

# Etude d'une couche continue de germanène déposée sur Al(111)

M. Derivaz<sup>1</sup>, D. Dentel<sup>1</sup>, R. Stephan<sup>1</sup>, M.-C. Hanf<sup>1</sup>, A. Mehdaoui<sup>1</sup>, Ph. Sonnet<sup>1</sup> et C. Pirri<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS UMR 7361, Université de Haute Alsace, 3b rue Alfred Werner 68093 Mulhouse cedex, France

La découverte du graphène a fortement stimulé la recherche sur les matériaux 2D. En 2012, le silicène, cousin du graphène pour le silicium, a été synthétisé sur un substrat métallique d'argent (111). Ces dernières années, le silicène a également été observé sur des surfaces de dibore de zirconium (0001) ou d'iridium (111). Jusqu'à présent, il n'existe pas de silicène qui serait détaché de son support comme dans le cas du graphène. Le germanène, un autre cousin du graphène mais à base de germanium, a été prédit en 2009 comme étant une phase stable du germanium, et observé en 2014 en multiphase sur un substrat d'or (111) [1]. La synthèse d'une couche de germanène sur d'autres substrats permettrait de comprendre comment se forme ce type de couche 2D.

Dans ce travail, nous avons élaboré et caractérisé une couche de germanène déposée sur un substrat d'aluminium orienté dans la direction (111) [2]. Les observations par microscopie tunnel (STM) montrent que cette couche de germanène présente une structure 2D de type nid d'abeille similaire à celle du silicène, et que cette couche recouvre uniformément le substrat d'aluminium sur de larges domaines probablement supérieurs à 100 nm. Le diagramme de diffraction d'électrons lents (LEED) suggère l'existence d'une surstructure (3x3) par rapport au réseau du substrat. Enfin, les mesures de diffraction de photoélectrons X (XPD) indiquent que les atomes de Ge forment une couche bidimensionnelle.

Les calculs, basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, ont permis d'identifier la structure atomique de cette couche de germanène. La cellule unité est formée de huit atomes de germanium dont deux germaniums sont en position haute et les autres en position basse. La différence de hauteur entre les atomes en position haute et basse est de 1.23 Å. La distance Ge-Ge prédite par le calcul est comprise entre 2.60 et 2.65 Å. Cette distance est plus grande que dans le germanium volumique. Cependant, des calculs de la fonction de localisation électronique (ELF), donnant des informations sur la nature des interactions entre les atomes, montrent la présence de liaisons covalentes entre les atomes de germanium, et fournissent également une preuve directe de l'absence de liaisons covalentes entre la couche de germanène et le substrat d'aluminium. La simulation des images STM conduit à un bon accord entre l'expérience et les calculs, validant ainsi le modèle atomique proposé (Figure 1).

En conclusion, les résultats obtenus montrent clairement qu'il a été possible de former une couche 2D continue de germanium, nommée germanène, sur un substrat d'Al(111). La synthèse de ce nouveau matériau sur de larges domaines pourrait ouvrir de nouvelles perspectives dans de nombreux domaines d'application.

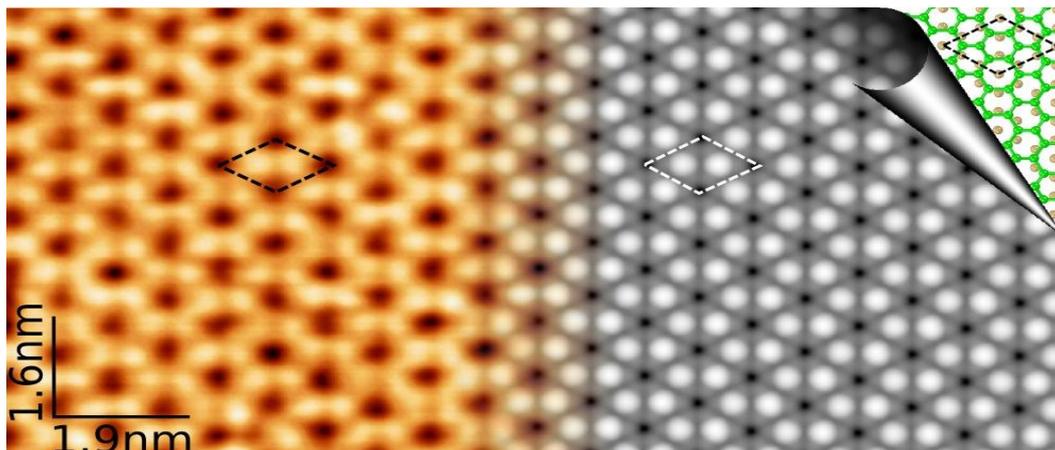


Figure 1: De gauche à droite : images STM expérimentale et calculée d'une couche de germanène déposée sur Al(111) ( $V=1.3$  V). Le coin en haut à droite fait apparaître la structure atomique calculée. La cellule unitaire est indiquée en traits discontinus sur chaque image.

[1] M. Davila, L.Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay, *Germanene: A novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene*, *New J. Phys.* **16**, 095002 (2014)

[2] M. Derivaz, D. Dentel, R. Stephan, M.-Ch. Hanf, A. Mehdaoui, Ph. Sonnet, C. Pirri, *Continuous germanene layer on Al(111)*, *Nano Lett.* **15**, 2510 (2015)