

# Interactions de van der Waals et Théorie de la Fonctionnelle de la Densité : méthodologies et applications aux systèmes hybrides molécules/surfaces

Yannick J. Dappe  
CEA Saclay, IRAMIS/SPEC

L'émergence des nanotechnologies a vu la communauté scientifique s'orienter vers la découverte de nouveaux matériaux toujours plus complexes, afin d'en exploiter de nouvelles propriétés mécaniques, électroniques, chimiques ou biologiques, etc ... Parmi ces matériaux, les molécules et leurs assemblages, relativement peu coûteux à produire et faciles à manipuler offrent une gamme énorme d'applications nouvelles. Par exemple, l'électronique est en train de basculer de l'ère du Silicium à l'ère des molécules, profitant ainsi des propriétés quantiques de ces nano-objets.

Cependant, la compréhension des assemblages moléculaires nécessaires à ces évolutions, et notamment les interactions molécule-molécule et molécule-surface, s'avère être un redoutable défi scientifique. D'un point de vue structural par exemple, les interactions à la base de ces assemblages comme les interactions de van der Waals demeurent difficile à décrire au niveau microscopique. En effet, les méthodes de premier principe tels que la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) prennent difficilement en compte ces interactions où les densités électroniques se recouvrent peu. Or les propriétés électroniques et de transport sont intrinsèquement liées aux aspects structuraux, et de ce fait, la description de ces interactions joue un rôle crucial dans la compréhension de ces propriétés.

Au cours de cet exposé, je vais donc présenter un bref état de l'art des méthodes utilisées pour décrire les interactions de van der Waals dans le formalisme de la DFT. Des méthodes semi-empiriques jusqu'à l'approximation de la phase aléatoire (RPA), je tacherai de présenter les aspects les plus intéressants de ces méthodes. Dans un second temps, je présenterai la méthode que nous avons développée, basée sur une théorie de perturbation intermoléculaire et l'approximation dipolaire, ainsi que quelques applications dans le domaine des matériaux graphitiques et des interfaces métal/molécules organiques. Je conclurai finalement par la présentation des dernières perspectives dans ce domaine.

## Références :

- [1] Y.J. Dappe and J.I. Martinez, Carbon 54, 113 (2013).
- [2] M. Švec, P. Merino, Y. J. Dappe, C. González, E. Abad, P. Jelínek, and J. A. Martín- Gago, Phys. Rev. B 86, 121407(R) (2012).
- [3] Y.J. Dappe, P.G. Bolcatto, J. Ortega and F. Flores, J. Phys. : Condens. Matter 24, 424208 (2012).
- [4] Y.J. Dappe, J. Ortega and F. Flores, Physical Review B 79, 165409 (2009).
- [5] Y.J. Dappe, Miguel A. Basanta, José Ortega and F. Flores, Physical Review B 74, 205434 (2006).