

Etude du mécanisme d'alignement dans les jonctions moléculaires asymétriques

Colin Van Dyck

Service de Chimie Physique Théorique - Université de Mons

Le contexte Ce travail de mémoire se place dans le contexte de la course à la miniaturisation et la transition de la *micro* vers la *nano*électronique. La tendance actuelle, qui consiste à toujours réduire la taille des composants électroniques (transistors, diodes, capacitances,...) en se basant sur les principes connus de la physique des semiconducteurs, soulève plusieurs problèmes économiques majeurs :

1. Il est extrêmement difficile de fabriquer des dispositifs électroniques nanométriques en utilisant des semiconducteurs
2. Il est difficile de s'assurer de la fiabilité des jonctions de semiconducteurs lorsque les effets quantique tendent à affecter leur fonctionnement
3. Les matériaux semiconducteurs sont de plus en plus coûteux

Cet état de fait se résume souvent sous la forme d'une loi empirique exponentielle (loi de Moore-Rock) : « Le coût de fabrication des puces à base de semiconducteur double tous les quatre ans ».

Le sujet Une possibilité innovante consiste à remplacer les matériaux semiconducteurs par des couches moléculaires autoassemblées à l'échelle nanométrique. Les molécules étant principalement constituées de carbone, elles sont peu coûteuses et leurs propriétés peuvent facilement être modifiées par la substitution d'un ou plusieurs groupements chimiques. C'est l'idée centrale du domaine très actif de la recherche en nanotechnologies qu'est l'électronique moléculaire. La question fondamentale de ce domaine est de savoir comment contrôler la caractéristique courant-tension d'un dispositif moléculaire via des substitutions chimiques sur la molécule. Ce point est à l'heure actuelle loin d'être maîtrisé et requiert la compréhension fine des processus physiques régissant l'alignement des niveaux électroniques des molécules par rapport aux niveaux de Fermi des électrodes.

La tâche du mémorant Il existe un formalisme mathématique permettant de calculer la structure électronique des couches moléculaires contactées à des électrodes (réservoirs infinis d'électrons). Il se base sur l'hamiltonien moléculaire traité selon la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

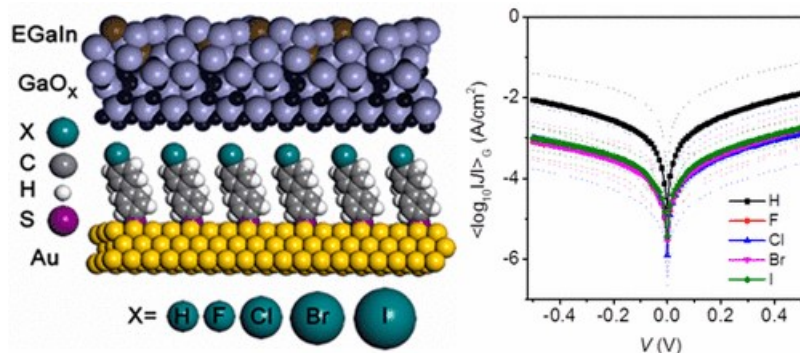


FIGURE 1 – Une couche moléculaire nanométrique est déposée sur un substrat d'or et contactée par une seconde électrode pour former une jonction moléculaire (à gauche) et mesurer sa caractéristique courant-tension (à droite). L'atome supérieur est substitué de façon à modifier le moment dipolaire de la molécule. À droite, on peut constater l'impact de cette modification sur la caractéristique courant-tension. De façon intrigante, tous les substituants, hormis l'hydrogène, mènent à la même caractéristique courant-tension.

et la méthode des fonctions de Green hors équilibre (NEGF). Avec ce formalisme, il est possible de calculer théoriquement l'alignement des niveaux électroniques tout en jouant sur les groupements chimiques des molécules. Le formalisme permet également de calculer la transmission électronique au sein du dispositif et donc de prédire la conductance de la jonction, dominée par l'effet tunnel à cette échelle de la matière. L'étudiant cherchera à comprendre le mécanisme menant à l'alignement observé en lien avec les propriétés chimiques des molécules. Il s'intéressera notamment à l'effet des moments dipolaires au sein de la jonction et tâchera d'expliquer des résultats expérimentaux récemment observés par un groupe expérimental de l'université d'Heidelberg (Figure 1).

Contact Pour toute question : colin.vandyck@umons.ac.be