# Mise en perspective didactique d'un dossier de recherche

# Quentin Berrahal

Concours externe spécial de l'agrégation de physique-chimie option physique 2020

# 1 Parcours universitaire et scientifique

#### Cursus

**2011–2012** : 1<sup>re</sup> et 2<sup>e</sup> années de licence de physique, *Université Paris-Diderot*.

2012–2016 : Diplôme de l'ENS (L3-M2 recherche), École normale supérieure rue d'Ulm.

2016–2019 : Doctorat en physique sous la direction de Yann Girard et Jérôme Lagoute : « Étude par STM de nanostructures métalliques dans le graphène : croissance, propriétés et défauts induits ». Thèse soutenue le 15/11/19. Laboratoire matériaux et phénomènes quantiques, Université Paris-Diderot.

#### Expériences

#### Stages

**Février**—**Juin 2014 :** Réalisation de guides d'ondes supraconducteurs et de SQUID pour l'électronique quantique, *Université de Bâle, Suisse*, Christian Schönenberger.

Janvier–Mars 2015 : Étude de l'électromagnon dans le composé multiferroïque CuO par spectrocopie Raman, Équipe SQUAP, MPQ, Université Paris-Diderot, Maximilien Cazayous.

**Février**—**Juin 2016**: Étude de l'effet de défauts non magnétiques sur la mono-couche de plomb par microscopie et spectroscopie tunnel, institut des nanosciences de Paris, Université Pierre et Marie Curie, Tristan Cren et Christophe Brun.

#### Enseignement

2016–2018 : Travaux dirigés de physique en PACES, Université Paris Descartes.

9-10 juillet 2019 : Participation au colloque « Enseigner la Physique à l'Université », UPEM.

#### Médiation scientifique et valorisation de la recherche

2018 : Présentation d'une expérience en direct : « 1 Chercheur, 1 Manip », Palais de la découverte.

2019 : Rencontre « Ma Thèse en 5 minutes », Bibliothèque publique d'information.

2019 : Atelier BD-Sciences, Association Stimuli, Lycée Émilie du Châtelet, Serris.

# 2 Travaux de recherche

# 2.1 Contexte : le graphène et l'électronique 2D

Isolé et caractérisé pour la première fois en 2004 par Andre Geim et Konstantin Novoselov<sup>1</sup>, le graphène est une couche monoatomique d'atomes de carbone arrangés en nids d'abeille. Leur découverte, qui leur valut l'attribution du prix Nobel de physique en 2010, met un terme à plus d'un demi-siècle de débats portant sur la stabilité d'un cristal bidimensionnel. L'intérêt général suscité par un tel matériau tient au fait que la relation de dispersion des électrons du graphène au niveau de Fermi est de la forme  $E = \hbar v_F k$ , où  $v_F$  est la vitesse de Fermi, alors qu'elle est le plus souvent de la forme  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm eff}}$  pour les électrons dans les solides, où  $m_{\rm eff}$  est une masse effective dépendant du matériau. La relation de dispersion linéaire du graphène se rapproche ainsi de celle d'un photon  $(E = \hbar ck)$  avec  $v_F \simeq c/300$ , ce qui signifie que les électrons du graphène se comportent près du niveau de Fermi comme des particules relativistes sans masse. Il en découle une mobilité exceptionnelle (iusqu'à  $200.000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  contre 30 pour le cuivre et 1400 pour le silicium) et une densité d'états électroniques (nombre d'états électroniques disponibles à une énergie donnée) au niveau de Fermi nulle. Une telle structure, dite en « cônes de Dirac », est très résistante aux contraintes mécaniques et à la présence de défauts. On nomme point de Dirac l'énergie où la densité d'états est nulle. L'ajout d'une deuxième couche de graphène suffit à transformer la relation de dispersion linéaire en relation quadratique. Cependant, si l'angle entre les deux couches de graphène n'est pas nul, celles-ci se découplent et se comportent à nouveau comme deux couches de graphène isolées.

Le graphène a trouvé sa place dans le monde de la recherche et de l'industrie grâce à de nombreuses usages fondamentaux et appliqués. Il a notamment fait l'objet en 2009 d'un programme européen de dix ans, le *Graphene Flagship*, doté d'un milliard d'euros. Une partie de son succès tient aux applications possibles du graphène en électronique. En cela, il prend place dans le domaine de l'électronique bidimensionnelle et plus particulièrement l'électronique organique ou moléculaire. La bidimensionnalité implique un encombrement réduit qui est évidemment très intéressant. L'aspect organique, quant à lui, pourrait permettre, grâce à des substrats adaptés, de construire des circuits flexibles ce qui est impossible avec des semi-conducteurs inorganiques comme le silicium ou l'arséniure de gallium, trop rigides. Toutefois, les propriétés du graphène non altéré ne sont pas nécessairement celles utiles en électronique. Pour faire des transistors, il faut une bande d'énergie interdite (ou gap) ce dont le graphène est dépourvu. Dans d'autres situations, il peut être nécessaire de contrôler le niveau de Fermi. Ces deux exemples montrent la nécessité d'étudier les altérations du graphène pour faire émerger de nouvelles propriétés. Mon travail de thèse s'inscrit dans cette perspective. Je présenterai ici trois résultats tirés de mes recherches.

