



SACLAY



DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE,
DEPARTEMENT DE RECHERCHE SUR L'ETAT CONDENSE,
LES ATOMES ET LES MOLECULES,
SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

SEMINAIRE

Lundi 23 Octobre 2006 à 11h00

Bâtiment 522, salle 137-138 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette

Simulations DFT dans le formalisme LCAO-OO : applications aux interfaces métal- organiques et au transport électronique (STM/STS)

Y. Dappe

*Departamento de Fisica Teorica de la Materia Condensada, Facultad de Ciencias, Universidad
Autonoma de Madrid*

Invité par M.C. Desjonquères

Résumé:

Je vais présenter ici les différents aspects de mon travail scientifique dans le domaine de la Physique des surfaces, interfaces et nanostructures, ainsi que les développements et études menées dans le cadre du formalisme de la fonctionnelle de la densité (DFT).

En premier lieu j aborderai le thème des spectroscopies optiques linéaires et non-linéaires, par l étude et la modélisation de l écrantage du champ aux surfaces métalliques. Dans le même domaine, je traiterai également de la dynamique des électrons de surface, étudiée par spectroscopie de photoémission à deux photons.

Ensuite, je présenterai des travaux réalisés dans le cadre de la DFT en bases d orbitales localisées sur des systèmes complexes. Je m attarderai par exemple sur le cas des interactions de van der Waals dans le graphite. Je développerai également les méthodes théoriques utilisées pour nos travaux et notamment le formalisme du nombre d occupation (LCAO-OO), ainsi que ses applications sur les systèmes carbonés, notamment les molécules d hydrocarbures, mais également sur des systèmes tels que le Silicium ou l Aluminium.

Enfin, je parlerai des problèmes d interfaces métal/molécule organique, des dipôles d interface et des propriétés de transport dans ce type de système, en me focalisant notamment sur la surface (111) de l or et les molécules carbonées.

Pour conclure, je présenterai les principaux aspects de mon projet concernant les interfaces métal/molécules organiques, dans le domaine magnétique, avec notamment l'étude du transport polarisé en spin sur des systèmes Fe/CuPc par exemple, ainsi quel apport de notre modélisation de spectroscopie STM pour l obtention d une meilleure caractérisation du système et l interaction avec les expériences.

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 : 01.69.08.84.46 ou 01.69.08.40.44 ; e-mail : deprez@drecam.cea.fr ou julien@drecam.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.