
Théorie et modélisation des expériences



Mark O. Goerbig

→ activité au LPS

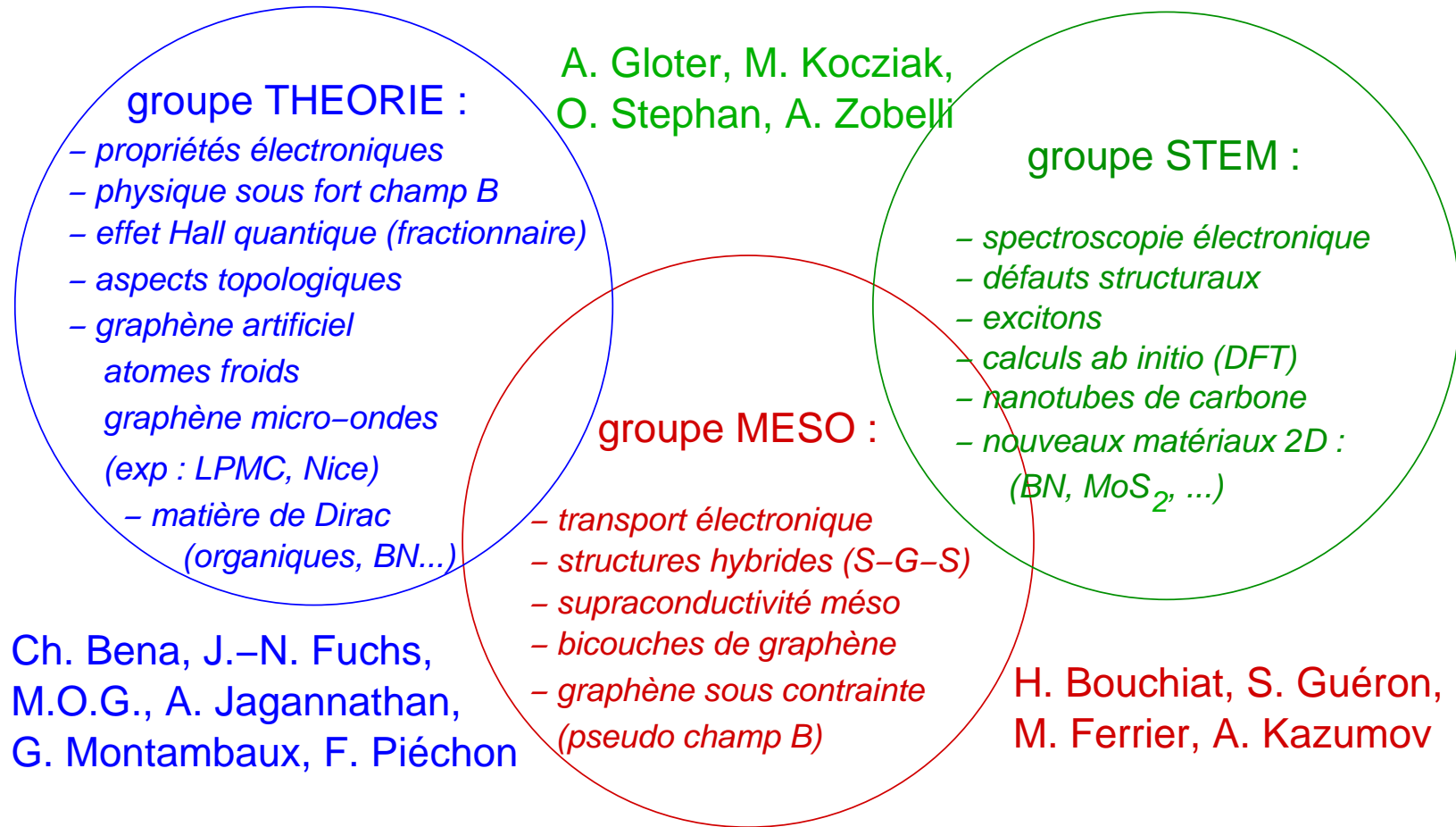
→ cadre plus général



Théorie et recherche fondamentale au FS

- **Discussions Lavoisier** : Matière de Dirac et Transport (17-19 octobre 2011, LPS Orsay)
 - ⇒ contribution à la feuille de route (française)
 - ⇒ **théorie et modélisation** :
 - (*) calculs numériques (ab initio), **graphène fonctionnalisé**
(* IMPMC Jussieu, **LPS, CEA-SPEC/SPCSI**)
 - **corrélations électroniques** dans des multi-couches de graphène (**LPS**)