### 2.2 Enjeux

Si, en fin de compte, on s'intéresse aux propriétés globales d'un échantillon, il est utile de les envisager de manière locale pour en dégager une compréhension plus profonde. Les techniques de caractérisation que j'ai utilisées pour cela sont la microscopie et la spectroscopie tunnel. Celles-ci permettent d'obtenir des images avec une résolution sub-atomique et de sonder les propriétés électroniques locales d'un matériau avec la même précision. Leur mise en œuvre et la nécessité de

<sup>1.</sup> K. S. Novoselov et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. Science (2004).

s'affranchir des contaminations de l'air, particulièrement importantes en physique des surfaces, nous contraignent à travailler sous vide.

Sous vide extrême (UHV pour *Ultra High Vacuum*), c'est-à-dire sous des pressions de l'ordre de  $10^{-10}$  mbar, les espèces résiduelles ont des libres parcours moyens avoisinant la dizaine de kilomètres. Outre le microscope, on trouve dans les chambres UHV des outils de préparation de surfaces, notamment de synthèse. Dans le but d'obtenir le graphène le moins contaminé possible, j'ai choisi une méthode de synthèse sous vide (synthèse et caractérisation  $in \ situ$ ) qui utilise le carbure de silicium (SiC). Il s'est agi en premier lieu de synthétiser du graphène de qualité à la surface du SiC avant de l'altérer, d'abord par évaporation d'or et puis en remplaçant certains des atomes de carbone par des atomes d'azote.

# 2.3 Techniques expérimentales

#### 2.3.1 Microscopie et spectroscopie tunnel

La microscopie à effet tunnel (MET – qui désigne également l'outil – ou STM pour Scanning Tunneling Microscope) est un outil puissant qui permet, en utilisant une pointe que l'on suppose atomiquement fine à son extrémité, d'étudier les corrugations et les propriétés électroniques locales à l'échelle du nanomètre. Elle a été développée en 1982 par Gerd Binnig et Heinrich Rohrer chez IBM Zürich et leur a valu le prix Nobel de physique en 1986. Je vais détailler ici les principes théoriques régissant son fonctionnement.

Le MET est fondé sur le principe de l'effet tunnel. Ce dernier est une conséquence du caractère ondulatoire de la matière et permet à une particule d'énergie cinétique E (ici, un électron) de passer à travers une barrière d'énergie (rectangulaire dans la Fig.1.a) de hauteur  $\phi > E$  et de largeur z. Ce phénomène, qui résulte directement de l'équation de Schrödinger pour une particule massive dans un potentiel, donne, pour  $z \gg \ell_t = \sqrt{\frac{\hbar^2}{8m(\phi - E)}}$ , l'autre longueur caractéristique du problème, une probabilité de transmission  $T(z) \propto e^{-z/\ell_t}$ .

En MET, la géométrie est celle d'une pointe en face d'une surface (voir Fig.1.b), la particule est un électron et la barrière d'énergie est le travail de sortie des conducteurs dont sont faites la pointe et la surface. Pour un travail de sortie de 5 eV  $^2$ , commun dans les métaux, et un électron au niveau de Fermi, on a  $\ell_t \simeq 0.436$  Å  $^3$ . Une variation de la largeur de la barrière (la distance pointe-surface) de 1 Å provoque alors une variation de la probabilité de transmission d'un facteur  $\simeq 10$ . Le MET est donc un outil très sensible aux détails du relief d'une surface. Nous comprenons bien ainsi son grand intérêt lorsqu'il s'agit de sonder la matière à l'échelle atomique.

Pour la spectroscopie tunnel, qui exploite la caractéristique intensité-tension de la jonction tunnel, il convient d'utiliser l'approche plus élaborée développée par Bardeen en 1961 pour des jonctions tunnel planes NIS (une couche isolante séparant un métal à gauche d'un matériau supraconducteur à droite). Celle-ci se fonde sur l'expression perturbative qu'est la règle d'or de Fermi qui permet de calculer le taux de transition (la probabilité de transition par unité de temps) au travers de la jonction.

Cette description globale est rendue locale (ce qui est plus judicieux pour la MET) par Tersoff & Hamman en 1985. En se plaçant à température nulle ou très basse, c'est-à-dire  $k_BT \ll V \times e \ll \phi$  avec

<sup>2.</sup> Électronvolt : 1 eV  $\simeq 1,602 \times 10^{-19}$  J.

