

# Initiation à la recherche scientifique

Service de Chimie Physique Théorique - Département de Physique

**Contact** Pour toute question : [colin.vandyck@umons.ac.be](mailto: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. A 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 stage, 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*

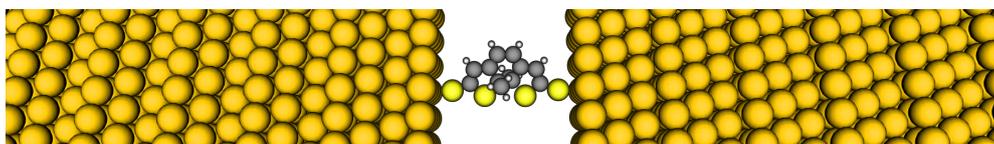


FIGURE 1 – Illustration d'une jonction moléculaire : une molécule est sandwichée entre deux électrodes d'or.

## Sujet 2 :

### The interface is the device : Field and Thermionic emissions at Metal-Organic interfaces

Un champ très actif de la recherche en nanoélectronique s'intéresse aux propriétés conductrices de couches organiques d'épaisseur nanométrique prises en sandwich entre deux électrodes. La caractéristique courant-tension de ces dispositifs nanométriques présente une forte non-linéarité (la loi d'Ohm ne s'applique pas). L'attribution du mécanisme physique à l'origine du courant mesuré dans ces dispositifs est un problème complexe relevant de la physique de la matière condensée. L'objet de ce stage est de tester un modèle alternatif qui pourrait fournir une explication simple à des mesures expérimentales publiées dans la littérature dont l'origine est fortement débattue.

Une surface métallique portée à haut potentiel devient un canon à électron. En substance, l'application du potentiel fournit un profil électrostatique favorable, qui abaisse la barrière énergétique que doivent franchir les charges électriques pour s'échapper du métal (fonction de travail). On distingue trois mécanismes à l'origine de cette émission de charges :

- Franchissement de la barrière par excitation thermique ('effet Schottky')
- Traversée directe de la barrière par effet tunnel ('effet de champ')
- Excitation thermique suivie d'une traversée directe par effet tunnel ('thermally assisted tunnelling')

Durant ce stage, l'étudiant testera l'hypothèse selon laquelle les caractéristiques mystérieuses de certains dispositifs relevant de la nanoélectronique organique sont dominées par les effets d'interfaces, c-à-d, l'injection ardue des charges dans la couche organique. Un modèle d'émission de charge prenant les trois mécanismes en considération sera développé, à l'aide de méthodes élémentaires de l'analyse numérique. Ce modèle permettra de prédire des caractéristiques électriques qui seront ensuite confrontées à la réalité expérimentale.

**Keywords** *Thermionic and field emission, Metal-Organic interfaces, Molecular Junctions*

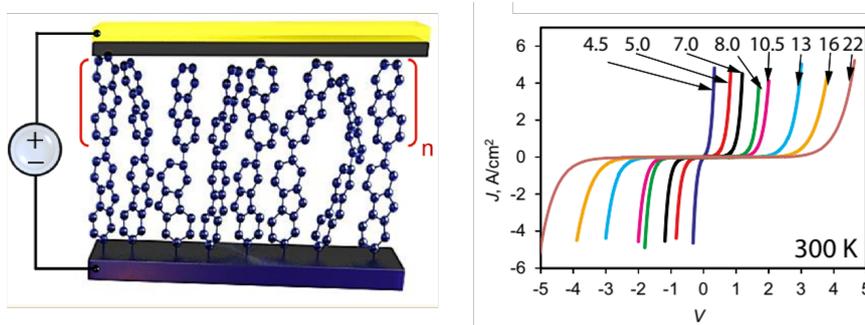


FIGURE 2 – A gauche : couche organique désordonnée sandwichée entre deux électrodes. L'épaisseur varie de 4,5 à 22 nm. A droite : caractéristiques courant-tension non-linéaires de ces dispositifs nanométriques.