



## Étude théorique d'électrodes en graphène pour l'Electronique Moléculaire

**Spécialité** Physique de la matière condensée

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [SPEC/GMT](#)

**Candidature avant le** 30/04/2021

**Durée** 4 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [DAPPE Yannick](#)  
+33 1 69 08 30 32  
[yannick.dappe@cea.fr](mailto:yannick.dappe@cea.fr)

### Résumé

L'objectif principal de ce stage est de comprendre les mécanismes de transport électroniques au sein de jonctions moléculaires à base de graphène, par des méthodes de type "théorie de la fonctionnelle de densité - DFT".

### Sujet détaillé

L'électronique moléculaire constitue de nos jours un domaine de recherche très actif, tant pour les aspects fondamentaux de ces nouveaux systèmes qui permettent d'explorer la Physique à l'échelle atomique, que par les possibles retombées en termes de composants électroniques innovants. En effet, outre la capacité à reproduire les composants électroniques à base de silicium (diodes, transistors, ...), les molécules peuvent apporter de nouveaux types de réponses électriques du fait d'un grand nombre de degrés de liberté quantiques, modulables en fonction de la molécule considérée. En effet, la nature quantique de ces objets ainsi que les nouvelles fonctionnalités qui y sont associées, ouvrent des perspectives fascinantes pour construire l'électronique du futur. En conséquence, ces nouvelles recherches ont conduit à d'importants développements dans le domaine de l'électronique moléculaire, notamment pour ce qui est du contrôle et de la manipulation du transport électronique à travers une jonction moléculaire. La majorité des jonctions moléculaire est fabriquée à base de molécules connectées à leurs extrémités par des électrodes métallique (or, platine, argent, ....). Or il a été démontré à plusieurs reprises que la connexion de l'électrode à la molécule présente une influence non négligeable sur la conductance électrique du système. En ce sens, de récents développements ont proposés l'utilisation de nouveaux matériaux tels que le graphène, une couche monoatomique de carbone, réputée pour ces fantastiques propriétés de conduction électrique, comme électrodes dans les jonctions moléculaires. Ainsi, il a été observé que la connexion à une électrode en graphène permet d'augmenter significativement la conductance de la jonction pour de longues chaînes moléculaires, et donc de réduire le coût énergétique de ces systèmes.

L'objectif principal de ce stage s'inscrit dans ce cadre par l'étude théorique de jonctions moléculaires asymétriques, basées sur des électrodes en graphène ou MoS<sub>2</sub>, ainsi que l'étude de fils moléculaires décollés de la surface par une pointe STM. En utilisant la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), on déterminera la configuration d'équilibre de la jonction moléculaire, ainsi que des propriétés électroniques, avant dans un deuxième temps, à partir des

---

configurations d'équilibre obtenues, de calculer le transport électronique dans un formalisme de Keldysh-Green. Il s'agira alors de comprendre le mécanisme d'augmentation de la conductance par rapport aux jonctions classiques, et de les comparer aux résultats expérimentaux existants. Les différents comportements attendus dans ces systèmes permettent d'étudier la Physique du transport électronique à l'échelle atomique, et peuvent être à l'origine de la conception de nouveaux composants à l'échelle de la molécule unique.

### **Mots clés**

Théorie, simulations numériques, propriétés électroniques et transport électronique, électronique moléculaire, graphène

### **Compétences**

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), formalisme de Keldysh-Green pour le transport hors-équilibre, modèle de liaisons fortes

### **Logiciels**

Fortran, Fireball code

---

## Theoretical study of graphene electrodes for Molecular Electronics

### Summary

The main objective of this internship is the theoretical study within the Density Functional Theory (DFT) frame of graphene-based molecular junctions, as well as the understanding of the corresponding electronic transport mechanisms.

### Full description

Molecular Electronics constitute nowadays a very active field of research, either for fundamental aspects in these new systems which allow exploring new Physics at the atomic scale, than for the possible applications in terms of innovative electronic devices. Indeed, beyond the ability to reproduce silicon based components (diodes, transistors, ...), molecules can also bring new types of electric response due to the great number of quantum degrees of freedom, which are tunable according to the considered molecule. Indeed, the quantum nature of these objects as well as the new associated functionalities open fascinating perspectives to build future electronics. Consequently, those new researches have led to important developments in the field of Molecular Electronics, in particular regarding the control and manipulation of electronic transport through a molecular junction. Most of the molecular junctions are based on molecules connected to metallic electrodes (gold, platinum, silver...). However, it has been demonstrated in several occasions that the connection between molecule and electrode has a non negligible influence on the electric conductance of the system. In that manner, recent developments have proposed to make use of new materials like graphene, which is really well-known for its fantastic electric conduction properties, as electrodes for molecular junctions. Hence, it has been observed that the connection to a graphene electrode allows to significantly increase the junction conductance for long molecular chains, and therefore to reduce the energetic cost of such junction.

The main objective of this internship lies in this frame by the theoretical study of asymmetric molecular junctions based on graphene or MoS<sub>2</sub>, as well as the study of molecular wires lifted off a surface using a STM tip. By using Density Functional Theory (DFT), we will determine the equilibrium configuration of the molecular junction and the corresponding electronic properties, before in a second time to calculate the electronic transport from the obtained structures, using a Keldysh-Green formalism. The purpose will be to understand the mechanism of conductance increase with respect to classical junctions, and to compare them to existing experimental results. The different expected behaviors in those systems allow to study the Physics of electronic transport at the atomic scale, and could be exploited for the conception of new devices at the single molecule scale.

### Keywords

Theory, numerical simulations, electronic properties and electronic transport, molecular electronics, graphene

### Skills

Density Functional Theory (DFT), Green Keldysh formalism for non-equilibrium transport, tight-binding model

### Softwares

Fortran, Fireball code