# Électronique et Photonique avancées

### ÉLECTRONIQUE

# PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES DES MATÉRIAUX TOPOLOGIQUES

Malgré leur protection topologique, la quantification des états de bords dans les isolants topologiques 2D reste étonnamment fragile. Un problème connexe concerne la présence d'états conducteurs parasites au cœur des matériaux topologiques. La résolution de ces problèmes permettrait d'utiliser ces états exotiques dans diverses applications. Néanmoins, un grand nombre de questions du domaine sont uniquement motivées par la curiosité scientifique. Par exemple, quelle est l'influence du désordre sur les propriétés de transport des isolants topologiques? Un défi majeur consiste aussi en une classification géométrique et topologique des électrons en interaction. Un matériau non-topologique peut-il devenir topologique grâce à ces interactions électron-électron? La surface d'un isolant topologique magnétique peut-elle héberger de nouveaux états topologiques sous l'action des interactions? Par ailleurs, certaines symétries cristallines associées à de multiples inversions de bandes peuvent créer des systèmes topologiques d'ordre supérieur de dimension N, abritant des états de bords de dimension N-2 ou N-3, au lieu de N-1. De même, les phases topologiques dans les matériaux amorphes, ou encore les anomalies chirale ou gravitationnelle associées aux fermions de Weyl doivent être explorées. Enfin, le concept de topologie s'est récemment révélé extrêmement utile dans la classification d'autres bandes d'énergie dispersives dans les solides, notamment pour les magnons ou les phonons. Des avancées fondamentales sont attendues sur l'ensemble de ces sujets.

# MATÉRIAUX BIDIMENSIONNELS ET SYSTÈMES MULTIFONCTIONNELS

La superposition de matériaux de van der Waals et les effets de proximité associés ont ouvert de vastes champs d'investigation incluant la twistronique et la physique des moirés, la spin-orbitronique, les phases hors équilibre, etc. La combinaison de ces différentes interactions, parfois antagonistes et induisant donc une frustration, représente une activité de recherche prolifique. Des découvertes de rupture surviennent telles que les matériaux à la fois magnétiques et ferroélectriques, le développement de la valléetronique, ou l'effet Hall quantique fractionnaire. Il faut aussi souligner l'apparition récente de structures latérales composées de plusieurs matériaux

et de monocouches de type Janus, possédant des propriétés différentes d'un côté et de l'autre du feuillet. Un travail théorique et expérimental conséquent reste à accomplir dans tous ces domaines pour comprendre les diagrammes de phases et sonder les différentes excitations. Un travail de modélisation est aussi nécessaire pour aider les expérimentateurs à faire le choix de matériaux en fonction des propriétés visées. Compte tenu du grand nombre d'avancées majeures dans ce domaine, il est fort probable que plusieurs nouvelles percées fondamentales y soient encore faites ces prochaines années. De nombreuses questions fondamentales sont d'ailleurs déjà identifiées. L'effet Hall quantique de vallée sans champ magnétique existe-t-il dans le graphène bicouche twisté? Peut-on observer les phases semi-métalliques de Weyl dans des réseaux de Kagomé? Quels sont les mécanismes à l'origine du magnétisme orbital?

### SYSTÈMES MÉSOSCOPIQUES

Malgré le niveau de maturité actuel de la physique mésoscopique en matière de concepts et de qualité des matériaux étudiés, un grand nombre de questions fondamentales subsistent. Dans une approche unifiée du transport quantique et de l'optique, quels effets sont induits dans les dispositifs mésoscopiques par le couplage fort avec la lumière? Au-delà des préceptes de la thermodynamique classique, peut-on extraire un travail de systèmes mésoscopiques? Comment manipuler les anyons et étudier le transport de chaleur associé en régime d'effet Hall quantique fractionnaire? La génération et le contrôle d'électrons uniques et de charges fractionnaires, autant que la nécessité d'augmenter la température de mesure, impliquent une prochaine montée en fréquence du GHz au THz. Il faudra aussi inclure les défauts et le désordre dans les modèles et développer une instrumentation de mesure appropriée qui en tiendra compte. L'instrumentation devra permettre de se libérer des pertes et du bruit induit par les distances et les connexions sur les signaux faibles et il sera nécessaire de développer de nouveaux dispositifs tels que des convertisseurs optique/micro-ondes, ou des amplificateurs paramétriques à la limite quantique. L'utilisation des matériaux 2D (couplage spin-orbite par effet de proximité, supraconductivité...) et des matériaux topologiques devrait aussi se développer.

### MAGNÉTISME ET SPINTRONIQUE

Quatre vecteurs de défis et de gain de nouvelles connaissances sont identifiés dans ce domaine. Les ordres magnétiques et textures de spin apporteront des interactions, effets et fonctionnalités nouveaux en lien avec des degrés de liberté additionnels tels que la chiralité, la frustration, les dimensionnalités hautes et hybrides (espace et champ vectoriel), les symétries cristallines, les effets de courbure, les couplages renforcés. Ils permettront l'émergence de pseudo-particules topologiques avec leurs comportements propres: skyrmions, hopfions et autres textures 3D, monopoles, points de Bloch, etc. Cela nécessitera des efforts en synthèse de composés massifs ou en couches minces et hétérostructures, par des voies ascendantes dont chimiques (ALD, électrochimie), incluant les matériaux 2D pour leurs couplages exaltés et multiphysiques.

La dynamique d'aimantation apportera à la fois un degré de liberté supplémentaire (le temps) pour une physique plus riche, et de nouvelles fonctionnalités. Les frontières sont la maîtrise et compréhension des échelles de temps ultimes (ps-fs-as) ou en domaine fréquentiel équivalent, en fort lien avec l'optique; le comblement du gap THz dans une bande large et efficace, par les effets spintroniques ou les électromagnons; le contrôle et la physique de la cohérence et du couplage de nano-oscillateurs à transfert de spin. Les frontières de la magnonique sont la compréhension et la maîtrise de la décohérence et des pertes (micromagnétisme, problématique matériaux), l'hydrodynamique et le chaos, et leur utilisation pour de nouveaux paradigmes de traitement de l'information, en lien avec les effets quantiques. Ceci nécessite des progrès en instrumentation pour exciter et mesurer à ces échelles, et pour les matériaux, d'identifier ceux permettant le meilleur couplage à l'excitation/mesure (hétérostructures et interfaces) ou la montée en fréquence (antiferromagnétiques, etc.).