<sup>3.</sup> Ångström :  $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ .

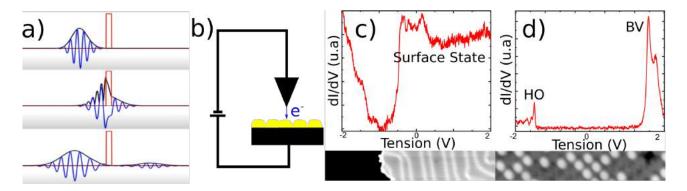


FIGURE 1 – (a) Évolution d'un paquet d'onde gaussien à travers une barrière par effet tunnel. (b) Schéma de fonctionnement de la géométrie pointe-surface d'un MET. (c) Spectre et image tunnel d'une surface d'Au(111) présentant un état électronique (état de Schockley) de surface ( $\propto$  constante) apparaissant à -0.5 eV ( $50\times9$  nm<sup>2</sup> U=1 V I=100 pA). (d) Spectre et image tunnel d'un ensemble de molécules de porphyrine de fer (avec des atomes de chlore) sur graphène montrant les orbitales moléculaires HO (haute occupée) et BV (basse vacante) de la molécule.

V la tension dans la jonction, on obtient, pour une distance pointe-surface donnée et une position  $\overrightarrow{r}$  de la pointe :

$$\frac{dI}{dV}(\overrightarrow{r}, V) \propto \rho_s(\overrightarrow{r}, E_F + eV) \tag{1}$$

Cette expression valable moyennant quelques approximations supplémentaires nous donne donc que la conductance différentielle  $\frac{dI}{dV}$  à une tension V est proportionnelle à la densité d'états électronique de la surface  $\rho_s$  à l'énergie  $E_F + eV$  au point  $\overrightarrow{r'}$  de la surface, appelée également LDOS pour Local Density of States. Ceci fait de la spectroscopie tunnel un outil extrêmement performant pour l'étude de phénomènes localisés et non localisés comme les orbitales électroniques d'une ou plusieurs molécules ou l'état de surface d'un métal (Fig.1.(c-d)).

#### 2.3.2 Mise en œuvre expérimentale de la MET

En pratique, l'acquisition de cartes topographiques (images) MET nécessite la mise en place d'un dispositif plus élaboré qu'une pointe, une surface et un générateur de tension ou de courant. L'acquisition d'images MET requiert notamment un contrôle précis du mouvement dans le plan x-y. Le maintien d'une distance pointe-surface optimale suppose un contrôle dans la direction z et il faut ajouter à cela une électronique pour commander les mouvements de pointe, les rampes de tension, etc.

Pour acquérir une image topographique, il faut balayer la surface ligne après ligne. La méthode communément utilisée en MET est la microscopie « à courant constant ». Une boucle de rétroaction permet de conserver un courant de consigne constant au cours du balayage. Si la surface est homogène cela signifie que l'on conserve également une distance pointe-surface constante. On peut donc, si on connaît les mouvements en (x, y, z) de la pointe, déterminer le relief de la surface (Fig.2.a). On utilise pour cela des « moteurs » piézo-électriques, matériaux dans lesquels l'application d'une différence de potentiel induit une contrainte (donc un mouvement) du matériau et inversement. Si le moteur piézo-électrique est bien étalonné, il est possible de déplacer ce qui se trouve à son extrémité (ici

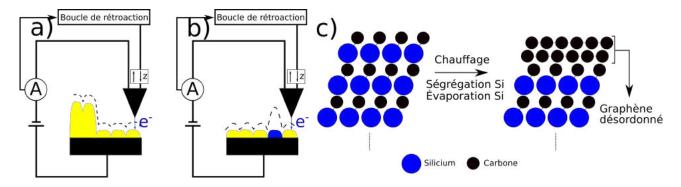


FIGURE 2 – (a) Schéma présentant le mode « courant constant » d'un MET. (b) Si on sonde différentes espèces chimiques ou configurations qui n'ont pas les mêmes I(V), on peut obtenir des images MET non homogènes même sans corrugation géométrique. (c) Processus schématique de synthèse du graphène sur SiC.

la pointe) avec une précision picométrique (Fig.2.a). Remarquons que le MET sonde les densités électroniques et pas exactement les corrugations atomiques. Des matériaux ayant des configurations électroniques différentes mais une corrugation atomique similaire peuvent apparaître à différentes hauteurs (Fig.2.b).

#### 2.3.3 La synthèse du graphène

Le SiC est un matériau semi-conducteur à grand gap (2-3 eV) constitué de bi-couches carbonesilicium empilées de manières très variées (on parle de polytypes). La synthèse du graphène sur SiC s'effectue selon un processus en apparence très simple (voir Fig.2.c) :

- on chauffe le SiC à haute température sous vide;
- le silicium proche de la surface de l'échantillon s'y accumule et s'évapore;
- le carbone restant à la surface se réarrange sous forme de graphène;
- le processus recommence avec les atomes de silicium les plus proches de la surface;

Le graphène sur SiC croît donc de la surface vers le centre de l'échantillon. Le nombre de couches de graphène obtenues est d'autant plus grand que la température et la durée de synthèse sont importantes.

