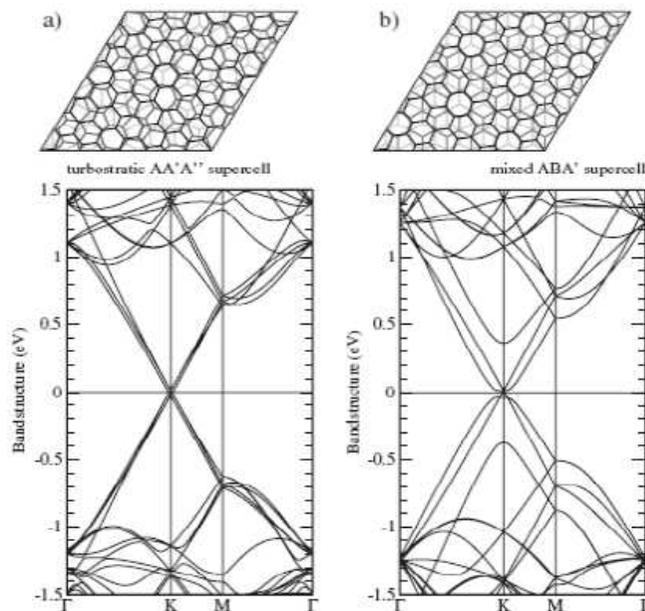
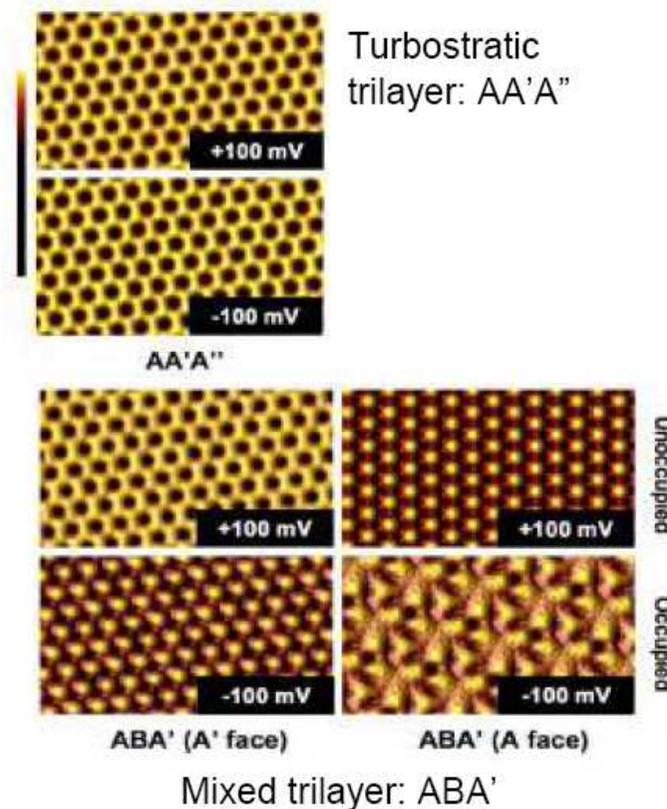


FIG. 3. Representation of the supercells and the corresponding electronic band structure for trilayer graphites. The turbostratic AA'A'' system (43.57° and 38.21° misorientation angles) is shown in (a), and the mixed ABA' structure is shown in (b).

Rotation θ : 16.3 and 21.8°, $D=0.86$ nm.

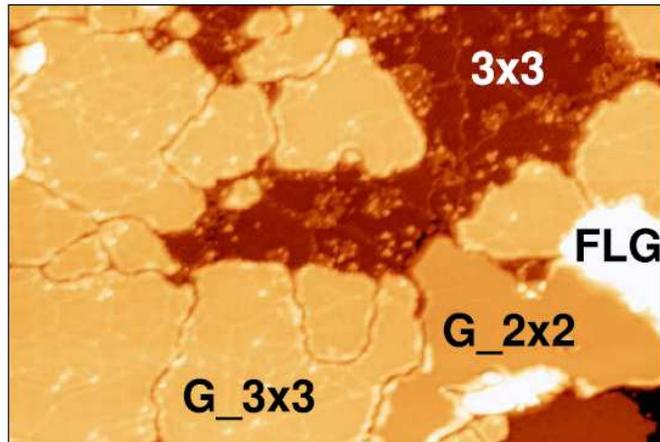
Computed STM images:
graphene-like contrast.