Les phénomènes d'interconversion seront clefs dans les progrès, comme moyens d'exciter ou détecter, ou de coupler des phénomènes divers. Les couplages historiques devront être renforcés: spin-charge, champ électrique/ ferroélectrique, multiferroïques, matériaux topologiques, récupération d'énergie, capteurs magnétiques. Une multitude de couplages plus exotiques émergent, ouvrant des voies nouvelles à l'interface de différentes communautés: moment angulaire de spin versus moment orbital, génération de courants d'électrons chauds, altermagnétisme dans les antiferromagnétiques, spin-réseau dont contraintes et phononique de moment angulaire, photonique (spin-LED, VECSEL), interface spintronique/ supraconducteurs. L'ensemble requerra de nouvelles instrumentations, des théories et outils de simulation multiphysiques, des efforts en science des matériaux pour exalter et varier les couplages (y compris matériaux 2D, moléculaires, quantiques, et leurs compatibilités), ainsi qu'un effort en métrologie.

Les nouveaux paradigmes de traitement de l'information reposent sur la mise à profit d'effets physiques connus pour obtenir une fonctionnalité nouvelle en logique. Les effets spécifiques de non-linéarité, stochasticité et hystérésis des systèmes magnétiques sont une force pour réaliser un ensemble de fonctions complexes avec un unique support, ce que ne permettent pas d'autres matériaux. Ceci inclut le calcul probabiliste (fluctuations thermiques, grand nombre de degrés de liberté), les non-linéarités de dynamique d'aimantation (oscillateurs individuels ou magnonique), des phénomènes de reptation, pour réaliser des composants de type neurones, synapses, ou de reservoir computing.

### ÉLECTRONIQUE ORGANIQUE ET MOLÉCULAIRE

Pour imaginer de nouvelles fonctionnalités ou améliorer la stabilité des dispositifs, il s'agira de mieux observer et comprendre les interfaces et les mécanismes de transport de charge électronique et ionique à l'échelle moléculaire. En particulier, le transport électronique et ionique au sein de la molécule, à l'interface avec son support et son environnement (effet du greffage, adsorption, de la configuration moléculaire), mais aussi à l'échelle intermoléculaire sur de courtes distances (1-10 nm). L'étude des mécanismes d'échange ionique jusque-là considérés comme instabilités permettra d'éviter, ou au contraire d'exploiter les perturbations induites (échange possible d'information dans des systèmes moléculaires à comportement synaptique; compréhension de l'effet des stimuli externes comme la lumière, le champ magnétique, les paramètres environnementaux, etc.).

Ces recherches contribueront au contrôle des jonctions et composants moléculaires. Ainsi, la rectification de courant prédite par combinaison de groupements «donneur» ou «accepteur» reste un verrou expérimental (réalisation du dopage, transport de charge aux interfaces molécule/électrode notamment molécules/ matériaux 2D comme le graphène ou dichalcogénures du type MoS<sub>2</sub>). L'introduction de matériel biologique dans les jonctions et dispositifs représente également les prémices d'une recherche bio-inspirée multidisciplinaire: chimie, physique, biologie, traitement du signal. Des systèmes moléculaires synaptiques ou pour le calcul in materio pourraient être conçus. Finalement, l'exaltation localisée de réaction ou d'échange chimique par des points chauds, ou les mécanismes de transport thermique à l'échelle de la molécule, restent à étudier pour maîtriser la réactivité chimique à cette échelle. Le succès de ces études vers la découverte de nouvelles fonctions (pour une chimie efficace, les capteurs, ou le calcul) dépendra des avancées conceptuelles combinées aux progrès de la synthèse chimique large surface et du traitement du signal (bruit de fond et fluctuations).

#### **NOUVEAUX PARADIGMES DU CALCUL**

Le calcul «en-mémoire» requiert de nouveaux matériaux et nanocomposants, fiables, pilotables rapidement (ns) et sans dérive de leurs propriétés à long terme. Une grande diversité d'approches coexistent. L'étude des mécanismes physiques en jeu dans le nano-composant, responsables des propriétés recherchées aux échelles nano

(typiquement 20 nm), est primordiale: conservation des propriétés volumiques à cette échelle; prédominance des mécanismes de surface; maîtrise de la variabilité statistique des propriétés physiques devenant critique pour des mémoires multi-niveaux.

En calcul neuromorphique, un verrou existe en physique pour dépasser des limites de l'algorithmique de l'apprentissage automatique, et aller vers un apprentissage continu. Des matériaux associant forte non-linéarité et non volatilité sont à rechercher. Les composants ferroélectriques sont prometteurs, sans négliger des alternatives en rupture (e. g. approches biomimétiques fondées sur le principe de plasticité), ni l'impact de nouvelles solutions algorithmiques (e.g. approches bayésiennes) avec une interface directe nécessaire entre le développement des nano-composants et la théorie des réseaux d'apprentissage (apprentissage automatique/continu; théorie de l'oubli).

Finalement, des difficultés se posent pour le pilotage de réseaux neuromorphiques de grande dimension qui requièrent dès le départ une loi énergétique de passage à l'échelle réaliste. Un calcul à grande efficacité énergétique «scalable» passera par une nouvelle physique des composants pour des opérations de calcul au plus proche du résultat final directement par la couche physique, et par le développement de la physique des couplages en réseau. Les approches électroniques inorganiques sont à comparer aux alternatives organiques/moléculaires, ou hybrides photonique-électronique avec tout ou partie des opérations de mémoire-calcul réalisées en optique. Cette branche de la physique dépendra du développement d'approches profondément 3D (fabrication 3D à l'échelle micro-nano; méthodes d'élaboration capables de plasticité).

### **PHOTONIQUE**

#### FIBRES OPTIQUES ET SOURCES DE PUISSANCE

La maîtrise de nouvelles géométries de fibres optiques (multicœurs/multimodes, creuses, dopées, nanofibres, à base de nouveaux matériaux) ouvre de nouveaux champs de recherche.

Le multiplexage spatial dans les fibres multicœurs/multimodes, dans lesquelles les processus d'amplification et d'interactions non-linéaires entre modes restent incomplètement maîtrisés, de même que le contrôle angulaire en phase de ces modes.

