

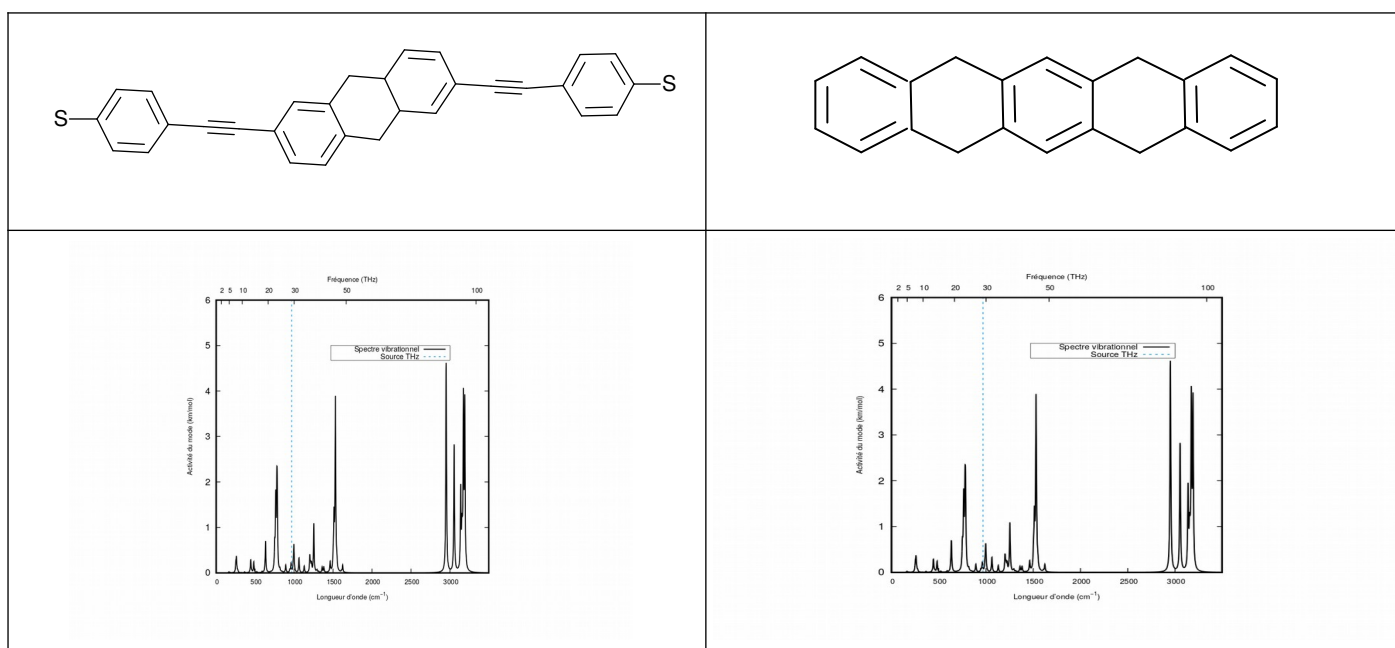
Modélisation Ab-Initio de divers Composé Vibrational en Jonction Moléculaire sous Champs électrostatique et Impulsion Terahertz.

Christophe Krzeminski

Iemn, Laboratoire Central (LCI), Université de Lille, Cité Scientifique,
Avenue Henri Poincaré, 59652 Villeneuve d'Ascq.

Cette communication scientifique présente des modélisations théoriques Ab-initio principalement en théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) de divers composés organiques aromatiques bisarylethyne, anthracène ou dihydropentacène. Ces composés sont susceptibles de par leurs caractéristiques d'avoir des propriétés potentiellement intéressantes notamment pour des caractérisations fines en microscopie SNOM de matériaux moléculaires [2] via le spectre vibrationnel. Ces caractérisations comportent à la fois un champ électrostatique classique mais également ici un régime d'impulsion modulé dans la gamme terahertz (~30 THz) ayant une influence complexe au niveau des propriétés de conduction en transport tunnel des jonctions moléculaires. Au niveau nanotechnologie, il existe une large diversité d'interprétation physique de ces caractéristiques électriques relativement non-linéaires caractéristique de la transmission observées qui vont d'un effet de « localisation électronique moléculaire » [3] sous champs électrique élevé, d'un couplage électron-phonon et de l'influence des modes de vibration à fréquence peu élevée [4].

L'hydrogénation par voie chimique de ces composés aromatiques au niveau atomique est potentiellement intéressante dans le sens où celle-ci permettrait de moduler à la fois les propriétés électroniques, ici en augmentant la largeur de bande interdite des composés afin de diminuer la composante du courant à effet tunnel élastique, tout en modulant finement les propriétés de la conformation moléculaire ainsi que les activités des modes vibrationnels moléculaires à priori sondés. L'alternance de cycle hydrogéné (σ) et de cycle (π) pourraient également être intéressante dans cette optique notamment au niveau des propriétés du spectre vibrationnel moléculaire à priori sondé.



Toutefois, il semble exister probablement plusieurs limites à cette spectroscopie spécifique SNOM terahertz de jonctions moléculaires en courant tunnel à savoir la persistance de ces propriétés moléculaires vibrationnelles fines voire éventuellement de phase ainsi que le niveau de la composante terahertz réfléchi par la surface métallique et réellement vue par la jonction moléculaire et la sonde nanométrique par rapport à la composante du champ électrostatique classique.

[1] D. W. Pohl et al., « *Scanning near-field optical microscopy (SNOM)* », *Journal of Microscopy*, Vol. 152, n°13, p. 853, (1988).

[2] Iris Niehues et al., « *Identification of weak molecular absorption in single-wavelength s-SNOM images* », *Optics Express*, Vol. 31, n°4, (2023).

[3] Perrin, Mickael L., et al. "Single-molecule resonant tunneling diode." *The Journal of Physical Chemistry C* 119.10 (2015): 5697-5702.

[4] H. Bi et al., « *Electron-phonon Coupling in Current-Drive Single-Molecule Junctions* », *Journal of American Chemical Society*, Vol. 142, p. 3384-3391, (2020).