

## **Phénomènes exotiques dans les nanostructures d'oxydes : de la théorie aux applications**

Philippe GHOSEZ

*Physique Théorique des Matériaux, Université de Liège (Belgique)*

Nanotechnologies, nanomatériaux, nanoélectronique, nanophotonique, nanobiologie, nanomédecine ... Le *nano* est à la mode ! Trouvant son origine étymologique dans le mot grec *nanos*, nain, ce préfixe de quatre lettres est couramment utilisé dans le système de mesure international pour diviser par  $10^9$  l'unité dont il précède le nom (1 nanomètre = 0,000000001 mètre). Par extension, il est maintenant plus généralement employé pour faire référence aux propriétés et phénomènes spécifiques aux objets possédant des tailles de l'ordre du nanomètre. Les nanomatériaux sont ainsi des matériaux dont une des dimensions, au moins, est de l'ordre de grandeur du nanomètre.

Confiné pour un temps au cénacle scientifique, le *nano* envahit peu à peu notre quotidien. Les nanosciences ont ouvert un champ d'investigations nouveau et, comme nous le verrons par la suite, permettent d'envisager de manière réaliste ce qui, parfois, paraissait auparavant complètement impossible. Certains prédisent ainsi que les nanotechnologies apporteront à la prochaine décennie un développement comparable à celui qu'internet a apporté à la précédente. Il faut sans doute rester prudent et laisser le temps aux idées de se concrétiser : on ne développe pas un nanomédicament comme on développe un nouvel outil internet. Mais, il est certain que le *nano* sera de plus en plus présent dans notre vie quotidienne. Des applications concrètes apparaissent et certains domaines, tels que l'électronique, sont déjà entrés de pleins pieds dans l'ère *nano*.

Face à l'émergence des nanotechnologies, le citoyen et le consommateur que nous sommes sont sans doute parfois perplexes. Le mot *nano* est couramment associé à "haute technologie" et certaines marques n'hésitent plus à vanter le pouvoir magique de nanoparticules dans telle crème cosmétique ou tel spray imperméabilisant pour chaussures. À l'inverse, les nanotechnologies ont aussi leurs détracteurs et les risques potentiels liés à l'utilisation des nanoparticules sont aussi décriés. Alors qu'en penser?

Certes, comme pour tout ce qui est nouveau, la prudence est certainement de rigueur et il ne faut pas renouveler certaines erreurs du passé. Un matériau peut acquérir des propriétés nouvelles sous forme nanostructurée et devenir toxique alors qu'il ne l'était pas à l'état massif, et inversement. Les scientifiques en ont bien conscience, et parallèlement au développement des nanotechnologies, ils étudient activement l'impact de leurs réalisations sur la santé et l'environnement. Comme pour toute autre technologie, cet impact combinera assurément des aspects positifs et négatifs. Il importera de faire une saine utilisation des nanotechnologies, mais certainement pas de tout rejeter en bloc, comme certains raisonnements simplistes pourraient nous inciter à le faire.

Le *nano* n'est d'ailleurs pas neuf. Durant l'Antiquité, l'homme utilisait déjà des nanoparticules sans le savoir, et l'aspect esthétique étonnant de certains vases de l'époque romaine repose sur l'inclusion de nanocristaux. Au Moyen-Âge, les maîtres verriers avaient également couramment recours, à leur insu, à des dispersions de nanoparticules d'or, d'argent, ou de cuivre pour produire les couleurs intenses des vitraux des cathédrales. De nombreux oxydes cristallisent naturellement sous forme de mille-feuilles nanostructurés et nous sommes entourés sans le savoir d'une multitude de nanomatériaux. Alors pourquoi le *nano* émerge-t-il aujourd'hui ? Tandis que par le passé le recours aux nanoparticules se faisait de manière empirique et sans en avoir conscience, l'avènement des nanotechnologies est étroitement lié à l'apparition récente des outils indispensables pour fabriquer, voir et manipuler les nanostructures, donnant les moyens concrets de réaliser une véritable ingénierie à l'échelle atomique. Ainsi, d'une part, les progrès importants réalisés récemment dans la croissance des matériaux permettent de contrôler leur structure à l'échelle atomique et même de stabiliser des structures nouvelles. Utilisant, par exemple, des canons à atomes tels que la MBE (Molecular Beam Epitaxy), il est ainsi possible de fabriquer des matériaux artificiels couche par couche, en agençant les atomes à souhait comme un enfant empile des briques Légo. D'autre part, grâce à de nombreuses avancées en microscopie, l'imagerie et la caractérisation atteignent maintenant une résolution atomique. Cela permet d'aller visualiser les nanostructures qu'on fabrique et d'en contrôler la qualité. Allant plus loin, il est même permis de manipuler et d'organiser les nano-objets qu'on visualise, ouvrant ainsi *de facto* la porte aux nanotechnologies.

"*Small is beautiful*" et on ne peut que s'émerveiller de voir la taille et le poids de son ordinateur ou téléphone portable diminuer d'année en année. Réduire la taille des dispositifs électroniques permet non seulement d'inclure davantage de fonctionnalités dans un volume toujours plus petit mais également d'augmenter leur rapidité et de diminuer la quantité de matière nécessaire à leur conception. Depuis l'apparition de l'électronique, les ingénieurs ont travaillé sans relâche à diminuer la taille des dispositifs permettant ainsi, par exemple, l'explosion de la puissance informatique que nous avons connue au cours des dernières décennies. Mais la miniaturisation a ses limites, fixées par la taille finie des atomes qui constituent la matière. Actuellement, le canal à travers lequel passent les électrons dans les transistors possède des dimensions approchant la taille des atomes. Non seulement, il devient matériellement impossible de le raccourcir encore mais, à ces tailles, des phénomènes inattendus apparaissent.

