

Etude théorique de nouvelles nanostructures à base de graphène

Un sujet de thèse est proposé au sein du Groupe de Modélisation et Théorie du SPEC (UMR 3680 CNRS – CEA Saclay).

Il s'agit d'un travail théorique portant sur les propriétés électroniques de matériaux carbonés nouveaux tels que des nanomeshes de graphène (réseau parfaitement périodique de trous calibrés dans un plan de graphène), flakes de graphène (macromolécules monodisperses, dont la forme est contrôlée) ou rubans de graphène. Ces matériaux présentent des nouvelles propriétés d'intérêt dans les domaines de l'optique, l'électronique ou la spintronique.

Ce travail consistera à étudier la structure atomique et électronique de ces matériaux, dans le cadre de leur synthèse, afin d'en extraire les propriétés de transport électronique ainsi que leur réponse optique.

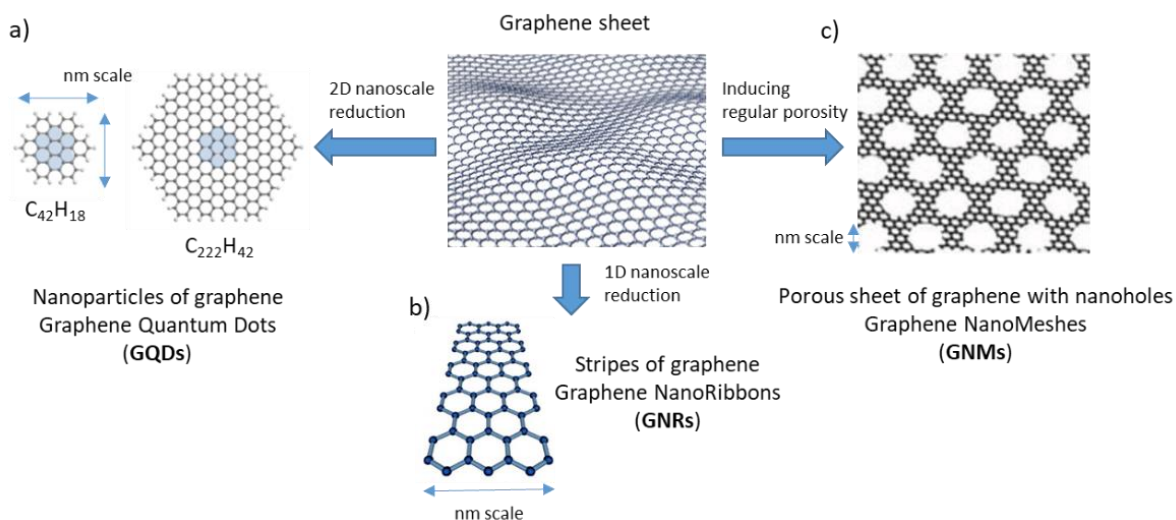
Les méthodes utilisées seront la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), ainsi que des méthodes de type liaisons fortes, qui permettront de déterminer la structure électronique de ces objets avec différents degrés de précision et pour différentes tailles de systèmes. A partir de la structure électronique, les propriétés de transport seront déterminées dans un formalisme de fonctions de Green. Il s'agira également de simuler les images de microscopie électronique à effet tunnel (STM) ainsi que les spectres tunnels correspondant, afin de les comparer aux données expérimentales.

Les propriétés optiques (absorption et luminescences) seront calculées à partir des résultats DFT précédents. Il s'agira ici de déterminer les fonctions de réponse via des approches combinées DFT/liaisons fortes. Une partie du travail consistera à développer le modèles liaisons fortes permettant de traiter les plus grandes structures.

Ce projet s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre différentes équipes du plateau de Saclay : des chimistes en charge de la synthèse de ces matériaux (CEA-NIMBE et ICMMO Paris XI), un groupe de microscopie en champ proche (ISMO) et un groupe d'opticiens (LAC Paris XI).

Les travaux théoriques seront réalisés lors de cette collaboration ce qui assurera un cadre de comparaisons et de *feedback* théorie/expériences extrêmement fructueux.

Le/la candidat(e) devra avoir une formation dans le domaine de la physique théorique de la matière condensée et les approches numériques correspondantes. Il/elle devra également porter un intérêt particulier à la compréhension des techniques expérimentales attenantes.



Personnes à contacter :

Yannick Dappe yannick.dappe@cea.fr
Sylvain Latil sylvain.latil@cea.fr