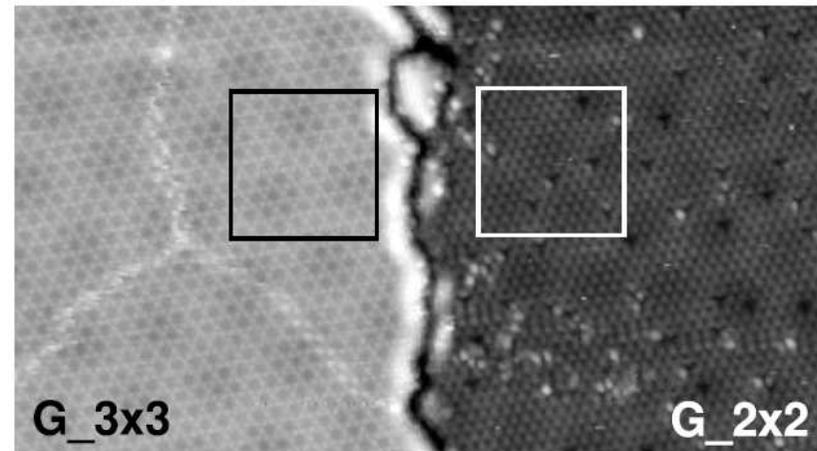
Dependence on stacking sequence and polarity beyond 2 ML!

Interface graphène/SiC(000-1)

F. Hiebel, P. Mallet, F. Varchon,, L. Magaud, J-Y. Veullen, *PRB.* **78**, 153412 (2008)



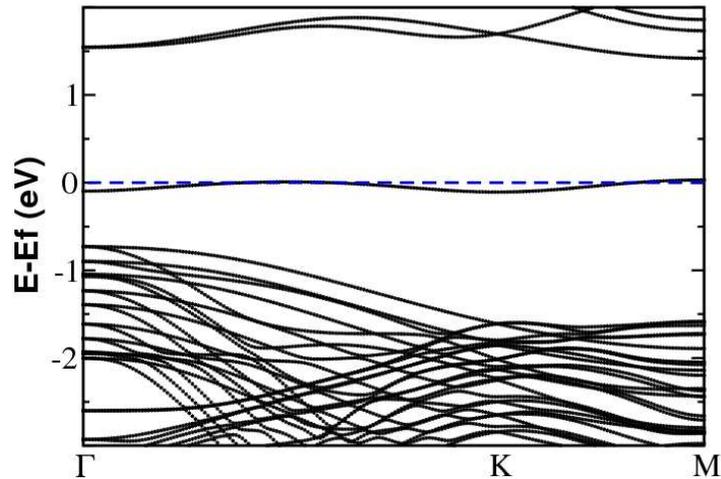
120 x 80 nm², +2.5 V



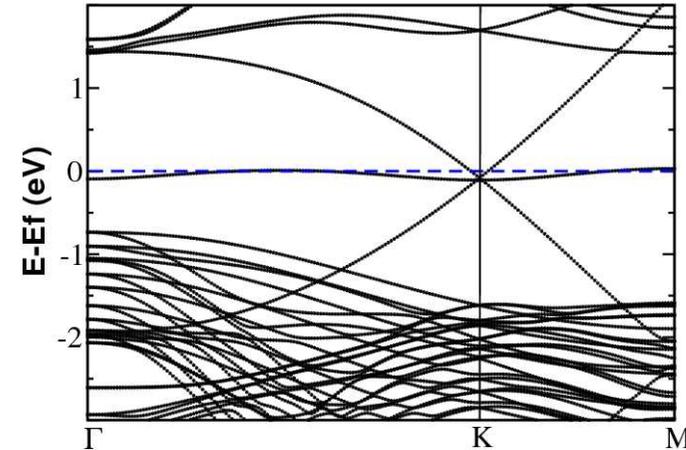
40 x 22 nm², -2.0 V

Dispersion curves for C-layers on SiC (C-terminated)

