



Sujet de doctorat
de Monsieur **Lyes MESBAHI**.



Intitulé : Étude ‘Ab-Initio’ des propriétés physiques de couches 2D à base d’alliages ternaires métal₁-métal₂-chalcogène.

L’intérêt technologique de matériaux structurés sous formes de couches minces d’épaisseur nanométrique n’est plus à démontrer. Ces structures bidimensionnelles (2D) sont utilisées dans de nombreux domaines tels que l’enregistrement magnétique haute densité, la spintronique, l’optoélectronique, la photonique, etc...Les propriétés physiques intéressantes de ces structures étant en partie le résultat de la réduction de leur dimensionnalité.

Des exemples récents de telles structures sont les TMDC (Transition Metal DiChalcogenide) qui sont des couches minces associant un métal de transition et un chalcogène, le MoS₂ étant un exemple. Ces structures présentent des caractéristiques physiques intéressantes qui peuvent être facilement modifiées en agissant sur leur épaisseur ou composition. Ainsi ces TMDC peuvent être soit semi-conductrices ou conductrices, demi-métalliques ou métalliques, à bande interdite directe ou indirecte....

Notre objectif dans le cadre de cette thèse est d’étudier des structures à base d’alliages ternaires comportant deux éléments métalliques et un élément chalcogène (M₁M₂C). Ces structures offrent un large choix de configurations à étudier avec comme perspective la possibilité de proposer l’élaboration de dispositifs pratiques utilisables en photonique ou en électronique. Cette étude se fera essentiellement dans un cadre ‘ab initio’