

Titre : Transport électronique quantique dans des biplans de graphène tournés

Stage de Master 2, durée : 4 mois minimum

Encadrants : G. Trambly de Laissardière (guy.trambly@cyu.fr) et A. Honecker (andreas.honecker@cyu.fr), Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, LPTM, CY Cergy Paris Université / CNRS, Cergy-Pontoise.

Le lien structure propriété est une thématique fondamentale en matière condensée. Dans les matériaux à 2 dimensions (2D) ce lien prend un aspect exceptionnel puisqu'une structure aussi simple qu'un biplan tourné, appelé moiré, est associée à une structure électronique remarquable ayant des bandes plates [1], des corrélations électroniques fortes et même parfois de la supraconductivité. Ces propriétés, mis en évidence en 2018 dans des biplans de graphène tournés d'un angle "magique" proche de 1° , ont renforcé l'intérêt pour ces matériaux. Malgré de nombreuses études théoriques et expérimentales, la compréhension de cette nouvelle localisation électronique est toujours incomplète. L'angle de rotation est bien-sûr un paramètre déterminant, mais nous avons aussi récemment montrer qu'une petite dilatation ou contraction d'un plan par rapport à l'autre (« *heterostrain* ») peut modifier fortement la structure électronique des bandes plates (voir figure) [2,3].

Le but de ce stage est l'étude théorique de la diffusion quantique des porteurs de charge dont les bandes électroniques sont plates (ou presque plates) en tenant compte le mieux possible des paramètres structuraux qui les conditionnent (angle de rotation, contraction/dilatation d'un plan, défauts). Dans un premier temps, nous négligerons les effets d'interactions électroniques (problème à N corps) et nous considérerons un modèle hamiltonien réaliste qui a déjà été validé par des comparaisons expérimentales. Le transport quantique sera calculé numériquement par des méthodes dont nous sommes spécialistes telles que les méthodes de récursions dans l'espace réel (formule de Kubo) ou des méthodes par matrice de transmission (formalisme de Landauer-Büttiker).

Ce travail sera fait au LPTM (Cergy-Pontoise) en collaboration avec des équipes expérimentales (PHELIQS, CEA) et théorique (Néel, CNRS) de Grenoble dans le cadre du projet ANR FlatMoi qui démarre actuellement. Il pourra éventuellement déboucher sur un projet de thèse.

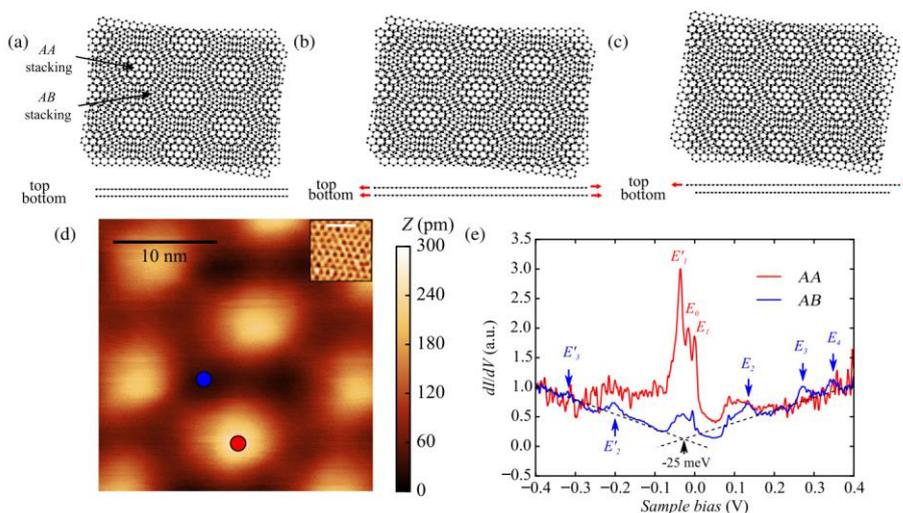


Figure (d'après Réf. [2]):
 Représentation schématique d'un moiré de biplan de graphène (a) sans et (b,c) avec élongation d'un plan par rapport à l'autre. (d) Image STM d'un moiré et (e) Densité d'états électroniques en 2 points particuliers du moiré.

