

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

SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

SEMINAIRE *

Mercredi 18 novembre 2009 à 11h00

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

Computational modeling of carbon nanostructures for energy storage and nanoelectronic applications

Vincent Meunier

Oak Ridge National Laboratory, USA

Invitée par Sylvain Latil

We employed computational methods to study applications of carbon nanostructures as electrical energy storage media (supercapacitors) and nanoelectronic devices (including 3D nanomeshes and heterojunctions). A heuristic model based on density functional theory is built to understand fundamental energy storing mechanisms supercacitors, thereby pointing out the key role played by pore curvature on the storage performance. The electronics applications in carbon nanomeshes are studied using a quantum transport approach within Landauer-Buttiker theory and Green's functions formalism. We emphasize the role of modeling in providing a precise understanding of processes responsible for a given functionality, and how simulations can be used to enhance desired properties and suppress unwanted ones

*** 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.