

DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE,
INSTITUT RAYONNEMENT MATIÈRE DE SACLAY

SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

SEMINAIRE *

Vendredi 3 décembre 2010 à 11h00

Bâtiment 466, salle 111 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette

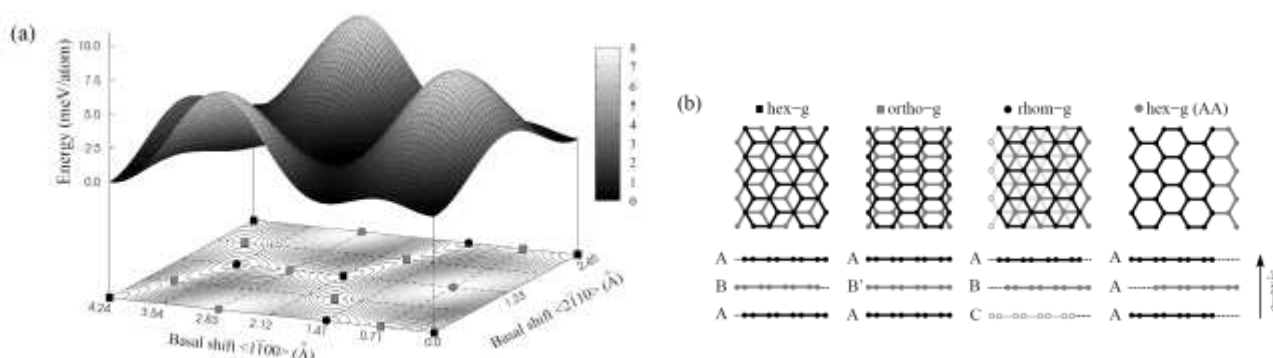
Théorie de la Fonctionnelle de la Densité et approche perturbative pour la modélisation des Nanostructures : Nanotubes, surfaces métalliques, molécules organiques et interaction de van der Waals.

Yannick Dappe

LPS Université d'Orsay

Invité par Cyrille Barreteau

L'essor croissant des nanotechnologies, grâce à de nouvelles techniques expérimentales de pointe, amène des retombées considérables pour l'évolution de nos sociétés. D'un point de vue fondamental, ces développements amènent également de nouvelles questions, tant la complexité des systèmes étudiés devient importante. Par exemple, les derniers progrès en électronique moléculaire, ou le transport dans les matériaux graphitiques, posent la question d'une nouvelle Physique de ces interfaces hybrides. La nécessité d'une modélisation réaliste de ces systèmes s'impose, en vue d'une bonne interprétation de résultats expérimentaux novateurs. En ce sens, la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) semble être l'outil adapté pour ce genre de modélisation. Cependant, du fait de comportements articuliers dans ces nouveaux systèmes (faible transfert de charge, interaction faible et de van der Waals, corrélations à longue portée), les approximations usuelles de a DFT (LDA, GGA, ..) peinent à reproduire correctement ces nouveaux effets. De ce fait, il apparaît nécessaire de développer des techniques allant au-delà de la DFT traditionnelle pour reproduire au mieux la réalité des observationsexpérimentales. Au cours de ce séminaire je vais donc présenter les récents développements réalisés dans la modélisation de ces interactions faibles. Je présenterai notamment à titre d'exemple, certains résultats récents concernant le graphène, les Nanotubes de Carbone et les fullerènes. Je parlerai également des interfaces métal/molécules organiques, notamment en ce qui concerne la caractérisation des dipôles d'interface responsable du transfert de charges à l'interface. Enfin, j'évoquerai mes travaux en cours sur l'absorption de molécules organiques dans les Nanotubes de Carbone, et je présenterai les perspectives de ces différentes approches.



*** SERA PRECEDE D'UNE PAUSE-CAFE A PARTIR DE 10H30**

Formalités d'entrée : Contacter le secrétariat pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le centre de Saclay. Tel : 01.69.08.65.32 ou 01.69.08.40.12; Fax : 01.69.08.40.44 ; e-mail : catherine.julien@cea.fr. Le délai minimum est de 24 heures pour les visiteurs ressortissants des pays de l'Union Européenne, et de huit jours pour les autres. Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le centre de Saclay. Dans tous les cas, se munir d'une pièce d'identité.