 - (*) graphène sous **fort champ magnétique** (**LPS, LPMMC**,
* exp : LNCMI Grenoble)
 - **matière de Dirac au-delà du graphène** (topologie, atomes froids, matériaux, graphène artificiel, ...) (**LPS, exp : LPMMC-Nice**)

Graphène au LPS, 2005-2013

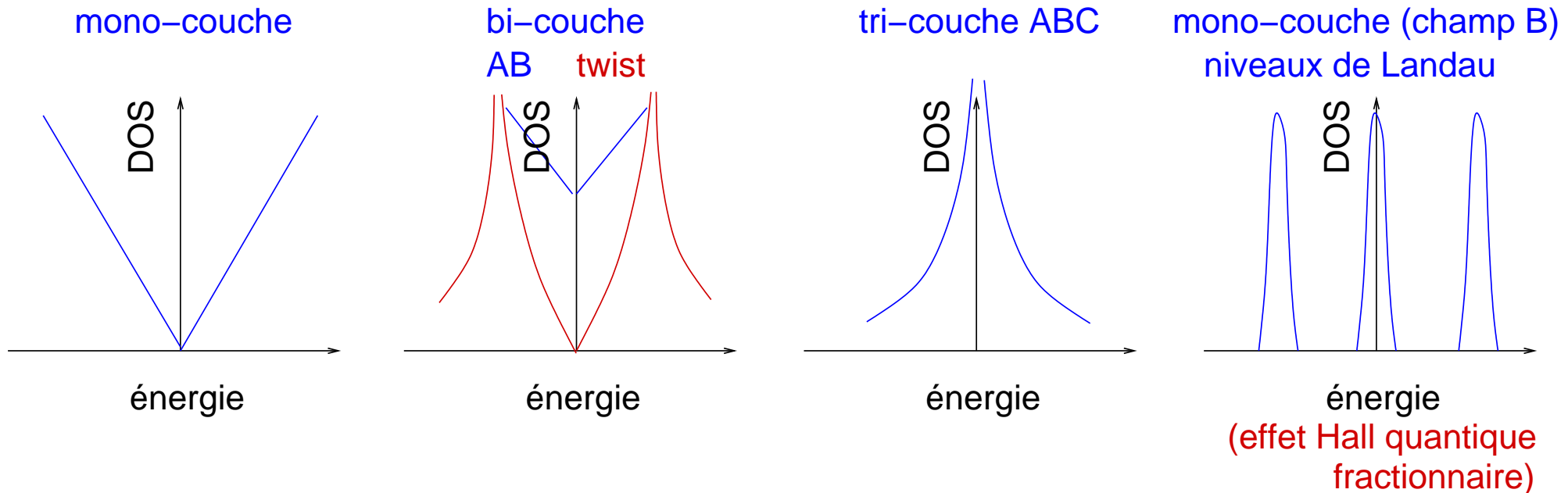


- > 75 publications ; > 1800 citations ; 2 premières conférences françaises (2007)
- 8 post-docs, ~10 doctorants (5 thèses soutenues)
- cours sur le graphène (M2 & ED), vulgarisation, interventions dans la presse

