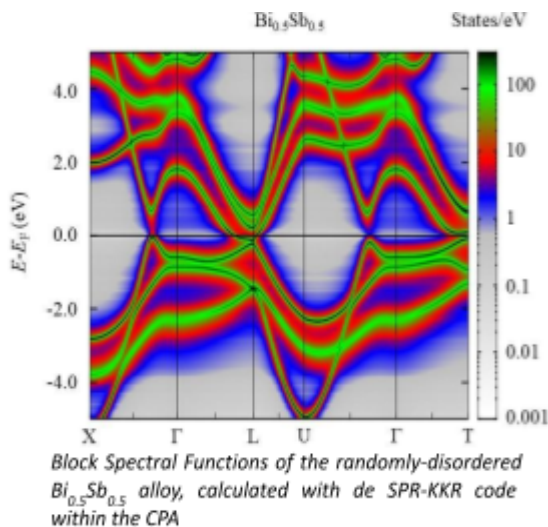


Calculs *ab initio* de la structure électronique d'alliages $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Se,Te})_3$ et de leurs interfaces

Contacts : Rémi Arras (CEMES, Toulouse, remi.arras@cemes.fr),
Lionel Calmels (CEMES, Toulouse, lionel.calmels@cemes.fr)

Contexte : Les matériaux quantiques sont très prometteurs pour le développement de futurs dispositifs innovants dont le fonctionnement va reposer sur des phénomènes collectifs entièrement gouvernés par la mécanique quantique [1,2]. C'est en particulier le cas des isolants topologiques (TIs) tels que les alliages $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ dont la principale caractéristique est de présenter des états de surfaces ou interfaces chiraux qui rendent ces surfaces/interfaces métalliques. L'existence des états électroniques responsables de ce comportement métallique local étant garantie par la structure de bandes du de l'isolant topologique, ces états sont dits « topologiquement protégés ». Leur existence n'est donc pas affectée par le désordre atomique ou par la géométrie des échantillons, du moins tant que ce désordre ne modifie pas fondamentalement la structure de bandes. De plus, du fait de leur chiralité, ces états ne peuvent pas être rétrodiffusés et ne subissent pas de dissipation.

Pour tirer partie des propriétés topologiques des alliages $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ pour des applications, il est nécessaire de bien maîtriser le dopage électrostatique au voisinage des interfaces. Il est notamment important de pouvoir ajuster l'énergie du point de Dirac par rapport au niveau de Fermi et d'améliorer la mobilité des porteurs. Ces conditions pourraient être atteintes, d'une part en remplaçant $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ par des alliages quaternaires tels que les composés $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Se,Te})_3$ (BSTS) [3], d'autre part grâce à un choix judicieux des électrodes de *back-* ou de *top-gate*.



Objectifs :

Des calculs numériques *ab initio*, basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), seront réalisés pour analyser la structure de bandes des alliages BSTS. Les propriétés de ces cristaux massifs seront tout d'abord étudiées en fonction de leur composition chimique. Pour les compositions les plus intéressantes, la structure électronique au voisinage de l'interface avec une électrode sera également calculée. Les calculs DFT permettront de comprendre les paramètres clés qui permettent le contrôle des propriétés électroniques essentielles pour les applications, qu'il s'agisse de la valeur des masses effectives, de l'alignement des bandes

au voisinage des interfaces, ou de la position du niveau de Fermi vis-à-vis des différentes bandes. Une fois calculées, les caractéristiques importantes des alliages BSTS et de leurs interfaces pourront directement être comparées avec des mesures de transport réalisées au LNCMI, ce qui contribuera à interpréter ces résultats expérimentaux.

Prérequis : Le candidat devra posséder de bonnes connaissances en physique de la matière condensée et mécanique quantique, ainsi qu'un fort intérêt pour la physique numérique. Il devra également être capable de communiquer aisément ses résultats, à l'oral comme à l'écrit. Une maîtrise correcte d'au moins un langage de programmation est également souhaitée.

Détails pratiques : Le stage de niveau M2 se déroulera au printemps 2026 au CEMES à Toulouse, dans le cadre du projet « *Toward electrical control of topological insulators for topological heterostructures assembly* » (TopoTOLOSA) financé par le Labex NanoX. Le projet TopoTOLOSA réunit des expérimentateurs et théoriciens du CEMES, LNCMI et du LAAS à Toulouse [4-6], avec lesquels des échanges réguliers seront entretenus.

Références :

- [1] B. Keimer & J. E. Moore, *The physics of quantum materials*, Nat. Phys. **13**, 1045 (2017).
- [2] Y. Tokura, M. Kawasaki & N. Nagaosa, *Emergent functions of quantum materials*, Nat. Phys. **13**, 1056 (2017).
- [3] N. Abdelrahman, et al., *Controlled growth of 3D topological insulator BiSb(Te_{1-y}Se_y)₃ nanocrystals via chemical vapor transport*, J. Mater. Chem. C **12**, 18416 (2024).
- [4] L. Veyrat, et al., *Band Bending Inversion in Bi₂Se₃ Nanostructures*, Nano Lett. **15**, 7503 (2015).
- [5] D. Sadek, et al., *Integration of the Rhombohedral BiSb(0001) Topological Insulator on a Cubic GaAs(001) Substrate*, ACS Appl. Mater. Interfaces **13**, 36492 (2021).
- [6] K. Rubi, et al., *Aperiodic quantum oscillations in the two-dimensional electron gas at the LaAlO₃/SrTiO₃ interface*, npj Quantum Mater. **5**, 9 (2020).

