

## SEMINAIRE

Vendredi 18 Janvier 2008 à 11h00

Bâtiment 466, salle 111 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette

### Propriétés électroniques de films 2D de graphite (calcul *ab initio*)

**S. LATIL**

*Groupe LMSIN, Service de Physique & Chimie des Surfaces & Interfaces, CEA-Saclay*

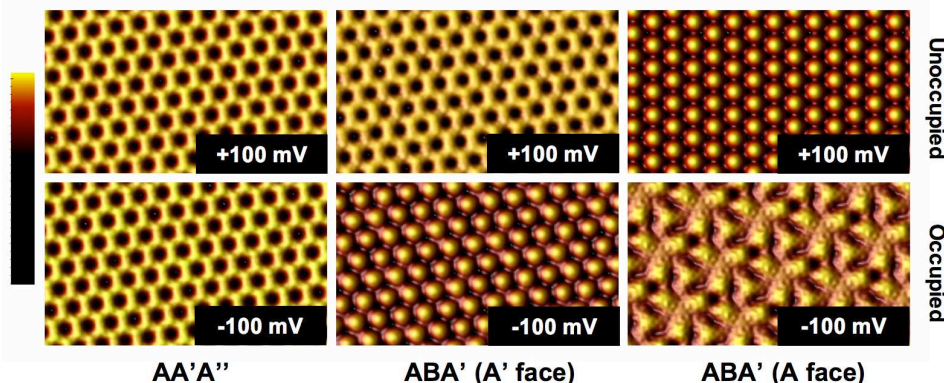
#### Résumé:

Les propriétés électroniques des Graphites (bulk) ont été étudiées depuis plus de 60 ans. Dans ces matériaux lamellaires, la cohabitation de plusieurs porteurs (électrons et trous) est rendue possible par la forme caractéristique (et compliquée) des bandes autour du niveau de Fermi ; les porteurs se partagent des territoires situés sur les bords de la surface de Fermi, pour des valeurs de  $k_x$  et  $k_y$  similaires, mais pour différentes valeurs de  $k_z$ .

Depuis quelques années, des films minces ne contenant que quelques couches graphitiques (Few Layer Graphites ou FLGs) ont été synthétisés. Des mesures de coefficient de Hall ont permis de déterminer la nature des porteurs de charge. Ainsi, il a été montré que la coexistence électron/trou y était conservée, et ce malgré le fort confinement le long de l'axe  $z$ . Comment des bandes électroniques (nécessairement 2D) peuvent-elles coexister dans ces systèmes où  $k_z$  n'est pas défini ?

De plus, très récemment, des films ne contenant qu'une seule couche atomique ont été obtenus (single layer graphene, ou SLG). Ces objets sont caractérisés par une dispersion électronique linéaire au niveau de Fermi (comme le prévoyait la théorie dès les années 1940), leur confèrent des propriétés toutes particulières : vitesse de groupe colossale, niveaux de Landau évoluant en  $B^{1/2}$  (au lieu d'être séparés proportionnellement au champ), effet Hall quantique anormal, etc. Ces propriétés sont apparemment réservées aux films monocouches, car eux seuls présentent cette fameuse dispersion linéaire. Toutefois, que se passe-t-il pour des empilements désordonnés (turbostratiques) de plans de graphite ?

Dans ce séminaire, nous présenterons des résultats de calculs *ab initio* de graphites bulk et de FLGs, les structures étudiées allant de 1 à 5 couches. Nous montrerons que suivant la géométrie de l'empilement, les FLGs présentent ou non, une coexistence d'électrons et de trous. De plus, dans le cas d'un empilement turbostratique, nous montrons que la structure de bande prédite est linéaire, rompant la règle usuelle "bande linéaire = 1 seule couche". Enfin, nous discuterons de l'implication de ces résultats sur l'interprétation de signatures expérimentales, images STM et spectrométrie Raman.



**\* SERA PRECEDE D'UNE PAUSE-CAFE A PARTIR DE 10H30**