Aspect peu abordé par la recherche fondamentale

Rôle des corrélations électroniques dans le graphène :

$$DOS \times \text{couplage}$$



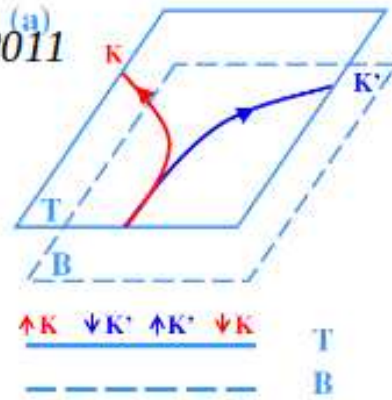
⇒ nouvelles phases dues aux corrélations ?

- phases magnétiques ou supraconductrices ?
- condensation excitonique ?
- effet Hall quantique anormal ?

Corrélations dans la bicouche de graphène

(a) MacDonal, PRL 2011

Ferroelectric

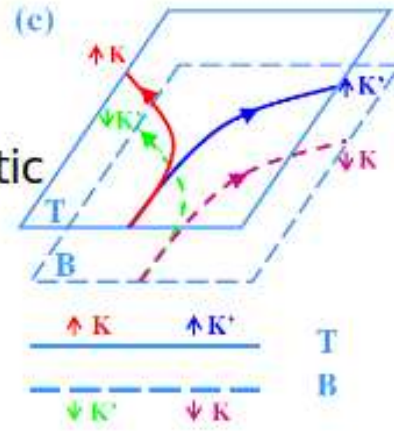


(b)

Hall effect
in zero field
Time reversal
Symmetry breaking

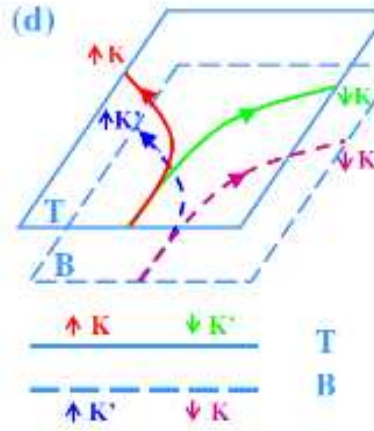


Antiferromagnetic



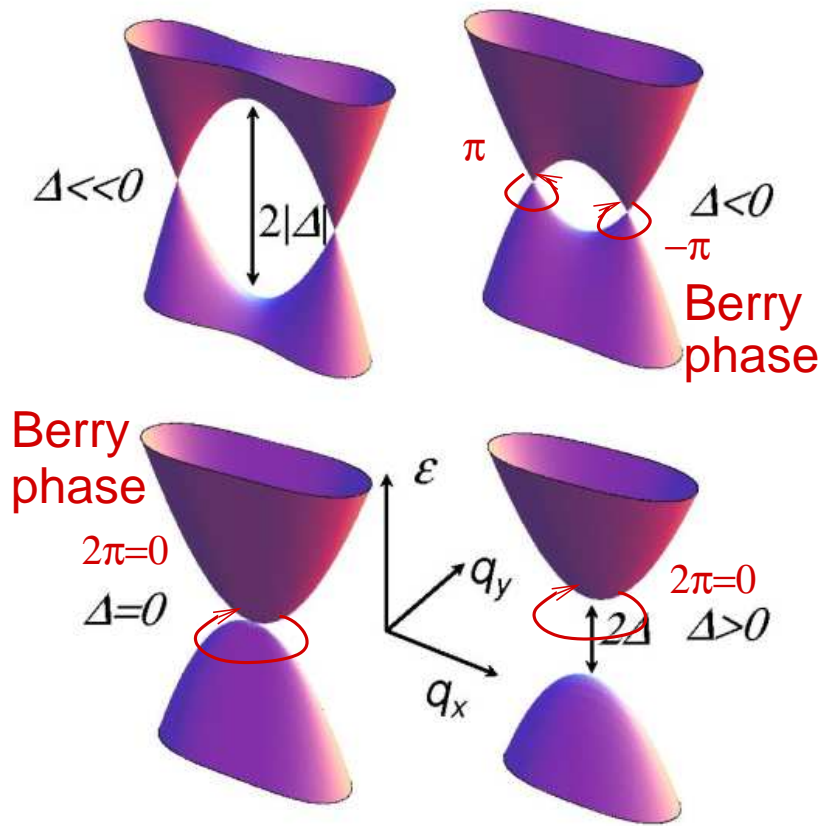
(d)