La minimisation des non-linéarités et des pertes dans les fibres creuses pour le transport longue distance sans distorsion de faisceau intense, et au-delà de la bande télécom (visible, MIR).

L'exploitation des effets non-linéaires pour les sources et l'imagerie de fonctions actives: capteurs, convertisseurs de longueur d'onde, sources, peignes de fréquences multiples devant gagner en stabilité (bruit de phase et cohérence), extension (>µm), et domaine spectral (UV et IR).

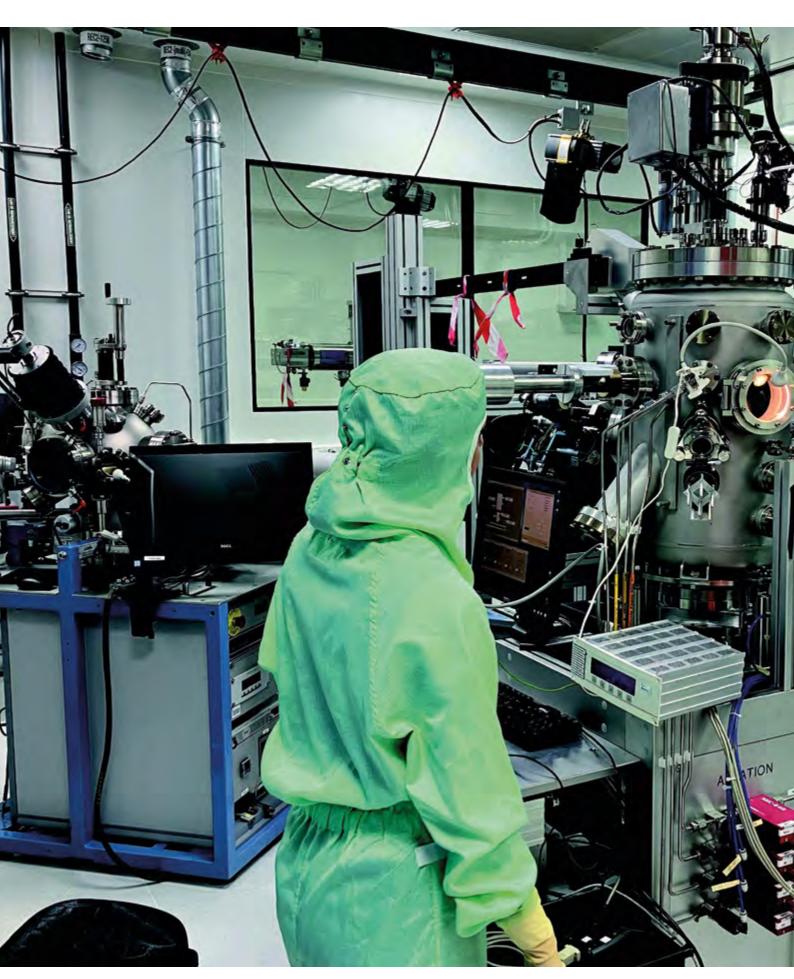
Les avancées conceptuelles et expérimentales sont conditionnées par la qualité, l'uniformité, la faible rugosité des matériaux et des géométries sur grande distance. Des modèles temporels assistés par apprentissage automatique couplés à la théorie de l'information permettront de comprendre les évènements non-linéaires extrêmes (turbulence, chaos spatio-temporel). Une limite des sources et amplificateurs paramétriques fibrés pour la tenue au flux existe au mJ. Si les fibres peuvent s'implanter dans les premiers étages d'amplification, la puissance ultime requiert de l'optique de volume (cristaux massifs) en espace libre où les enjeux en conception et fabrication sont similaires: contrôle spatial et modal, extension spectrale, effets non-linéaires, transverses et de bord, thermo-optiques, grandes dimensions.

### PHOTONIQUE INTÉGRÉE, COMPLEXE, ET MULTIFONCTIONNELLE

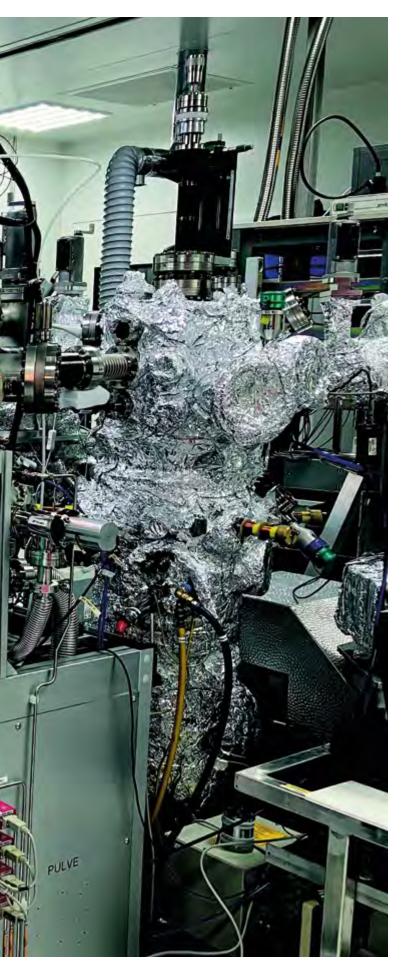
Les avancées des circuits photoniques intégrés reposent sur la compréhension et l'exploitation des interactions lumière-matière aux échelles sub-longueurs d'ondes et sur l'amélioration des matériaux et des procédés technologiques. Afin de répondre aux enjeux des technologies de l'information et du quantique, il sera essentiel de développer des circuits photoniques aussi complexes que des circuits électroniques, intégrant de nombreux composants et réalisant des fonctions diverses.

Circuiterie photonique ultra dense: la complexité des circuits photoniques est corrélée à notre capacité à y intégrer un grand nombre de composants. Le premier enjeu est de pouvoir y réaliser des opérations passives telles que guider la lumière quasiment sans perte, la filtrer spatialement ou spectralement à volonté, et cascader facilement ces opérations. Les performances attendues, en particulier pour les circuits photoniques quantiques, sont très au-delà de l'état de l'art actuel. Pour les atteindre, il faudra réaliser un saut technologique permettant de structurer la matière (semi-conducteurs ou diélectriques) avec une précision quasi atomique, de façon reproductible. L'augmentation de la dimensionnalité des architectures de circuits du 2D au 3D ou 4D (circuits reconfigurables temporellement) permettra d'imaginer de nouveaux agencements des liens photoniques sur puce. Ceci répondra notamment aux besoins d'interconnections riches dans les circuits photoniques pour les réseaux neuronaux, ou l'astrophotonique.