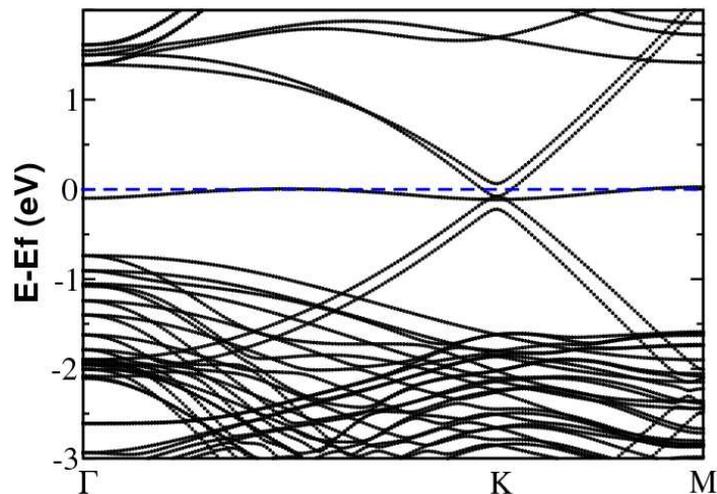
1 C layer



2 C layers



3 C layers



1 C layer :

- no linear dispersion
- not graphene = buffer layer

2 C layers :

- linear dispersion = graphene
- no doping = neutral graphene

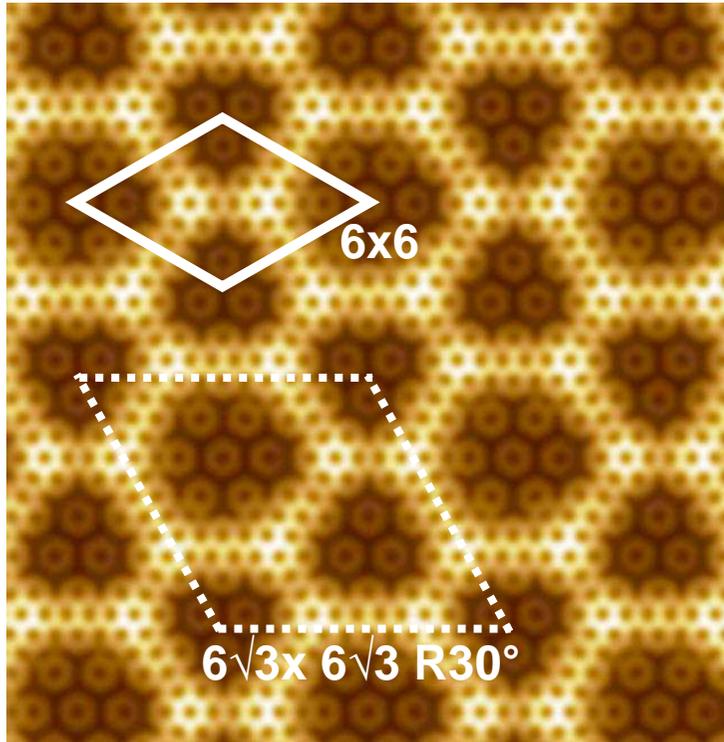
3 C layers :

- similar to the dispersion of a graphene bilayer.
- no doping

For all: state with a small dispersion at E_{fermi} :
Dangling bond (DB) state of the lonely atom

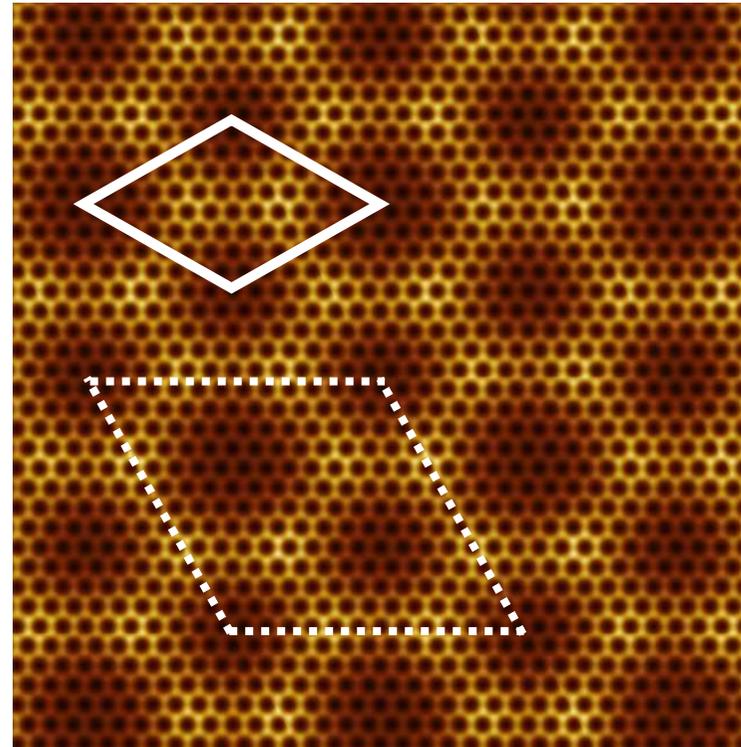
6x6 reconstruction on SiC (-C)

Ab initio (buffer)



8x8 nm², charge density

Ab initio (graphene)



8x8 nm², charge density

- **Apparent 6X6 reconstruction**
- **C – C bonds are formed between the “buffer” and the SiC**
- **Lattice distortions induced in the layers are stronger than on the Si-terminated case**
- **6√3 x 6√3 R30° geometry is not stable?**
- **Actually the C-terminated interface geometry is not precisely know**

Calculs *ab initio*

Résolution de l'équation de Schrödinger pour un système de N atomes en interaction sans paramètre ajustable.

Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :

- L'énergie totale d'un système de N_e électrons peut s'exprimer comme une fonctionnelle de l'observable densité électronique ρ_e .
- L'énergie est minimisée par la densité de l'état fondamental.

P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev., **136**, B864 (1964)

Équations de Kohn-Sham:

- Système fictif de N électrons sans interaction (états de Kohn-Sham) de même densité électronique que les N_e électrons du système réel.
- Résolution de N_e équations de Schrodinger « monoélectronique ».
- 3 équations interdépendantes qui doivent être résolues de manière auto-cohérente afin de trouver la densité de l'état fondamental.

- Procédure itérative
- code de calcul

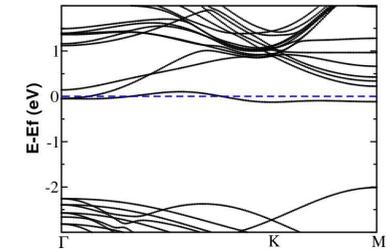
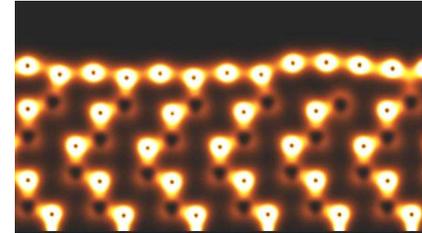
W. Kohn, L. Sham, Phys. Rev., **140**, A1133 (1965)

Graphène épitaxié sur SiC face Si

Résultats numériques :

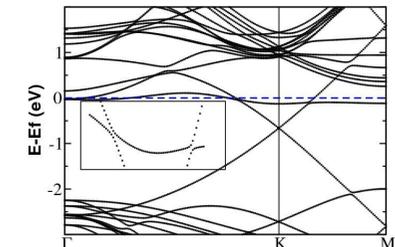
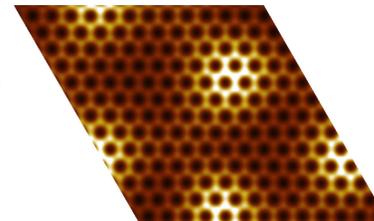
A) 1 plan sur SiC(0001) : plan tampon

- forte interaction avec le substrat (nanostructuration, liaisons covalentes)
- absence de dispersion linéaire
- il permet aux autres plans qui le recouvrent d'avoir la structure électronique de type monoplan/multiplan de graphène



B) 2 plans sur SiC(0001) : plan de graphène

- faiblement modulé (il suit la morphologie du plan tampon)
- cône de Dirac : graphène pratiquement découplé
- dopé en électrons par transfert de charges
- états peu dispersifs à E_F (liaisons pendantes de l'interface)



Graphène épitaxié sur SiC(0001)

Publications :

A) Calculs DFT, géométrie simplifiée d'interface, plan tampon, plan de graphène dopé :

F. Varchon *et al.*, PRL **99**, 126805 (2007)

A. Mattausch and O. Pankratov, PRL **99**, 076802 (2007)

B) Calculs DFT, géométrie non simplifiée d'interface, nanostructuration du plan tampon, modulation du plan de graphène :

F. Varchon *et al.*, PRB **77**, 235412 (2008)

S. Kim *et al.*, PRL **100**, 176802 (2008)

C) Etude STM, identification du monoplan et du biplan de graphène :

P. Mallet, F. Varchon *et al.*, PRB **76**, 041403(R) (2007)

G.M. Rutter *et al.*, Science **317**, 219-222 (2007)

V.W Brar *et al.*, APL **91**, 122102 (2007)

P. Lauffer *et al.*, PRB **77**, 155426 (2008)

A) Etude STM, identification d'effets liés à la chiralité des électrons :

I. Brihuega *et al.*, PRL **101**, 206802 (2008)

Graphène sur SiC(000-1)

Publications :

A) Calculs DFT, découplage par rotation :

J. Hass, F. Varchon *et al.*, PRL **100**, 125504 (2008)

J. M. B. Lopes dos Santos *et al.*, PRL **99**, 256802 (2007)

S. Latil *et al.*, PRB **76**, 201402 (2007)

S. Shallcross *et al.*, PRL **101**, 056803 (2008)

B. Etude STM, figures de moiré :

F.Varchon *et al.*, PRB **77**, 165415 (2008)

soutenance