Spin Hall

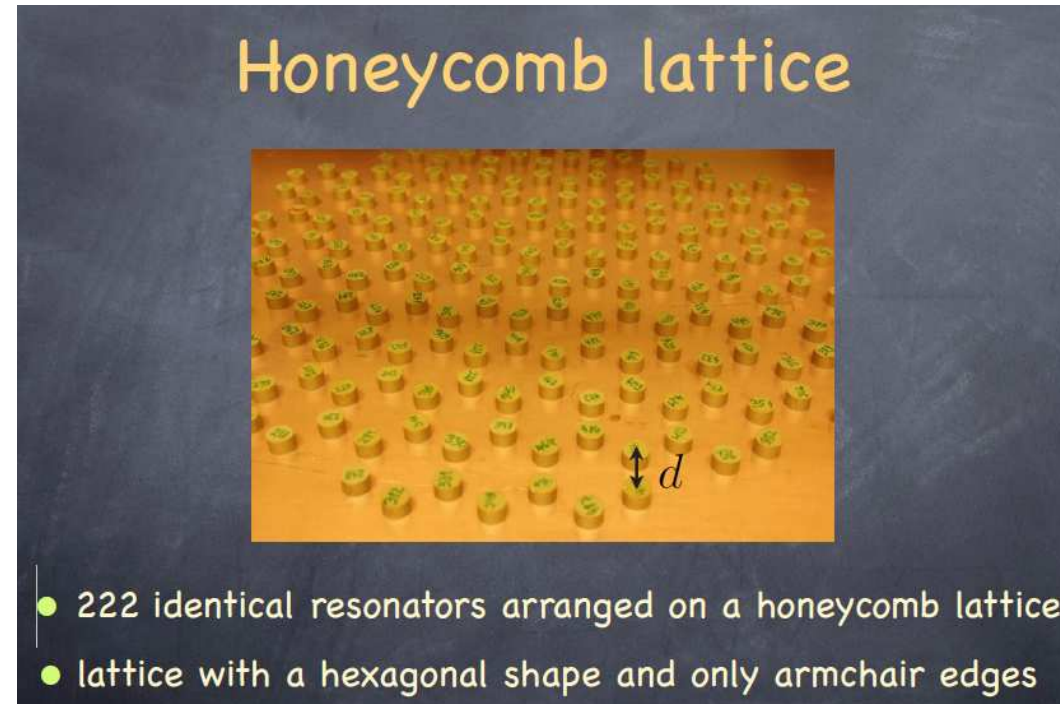


Nematic phase : rotational symmetry breaking

“Strain Engineering” – graphène artificiel



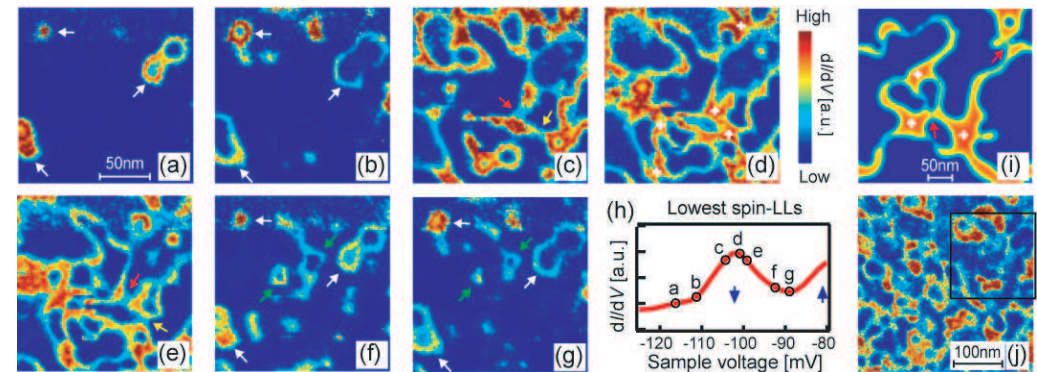
théorie LPS, 2009



exp. micro-ondes ; LPMC-Nice, 2012

Magnéto-spectroscopie du graphène – LPMMC Grenoble

- Aspects locaux des électrons sous fort champ (effet Hall quantique)
- Résonance magnéto-phonon
- Aspects des interactions, dynamique des électrons photo-excités
- Structures hybrides
- D. Basko, Th. Champel, F. Hekking, R. Whitney, T. Ziman
- collaborations : LNCMI, Néel (Grenoble) ; LPN, LPS (IdF) ; Charles Coulomb (Montpellier)



gaz 2D sur surface de n -InSb

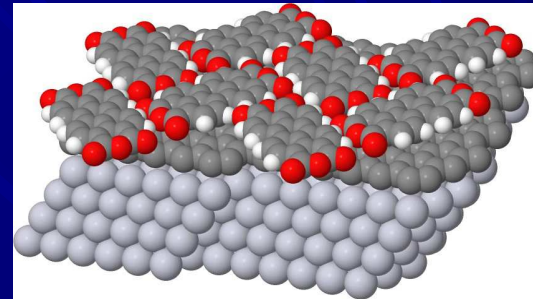
Hashimoto et al., PRL 101, 256802 (2008)

Calculs ab initio (Yannick Dappe, CEA)

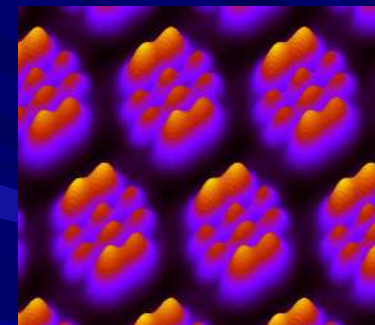
Modulation des propriétés électroniques du graphène par auto-assemblage moléculaire

Yannick Dappe (SPEC/SPCSI, CNRS-CEA Saclay)

- configuration d'équilibre, interaction molécule-molécule et molécule/graphène :
=> Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) + modèle LCAO-S² + vdW
- modélisation image STM en comparaison avec l'expérience :
=> formalisme de Keldysh-Green pour le calcul du courant
- modification des propriétés électroniques du graphène :
=> détermination de la nouvelle structure de bandes, modification du cône de Dirac, ouverture de gap, etc ...
=> propriétés de transport électronique, nanodevice graphène/molécules organiques



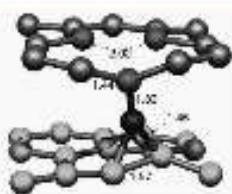
atomistic model of herringbone self-organization of PTCDA molecules on graphene/Pt(111)



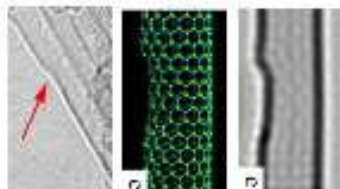
Corresponding theoretical STM image of the LUMO of the molecules