Intégrer de la multifonctionnalité: les matériaux utilisés en photonique intégrée pour la réalisation des différentes fonctionnalités (guides, sources, détecteurs, modulateurs...) sont pléthoriques. Les semi-conducteurs III-V, le silicium, le germanium, le nitrure de silicium, le niobate de lithium, les chalcogénures, les matériaux 2D, des polymères, des oxydes fonctionnels, les métaux nobles, les matériaux supraconducteurs en font partie. Cepen-



Salle blanche pour la fabrication de micro-dispositifs. © Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies.



dant, aucune famille de ces matériaux ne possède toutes les propriétés physiques nécessaires à la conception de tous les composants d'un circuit. Des plateformes hybrides intégrant plusieurs de ces matériaux (limités à seulement 2 aujourd'hui) ont émergé, apportant de nouvelles pistes d'exploration pour la photonique intégrée. Elles permettent d'envisager de nouvelles architectures de circuits multifonctionnels jusqu'ici irréalisables (par ex. des circuits photoniques quantiques intégrant des sources à photons uniques en semi-conducteurs III-V, des guides d'ondes à très faibles pertes en SiN, des modulateurs électro-optiques en LiNbO3 et des détecteurs supraconducteurs en NbN). Elles sont aussi une nouvelle source d'inspiration pour l'étude de phénomènes physigues issus de l'association des propriétés spécifiques des différents matériaux (comme la photonique non hermitienne mélangeant gain et pertes).

Photonique active: la miniaturisation, l'augmentation de la bande passante, la réduction de la consommation énergétique seront encore des enjeux majeurs pour la conception des composants photoniques. Les limites sont repoussées en inventant de nouvelles configurations optiques permettant de confiner la lumière dans des volumes de matière toujours plus petits et d'utiliser des matériaux toujours plus efficaces en termes de non-linéarités ou d'effets électro-optiques. L'utilisation de nouveaux outils numériques prenant en compte l'aspect multi-physique des effets à exalter sera à la base des progrès à venir. Les recherches sur les composants actifs (sources, détecteurs, modulateurs, transistor/portes non-linéaires optiques...) seront intimement liées aux besoins des circuits photoniques en convergence avec la microélectronique (interfaçage optique d'unité de calculs ou de neurones électroniques), le calcul et le traitement du signal tout optique ultra-rapide, ou les communications et le calcul quantique. La variété de ces applications et leurs exigences en termes de performances nécessitent l'exploration de nouveaux concepts, mais aussi de nouveaux composants (isolateurs optiques intégrés, nanolasers autopulsants, supercontinua ultra large bande, peignes de fréquence accordables, portes optiques quantiques,

Régimes non-linéaires en couplage fort photon-excitons/électrons - polaritonique: le couplage des modes photoniques avec des excitations matérielles (exciton, transitions inter-sous bande, plasmons, phonons...), modifie les propriétés lumière-matière de manière intéressante pour la photonique intégrée: fortes non-linéarités optiques, gain sans inversion de population, etc. Ces propriétés sont à explorer grâce aux plateformes telles que les cristaux photoniques ou les métasurfaces, et en s'appuyant sur les concepts de la photonique topologique, pour déboucher peut-être sur des lasers à bas seuils, peignes de fréquences, modulateurs rapides, émetteurs de faisceaux complexes, dont le déploiement dépendra aussi de la découverte de matériaux et configurations permettant une commande électrique et le fonctionnement à température ambiante. Dans le MIR/

THz, le caractère collectif/cohérent des excitations matérielles est un défi pour l'excitation électrique, mais les forts couplages lumière-matière ouvrent des perspectives pour les dispositifs (fonctions non-linéaires, détecteurs, sources non-conventionnelles, etc.).

Extension du domaine spectral au MIR et THz: le gap THz n'est pas encore couvert et les émetteurs MIR doivent encore être améliorés. De nouveaux peignes de fréquences et des émetteurs submillimétriques par photo-mélange MIR seront donc développés, ainsi que des lasers MIR inter-sous-bandes à base de métasurfaces, contrôlant de manière dynamique le spectre, la polarisation et la directivité de la lumière. À l'horizon 2030, les systèmes optiques réalisés par ajout de composants tendront à disparaître au profit de composants à base de métasurfaces couplées à des optiques freeform. Les QCL seront incorporés aux circuits photoniques et leur réponse ultrarapide et non linéaire sera exploitée. La spectroscopie THz ultra-haute résolution permettra d'étudier de nouvelles familles de molécules et de détecter d'éventuelles variations temporelles des constantes fondamentales. Des impulsions THz contrôleront un électron unique au sein de systèmes quantiques. Les expériences non-linéaires et pompe-sonde THz révéleront de nouveaux processus physiques en matière condensée, et les matériaux 2D ou les boîtes quantiques seront largement utilisés pour les technologies MIR et THz. Au-delà des futures technologies, un grand nombre de questions fondamentales associées au MIR et au THz sont en suspens. Parmi cellesci: quelles sont les propriétés optiques des excitons de Rydberg, comment exalter l'interaction lumière-matière et comment générer et détecter des états comprimés de la lumière?

