

DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE, INSTITUT RAYONNEMENT MATIÈRE DE SACLAY  
SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

# SEMINAIRE

Vendredi 19 Avril 2013 à 11h00

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

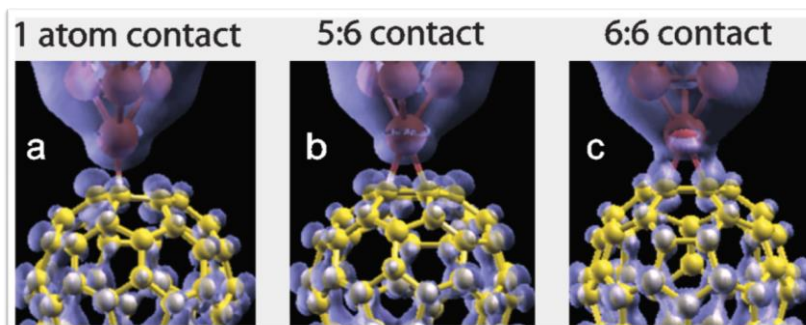
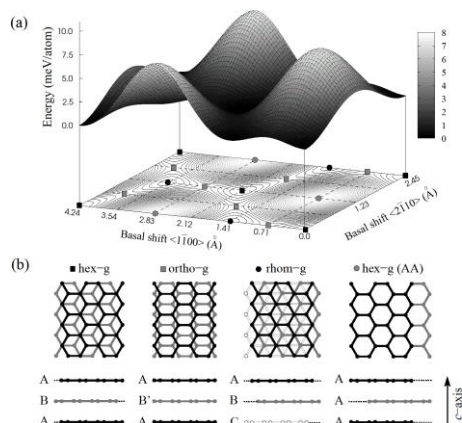
## Interactions de van der Waals et propriétés de transport électronique dans les nanostructures hybrides

Yannick Dappe

CEA-Saclay, DSM, IRAMIS, SPCSI, Laboratoire des Nano-Objets et Systèmes Complexes  
Gif-Sur-Yvette, FRANCE

La Physique des Surfaces et des Nanostructures hybrides à base de matériaux graphitiques (graphène, nanotubes, ...) et de molécules organiques est en plein essor. Les récentes études de structure électronique, de transfert de charges et de propriétés de transport sur ces systèmes sont notamment au cœur des développements de l'électronique moléculaire. Du fait de leur important potentiel, mais également de la méconnaissance des phénomènes d'interface, ces Nanostructures hybrides constituent des thèmes de recherche extrêmement porteurs. La caractérisation structurale et électronique de ces systèmes requiert une connaissance précise des interactions au niveau microscopique. En particulier, les interactions de van der Waals qui jouent un rôle fondamental dans ces systèmes sont mal déterminées au niveau microscopique.

Au cours de ce séminaire, je présenterai une approche pour traiter les interactions de van der Waals dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). J'illustrerai ces développements par quelques résultats sur les matériaux graphitiques ou les molécules organiques. Dans un second temps, je présenterai quelques résultats sur les nanostructures hybrides en termes de transport électronique et de modélisation d'image de microscopie électronique à effet tunnel (STM). Enfin je présenterai quelques perspectives de ces travaux.



**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.