

# Calculs numériques des hauteurs de barrière Schottky dans des hétérostructures d'oxydes

**R. Arras** (CEMES- CNRS)  
[remi.arras@cemes.fr](mailto:remi.arras@cemes.fr)

**Mots-clés :** Calculs numériques *ab initio*, théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), interfaces, physico-chimie des oxydes de métaux de transition, jonctions Schottky, matériaux multiferroïques.

**Objectifs :** Le sujet de ce stage de M2 (5-6 mois) portera sur l'étude de la structure électronique dans des hétérostructures à base d'oxydes complexes de métaux de transition.

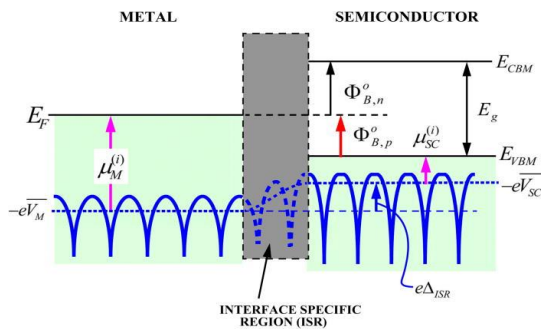


Figure 1: Schéma simplifié des niveaux d'énergie des états électroniques à l'interface Métal/Semiconducteur. Les hauteurs de barrière de Schottky correspondent aux différences d'énergie  $\Phi_B^0$ . D'après [1].

L'interface entre un matériau semiconducteur et un métal peut permettre de réaliser une jonction Schottky, un composant à la base de nombreux dispositifs électroniques [1]. Dans ces jonctions, il est possible de transférer des charges du métal vers le semiconducteur en fournissant une énergie définie par la hauteur de barrière Schottky. Cette grandeur, qui peut être mesurée expérimentalement ou calculée numériquement [2], dépend à la fois des propriétés électroniques intrinsèques des deux matériaux, telles que le travail de sortie du métal, le potentiel d'ionisation et la largeur de bandes interdite du semiconducteur, mais aussi des caractéristiques de l'interface formée.

Au cours du stage, nous effectuerons des calculs *ab initio* basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) afin d'étudier la structure électronique de l'interface  $(\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25})\text{MnO}_3/\text{ICL}/(\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5})\text{TiO}_3(001)$ , pour laquelle  $(\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25})\text{MnO}_3$  constitue l'électrode métallique et  $(\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5})\text{TiO}_3$  la couche isolante, potentiellement ferroélectrique. La couche nommée ICL (*interface control layer*) est une couche ultramince de  $(\text{A}_x\text{Sr}_{1-x})\text{MnO}_3$  ou  $(\text{A}_x\text{Sr}_{1-x})\text{TiO}_3$  ( $\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}, \text{La}$ ) intercalée à l'interface et dont la composition chimique est susceptible de varier afin de modifier la hauteur de barrière Schottky. Nos calculs auront pour but d'expliquer l'évolution de la hauteur de barrière Schottky en fonction des distorsions atomiques et des variations de degrés d'oxydation, qui dépendront des compositions chimiques choisies. Afin de modéliser des systèmes les plus réalistes possibles, les structures étudiées durant ce stage devront également tenir compte de la présence potentielle de défauts de structure et différentes terminaisons d'interface devront être considérées.

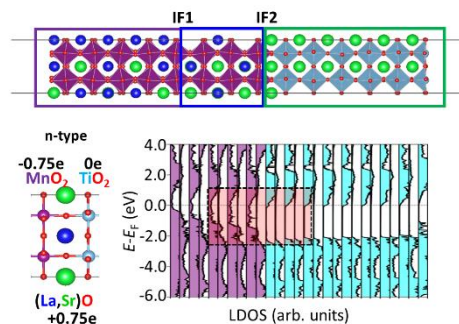


Figure 2: Exemple de structure étudiée et de densités d'états calculées. Cas d'une interface de type n entre  $\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}$  et  $\text{SrTiO}_3(001)$ .

Ce sujet théorique s'inscrit dans un projet collaboratif (Projet ANR « *Bepolar* » [3]) alliant mesures expérimentales et calculs numériques. Les résultats théoriques obtenus auront pour but d'aider à l'interprétation des mesures expérimentales réalisées par nos collaborateurs, en proposant et vérifiant des hypothèses pré-établies. Les résultats ainsi obtenus pourront servir de guide pour l'optimisation des propriétés des jonctions réalisées.

L'étudiant candidat à ce stage devra montrer un fort intérêt pour la physique fondamentale de la matière condensée, ainsi que pour les simulations numériques. De bonnes bases en programmation, ainsi qu'une certaine aisance à communiquer les résultats, seront considérées comme un plus.

Références :

[1] R. T. Tung, [Appl. Phys. Rev. 1, 011304 \(2014\)](#).

[2] R. Arras, *et al.*, [Phys. Rev. B 102, 205307 \(2020\)](#).

[3] BePolar - *Beyond polar dead-layers and leakage in BST-based varactors for NFC and 5G Telecommunications* - <https://anr.fr/Project-ANR-20-CE24-0008>