### PHOTONIQUE SUB-LAMBDA, MÉTASURFACES ET OPTIQUE EN MILIEUX COMPLEXES

Métasurfaces pour le contrôle des propriétés de la lumière: les métasurfaces ou surfaces optiques planaires nanostructurées aux échelles sub-λ représentent un enjeu scientifique et industriel dans de nombreux domaines (photo-détection, lidars, imagerie, spectro-polarimétrie, optique non-linéaire et technologies quantiques), et leur intégration dans des systèmes optoélectroniques ou de l'instrumentation permettra d'introduire de manière compacte de nouvelles possibilités de mise en forme de faisceau et de détection. Cet essor nécessitera un contrôle des procédés de nanostructuration à large échelle. Parallèlement, le contrôle de la dynamique de la réponse de ces métasurfaces devrait se développer pour commander activement (électriquement, optiquement) la polarisation, le spectre, la phase de l'onde optique. Les métasurfaces dynamiques (ajout de la composante temporelle comme degré de liberté) ouvrent aussi des perspectives intéressantes comme pour la synthèse de milieux non réciproques. Plusieurs approches sont prometteuses pour ces recherches: les cristaux liquides, le contrôle de la densité de porteurs dans les semi-conducteurs, la modulation électro-optique (e.g. sur LNOI), les polymères conducteurs et matériaux à changement de phase (GST, VO<sub>2</sub>), la modulation thermique. Le développement des métasurfaces à haut facteur de qualité sera important dans ce cadre. Leur couplage en champ proche avec des sources intégrées permettra également d'exalter les taux d'émission ou de générer des états de polarisation et des moments angulaires orbitaux spécifiques. Enfin, d'autres routes seront possibles comme celle du calcul analogique optique. Toutes ces recherches nécessiteront le développement de méthodes numériques et analytiques pour modéliser et analyser les réponses optiques des dispositifs. La conception inverse, les méthodes d'optimisation et d'apprentissage joueront un rôle important pour déterminer des réponses optiques spécifiques complexes (filtrage spectral, contrôle de la polarisation, exaltation de champ proche ou rayonnement en champ lointain, etc.).

Couplages hybrides phonons-photons, et acousto-optique en nanophotonique: des métasurfaces dédiées à la phononique et la nanothermie permettront le contrôle (angulaire, spatial, temporel) du rayonnement thermique. Les retombées pour le refroidissement radiatif, ou les super-isolants, seront partiellement conditionnées par la structuration sub 100 nm des surfaces et matériaux à grande échelle, de manière déterministe, ou en exploitant un désordre corrélé.

Des oscillateurs nano-optomécaniques intégrés, hybridés (piézo en films minces, PCM) plus efficaces (adaptation modale) restent à concevoir pour générer ou détecter des signaux RF/micro-ondes sur porteuse optique spectralement purs. Ils seront le fondement de nouvelles recherches pour des oscillateurs reconfigurables ou des réseaux d'oscillateurs couplés en vue du calcul analogique.

Optique des milieux complexes: l'intégration de motifs structurés et désordonnés avec divers degrés de corrélation à des milieux complexes permettra d'ajouter des fonctionnalités comme l'absorption des ondes ou la transparence des milieux complexes. L'étude du rôle des nanostructures interagissant de manière résonnante avec la lumière, du couplage inter-particules et/ou milieux stratifiés, de leur degré de corrélation, mais aussi des effets d'inter-réflexion entre les surfaces sur les rendus visuels sera un axe majeur pour lequel la modélisation multi-échelle jouera un rôle primordial. Les approches de conception inverse de métasurfaces désordonnées émergent dans le domaine des micro-ondes et les prochaines années les verront investir le domaine spectral visible. Un axe de recherche clé portera sur l'étude du désordre corrélé et sur l'impact du degré de corrélation sur le rendu visuel de matériaux artificiels ou biologiques. La nature est aussi une source d'inspiration pour les structures photoniques. La synthèse et la structuration ou l'assemblage de nanomatériaux sur de larges surfaces seront également des moteurs pour ces études. Par ailleurs, les thématiques des milieux complexes et de l'optique quantique se révèlent très complémentaires, au travers du suivi des états quantiques de la lumière en milieu désordonné. Les technologies quantiques bénéficieront des avancées en contrôle de front d'onde pour générer des états quantiques de la lumière de haute dimension avec des retombées dans le cryptage de données ou le contrôle des ondes dans les dispositifs de calcul quantique.

Nanophotonique diélectrique et plasmonique pour l'exaltation des interactions lumière-matière: l'étude de la chiralité devrait poursuivre ses progrès afin d'atteindre une résolution de détection à l'échelle de la structure unique (protéine, peptide, molécule...), idéalement en milieu biologique (comme à l'intérieur même d'une cellule), ce qui permettra de suivre la dynamique de conformation. L'objectif est de développer des nanostructures générant de grandes densités de chiralité dans le volume centré sur l'objet chiral d'intérêt, en exaltant et contrôlant en phase des champs magnétique et électrique intenses. Les perspectives intéressantes sont la détection de molécules chirales, mais aussi la génération de champ magnétique statique photo-induit et le contrôle du facteur de Purcell magnétique ou électrique. La nanophotonique UV sera également amenée à poursuivre son essor. Cette gamme spectrale correspond à un maximum d'absorption des cycles nucléiques (désinfection UV), à l'autofluorescence des protéines permettant leur détection, à l'absorption de molécules chirales. L'exaltation de l'interaction lumière-matière sera également exploitée pour augmenter l'efficacité de la photocatalyse à petite échelle (e.g. réactions de réduction d'oxygène, synthèse de H<sub>2</sub> à partir de H<sub>2</sub>O ou de NH<sub>3</sub>). En général, l'interaction lumière-matière à des échelles nanométriques jouera un rôle clé dans l'amélioration des capteurs optiques, la spectroscopie exaltée, et l'amélioration de l'efficacité des sources. Le contrôle de la position et de l'orientation des émetteurs dans ces cavités constitue un enjeu pour la synthèse de sources de photons uniques brillantes et couplées à des circuits photoniques. Finalement, les cavités optiques aux échelles sub-nanométriques seront des plateformes efficaces pour la rectification optique et pour atteindre le régime de couplage fort avec des perspectives intéressantes en chimie polaritonique, et l'intégration de matériaux comme les monocouches de dichalcogénures de métaux de transition en pico-cavité permettra de démontrer des fonctions optoélectroniques avec quelques atomes.

### **PHONONIQUE**

Si la physique des photons et des électrons commence à être très bien maîtrisée, il n'en est pas encore de même pour des quasi-particules que sont les phonons, responsables du transport de la chaleur, de la propagation du son, mais qui sont aussi à l'origine de phénomènes d'interaction avec les photons et les électrons. La (nano)-phononique est une science en émergence depuis une vingtaine d'années autour de laquelle la communauté française est particulièrement organisée et une des plus actives en Europe. Nous nous intéressons ici aux effets

de structuration de la matière à très petites échelles de longueur sur les propriétés thermiques et de transport de phonons. À ces dimensions nanométriques, les lois que nous connaissons comme la loi de Fourier deviennent caduques et les mécanismes d'échange de chaleur par les phonons doivent être complètement repensés.

