

INTERNSHIP PROPOSAL

Laboratory name: CEMES
CNRS identification code: UPR8011
Internship director's surname: Rémi Arras
e-mail: remi.arras@cemes.fr
Web page: <https://www.cemes.fr/en/mem-eng/>
Internship location: Toulouse, France

Phone number: 0562257856

Thesis possibility after internship: NO

Funding: Yes

If YES, which type of funding: Labex

Calculs *ab initio* de la structure électronique d'alliages $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Se,Te})_3$ et de leurs interfaces

Contexte : Les matériaux quantiques sont très prometteurs pour le développement de futurs dispositifs innovants dont le fonctionnement va reposer sur des phénomènes collectifs entièrement gouvernés par la mécanique quantique. C'est en particulier le cas des isolants topologiques tels que les alliages $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ dont la principale caractéristique est de présenter des états de surfaces ou interfaces chiraux qui rendent ces surfaces/interfaces métalliques. L'existence des états électroniques responsables de ce comportement métallique local étant garantie par la structure de bandes du de l'isolant topologique, ces états sont dits « topologiquement protégés ». Leur existence n'est donc pas affectée par le désordre atomique ou par la géométrie des échantillons, du moins tant que ce désordre ne modifie pas fondamentalement la structure de bandes. De plus, du fait de leur chiralité, ces états ne peuvent pas être rétrodiffusés et ne subissent pas de dissipation. Pour tirer partie des propriétés topologiques des alliages $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ pour des applications, il est nécessaire de bien maîtriser le dopage électrostatique au voisinage des interfaces. Il est notamment important de pouvoir ajuster l'énergie du point de Dirac par rapport au niveau de Fermi et d'améliorer la mobilité des porteurs. Ces conditions pourraient être atteintes, d'une part en remplaçant $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ par des alliages quaternaires tels que les composés $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Se,Te})_3$ (BSTS), d'autre part grâce à un choix judicieux des électrodes de *back-* ou de *top-gate*.

Objectifs : Des calculs numériques *ab initio*, basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), seront réalisés pour analyser la structure de bandes des alliages BSTS. Les propriétés de ces cristaux massifs seront tout d'abord étudiées en fonction de leur composition chimique. Pour les compositions les plus intéressantes, la structure électronique au voisinage de l'interface avec une électrode sera également calculée. Les calculs DFT permettront de comprendre les paramètres clés qui permettent le contrôle des propriétés électroniques essentielles pour les applications, qu'il s'agisse de la valeur des masses effectives, de l'alignement des bandes au voisinage des interfaces, ou de la position du niveau de Fermi vis-à-vis des différentes bandes. Une fois calculées, les caractéristiques importantes des alliages BSTS et de leurs interfaces pourront directement être comparées avec des mesures de transport réalisées au LNCMI, ce qui contribuera à interpréter ces résultats expérimentaux.

Prérequis : Bonnes connaissances en physique de la matière condensée et mécanique quantique / fort intérêt pour la physique numérique / maîtrise correcte d'au moins un langage de programmation également souhaitée.

Détails pratiques : Le stage de niveau M2 se déroulera au printemps 2026 au CEMES à Toulouse, dans le cadre du projet « *Toward electrical control of topological insulators for topological heterostructures assembly* » (TopoTOLOSA) financé par le Labex NanoX. Le projet TopoTOLOSA réunit des expérimentateurs et théoriciens du CEMES, LNCMI et du LAAS à Toulouse, avec lesquels des échanges réguliers seront entretenus.

Condensed Matter Physics: YES Soft Matter and Biological Physics: NO
Quantum Physics: YES Theoretical Physics: NO