



SOUTENANCE HDR (Habilitation à Diriger des Recherches)

Hakim AMARA

Apport de la simulation atomique à la compréhension du nanomonde

Mercredi 13 janvier 2021 à 14h
Amphithéâtre Pierre-Gilles de Gennes - Université de Paris
10, rue Alice Domont et Léonie Duquet - 75013 Paris

Pour y assister par visioconférence, voici le lien zoom :
<https://us02web.zoom.us/j/84302749196?pwd=SU1xeGIZWWZTS2xreDlOTNjelBnQT09>

Cyrille BARRETEAU
Christine MOTTET
Christophe VOISIN
Jacek GONIAKOWSKI
Gilles PATRIARCHE
François DUCASTELLE

CEA-Université Paris Saclay
CINaM-Aix Marseille Université
LPENS-Université de Paris
INSP-Sorbonne Université
C2N-Université Paris Saclay
LEM-ONERA/CNRS

Rapporteur
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Invité



Résumé

Les nanomatériaux se sont imposés comme la base de nouvelles classes de matériaux dont les propriétés physico-chimiques opèrent une rupture scientifique avec leurs parents massifs. Le nombre impressionnant de contributions majeures a mis en lumière leurs propriétés singulières, leurs forces mais aussi leurs faiblesses pour leur utilisation dans diverses applications. Dans ce contexte, la modélisation à l'échelle atomique joue donc un rôle essentiel pour non seulement mieux cerner certaines propriétés mais également en prédire de nouvelles. Pour illustrer l'apport de la simulation atomique à la compréhension du nanomonde, deux exemples seront présentés issus de mes travaux.

Le premier concernera le nitrure de bore hexagonal, un matériau 2D dont l'intérêt ne cesse de croître pour ses propriétés de photoluminescence si uniques. Nous présentons ainsi une étude théorique détaillée des propriétés excitoniques (paire electron-trou) dans le cas d'une monocouche et également d'un ensemble de couches. En combinant des calculs *ab initio* (GW/Bethe-Salpeter) et un modèle de type liaisons fortes, nous montrons comment l'épaisseur de la couche affecte la forme du spectre d'absorption. La deuxième partie de ma soutenance sera consacrée aux nanotubes de carbone dont les propriétés électroniques dépendent de la façon dont ils sont enroulés autour de leur axe. Une synthèse sélective permettrait de fabriquer à l'échelle industrielle différents dispositifs mais de telles applications se heurtent à une compréhension limitée des mécanismes de croissance. A partir de simulations Monte Carlo, nous avons développé un modèle thermodynamique de la croissance permettant d'établir des cartes structurales qui serviront à guider un choix rationnel de catalyseurs et de paramètres de croissance vers une meilleure sélectivité.