Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques

SEMINAIRE GÉNÉRAL

L'apport de la simulation atomistique à la compréhension du nanomonde

Hakim Amara

Laboratoire d'études des microstructures, ONERA - CNRS

24 Janvier 2019 à 11 h - Amphi Pierre-Gilles de Gennes

Les nanomatériaux se sont imposés comme la base de nouvelles classes de matériaux dont les propriétés opèrent une rupture scientifique avec leurs parents 3D. Le nombre impressionnant de contributions majeures a mis en lumière leurs propriétés singulières, leurs forces mais aussi leurs faiblesses dans un contexte applicatif donné. La modélisation à l'échelle atomique joue donc un rôle essentiel pour mieux cerner certaines propriétés mais également en prédire de nouvelles.
Pour illustrer l'apport de la simulation atomique à la compréhension du monde nano, deux exemples seront présentés au cours de ce séminaire. Le premier concernera les matériaux 2D où il s'agira ici de traiter le nitrure de bore hexagonal qui attire un intérêt croissant pour ses propriétés de photoluminescence. Nous présentons ainsi une étude théorique détaillée des propriétés excitoniques (paire électron-trou) dans le cas d'une monocouche et également d'un ensemble de couches. En combinant des calculs ab initio (GW/Bethe-Salpeter) et un modèle simple de type liaisons fortes, nous montrons comment l'épaisseur de la couche affecte la forme du spectre d'absorption [1,2]. La deuxième partie de l'exposé sera consacrée aux nanotubes de carbone dont les propriétés électroniques dépendent de la façon dont ils sont enroulés autour de leur axe. Une synthèse sélective permettrait de fabriquer à l'échelle industrielle différents dispositifs, mais de telles applications se heurtent à une compréhension limitée des mécanismes de croissance. A partir de simulations Monte Carlo, nous avons développé un modèle thermodynamique de la croissance permettant d'établir des cartes structurales qui serviront à guider un choix rationnel de catalyseurs et de paramètres de croissance vers une meilleure sélectivité [3,4].

Références:

[1] T. Galvani et al., Phys. Rev. B 94, 125303 (2016).
[2] F. Paleari et al., 2D Mater. 5, 045017 (2018).
[3] Y. Magnin et al. Phys. Rev. Lett. 115, 205502 (2015).
[4] Y. Magnin et al., Science 362, 212 (2018).

Informations orateur:
Laboratoire LEM, ONERA - CNRS,
Thématique Matériaux de basse dimensionnalité
hakim.amara@onera.fr

Alexandre LE BOITÉ & Damien ALLOYEAU