La mécanique quantique nous enseigne que les électrons ne sont pas seulement des particules mais également des ondes. Un peu comme un poisson ne se comportera pas de la même manière dans un bocal que dans l'océan, lorsqu'on confine les électrons à

des dimensions comparables à leur longueur d'onde, leur comportement est modifié. Ceci constitue l'intérêt majeur de travailler à l'échelle du nanomètre: au-delà de permettre de faire les mêmes choses à une échelle plus petite, confiner les électrons dans des structures de tailles nanométriques induit une multitude de phénomènes nouveaux et totalement surprenants. En travaillant à cette échelle, il est ainsi permis d'envisager des choses qui auparavant paraissaient totalement impossibles.

Comme l'avait anticipé Feynman en 1959 lors d'un plaidoyer visionnaire intitulé, "*There is plenty of room at the bottom*", un monde nouveau s'ouvre à nous à l'échelle du nanomètre. L'expérimentateur sera ainsi souvent fasciné par les propriétés des nanostructures qu'il manipule, mais aussi quelque peu désemparé. Les phénomènes qu'il observe à cette échelle défient son intuition et ne peuvent se comprendre qu'en ayant recours à la théorie et, en particulier, à la mécanique quantique. Les nanosciences constituent donc un domaine où, plus qu'ailleurs encore, l'expérimentateur et le théoricien sont amenés à collaborer étroitement pour comprendre les phénomènes et tenter de les exploiter.

Au niveau théorique, de nombreux progrès ont aussi été réalisés au cours des dernières décennies dans la description de la matière à l'échelle atomique. La matière n'est jamais qu'un ensemble d'atomes, eux-mêmes constitués d'un noyau et d'électrons. Les lois fondamentales de la mécanique quantique et de l'électromagnétisme qui régissent le comportement de ces particules en interaction sont connues depuis un siècle. A priori, l'utilisation de ces lois devrait nous permettre de prédire le comportement des électrons et les propriétés qui en découlent, comme la loi de Newton permet de prédire la trajectoire des planètes, mais le problème est d'une telle complexité que sa résolution exacte est impossible en pratique. Pendant très longtemps, les physiciens ont dû se contenter de petits modèles qualitatifs pour décrire le comportement des matériaux. Ce n'est que récemment, avec l'explosion de la puissance informatique, qu'il est devenu possible de prédire de manière très fiable et sans recours à l'expérience, les propriétés des matériaux complexes à l'aide de calculs dits *ab initio*. Ces calculs consistent à résoudre numériquement, moyennant certaines approximations, les équations de la mécanique quantique et permettent de modéliser avec une grande précision les propriétés des matériaux et nanostructures au départ d'une description à l'échelle atomique. Même si la modélisation *ab initio* de systèmes d'intérêt pratique peut nécessiter des semaines, voire des mois, de calculs sur des super-ordinateurs tels que le Nic3 de l'ULG, cela reste raisonnable en comparaison de l'effort requis pour réaliser des investigations similaires au niveau expérimental. Non seulement la modélisation *ab initio* apparaît de nos jours comme un outil théorique efficace pour guider les expérimentateurs vers des systèmes aux propriétés intéressantes mais, se basant sur les lois fondamentales de la physique, elle permet en outre d'identifier et de comprendre les mécanismes microscopiques à l'origine de ces propriétés.

À l'heure actuelle, la plupart des recherches sur les nanomatériaux combinent des approches théoriques et expérimentales. C'est selon ce schéma que nous travaillons au sein du service de *Physique Théorique des Matériaux* : nous étudions différents types de nanostructures d'oxydes en collaboration avec plusieurs laboratoires expérimentaux à travers le monde, de manière à combiner nos expertises respectives dans le domaine de la modélisation, de la croissance et de la caractérisation des matériaux.

Les nanostructures d'oxydes complexes constituent un domaine d'investigation tout à fait fascinant et en pleine expansion. En 2007, la revue *Science* épinglait l'apparition de phénomènes inattendus aux interfaces d'oxydes comme l'une des 10 avancées scientifiques majeures de l'année et certains experts n'hésitaient pas à comparer le stade de développement embryonnaire de ce domaine à celui des semi-conducteurs il y a 60 ans ! Depuis, l'intérêt pour ces interfaces n'a cessé de croître mettant en lumière des phénomènes variés tels que la possibilité de créer un gaz d'électrons bidimensionnel à l'interface entre deux oxydes isolants, l'électrorésistance géante dans les jonctions "tunnel" ferroélectriques ou le couplage d'instabilités structurales aux interfaces de nanocomposites, produisant des propriétés fonctionnelles inédites.

Se basant sur quelques exemples concrets, mon exposé visera à présenter et à expliquer certains phénomènes inattendus pouvant émerger aux interfaces d'oxydes. Comprendre la physique de ces interfaces au niveau microscopique s'avère une étape indispensable pour imaginer de nouveaux systèmes pouvant trouver des applications dans les domaines de l'électronique, de la spintronique, des senseurs ou même de l'énergie.