

## Résumé

Cette thèse présente une étude ab initio des propriétés électroniques et de transport d'hétérostructures bidimensionnelles constituées d'une monocouche atomique métallique et d'une couche de WSe<sub>2</sub>, avec un intérêt particulier porté à la conductivité Hall anormale (AHC). Les calculs de type DFT et DFT+U sont réalisés en utilisant la suite logicielle Quantum ESPRESSO.

Dans un premier temps, des structures WSe<sub>2</sub>/métaux de transition 3d sont étudiées afin d'analyser l'effet de la proximité magnétique induite par des couches ferromagnétiques. Ces systèmes présentent une hybridation marquée entre les orbitales du métal et celles du WSe<sub>2</sub>, conduisant à des comportements électroniques variés (métalliques, semi-métalliques ou semi-conducteurs) selon la nature du métal de transition et l'inclusion du potentiel de Hubbard U.

L'étude se concentre ensuite sur les structures WSe<sub>2</sub>/terres rares, en particulier le système Gd/WSe<sub>2</sub>. Les résultats montrent que cette structure est métallique et que l'aimantation issue des orbitales d et f du gadolinium, combinée au fort couplage spin-orbite du WSe<sub>2</sub>, entraîne une levée des dégénérescences de bandes au voisinage du niveau de Fermi et génère une courbure de Berry importante, à l'origine d'une conductivité Hall anormale intrinsèque élevée. L'influence des paramètres structuraux sur l'AHC est étudiée mettant en évidence une forte sensibilité de cette grandeur aux effets de contrainte biaxiale et à la distance inter-couches. Enfin, la substitution d'un atome de sélénium par un halogène ou un métalloïde (Gd/WSeBr, Gd/WSeAs) permet de moduler la structure électronique et la réponse Hall anormale. Ces résultats soulignent le potentiel de ces structures fonctionnalisées par des métaux magnétiques comme systèmes prometteurs pour des applications spintroniques bidimensionnelles.

## Abstract

This thesis presents an ab initio study of the electronic and transport properties of two-dimensional heterostructures composed of a metallic atomic monolayer and WSe<sub>2</sub> layer, with particular emphasis on the anomalous Hall conductivity (AHC). Density functional theory (DFT) and DFT+U calculations are performed using the Quantum ESPRESSO software suite. First, WSe<sub>2</sub>/3d transition-metal structures are investigated to analyze the effect of magnetic proximity induced by ferromagnetic layers on the electronic structure of WSe<sub>2</sub>. These systems exhibit significant hybridization between the metal orbitals and those of WSe<sub>2</sub>, leading to a variety of electronic behaviors (metallic, semi-metallic, or semiconducting) depending on the nature of the transition metal and on the inclusion of the Hubbard potential U.

The study then focuses on WSe<sub>2</sub>/rare-earth structures, with particular attention to the Gd/WSe<sub>2</sub> system. The results show that this structure is metallic and that the magnetization arising from the gadolinium d and f orbitals, combined with the strong spin-orbit coupling of WSe<sub>2</sub>, leads to a lifting of band degeneracies near the Fermi level and generates a sizable Berry curvature, giving rise to a large intrinsic anomalous Hall conductivity. The influence of structural parameters on the AHC is investigated revealing a strong sensitivity of this quantity to biaxial strain effects and to the interlayer distance. Finally, the substitution of a selenium atom by a halogen or a metalloid (Gd/WSeBr, Gd/WSeAs) allows tuning of the electronic structure and the anomalous Hall response. These results highlight the potential of

such magnetic-metal-functionalized structures as promising systems for two-dimensional spintronic applications.