Le SiC est par ailleurs un matériau polaire : si l'on s'intéresse à la surface (001) parallèle aux bi-couches carbone-silicium, on distingue deux surfaces non équivalentes. La première est dite riche en silicium et la seconde riche en carbone. Cette polarité influe sur la croissance du graphène. Ainsi, le graphène qui croît sur la surface riche en silicium possède un fort dopage en électrons et un empilement ABAB qui éloignent son comportement de celui du graphène idéal. De son côté, le graphène qui croît sur la surface riche en carbone présente un désordre rotationnel : deux couches de graphène superposées sont décalées d'un angle non nul a priori aléatoire qui a pour effet de les découpler. Quel que soit son nombre de couches, le système conserve ainsi la structure en cônes de Dirac du graphène et un dopage faible, ce qui explique mon choix d'utiliser ce matériau.

En pratique, la synthèse est complexe à mettre en œuvre et délicate à optimiser. Il existe des traitements de pré-synthèse et des conditions de synthèse qui permettent en principe d'obtenir du graphène avec une densité de défauts minimale. L'étalonnage des durées et des températures de

synthèse est également critique. En bref, deux points sont importants. Il faut tout d'abord éliminer l'oxygène présent à la surface du SiC avant la synthèse, autrement les domaines de graphène seront de très petite taille (< 5 nm de large). On utilise pour cela un chauffage et une évaporation de silicium. Il faut ensuite faire la synthèse à une température intermédiaire voisine de 1300°C. Si elle est trop faible, le graphène sera trop fin et pas assez découplé du substrat. Si elle est trop élevée, la croissance deviendra anarchique.

J'ai travaillé avec des wafers (plaques fines) de SiC monocristallins. Pour les chauffer, j'ai utilisé un porte-échantillon permettant de faire circuler un courant dans l'échantillon et de le chauffer par effet Joule. Le SiC est préalablement dopé pour réduire sa résistance (de l'ordre du  $M\Omega$ ). Pour caractériser globalement les échantillons au cours de la synthèse, j'ai également utilisé la diffraction d'électrons lents et la spectroscopie Auger qui donnent respectivement des informations sur la structure et la composition chimique de la surface.

#### 2.4 Résultats

J'ai essentiellement étudié l'effet d'un dépôt métallique sur la croissance de graphène sur SiC. J'ai également étudié les propriétés d'atomes d'azote en substitution dans le graphène. Je présente ici une étude de défauts structuraux induits par un dépôt d'or avant la synthèse et un triple défaut azote réalisé après la synthèse.

## 2.4.1 Le graphène inaltéré

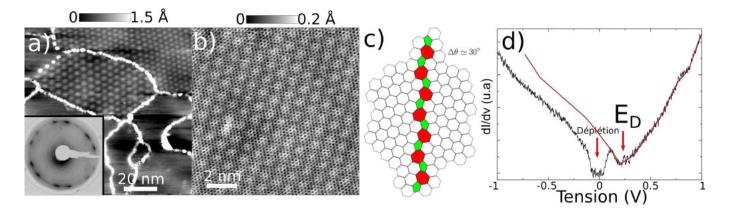


FIGURE 3 – (a) Image MET de plusieurs domaines de graphène multicouche sur lesquels on observe des moirés et des joints de grains (200×200 nm² U=-1 V I=50 pA) Insert : Cliché de diffraction du graphène montrant le désordre rotationnel (arcs de cercles). (b) Image de résolution atomique sur un moiré de graphène (11×11 nm² U=-0.5 V I=500 pA). (c) Modèle atomique d'un joint de grains avec un  $\Delta\theta \simeq 30^\circ$ . (d) Spectre tunnel typique du graphène (noir) et modèle de spectre sans la déplétion due aux effets inélastiques (rouge).

Je vais tout d'abord présenter les propriétés du graphène dans le cas d'une synthèse ordinaire. Après une synthèse à 1300°C, l'épaisseur du graphène se situe entre deux et une vingtaine de couches atomiques (analyse chimique). On observe des domaines cristallographiques grands de quelques centaines de nm² séparés par des joints de grains (voir Fig.3.(a-b)). Un joint de grains est une paroi de domaine cristallographique entre deux grains ayant des orientations cristallographiques différentes.