#### TRANSPORT DE CHALEUR À PETITE ÉCHELLE

Deux longueurs caractéristiques permettent de comprendre les mécanismes à l'origine du transport de chaleur par les phonons: les longueurs d'onde dominantes et le libre parcours moyen inélastique des phonons. Si les dimensions d'un objet sont plus petites qu'une de ces longueurs alors les lois habituelles telles que la loi de diffusion de Fourier ne s'appliquent plus. Un des enjeux à venir est de démontrer des effets originaux de confinement de phonons (transport balistique et prépondérance de l'hydrodynamique des flux de phonons). Ceci nécessite de comprendre le transport des phonons en milieux complexes (diffusion en milieux confinés, diffusion hiérarchique, diffusion sur défauts organisés, milieux désordonnés tels que verres, TLS). L'enjeu est de mettre en évidence des effets cohérents sur les flux de chaleur dans des limites de transport balistique de type Landauer par la mesure des flux de phonons en conditions extrêmes (petites dimensions et basse température). Un des grands défis à venir repose sur la maîtrise de ces concepts, pour nous amener à manipuler et contrôler les flux de chaleur à façon comme dans des métamatériaux thermiques (cristaux phononiques).

### TRANSPORT DE CHALEUR DANS LES NANO-OBJETS

Dans les matériaux nanostructurés ou les nano-objets, les enjeux portent sur les multiples effets d'interfaces entre la structure de taille réduite et son environnement. Les phénomènes physiques présents aux interfaces tels que l'interaction phonon-particule (électron, polariton ou plasmon) doivent être maîtrisés afin de mieux comprendre les transferts électriques et thermiques au contact. Les transferts de chaleur dans les contacts ponctuels restent assez inexplorés, en particulier en ce qui concerne la quantification des flux dans un canal unique, les effets tunnel de phonons, ou les effets d'interférence du paquet d'onde. Enfin, une des directions de la nanophononique à l'interface de l'électronique moléculaire est la mesure thermique à l'échelle de la molécule unique, un enjeu majeur pour la compréhension des transferts de chaleur dans des canaux quasi-1D à l'échelle de quelques nanomètres comme par exemple dans des objets biologiques (ADN et origami d'ADN) ou les bilans thermodynamiques dans la cellule vivante où les mitochondries impliquent également les modes vibration.

#### NANOACOUSTIQUE ET OPTOPHONONIQUE

La physique des phonons ne se résume pas à des aspects thermiques où la distribution est polychromatique.

La manipulation de phonons acoustiques monochromatiques fait aussi partie des enjeux futurs en particulier en ce qui concerne des super-réseaux acoustiques. Dans ces systèmes, il est souhaitable de faire de l'ingénierie des vibrations mécaniques de haute fréquence. Le confinement acoustique peut amener des effets topologiques ou de la colocalisation des phonons et photons dans les mêmes cavités optophononiques que l'on mesurera par spectroscopie Brillouin. L'étude des phonons hors équilibre est également prometteuse.

### EFFETS THERMIQUES ET THERMOÉLECTRIQUES DANS LES MATÉRIAUX INNOVANTS

Tous les aspects thermiques (transfert et dégagement de chaleur, profil de température) ont été très peu étudiés sur les nouveaux matériaux 2D comme les TMD (dichalcogénures de métaux de transition) ou les isolants topologiques. C'est pourtant essentiel au vu de leur fort potentiel d'applications. Deux exemples: la gestion de l'énergie en thermoélectricité (texturation hiérarchique) permettra des augmentations de performances grâce aux changements d'échelle; l'utilisation de nanoparticules permettra des applications biomédicales pour le traitement thermique localisé de tissus.

L'apparition des nano-objets (nanoparticules, nanofils, membranes, 2D) est un accélérateur pour le développement de nouvelles techniques expérimentales qui permettront de sonder les flux de chaleur (phonons, polaritons...) à très petite échelle. Ces développements innovants concernent les sondes locales thermiques ultra-sensibles, les techniques couplées SNOM/TDTR, AFM/SThM/SEM. Enfin, les méthodes numériques nécessaires pour prédire les propriétés thermiques et thermodynamiques des nanomatériaux/nanosystèmes devront être adaptées ou développées comme les méthodes des fonctions de Green hors-équilibre, celles basées sur les premiers principes (DFT) et les méthodes de dynamique moléculaire étendues jusqu'aux basses températures.

### APPLICATIONS À LA RÉCUPÉRATION D'ÉNERGIE

La capacité à structurer la matière à différentes échelles de longueur ouvre la voie à beaucoup d'applications thermiques dans la gestion de l'énergie aux basses dimensions. La miniaturisation des capteurs hybridant parfois plusieurs sources d'énergie (thermoélectricité, photovoltaïque, piézoélectricité) ouvre la voie à de nouvelles applications comme avec des MEMS et NEMS thermiques. Des domaines tels que les objets connectés en général seront fortement impactés par ces innovations.

#### **MATÉRIAUX**

Par essence multidisciplinaire et à l'interface des domaines scientifiques, la science des matériaux est l'un des moteurs essentiels des développements de la recherche et de l'innovation. Ne se contentant pas de faire émerger de nouveaux matériaux, concepts et propriétés, elle repousse sans cesse les limites.

#### LES MATÉRIAUX DE DEMAIN: DE LA SYNTHÈSE AU CONTRÔLE DES PROPRIÉTÉS

Nouveaux matériaux et hétérostructures: l'émergence de propriétés et concepts innovants est portée par le développement de nouveaux matériaux et hétérostructures. Ainsi les matériaux 2D de van der Waals, dichalcogénures de métaux de transition, semi-métaux de Dirac et Weyl, mais aussi les matériaux organiques et hybrides (pérovskites halogénées organique-inorganique), les matériaux 2D magnétiques ou antiferromagnétiques, les oxydes fonctionnels, les métamatériaux à base d'oxydes, etc. constituent les matériaux de demain. L'exploration de nouveaux alliages et composés, la possibilité d'induire des changements de phase et d'aller vers les matériaux quantiques ou de réorganiser la matière pour contrôler à volonté les propriétés, comme l'inclusion de nanoparticules dans les polymères reconfigurables, sont également l'ébauche des futures applications et composants.

