

Sujets de mémoire

Service de Chimie Physique Théorique - Département de Physique

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

Sujet 1 :

Introduction d'échange Hartree-Fock pour la description théorique du transport dans les jonctions moléculaires

Les jonctions moléculaires sont constituées d'une molécule sandwichée entre deux électrodes. Par l'application d'une différence de potentiel entre ces électrodes, on observe expérimentalement l'apparition d'un courant électrique au sein de ces jonctions. Ce courant est lié au caractère ondulatoire des électrons et s'explique par l'effet tunnel : les ondes électroniques incidentes ont une probabilité non-nulle de traverser la barrière de potentiel constituée par la molécule. Cette probabilité, qui varie en fonction de l'énergie incidente des électrons, est la fonction de transmission de la jonction moléculaire.

La prédiction théorique, *ab initio*, de cette fonction de transmission est une tâche complexe. Elle repose sur l'utilisation de méthodes théoriques élaborées : (*i*) la théorie des fonctions de Green hors-équilibre et (*ii*) la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Ces méthodes permettent d'effectuer une description quantique de ce système complexe pour ensuite calculer numériquement la fonction de transmission. À l'aide d'ordinateurs puissants, il est alors possible de comparer cette fonction théorique avec les mesures expérimentales et comprendre l'origine physique du courant dans les jonctions moléculaires.

L'utilisation de ces méthodes repose sur une série d'approximations, inhérentes à la théorie de la fonctionnelle de la densité. Durant ce mémoire, la possibilité récente d'ajouter une quantité variable d'échange Hartree-Fock dans la description quantique du système sera étudiée (fonctionnelle hybride). En principe, cela pourrait permettre la prédiction quantitative de la conductance des jonctions moléculaires, et permettre à terme le design de nouveaux dispositifs électroniques à l'échelle nanométrique.

Keywords *Nanoelectronics, Quantum Transport, Density Functional Theory*

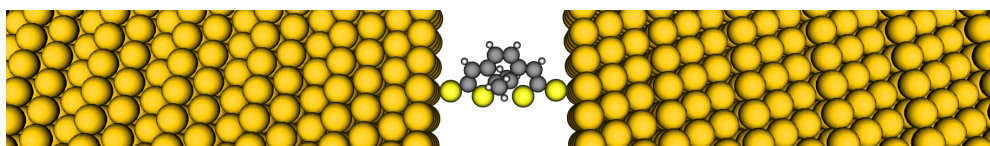


FIGURE 1 – Illustration d'une jonction moléculaire : une molécule est sandwichée entre deux électrodes d'or.

Sujet 2 :

Développement d'algorithmes bio-inspirés pour la chimie physique

Optimiser une fonction de plusieurs variables est un problème au carrefour d'une multitude de disciplines scientifiques : économie, chimie, physique, biologie... En physique, il est courant que la solution d'un problème s'exprime comme l'extremum global d'une fonction donnée. Un exemple célèbre est donné par le principe variationnel en mécanique quantique qui permet de construire des approximations de la fonction d'onde. En chimie, la détermination de la structure géométrique d'une formule moléculaire consiste mathématiquement en la recherche d'un ensemble de coordonnées atomiques minimisant l'énergie totale du système moléculaire, obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger.

Toutefois, la recherche des extrema d'une fonction dépendant de beaucoup de variables est une tâche ardue, requérant généralement l'exécution d'algorithmes numériques d'optimisation sur ordinateur. Une approche novatrice et originale consiste à imiter la nature : la sélection naturelle peut être vue comme un processus d'optimisation. Cette idée a mené au développement des algorithmes génétiques basés sur une population d'individus. Par la suite, d'autres algorithmes bio-inspirés ont vu le jour. Parmi ceux-ci, certains se sont inspirés de la manière dont les abeilles explorent et exploitent de nouvelles sources de nourriture. Concrètement, sur base de stratégies de coopérations et de compétitions, les individus représentant chacun une solution approchée du problème se meuvent dans l'espace de recherche afin de trouver la meilleure solution possible au problème d'optimisation. Ces algorithmes bio-inspirés sont particulièrement performants lorsque le problème comporte un grand nombre de minima/maxima locaux.

Durant ce mémoire, l'étudiant devra coder un algorithme bio-inspiré : Brain Storm Optimization. Celui-ci imite la façon particulière avec laquelle les humains résolvent, par la technique de brainstorming, des problèmes complexes qu'une seule et unique personne ne pourrait résoudre. Cet algorithme sera appliqué à deux problèmes concrets relevant de la chimie physique. Premièrement, la recherche de la structure du benzène à partir de sa formule chimique (C_6H_6). Deuxièmement, l'optimisation des fonctions de bases utilisées dans les calculs de chimie quantique à l'aide du principe variationnel de la mécanique quantique. Ce travail sera effectué en co-supervision avec Steve Smeets réalisant sa thèse au sein du service de Micro et Nano-Photonique (Bjorn Maes).

Keywords *Swarm Intelligence Algorithms, Quantum Chemistry*

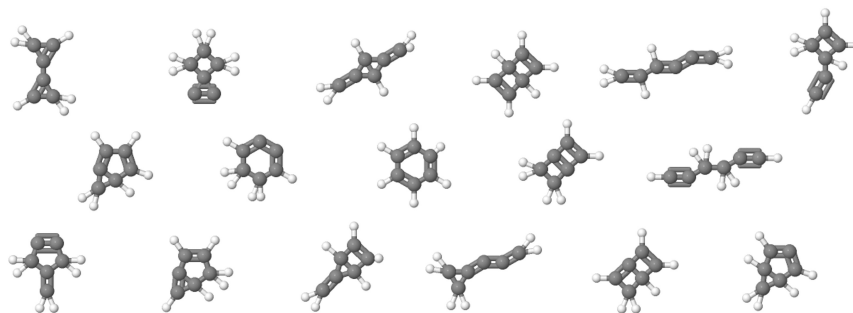


FIGURE 2 – Illustration de 17 (parmi les 217) isomères du benzène (C_6H_6)