

# Effet de la fonctionnalisation sélective sur l'ouverture du gap dans la bicouche du graphène

Jouda Jemaa Khabthani<sup>a\*</sup>, Ahmed Missaoui<sup>b</sup>, Didier Mayou<sup>c</sup> et Guy Trambly de Laissardière

- a. Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, Faculté des Sciences de Tunis, Université Tunis El Manar, 2092 Tunis, Tunisie
- b. Laboratoire de Spectroscopie Moléculaire et Applications, Faculté des Sciences de Tunis, Université Tunis El Manar, 2092 Tunis, Tunisie
- c. Univ. Grenoble Alpes, Inst Neel, F-38042 Grenoble, France
- d. Laboratoire de Physique théorique et modélisation, CNRS et Université de Cergy-Pontoise, 95302 Cergy-Pontoise, France

\* [jemaajouda@gmail.com](mailto:jemaajouda@gmail.com)

Le graphène et ses dérivés permettent la conception de nouveaux matériaux et ouvrent la voie à de nouveaux dispositifs électroniques performants. Dans ce travail, on se propose d'étudier les propriétés électroniques de la bicouche AB de graphène fonctionnalisée par des adsorbats via une modélisation numérique [1-3]. Nos résultats montrent qu'en réalisant une distribution sélective d'adsorbats, on peut varier le gap ainsi que la conductivité électrique qui pour des énergies très proches du gap présente un comportement anormal.

La fonctionnalisation par des adsorbats (atomes ou molécules) représente un des moyens parmi d'autres qui permettent de contrôler les propriétés électroniques du graphène, ainsi que de la majorité des matériaux bidimensionnels. Dans la bicouche bernal de graphène, les sites cristallographiques dans une couche ne sont pas équivalents par le fait qu'ils n'ont pas le même nombre de coordination. La fonctionnalisation sélective de l'un des deux sites est alors possible. Dans ce travail, nous présentons une étude théorique de la structure électronique ainsi que du transport électronique en utilisant deux modèles : un premier qui ne tient compte que des premiers voisins et un deuxième qui est plus réaliste puisqu'il permet d'aller au delà des premiers voisins.

Notre étude montre que pour certaines fonctionnalisations, un gap de mobilité variable se forme et peut atteindre 0,5 eV autour de l'énergie de Dirac. Ceci est réalisé pour une concentration d'adsorbats plus grande que 0,01. De plus, aux énergies autour du gap, la conductivité présente un comportement inattendu et augmente fortement lorsque la concentration  $c$  augmente. Nous avons montré que ce comportement résulte directement de la symétrie particulière de la structure atomique de la bicouche du graphène [4].

Ces résultats sont d'une grande importance pour des expériences futures et des investigations théoriques des divers phénomènes originaux relatifs au transport électroniques impliqués dans une bicouche de graphène bernal.

[1] G. Trambly de Laissardière et al, Phys.Rev. B **86**, 125413 (2012)

[2] G. Trambly de Laissardière et al, Phys. Rev. B **93**, 235135 (2016)

[3] G. Trambly de Laissardière et al C. R. Physique **15**, 70 (2014)

[4] A. Missaoui, J. J. Khabthani, N. Jaidane, D. Mayou and G. T. De Laissardière, Eur. Phys. J. B (2017) **90** 75