Fonctionnalisation et hybridation: les nouveaux développements passent également par la fonctionnalisation et l'hybridation de matériaux dont nous maîtrisons la synthèse et connaissons les propriétés. Alors que la fonctionnalisation offre la possibilité d'ajuster les propriétés d'un matériau (phénomènes d'exaltation ou d'inhibition) en modifiant les surfaces via des procédés d'encapsulation/enrobage ou de décoration avec des nanoparticules, molécules biologiques ou chimiques ouvrant ainsi vers l'interdisciplinarité, l'hybridation quant à elle explore l'association de matériaux de nature et/ou de dimensionnalité différentes. L'hybridation 2D/2D, 2D/3D, 1D/1D, multi-matériaux (2D/oxydes, 2D/organiques, III-V/2D, III-V/oxydes, 2D/supraconducteurs, magnétiques/molécules chirales, etc.) va au-delà de la simple association puisqu'elle vise non pas à additionner des propriétés, mais à en faire émerger et en façonner de nouvelles.

Nouveaux procédés de synthèse et nouvelles approches: la recherche en science des matériaux s'accompagne de grands verrous scientifiques et technologiques. L'émergence de nouveaux procédés de synthèse et d'intégration des matériaux, plus ou moins matures, constitue une des premières clés de progrès. Grâce à des approches innovantes de fabrication et de structuration des surfaces par micro-nano-fabrication, sont à notre portée la maîtrise de l'empilement de plusieurs couches 2D de pérovskites, le développement d'architectures aujourd'hui difficilement réalisables comme l'intégration d'oxydes fabriqués par ALD en spintronique, l'intégration métal/semi-conducteur en 3D pour l'électronique, le développement de matériaux organiques sur mesure comme des élastomères électroactifs ou des électrodes extensibles, ou encore les nanostructures fonctionnelles magnétiques. Au développement de ces procédés s'associe désormais la nécessité d'une forte contribution de nouveaux moyens de synthèse, de caractérisation, d'assistance, de prédiction et de simulation. C'est ainsi que face aux multiples combinaisons possibles de matériaux, comme dans les domaines des pérovskites, des oxydes, des dichalcogénures, etc., et à la quantité croissante de données, des outils intégrant l'intelligence artificielle sont désormais considérés, avec des enjeux d'apprentissage utilisant des modèles multiphysiques.

Verrous fondamentaux: tous ces nouveaux défis ne sauront être relevés sans une compréhension approfondie des phénomènes intervenants et contrôlant les propriétés des matériaux et hétérostructures comme c'est le cas dans les isolants topologiques et les métamatériaux. Le rôle des défauts et du désordre, du dopage et des impuretés, des contraintes dans les matériaux, la maîtrise des surfaces et interfaces ainsi que des phénomènes de migration qui y sont associés, la compréhension des instabilités ne sont que quelques exemples de verrous fondamentaux qu'il faut étudier pour maîtriser la reproductibilité des nouveaux matériaux et ainsi les porter vers un futur plus applicatif. lci encore, seront indispensables le développement de nouvelles techniques de caractérisation, notamment multiphysiques, et le couplage expérience/théorie-simulation multi-échelle, ainsi que l'étude des matériaux en conditions de fonctionnement in situ et operando.

### **DÉVELOPPEMENT DE MATÉRIAUX SOUTENABLES**

Matériaux non toxiques et abondants: afin de de relever les grands défis sociétaux, il devient important d'innover pour favoriser l'émergence de nouveaux matériaux performants, durables et issus de matières premières abondantes, non toxiques et non nocives. Le remplacement du plomb dans les pérovskites est l'exemple le plus connu, mais on peut citer aussi l'utilisation de matériaux sources toxiques pour la synthèse des matériaux 2D ou encore les solvants nocifs dans les étapes de synthèse des pérovskites ou de l'électronique organique. Le développement de procédés les plus respectueux possibles de nos environnements et de notre santé, tout en présentant un bilan de consommation des ressources optimum au regard du besoin considéré, doit devenir un enjeu majeur pris en compte, et orienter les choix en termes de matériaux et procédés.

Intégration cycle de vie des matériaux: il est aujourd'hui nécessaire d'intégrer dans nos développements le cycle de vie des matériaux et procédés utilisés, considérant ainsi les notions de frugalité, soutenabilité, durabilité, recyclage, consommation énergétique et émission de dioxyde de carbone. Des choix technologiques doivent être considérés au regard de la disponibilité des matières premières tout comme de leur recyclage, sans pour autant devenir inefficaces. Le remplacement d'éléments toxiques doit être une voie privilégiée, s'inspirant de la production verte, de l'impact zéro déchet et de l'économie circulaire. Mais elle ne peut être la seule voie si aucune solution viable n'est trouvée. Dans ce cas, l'intégration des futures étapes de recyclage doit être im-

pérativement considérée dès les premières phases de développement.

Optimisation des technologies: l'empreinte carbone/ gaz à effet de serre et les coûts énergétiques et environnementaux sont aujourd'hui des paramètres à intégrer dans nos stratégies de développement des matériaux. Aller vers des classes de matériaux plus performantes, favoriser une synthèse localisée où elle est strictement nécessaire et privilégier des techniques de synthèse plus efficaces et moins coûteuses en termes de rejet sont des stratégies à privilégier. Une méthodologie de contrôle des impacts au regard des matériaux et procédés utilisés ainsi que des objectifs scientifiques doit être discutée et intégrée à la démarche scientifique de demain.

### MISE À L'ÉCHELLE: DU MONDE (SUB-) NANOMÉTRIQUE AUX GRANDES SURFACES

Scalabilité: les matériaux et leurs hétérostructures synthétisés aux petites dimensions, comme les matériaux 2D, les couches minces et nanoparticules, et les nanomatériaux présentent des propriétés remarquables. Mais pour que ceux-ci soient porteurs de perspectives en termes d'applications pour la nanoélectronique et la nanophotonique, leur croissance sur de larges surfaces doit être développée sans pour autant en altérer leurs propriétés. Pour cela, de nouvelles techniques et procédés de fabrication sont explorés comme l'évaporation sous vide ou la synthèse décorrélée des parties organiques et inorganiques des pérovskites, le graphène artificiel ou bien encore la mise en œuvre de systèmes désordonnés.

