

Interfaces métal/matériaux bidimensionnels/métal : Propriétés de transport et perspectives pour les mémoires résistives à l'échelle atomiques

Les matériaux bidimensionnels (2D) offrent des perspectives uniques pour l'exploration de phénomènes électroniques et pour le développement de dispositifs à l'échelle atomique. Ce séminaire s'intéresse aux mécanismes de transport électronique vertical et aux effets d'interface dans des systèmes composés de matériaux 2D en interaction avec des électrodes métalliques, en focalisant l'analyse sur leur rôle dans les atomristors à commutation résistive.

Nous examinerons comment les propriétés intrinsèques des matériaux 2D, telles que le graphène, le MoSe₂ (1T et 2H) et le hBN, influencent les caractéristiques des interfaces métal/matériau 2D/métal, en tenant compte de paramètres comme l'épaisseur, l'empilement et les interactions orbitales. Les phénomènes de migration ionique et de formation de filaments, essentiels à la commutation résistive, seront également abordés.

En utilisant des méthodes théoriques basant sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) et les fonctions de Green hors-équilibre (NEGF), ce séminaire mettra en évidence l'importance des interactions métal-matériau 2D pour concevoir des mémoires résistives à l'échelle atomique et comprendre les bases fondamentales des systèmes nanoélectroniques de nouvelle génération.