[1] Voir par exemple : J. Vahedi, R. Peters, A. Missaoui, A. Honecker, G. Trambly de Laissardière, SciPost Phys. **11**, 083 (2021) ; et les Réfs. citées dedans.
 [2] L. Huder, A. Artaud, T. Le Quang, G. Trambly de Laissardière, A. G. M. Jansen, G. Lapertot, C. Chapelier, V. T. Renard, Phys. Rev. Lett. **120**, 156405 (2018)
 [3] F. Mesple, A. Missaoui, T. Cea, L. Huder, F. Guinea, G. Trambly de Laissardière, C. Chapelier, V. T. Renard, Phys. Rev. Lett. **127**, 126405 (2021).

Title: Electronic quantum transport in rotated graphene bilayers

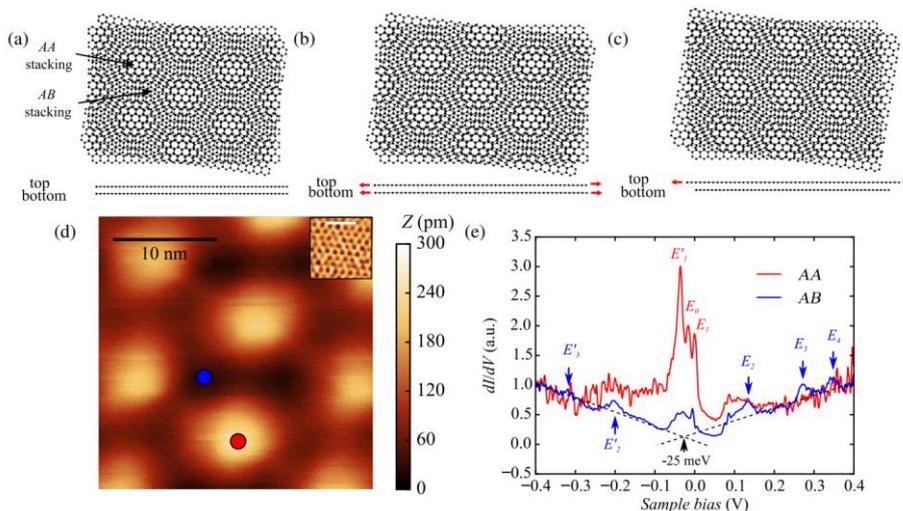
Master 2 internship, duration: 4 months minimum

Supervisors: G. Trambly de Laissardière (guy.trambly@cyu.fr) and A. Honecker (andreas.honecker@cyu.fr), Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, LPTM, CY Cergy Paris Université / CNRS, Cergy-Pontoise

The structure-property link is a fundamental theme in condensed-matter physics. In two-dimensional (2D) materials this link takes an exceptional aspect since a structure as simple as a rotated bilayer, resulting in a moiré pattern, is associated with a remarkable electronic structure having flat bands [1], strong electronic correlations, and sometimes even superconductivity. These properties, highlighted in 2018 in graphene bilayers rotated by a “magic” angle close to 1° , have attracted significant interest in these materials. Despite numerous theoretical and experimental studies, the understanding of this new electronic localization is still incomplete. The rotation angle is of course a key parameter, but we have also recently shown that a small expansion or contraction of one plane with respect to the other (“heterostrain”) can strongly modify the electronic structure of the flat bands (see figure) [2,3].

The goal of this internship is to study the quantum scattering of charge carriers with flat (or nearly flat) electronic bands, taking into account as much as possible the structural parameters that condition them (rotation angle, contraction/dilation of a plane, defects). First, we will neglect the effects of electronic interactions (quantum many-body problem) and we will consider a realistic Hamiltonian model that has already been validated by comparison with experiments. The quantum transport will be computed numerically by methods where we are specialists, such as real space recurrence methods (Kubo formula) or transmission matrix methods (Landauer-Büttiker formalism).

This work will be carried out at the LPTM (Cergy-Pontoise) in collaboration with experimental (PHELIQS, CEA) and theoretical (Néel, CNRS) teams from Grenoble in the framework of the ANR project FlatMoi that is currently starting. The internship could eventually lead to a PhD thesis.



[1] See for instance : J. Vahedi, R. Peters, A. Missaoui, A. Honecker, G. Trambly de Laissardière, SciPost Phys. **11**, 083 (2021); and Refs. therein.

[2] L. Huder, A. Artaud, T. Le Quang, G. Trambly de Laissardière, A. G. M. Jansen, G. Lapertot, C. Chapelier, V. T. Renard, Phys. Rev. Lett. **120**, 156405 (2018)

[3] F. Mesple, A. Missaoui, T. Cea, L. Huder, F. Guinea, G. Trambly de Laissardière, C. Chapelier, V. T. Renard, Phys. Rev. Lett. **127**, 126405 (2021).