IRAMIS

Brèves de l'IRAMIS

Institut Rayonnement Matière de Saclay

numéro 183 novembre 2009

SPCSI

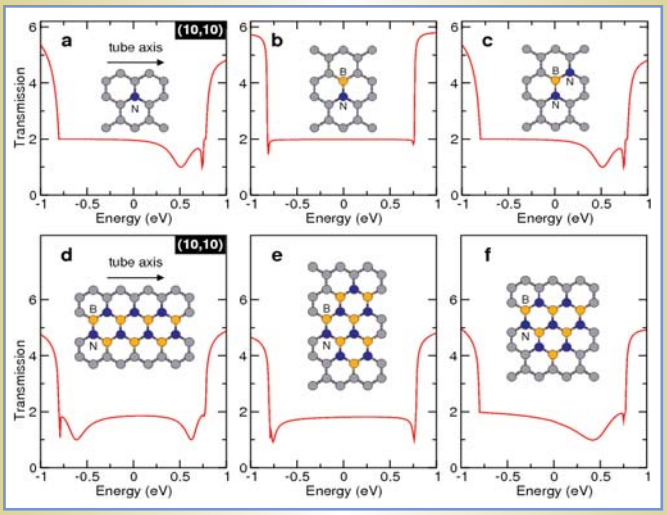
Manipuler la conductance des nanotubes de carbone par dopage bore et azote

Les nanotubes de carbone constituent des éléments très prometteurs pour l'émergence de composants à l'échelle nanométrique (transistors, senseurs, actionneurs, etc.). La modification contrôlée de leurs propriétés intrinsèques, par exemple grâce à un dopage par substitution chimique est donc une thématique importante, très étudiée actuellement.

Il est connu que des substitutions d'atomes d'azote N (cf. figure a) et de Bore B (non montré) dans le réseau nid d'abeille du nanotubes transfèrent respectivement un électron ou un trou, mais créent également des états liés, situés à une énergie au dessus (N) ou en dessous (B) du niveau de Fermi du nanotube. Ces états liés sont responsables d'une forte rétrodiffusion des électrons de conduction et donc d'une baisse drastique de la conductance. Lorsque des substitutions de B et N coexistent au sein d'un même nanotube, ces hétéroatomes se placent sous forme de domaines de BN hexagonal, à l'intérieur du réseau graphitique. Nous avons calculé la conductance de nanotubes présentant une paire de BN, un petit domaine NBN ou des domaines de BN de plus en plus larges. La transmission électronique a été obtenue par le formalisme des fonctions de Green (Landauer) tandis que la matrice de l'opérateur hamiltonien provient d'un calcul *ab initio*.

Nos résultats montrent qu'en présence d'une seule paire BN, la courbe de conductance (figure b) est très similaire à celle d'un tube non modifié. Par contre lorsqu'on accroît le nombre de substitutions, la forme du domaine (figure d,e) et le nombre relatif de donneurs et d'accepteurs qui le composent (figure c,f) sont des paramètres cruciaux pour déterminer si le domaine agira, ou non, comme un centre de rétrodiffusion important.

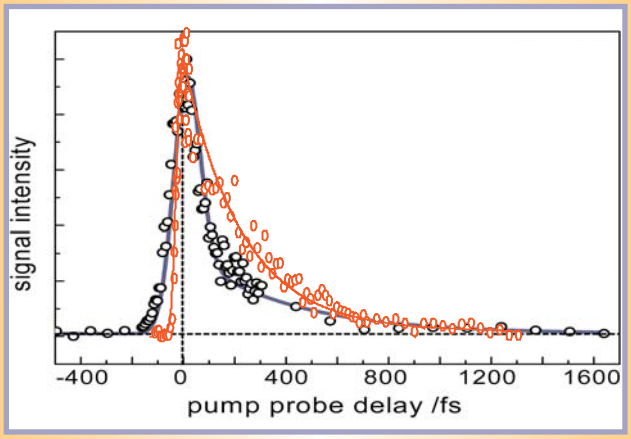
S. Latil 38 56



Courbes de transmission électronique pour divers nanotubes dopés en B et N

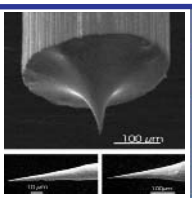
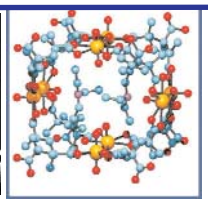
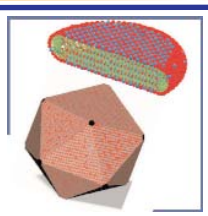
SPAM

Plein feu sur des intermédiaires très réactifs en chimie organique



Evolution temporelle de l'excitation électronique de deux radicaux. L'un très symétrique (t-butyle en rouge) perd son excitation environ deux fois plus lentement que l'autre, beaucoup moins symétrique (diméthyl-butyle en bleu foncé).

Le Laboratoire Francis Perrin, en collaboration avec l'Université de Würzburg (Allemagne) et le Laboratoire de Chimie Physique (U. Paris-sud-11), a ouvert la voie à une vision d'ensemble de la photodynamique d'intermédiaires très réactifs en chimie organique. Ceux-ci, des radicaux et des carbènes, sont omniprésents lors de processus réactifs violents, telles les combustions, ou dans les situations très hors équilibre créées par l'absorption de photons UV dans une atmosphère réactive (situation rencontrée dans l'atmosphère terrestre par exemple dans les processus de photodégradation de polluants).

La thèse de Bastian Noller, en cotutelle franco-allemande, exploite au mieux les possibilités offertes par Laserlab-Europe et SOLEIL. Elle fournit un ensemble de données expérimentales et théoriques sur la photodynamique d'un grand nombre de radicaux organiques et de carbènes, sur une gamme temporelle qui s'étend de la dizaine de femtosecondes à quelques nanosecondes. Ces informations concernent deux situations très intéressantes sur le plan fondamental car encore peu explorées : couplage au sein d'une forte densité d'états électroniques dans le cas des carbènes; couplage entre niveaux de Rydberg via les déformations moléculaires dans le cas des radicaux. Outre des retombées en chimie des intermédiaires réactifs, ces travaux permettent de tester les capacités théoriques actuelles à traiter des situations très multidimensionnelles où des degrés de liberté électroniques sont couplés via de nombreux degrés de liberté de déformation. Par exemple, la durée de vie des états de Rydberg impliqués dans la photodynamique de deux radicaux est sensible à leur symétrie globale (figure).

J.-M. Mestdagh 25 45