

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1



Ecole Doctorale : SPI

Discipline : Micro et Nano Technologies,
Acoustique et Télécommunications



Nom du candidat : Guillaume COPIE

JURY

Président de Jury

Directeur de Thèse

F. CLERI Professeur à l'Université de Lille1, IEMN

Rapporteurs

P. SONNET Professeur à l'IS2M, Mulhouse

Y. DAPPE HDR IRAMIS au CEA, Saclay

Membres

F. CHERIOUX Directeur de Recherche CNRS HDR à FEMTO-ST, Besançon

A. LEGRIS Professeur à l'UMET, Lille

B. GRANDIDIER Directeur de Recherche CNRS HDR à l'Université de Lille1, IEMN

M.-L. BOCQUET Professeur à l'ENS, Paris

A. DE VITA Professeur au King's Collège, Londres, Angleterre

TITRE DE LA THESE



Modélisation multi-échelle de l'auto-assemblage
de nanostructures sur surfaces

RESUME

Le développement des méthodes de simulations numériques a permis de modéliser des systèmes physiques de plus en plus complexes et de les étudier à des échelles de taille et de temps importantes en appliquant une démarche multi-échelle.

Ainsi, dans le cadre de cette thèse, un premier travail a regardé l'étude de l'auto-organisation de trois types de molécules organiques aromatiques (THBB, TBBB, TCNBB) sur une surface semi-conductrice dopée bore (Si:B(111)) à l'aide de différents outils numériques. Dynamique moléculaire empirique, métadynamique, et simulations de type Monte-Carlo ont été judicieusement combinées pour permettre l'étude multi-échelle de ces systèmes permettant ainsi d'explorer l'importance des interactions non-covalentes inter-moléculaires et molécule-surface, dans la structure et stabilité des réseaux 2 dimensions formés par ces trois molécules. A noter que, pour la molécule TCNBB, un comportement cinétique a également pu être mis en évidence, pouvant conduire à la coexistence de phases de symétries différentes sur la surface. Dans tous les cas, la comparaison avec les résultats expérimentaux est excellente.

Dans une deuxième partie de ces travaux, l'étude du comportement de couches denses de molécules chimisorbées à l'interface entre des nanoparticules d'Or auto-assemblées sur surface a été abordée. Deux types de molécules ont été étudiés (AzBT et MUDA). Pour la première, un comportement différent de la jonction moléculaire, suivant la configuration des molécules (cis ou trans), a pu être mis en évidence, permettant de proposer des explications microscopiques pour la réponse électronique des jonctions entre nano-particules auto-assemblées, utilisées dans des dispositifs d'électronique moléculaire. Pour la seconde molécule, nous avons pu étudier le comportement des couches moléculaires à l'interface entre couches de nanoparticules, quand celles-ci sont soumises à une contrainte mécanique de type compression. Un module de Young efficace pour ces couches moléculaires a pu être estimé.

Soutenance prévue le 11 décembre 2014 à 14h00
Amphi du LCI