On note  $\Delta\theta$  le désaccord en angle entre ces deux orientations. Au lieu d'être constitué d'hexagones d'atomes de carbone, le joint de grains est une alternance de paires pentagone-heptagone dont la répartition dépend de  $\Delta\theta$  (exemple pour  $\Delta\theta=30^\circ$  dans la Fig.3.c). Dans certains de ces domaines, on observe une sur-structure de périodicité nanométrique. Il s'agit d'un phénomène appelé moiré qui vient de la superposition des réseaux atomiques des deux couches de graphène de surface décalés d'un certain angle. Les zones plus brillantes correspondent à des coïncidences de deux réseaux. La période spatiale d'un moiré nous permet de remonter directement à la différence d'angle entre les deux premières couches de graphène.

D'un point de vue spectroscopique, on observe un minimum qui correspond au point de Dirac  $(E_D)$  ainsi qu'une déplétion proche du niveau de Fermi due à un effet tunnel inélastique (voir Fig.3.d, en rouge pour le spectre sans les effets inélastiques). Le fait que le point de Dirac n'est pas à énergie nulle vient d'un dopage natif du graphène dû à son environnement (défauts, couches inférieures) qui décale le niveau de Fermi.

#### 2.4.2 Les défauts-fleurs

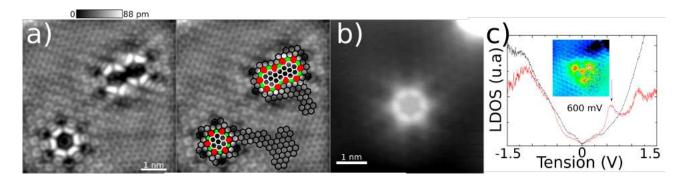


FIGURE 4 – (a) Image MET d'un défaut-fleur et d'un joint de grains circulaire de plus grande taille ainsi que leur modélisation atomique ( $6\times6$  nm² U=0.8 V I=400 pA). (b-c) Image MET et spectre à haute énergie (rouge) d'un autre défaut-fleur. Le spectre se distingue de celui du graphène (noir) par des pics de LDOS dont le premier a une localisation (insert) avec une symétrie d'ordre 3.

La première altération du graphène que j'ai étudiée est un défaut structurel très particulier : le défaut-fleur. Dans un premier temps, j'ai développé une méthode originale de synthèse du graphène reposant sur des dépôts d'or et des recuits à hautes températures. Ce processus favorise l'apparition de défauts-fleurs qui sont des joints de grains formant une boucle sur eux-mêmes. Ceux-ci séparent un domaine intérieur de petite taille d'un domaine extérieur d'orientation différente. J'ai ensuite étudié leurs propriétés électroniques par spectroscopie tunnel.

Les joints de grains circulaires représentent le cas particulier de joints de grains qui entourent un seul domaine et forment ainsi une boucle (voir Fig.4.a). On peut les classer en utilisant quelques critères :  $\Delta\theta$  entre les domaines extérieur et intérieur, nombre de paires pentagone-heptagone, taille du domaine intérieur ainsi que l'énergie de formation calculée par simulation, le défaut étant plus coûteux énergétiquement que le graphène inaltéré. Une grandeur intéressante est l'énergie de formation par paire pentagone-heptagone qui est plus pertinente dans une discussion énergétique. Il apparaît que les défauts les plus stables sont ceux de plus petite taille. Le plus petit (et le plus stable) est le défaut-fleur caractérisé par un  $\Delta\theta=30^\circ$ , six paires pentagone-heptagone, 24 atomes intérieurs et

une énergie de formation par paire pentagone-heptagone de 1,2 eV.

La synthèse repose sur des dépôts successifs d'or d'environ une monocouche d'or sur la surface de SiC suivis de recuits à des températures de plus en plus élevées, 1000°C puis 1200°C. Cette méthode favorise la formation de défauts-fleurs (ainsi que d'autres de plus grande taille et moins nombreux), ce qui permet de les étudier de manière systématique.

Le caractère indispensable des dépôts métalliques et de la synthèse en plusieurs temps est confirmé par des expériences test qui ne produisent pas de défaut-fleur. De plus, des simulations de théorie de la fonctionnelle de la densité effectuées en collaboration avec Hakim Amara de l'ONERA montrent que l'énergie de formation du défaut décroît sensiblement quand on ajoute des atomes d'or à sa surface, ce qui confirme l'importance de l'or dans la synthèse.

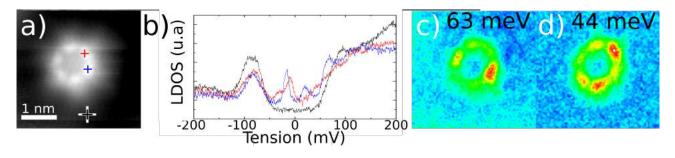


FIGURE 5 – (a-b) Image MET et spectres à basse énergie d'un autre défaut-fleur. Les spectres sur les lobes (rouge et bleu) présentent des pics de densité dans la déplétion de LDOS du graphène (noir). (c-d) Localisation de certains de ces pics sur les lobes.