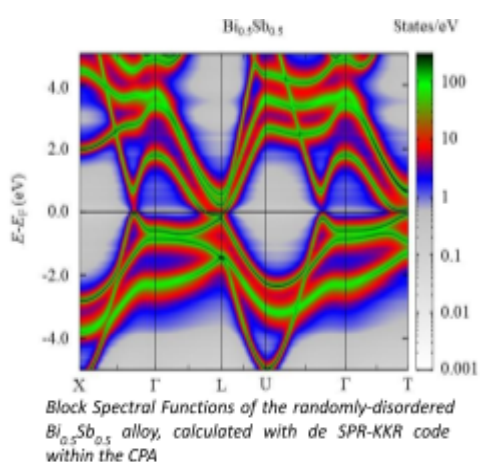
(English version below)

First-principles calculations of the electronic structure of $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Se,Te})_3$ alloys and their interfaces

Contacts : Rémi Arras (CEMES, Toulouse, remi.arras@cemes.fr),
Lionel Calmels (CEMES, Toulouse, lionel.calmels@cemes.fr)

Context: Quantum materials display a broad range of collective phenomena governed by quantum mechanics and hold great promise for future applications [1,2]. The main property of topological insulators (TIs), such as the $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloy, is the existence of chiral interface or surface states, which make their surfaces/interfaces metallic. These intrinsic surface/interface states are moreover chiral, with the chiral property being often associated to one or a combination of spin, momentum, and pseudo-spin. Since their existence is guaranteed by the material's band structure, those states are said to be “topologically protected” in the sense that their existence is not directly affected by disorder or geometry as long as it does not fundamentally change the band structure. Moreover, due to their chirality – either spin or direction of propagation – these edge states are protected against backscattering, making them dissipation-less.

To take advantage of the topological properties of $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ -alloys topological properties for applications, it is necessary to control precisely the electrostatic doping, both in the bulk and at the interfaces of TIs. In particular, further tuning of the Dirac energy and improving the carrier mobility are mandatory. This may be achieved in $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Se,Te})_3$ (BSTS) compounds [3], with the necessary use of a suitable back- and top-gate to uniformly tune the chemical potential.



Goals: First-principles numerical calculations based on the density functional theory (DFT) will be performed to investigate the band structure of BSTS alloys. Bulk compounds will first be studied with varying chemical compositions. For the most interesting compositions, interface properties with an electrode will also be computed. DFT calculations can allow access to important electronic properties (effective masses, interface band alignments and position of the Fermi level), which can directly be compared with experimental measurements at LNCMI and therefore support the analysis of the transport experiments.

Prerequisite: The candidate will have a good knowledge of condensed-matter and quantum physics, a strong interest in numerical physics, and good communication skills (oral and writing). Correct mastery of at least one programming language is also desired.

Practical details: This internship is dedicated to Master 2 students. It will be performed during spring 2026 (for a duration of approximately 5-6 months), at the CEMES, in Toulouse, within the framework of the project *Toward electrical control of topological insulators for topological heterostructures assembly* (TopoTOLOSA), funded by the Labex NanoX. The project TopoTOLOSA gathers experimentalists and theoreticians from CEMES, LNCMI and LAAS laboratories located in Toulouse [4-6], with whom regular scientific exchanges will be maintained.

Bibliography:

- [1] B. Keimer & J. E. Moore, *The physics of quantum materials*, Nat. Phys. **13**, 1045 (2017).
- [2] Y. Tokura, M. Kawasaki & N. Nagaosa, *Emergent functions of quantum materials*, Nat. Phys. **13**, 1056 (2017).
- [3] N. Abdelrahman, *et al.*, *Controlled growth of 3D topological insulator BiSb(Te_{1-y}Se_y)₃ nanocrystals via chemical vapor transport*, J. Mater. Chem. C **12**, 18416 (2024).
- [4] L. Veyrat, *et al.*, *Band Bending Inversion in Bi₂Se₃ Nanostructures*, Nano Lett. **15**, 7503 (2015).
- [5] D. Sadek, *et al.*, *Integration of the Rhombohedral BiSb(0001) Topological Insulator on a Cubic GaAs(001) Substrate*, ACS Appl. Mater. Interfaces **13**, 36492 (2021).
- [6] K. Rubi, *et al.*, *Aperiodic quantum oscillations in the two-dimensional electron gas at the LaAlO₃/SrTiO₃ interface*, npj Quantum Mater. **5**, 9 (2020).