

Du graphène nanoporeux à l'isolant topologique

V.Müller^{1,2}, A.Hallal^{1,2}, J.Landers^{1,2}, N.Bendiab^{1,2}, S.Lamare³, M.de Santis^{1,2},
F.Chérioux³, J.Coraux^{1,2}, L.Magaud^{1,2},

¹ Université Grenoble-Alpes, Institut Néel, F-38042 Grenoble, France

² CNRS, Inst NEEL, F-38042 Grenoble, France

³ Institut FEMTO-ST, Université de Franche-Comté, CNRS, ENSMM, 32 Avenue de l'Observatoire, F-25044 Besançon, France

La structure en nid d'abeille du graphène est à l'origine des propriétés optiques et électroniques remarquables de ce matériau. Les progrès récents des approches bottom-up permettent désormais de fabriquer des structures dérivées du graphène qui présentent des pores de taille bien définie, régulièrement arrangées et séparées d'une distance de l'ordre du nanomètre. Les propriétés de ces matériaux 2D de seconde génération dérivent de celle du graphène mais aussi de leur structure propre et peuvent être ajustées en jouant avec la taille des pores.

Le travail présenté ici a pour but de construire un réseau de graphène nanoporeux à partir d'une molécule bien choisie, le 1,3,5-tri(4'-acetylphenyl), puis d'en étudier les propriétés électroniques et notamment la possibilité de l'utiliser pour former un isolant topologique organique. Les molécules sont d'abord déposées sous ultra vide sur un substrat d'or où elles s'assemblent et forment un réseau supra moléculaire qui est ensuite recuit et converti en un réseau nanoporeux. Les étapes intermédiaires et la formation du réseau nanoporeux sont étudiées par STM. La nouvelle réaction¹ mise en évidence ici – une condensation d'aldol – n'a que l'eau comme seul sous-produit. Une étude AFM et Raman avant et après exposition à l'air démontre la stabilité du réseau nanoporeux formé.

En parallèle, des calculs DFT, nous ont permis de calculer la structure de bande très particulière de ce système qui est reliée à celle d'un réseau Kagomé (figure 1 a) et présente une bande plate et deux bandes avec une dispersion linéaire au voisinage de leur point de croisement en K. Ces résultats couplés à une approche simplifiée en liaisons fortes établissent dans quelles conditions le réseau nanoporeux peut être transformé en isolant topologique. En effet, la décoration par des éléments lourds (In) permet de renforcer le couplage spin-orbit et ouvre un gap aux points de dégénérescence (Figure 1b), Γ et K. L'analyse de la parité de la fonctions d'onde permet de calculer l'invariant topologique Z_2 et ainsi de montrer que la structure de bande de ce matériau est topologiquement non triviale et qu'elle correspond à un état Hall quantique de spin.

Les calculs sont réalisés en utilisant le code VASP, la fonctionnelle PBE et l'approche PAW. Leur convergence a été soigneusement vérifiée tant en ce qui concerne les dimensions de la supercellule que la grille de point k ou les forces résiduelles après relaxation. Les résultats sont comparés aux images STM réalisées sous ultra vide et à température ambiante et aux spectres Raman.

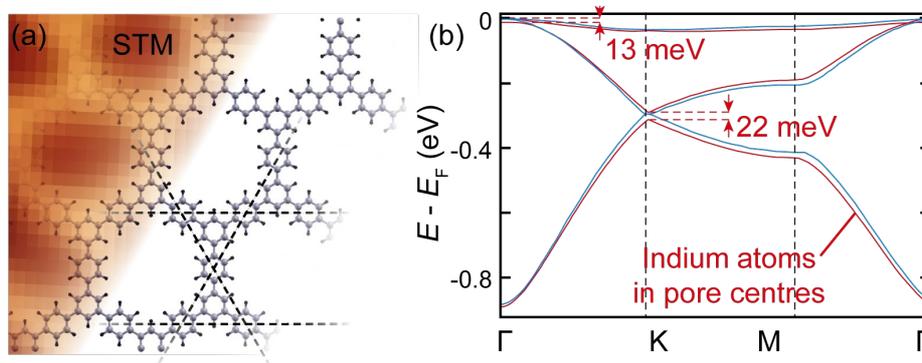


Figure 1 : Le réseau nanoporeux de graphène. a) image STM et schéma montrant sa structure de type réseau Kagomé (pointillés), b) zoom au voisinage du sommet de la bande de valence, de la structure de bande du réseau nanoporeux décoré par des atomes d'Indium, en bleu sans couplage spin-orbit, en rouge avec couplage spin-orbit, mettant en évidence l'ouverture de gap aux points Γ et K.

[1] J.Landers, F.Chérioux, M. De Santis, N.Bendiab, S.Lamare, L.Magaud and J.Coraux
 Convergent Fabrication of a Nanoporous Two-Dimensional Carbon
 Network from an Aldol Condensation on Metal Surfaces', 2D materials 1 (2014) 034005