

Simulation ab-initio du transport électronique à travers une couche organique déposé sur une surface

M. Cobián¹, F.D. Novaes^{2,4}, H. Ueba³, A. Garcia², P. Ordejón⁴ et N. Lorente⁴.

¹Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes

Ecole Centrale de Lyon; 36 avenue Guy de Collongue, F-69134 Ecully; France

²Institut de Ciencia de Materials de Barcelona ICMAB-CSIC, Campus de la UAB, 08193 Bellaterra, Spain

³Department of Electronics, Toyama University, Gofuku, Toyama 930-855, Japan.

⁴Centre d'Investigacio en Nanociencia i Nanotecnologia CIN2, Campus de la UAB, 08193 Bellaterra, Spain

L'interface entre des molécules organiques et une surface métallique est à l'origine de matériaux hybrides utilisés en microélectronique. Dans la plupart des cas, l'hybridation de la molécule organique avec le substrat conduit à un élargissement des niveaux électroniques. Dans notre étude, nous considérons la déposition de molécules de C60 sur une surface d'or(111) préalablement fonctionnalisée avec une autre molécule organique : la tetraphenyladamantane TPA. Il en résulte une couche organique nanostructurée où les niveaux d'énergies du fullerène sont peu affectés par la surface.

Les états moléculaires du C60 restent, donc, localisés et peu élargis ce qui donne lieu à des comportements non-linéaires dans les phénomènes de transport électronique.

Les calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle densité révèlent que le C60 adopte une configuration bien précise sur le substrat qui correspond aux images obtenues par STM. Des mesures STS (Scanning Tunneling Spectroscopy) présentent un effet de résistance différentielle négative. En effet, lorsque la tension entre la pointe et le substrat dépasse un certain seuil, l'intensité du courant traversant le système décroît. Ce type de système est très étudié de part ses potentielles applications en microélectronique. Ceci a motivé notre étude au niveau ab-initio avec le code TranSIESTA.

[1] KJ. Franke, G. Schulze, N. Henningsen, I. Fernandez-Torrente, JI. Pascual, S. Zrwell, K. Ruck-Braun, M. Cobián, N. Lorente Physical Review Letters **100**, 036807 (2008)

