

## Un simulateur pour l'électronique moléculaire

Publié le jeudi 22 septembre 2005

Voir en ligne : <https://www.france-science.org/Un-simulateur-pour-l-electronique.html>

Les progrès de l'électronique moléculaire dépendent fortement de notre compréhension des contacts entre molécules individuelles et silicium, et notamment des mécanismes de transfert de l'électricité à l'interface. Les scientifiques de l'Université de Purdue en Géorgie viennent de développer un outil de simulation capable de montrer comment le courant passe des atomes de silicium à la molécule individuelle avec laquelle ils sont en contact. L'équipe a cherché à modéliser les interactions entre niveaux électroniques atomiques et moléculaires d'un contact entre silicium et une molécule de fullerène, dans différents cas de figure, pour lesquels la molécule est simplement "posée" sur le silicium, ou bien "connectée" au silicium par un processus de recuit, ou encore "accrochée" sur un défaut de surface. Leur modèle permet de prévoir comment la conduction et la tension changent quand on passe d'un type de connexion à un autre, et leurs prédictions confirment des mesures faites en laboratoire par d'autres groupes. Ces travaux sur le transfert d'électricité à l'échelle atomique ont été développés pour la molécule de C-60, que l'on peut se procurer facilement, mais les méthodes de simulation pourront être étendues à d'autres systèmes, et même permettre de prévoir quel type de molécule peut permettre d'obtenir des caractéristiques de conduction spécifiques.

### Source :

[http://www.nanotech-now.com/news.cgi?story\\_id=11061](http://www.nanotech-now.com/news.cgi?story_id=11061)

### Rédacteur :

Roland Hérino, [attache.science@consulfrance-houston.org](mailto:attache.science@consulfrance-houston.org)