

Jeudi 16/01/2014, 14h00
LLB, Bât.563, p15 (grande salle), CEA-Saclay

Nanostructures hybrides pour l'électronique moléculaire – rôle des interactions de van der Waals

Yannick Dappe

Service de Physique de l'État Condensé (CNRS, URA-2464)

Mon activité de recherche porte essentiellement sur le développement de méthodes théoriques basées sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) afin de caractériser à l'échelle microscopique les systèmes en interaction faible tels que les matériaux graphitiques, les interfaces métal/molécules organiques, etc... Cette activité présente aujourd'hui un intérêt sans cesse grandissant, tant ces systèmes sont fondamentaux pour les développements de l'électronique moléculaire. Les résultats expérimentaux abondant en la matière requièrent un important support théorique pour leur correcte interprétation. La description précise du contact atomique dans une jonction moléculaire constitue par exemple un point fondamental pour la description du courant électrique qui circule à travers la molécule. D'un point de vue purement théorique, le développement de méthodes spécifiques pour décrire les interactions faibles et de van der Waals est absolument indispensable, tant les approximations standard de la DFT (approximation de la densité locale (LDA), du gradient généralisé (GGA), ...) ne sont pas à même de prendre en compte correctement ce type d'interactions. Bien que diverses approches aient été récemment élaborées, ces interactions demeurent compliquées à caractériser, en particulier au niveau microscopique. Ceci est principalement dû au caractère à longue portée des liaisons non-covalentes, à mettre en regard avec l'aspect courte portée des méthodes *ab initio*.

Au cours de cette soutenance, je vais présenter les derniers développements que j'ai effectués afin de traiter ces interactions, notamment par la présentation de résultats sur le graphène et les matériaux graphitiques tels que les fullerènes et les nanotubes de Carbone. Dans la même ligne, je présenterai les résultats obtenus pour les molécules de type benzène ou C_{60} adsorbées sur des surfaces d'or. Enfin, du fait de mes récents travaux dans le domaine du transport électronique et de la modélisation d'images de microscopie électronique à effet tunnel (STM), je présenterai les résultats de travaux sur des molécules adsorbées, étudiées par STM en mode contact, ainsi que des jonctions moléculaires entre électrodes d'or.

Vous êtes tous cordialement conviés au pot qui suivra