Du point de vue spectroscopique, j'ai observé des pics de densité d'états avec des localisations spatiales inattendues. D'une part, pour des énergies de l'ordre de l'électron-volt, on a observé des états électroniques ayant une symétrie différente de celle du défaut (voir Fig.4.(b-c)). Nous pensons que ces pics sont dus au confinement des électrons dans le défaut. D'autre part, à basse énergie (quelques dizaines de meV), j'ai observé pour la première fois des états électroniques dans la déplétion qui semblent situés sur les heptagones du joint de grains (voir Fig.5.(a-d)). Le fait que l'énergie de ces états se trouve dans la déplétion est actuellement difficile à expliquer et interroge sur l'origine de ces états.

#### 2.4.3 Le triple défaut azote

La seconde altération du graphène que j'ai étudiée s'observe lorsque le graphène est dopé à l'azote. L'objectif est de remplacer des atomes de carbone du graphène par des atomes d'azote. Celui-ci possédant un électron de plus que le carbone, le graphène va se trouver dopé en électrons (type n). Le niveau de Fermi en sera, en principe, déplacé au-dessus du point de Dirac (contrairement à la Fig.3.d où le niveau de Fermi est en-dessous du point de Dirac). Ce sont les effets locaux qui m'ont intéressé. Pour doper ces échantillons de graphène, un séjour de recherche à l'université de Namur dans l'équipe de Robert Sporken a été organisé. La technique utilisée met en jeu un plasma d'azote à basse pression ( $\simeq 10^{-4}$  mbar de  $N_2$ ) produisant de l'azote radicalaire qui arrive sur la surface et se substitue au carbone.

En MET, localement, les atomes d'azote en substitution apparaissent comme des triangles en relief (bien qu'ils soient dans le plan du graphène) à cause du transfert de charge de l'atome d'azote

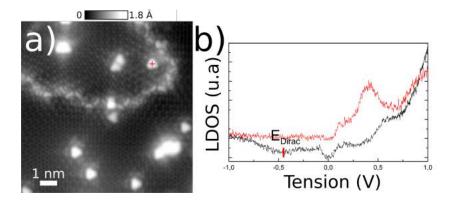


FIGURE 6 – (a) Image MET de graphène dopé (dopage autour de 0.5-0.8 % de substitution) avec des défauts azote simples et doubles ( $10\times10~\text{nm}^2~U=0.3~\text{V}~I=2~\text{nA}$ ). (b) Spectres du graphène (noir) et d'un défaut azote (rouge).

vers ses trois plus proches voisins (voir Fig.6.a). Loin du défaut, on observe un déplacement relatif du point de Dirac vers les énergies négatives. Sur le défaut, il existe un état électronique à énergie positive (voir Fig.6.b). Cependant, les atomes d'azotes ont une influence mutuelle à longue portée, ce qui a pour effet qu'une paire d'atomes d'azote aura un spectre différent d'un défaut simple. Ce spectre dépendra par ailleurs de la distance entre les deux atomes d'azote. J'ai pour ma part étudié un type particulier de défaut à base d'azote : un défaut triple. Au niveau structurel, il s'agit de trois atomes d'azote en ligne qui sont chacun le quatrième plus proche voisin d'un autre selon une direction dite armchair (voir Fig.7.(a-b)). Ce qui est surprenant, c'est que ce défaut a trois pics de LDOS également espacés qui correspondent à trois états électroniques ayant des localisations inattendues (voir Fig.7.c). En effet, elles correspondent de manière très convaincante à celle des états d'un système très simple : les orbitales moléculaires d'un ensemble de trois atomes isolés reliés par un terme de couplage de liaisons fortes  $\beta$  (voir Fig.7.d). En pratique, ces trois atomes ne sont bien évidemment pas isolés ce qui pose d'autres questions quant aux corrélations entre les atomes d'azote. On trouve néanmoins une valeur de  $\beta = 330$  meV cohérente avec les distances entre les atomes d'azote (4,26 Å).

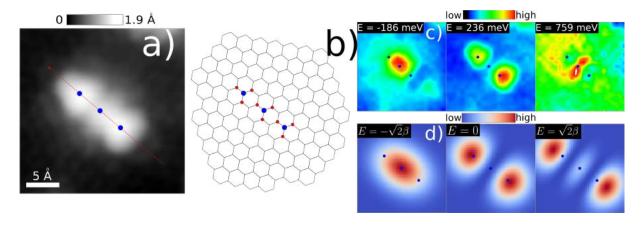


FIGURE 7 – (a) Image MET du défaut triple azote où les atomes d'azote sont repérés par des points bleus (présents également dans c-d pour repère)( $2.5 \times 2.5 \text{ nm}^2 U = 0.3 \text{ V} I = 1 \text{ nA}$ ). (b) Modèle atomique du défaut. (c) Localisations des trois pics de LDOS du défaut. (d) Simulations de cartes de conductance des états d'un système constitué de trois atomes reliés par liaisons fortes avec un terme de saut égal à  $\beta$ .