Réduction des échelles: structurer les matériaux aux très petites échelles permet d'en moduler ou d'en exalter les propriétés (en raison notamment du rôle prédominant des surfaces), voire d'en révéler de nouvelles, non atteignables aux plus grandes dimensions (cas de matériaux 2D). La nanostructuration ouvre ainsi la voie vers de nouveaux composés, de nouvelles fonctionnalités, de nouvelles stratégies pour l'hybridation ou l'intégration. Et, bien que les phénomènes s'exprimant à ces échelles nanométriques soient loin d'être pleinement explorés et maîtrisés, nous assistons à l'émergence de l'échelle sub-nanométrique avec le développement de structures atomiques et réseaux d'atomes artificiels. Cependant, tout ensemble intégrant des systèmes (sub-) nanométriques requiert une connaissance profonde des phénomènes mis en jeu en régissant les propriétés. Des verrous fondamentaux apparaissent, impliquant alors le développement de nouvelles techniques de nano-caractérisation et de nouveaux modèles de calculs. La quasi-inexistence de la modélisation de l'épitaxie des matériaux de van der Waals, pourtant si nécessaire au développement de cette activité, en est un bon exemple. Enfin, associé à ces verrous, il n'existe pas toujours de figures de mérite établies à ces échelles. Il est donc aujourd'hui essentiel de définir de nouveaux facteurs de qualité adaptés pour tendre vers une normalisation indispensable aux traitements de ces nouvelles échelles.

#### **DESIGN INVERSE**

Recherche fondamentale orientée par les applications: un apport essentiel de la recherche fondamentale réside dans la synthèse, l'architecturation et l'ingénierie contrôlée de matériaux porteurs de fonctions précises comme les oxydes fonctionnels pour la photonique, les nanomatériaux pour l'énergie, les matériaux antiferromagnétiques pour l'électronique ultra-rapide, etc. L'hybridation et l'intégration de matériaux aux propriétés différentes sont des voies à privilégier pour répondre à des besoins spécifiques orientés par les applications. Des verrous d'intégration multi-matériaux comme l'InP sur silicium ou le développement de couches de protection de TiO<sub>2</sub>/ III-V pour les applications de cellules électrochimiques exigent des investigations qui relèvent des aspects fondamentaux et nécessitent la mise au point de procédés ciblés. C'est ainsi que des questions fondamentales relatives au dopage, contacts, défauts, surfaces et interfaces, etc. redeviennent essentielles.

Multifonctionnalité: la coexistence de plusieurs matériaux aux fonctions distinctes dans un même système est aujourd'hui un prérequis au développement de composants plus efficaces, moins chers, moins volumineux. Cette co-intégration de fonctions multiples, comme le couplage de pérovskites avec le silicium pour la fabrication de cellules solaires tandem, de matériaux antiferroélectriques avec des phonons pour ajuster la vitesse de réponse dans les THz ou encore le développement d'interconnections 3D alliant électronique et photonique implique de connaître les propriétés fondamentales de chacune des parties intégrées et d'en étudier les interactions croisées dans le but de garantir l'efficacité de chacune sans en altérer les autres. L'interdisciplinarité s'invite également dans les systèmes multifonctionnels, avec par exemple le développement de capteurs physiques pour la biologie. Dès les premières étapes de conception, des enjeux additionnels en termes de choix de matériaux et de technologie compatibles avec les applications apparaissent alors.

Développements technologiques et maturation: innover en termes de nouvelles méthodologies (fabrication additive, procédés en phase vapeur pour géométrie à haut rapport d'aspect, hybridation des techniques de synthèse), favoriser l'intégration multi-échelles (nanostructures organisées aux petites et grandes échelles), faire converger différentes technologies (technologies quantiques avec celles historiques à base de semi-conducteurs), intégrer le caractère pluridisciplinaire des besoins (micro-nanotechnologies et santé (optogénétique, neuroélectronique) ou environnement (capteurs tout autonomes) sont les prérequis pour répondre aux enjeux sociétaux. Mais ces développements technologiques, intégrant les besoins applicatifs et impliquant des matériaux de maturités diverses, ne seront pleinement atteints et transférables qu'à la condition d'études approfondies de leur durabilité, robustesse et de leurs mécanismes de vieillissement.

### ENJEUX TRANSVERSES: NOUVELLES APPROCHES ET INSTRUMENTATION

### NOUVELLE MÉTROLOGIE, INSTRUMENTS ET SONDES

Les techniques expérimentales repoussent toujours plus loin les limites de sensibilité, de domaine spectral et de résolutions (temporelle, spatiale, angulaire, dans l'espace réciproque, et leur combinaison). L'instrumentation devient également plus polyvalente et associe dorénavant plusieurs mesures simultanées en fonction de multiples paramètres ou stimuli physiques. Elle se développe aussi in situ et operando. L'étude des matériaux 2D et des multiferroïques accélère d'ailleurs le développement des mesures multiphysiques, en fonction de la pression, de la température, des champs électriques et magnétiques, etc. Plus généralement, de nombreuses techniques sont amenées à se renforcer, parmi lesquelles la spectroscopie photoélectronique résolue en angle (ARPES) en régime hors équilibre, les magnétométries quantiques à centre coloré, le champ proche ultra-résolu spatialement grâce aux pointes/antennes plasmoniques, la spectroscopie Brillouin, les techniques de tomographie et de ptychographie, etc. De nouveaux instruments sont également attendus, tels que des sources solides continûment accordables au-delà de 1 THz, des générateurs d'impulsions picoseconde (au-delà de 100 GHz), ou encore des dispositifs mésoscopiques permettant de contrôler les interactions au niveau des particules individuelles. Ces efforts en instrumentation devront être conjoints et coordonnés entre instruments de laboratoire et IR\* (par ex. nouveaux instruments couplés aux futures lignes de SO-LEIL). Ces mesures ultimes, sur des matériaux et nanoobjets dont la qualité est croissante, permettront sans nul doute de nombreuses avancées fondamentales.

### DÉPLOIEMENT DE L'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE

Les algorithmes d'apprentissage automatique investissent rapidement le champ de la physique. Ils permettront d'accélérer la conception inverse de matériaux, dispositifs, systèmes, de même que la co-conception des couches physiques et de traitement du signal de plus en plus intégrées. L'intelligence artificielle (IA) est attendue pour la conception et le pilotage en temps réel des expériences. À plus long terme, il s'agira d'interfacer l'IA avec différents modèles physiques dans le but de voir prédit un modèle sur la base de résultats d'expériences, ou lorsque la donnée n'est pas accessible à l'expérience. Ceci pose des questions: quelle performance de l'IA pour évaluer la certitude des résultats produits, s'adapter à des situations proches, mais différentes, déterminer la faisabilité expérimentale des prédictions?