

Modélisation de différentes formes de composés moléculaires et de dispositifs.

Christophe Krzeminski ^(a)



^(a) iemn, Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologies,
Université des Sciences ET Technologies DE Lille,
Avenue Henri Poincaré, Cité Scientifique,
59652 Villeneuve d'Ascq

Matériaux, chimie et applications

Cette modeste communication scientifique présente les résultats de modélisation théorique menés sur différentes classes de composés organiques. Ces différents composés sont caractérisés par des changements de propriétés très importantes en terme de conformation, de propriétés électroniques, optiques voire vibrationnelle sous l'effet d'un stimuli qui peut-être de nature physique ou chimique. En pratique, au niveau technologique, il pourrait être envisagé d'utiliser ces composés moléculaires pour implémenter des interrupteurs moléculaires, sous la forme de deux états stables distincts (ouvert) ou (fermé) éventuellement des mémoires via des caractéristiques électroniques non-linéaires voire hautement dépendent de l'état de charge. Différents dérivés du composé azobenzène comportant deux états stables (trans) et (cis) sous l'effet d'une réaction d'isomérisation activée par un stimuli optique adéquat ont été étudiés. Il serait possible en terme d'ingénierie moléculaire d'améliorer certaines propriétés électroniques et les variations sous isomérisation de la molécule en par adjonction de groupements périphériques mais qu'il semble par contre difficile de préserver les propriétés particulières de la liaison azo (C-N=N-C) entre les cycles phényles pour des applications en électronique moléculaire. Les composés bisarylethynedihydroanthracène comportant un centre hydrogéné ont également étudié cette fois pour leurs propriétés électroniques en terme de jonction moléculaire. Caractérisé par des largeurs de bande interdite importante, il semblerait que ce soit plutôt les propriétés vibrationnelles et la localisation des modes de vibration de la jonction éventuellement une résonance électron-phonon et un stimuli micro-onde dans la gamme térahertz de ces molécules puisse avoir une influence au niveau de la caractérisation du transport électronique en jonction moléculaire. Enfin, les composés indolinoimidazoles, multi-états dont le cycle oxazolidine peut être ouvert via un stimuli de nature chimique, ici la protonation permettrait d'observer des variations de l'affinité électronique (\mathcal{A}) et pourrait être intéressante mais probablement plutôt dans un cadre électrochimie. En résumé, sur un plan ici scientifique, il serait possible dans l'ensemble de ces composés effectivement de trouver une forme moléculaire d'interrupteur que ce soit en terme de mécanisme chimique ou physique via l'orientation des cycles moléculaires, via une localisation des modes vibrationnels de la jonction ou tout simplement via la distance atomique.

Remerciements: Cette étude est réalisée dans le cadre du contrat EVOLMONET de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) porté par l'équipe NCM de l'iemn UMR 8520 et MOLTECH-Anjou, UMR 6200 de l'Université d'Angers.