En conclusion de cette partie sur mes travaux de recherche, j'ai été en mesure de modifier de manière locale la structure électronique du graphène grâce à la création de défauts ponctuels. Dans le cas des défauts-fleurs, nous sommes parvenus à créer des états électroniques au voisinage du niveau de Fermi. Dans celui du triple défaut azote, c'est la localisation spatiale des trois états électroniques qui est inédite. Dans les deux cas, en dehors de l'intérêt fondamental de poursuivre l'étude de ces systèmes notamment pour déterminer l'origine de ces états électroniques, il y a des applications possibles. En utilisant le graphène modifié comme substrat pour une couche de molécules, on pourrait ainsi par exemple modifier les propriétés des quelques molécules se trouvant au dessus des défauts mais pas celles de leurs voisines et ainsi potentiellement créer des débuts de circuits électroniques.

# 3 Enseignement et médiation scientifique

Lors de mon doctorat, j'ai également eu l'opportunité de participer à des activités d'enseignement (dans le cadre de mon contrat doctoral) et de promotion de la recherche (durant mon temps libre).

#### 3.1 Monitorat

Durant mes première et deuxième années de doctorat, j'ai effectué mon service d'enseignement à l'université Paris-Descartes principalement en travaux dirigés (TD) de physique pour les étudiants en PACES (Première Année Commune aux Études de Santé) et, moins longuement, en travaux pratiques (TP) de physique et de technologies de l'information et de la communication (TIC) pour des étudiants en première année de licence de sciences biomédicales. Dans les deux cas, il s'agissait de s'adresser à des étudiants n'ayant pas choisi la physique comme matière principale, ce qui était un défi très intéressant.

Du monitorat en PACES, qui fut ma première expérience d'enseignement, je retirerai deux choses. Tout d'abord, la capacité de rendre compréhensible en peu de temps et à des étudiants tout juste sortis du lycée des notions de physique assez avancées, le programme étant très dense. Ensuite, plusieurs exercices de physique appliqués à des systèmes du vivant (transport d'ions dans des membranes) qui peuvent tout à fait être proposés en tant qu'ouverture en classe de CPGE PC/MP ou BCPST et qui, en PACES, intéressaient particulièrement les étudiants, malgré leur relative difficulté.

Les TP-TIC consistaient en une initiation au langage de programmation Python qui est un langage libre et très utilisé en physique. Maintenant que ce langage est étudié au lycée, je pourrai directement utiliser cette compétence pour proposer des activités liées à la physique-chimie en partenariat avec les futurs collègues concernés. En plus d'une initiation à son utilisation en TP pour des tracés de courbes et des ajustements simples, je compte proposer des sujets de « projet expérimental et numérique » où Python sera présent pour l'analyse de données et pour un éventuel interfaçage d'appareil.

De manière générale, mon expérience d'enseignement, bien que parcellaire, m'a convaincu de ma volonté d'enseigner. J'ai par conséquent tenu à assister à l'édition 2019 du colloque « Enseigner la Physique à l'Université » (EPU) qui a porté à ma connaissance de nombreux outils pour la classe et m'a permis de bénéficier de retours d'expérience qui me seront utiles dans mon métier d'enseignant. Par exemple l'utilisation en classe de l'application mobile phyphox qui exploite les capteurs physique du téléphone (accéléromètre, baromètre, magnétomètre, microphone) me permettra de faire des travaux pratiques interactifs.

# 3.2 Valorisation et vulgarisation

J'ai également animé des ateliers et rencontres qui tiennent de la vulgarisation scientifique autour des mes recherches.

L'atelier « 1 Chercheur, 1 Manip » est une collaboration récurrente entre le Palais de la découverte et des laboratoires de recherche. J'y ai présenté, en direct, le principe et la mise en œuvre d'un microscope à force atomique, une autre technique de champ proche très similaire au MET. L'observation de nanotubes de carbone dans des microcircuits dont l'image se formait au fur et à mesure m'a permis de présenter l'électronique de demain ainsi que mes propres recherches au public varié du Palais de la découverte de manière vivante. La rencontre « Ma thèse en 5 minutes » <sup>4</sup> a été une autre occasion de présenter mes recherches de manière accessible et percutante. Ce qui m'a plu dans ces événements, c'est la possibilité de créer un pont entre le savoir-faire de la recherche actuelle et le grand public.

