

plusieurs dizaines de couches pour protéger les couches inférieures. Récemment, l'équipe de P. De Padova, en collaboration avec mes collègues Eric Salomon, Thierry Angot et moi-même, a montré que seules les couches les plus externes s'oxydent après une exposition à l'air ambiant pendant 24 heures. La seconde approche consiste à encapsuler le silicène en le recouvrant d'un matériau protecteur. Ainsi, l'équipe d'A. Molle y est parvenue en le recouvrant *in situ* d'un film d'aluminium, qui s'oxyde partiellement à l'air, mais protège le silicène situé au-dessous.

## Une structure en terrasses

Nous avons aussi étudié le réseau cristallin du silicène. La structure  $3\times 3/4\times 4$  est la plus stable et la première à avoir été observée pour le silicène, mais d'autres apparaissent et peuvent éventuellement coexister sur la même surface d'argent pour des températures un peu plus élevées. Cela reflète une certaine « flexibilité » du silicène, liée à sa forme ondulée et à l'effet accordéon d'adaptation.

Schématiquement, ces domaines semblent correspondre à des rotations du réseau de silicène par rapport à la couche dite nominale  $3\times 3/4\times 4$ , suivies d'une extension d'environ deux pour cent de la dimension de la maille. Mais cette légère dilatation du silicène conduit à de nouvelles relations d'épitaxie de la couche vis-à-vis du substrat. Et la densité en atomes de silicium étant environ quatre pour cent inférieure à celle de la structure nominale, les diverses propriétés de conduction pourraient changer.

Nous avons observé expérimentalement ces différents domaines cristallins avec Andrea Resta et d'autres collègues (voir la figure 2a), mais nous n'avons pas encore mesuré les caractéristiques de ces structures. Cependant, la présence de plusieurs domaines sur un même substrat implique celle de frontières entre les domaines, ce qui perturbe la circulation des charges électriques. En effet, les charges peuvent être réfléchies sur ces défauts ou y rester piégées. L'idéal serait d'avoir un système présentant une seule structure cristalline.

Quand on synthétise du silicène multicouche, les feuillets se superposent en se

décalant l'un par rapport à l'autre, à la façon des cultures en terrasses des rizières d'Asie du Sud ou des bancaous de Provence, des parcelles de cultures en gradins délimitées par des murs de pierre.

Ces feuillets présentent une nouvelle structure, notée  $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  tournée de 30 degrés par rapport à la structure nominale  $3\times 3/4\times 4$  du silicène en première couche. Nous avons aussi constaté que pour les domaines différents de la structure nominale, la structure suivante est également  $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ , mais l'orientation diffère. Souvent, des domaines de structures cristallines différentes coexistent sur la première couche. Dans la deuxième couche, on a une structure unique, mais l'orientation des domaines varie en fonction de celle des domaines sous-jacents.

Nous ignorons encore pourquoi nous obtenons la configuration unique  $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ , mais il est probable que les interactions du silicium et de l'argent deviennent négligeables et que ce soit la structure intrinsèque du silicène – définie par les seules interactions des atomes de silicium – qui impose cette maille. La structure atomique  $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  a une signature

## UNE STRUCTURE ÉLECTRONIQUE PARTICULIÈRE

Le carbone et le silicium appartiennent à la même colonne du tableau périodique des éléments. Ils possèdent tous les deux quatre électrons de valence dont l'occupation de l'espace est décrite par des fonctions mathématiques, les orbitales atomiques, solutions des équations de la mécanique quantique. Les orbitales se distinguent notamment par leur forme et leur énergie.

Par exemple, les orbitales *s* sont sphériques et les orbitales *p* sont constituées de deux lobes raccordés au noyau de l'atome. Pour déterminer la géométrie des liaisons entre atomes, il faut prendre en compte l'hybridation – ou mélange – des orbitales. Pour les orbitales *s* et *p*, plusieurs configurations sont possibles. La configuration stable du méthane ( $\text{CH}_4$ ) est notée  $sp^3$ , les quatre orbitales

séparées de 109,5 degrés forment un tétraèdre. Le graphène adopte l'hybridation  $sp^2$ . Trois liaisons occupées par les électrons sont dans un plan et sont séparées par des angles de 120 degrés ; une quatrième orbitale est perpendiculaire au plan. Le silicène, quant à lui, présente une hybridation intermédiaire entre  $sp^2$  et  $sp^3$ . Cette configuration est responsable de sa forme ondulée.

Dans le silicène, la configuration mixte  $sp^2$ - $sp^3$  des atomes confère au matériau une plus grande réactivité chimique que celle du graphène. Les atomes du silicène se lient plus facilement à d'autres éléments. En dopant le silicène, c'est-à-dire en lui ajoutant d'autres atomes, il est possible de le transformer en semi-conducteur. Le graphène, inerte, est plus difficile à doper.