L'atelier BD-Sciences, était une collaboration avec l'association de vulgarisation scientifique Stimuli et avait pour public une vingtaine de lycéens. Ces élèves avaient eu quelques séances avec un illustrateur et une médiatrice scientifique pour apprendre à construire une planche de bande dessinée. Lors d'une séance ultérieure, je leur ai présenté, à leur niveau, mon sujet de recherche, le but étant que chacun des élèves dessine une planche de BD à partir de ce qu'il avait retenu de mon intervention. J'en ai retiré, outre la volonté de participer à ce programme en tant que professeur accueillant, que le dessin peut être utilisé pour faire comprendre des concepts physiques potentiellement complexes. En dehors de la question de la nécessaire utilisation des figures en tant qu'enseignant, j'aimerais pouvoir organiser des séances où un élève expliquerait un concept scientifique qui lui tient à cœur et où les autres exprimeraient ce qu'ils ont compris au travers de dessins.

Ces expériences de vulgarisation, m'ont permis, de par leur variété de public et de format, d'aborder mon travail de doctorat par différents angles et m'ont parfois permis de résoudre certains blocages pédagogiques que j'avais vis-à-vis de mon sujet, notamment la question d'une explication tout niveau de l'effet tunnel.

# 4 Proposition de séquence pédagogique

# 4.1 Structure du graphène (Première Enseignement Scientifique)

Dans le chapitre « Une longue histoire de la matière », les élèves de Première abordent les cristaux. Pour les réseaux cubique simple et cubique à faces centrées, ils représentent les mailles cristallines dont ils calculent la compacité et la multiplicité.

En conclusion de ce cours, je compte proposer une activité autour de la structure d'un cristal bidimensionnel : le graphène (voir Fig.8.(a-b)). Elle permettra d'appliquer les méthodes apprises (calculs de compacité, de nombre d'atomes par maille, de masse volumique – ici surfacique) à un autre réseau qui a la particularité d'être 2D. Elle permettra également d'ancrer le cours dans la recherche actuelle via une présentation des applications scientifiques et industrielles de ce matériau. Cette activité sera également l'occasion de mettre l'accent sur le fait que « la structure microscopique du cristal conditionne certaines de ses propriétés macroscopiques » <sup>5</sup>.

<sup>4.</sup> Sur le mode de la compétition « Ma thèse en 180 secondes ».

<sup>5.</sup> Programme de la Classe de Première

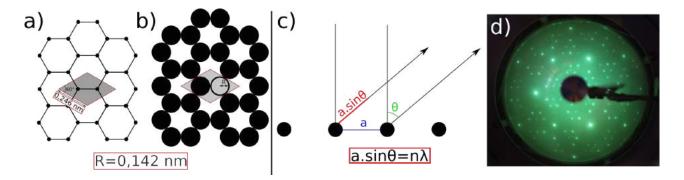


FIGURE 8 – (a) Schéma du réseau du graphène avec la maille et ses dimensions pour déterminer la multiplicité et la masse surfacique du cristal. (b) Schéma du graphène en sphères tangentes pour le calcul de compacité. (c) Schéma de principe de la diffraction d'électrons lents. (d) Figure de diffraction des électrons d'une surface.

# 4.2 Modélisation du microscope à effet tunnel (CPGE MP et PC)

L'effet tunnel est au programme de deuxième année PC et MP de CPGE et il est recommandé de faire une étude documentaire du microscope à effet tunnel. Celles disponibles sont sérieuses mais légèrement désincarnées. Cela repose notamment sur le fait que la mise en œuvre de la MET nécessite davantage qu'une pointe et un générateur. Je me propose de réaliser une étude documentaire plus complète intitulée « Microscope à effet tunnel et techniques de surface » autour d'articles scientifiques techniques et de notices d'appareils. Celle-ci a pour but de remettre le MET dans un contexte plus large et aborde :

- La nécessité de moteurs de précision et donc de la piézoélectricité;
- La nécessité de la rétroaction (abordée en SI en 1ère année) et les avantages du mode à courant constant contre le mode à hauteur constante;
- La notion de travail de sortie (en comparaison avec l'effet photoélectrique) en tant que barrière;
- Les ordres de grandeur des courants, tensions et distances pointe-surface typiques;
- La nécessité de travailler à basse pression (contamination des surfaces) et des calculs de libre parcours moyens correspondant à ces pressions.

Ce sera également l'occasion d'aborder une autre technique de physique des surfaces, la diffraction d'électrons lents (voir Fig.8.(c-d)). Cette technique est analogue à la diffraction de rayons X avec des électrons de faible énergie autour de 100 eV correspondant à  $\lambda_{dB} \simeq 1$ Å. Il s'agit d'un exemple intéressant en classe car il montre une autre application du caractère ondulatoire de l'électron et permet de remobiliser le concept de différence de marche déjà abordé en optique.

La technique fournit des informations sur la structure de la surface uniquement, car les électrons diffractés dans le volume interagissent beaucoup et n'arrivent pas sur le détecteur.

Mon aisance en anglais, mon expérience en construction de bibliographie et ma connaissance pratique du sujet me permettront de rendre cette activité vivante.