Calculs ab initio (IMN-Nantes), graphène fonctionnalisé

Structural Modification



Intrinsic Defects

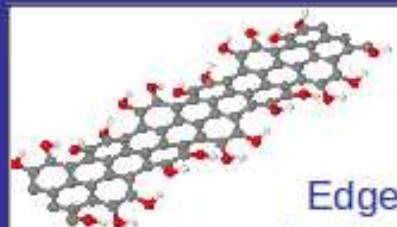


Irradiation Effects

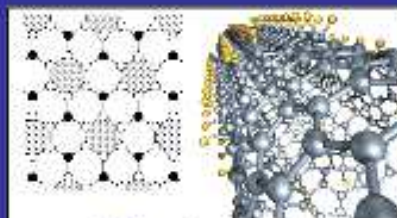


Other nano-objects

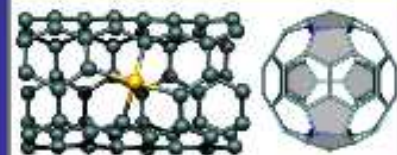
Chemical Modification



Edge Design



Fluorination

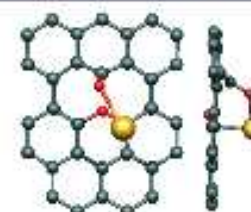


N et P doping

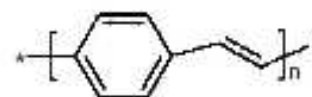
Interfaces ...



with substrates and adsorbates



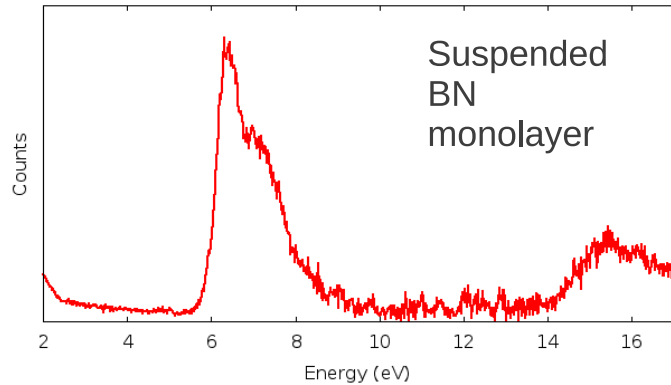
with metals



Polymer Hybrids (PPV) / Graphene

Calculs ab initio (LPS-STEM), matériaux

The STEM group at the LPS

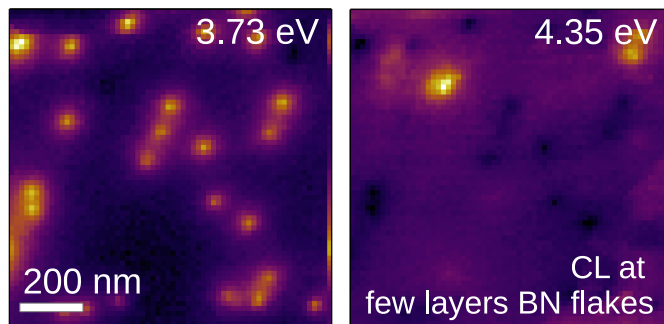
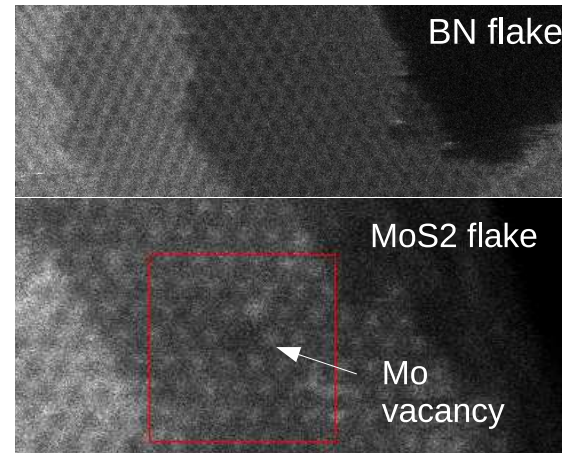


Subwavelength optical measurements at isolated 2D crystals

- Low loss EELS

Structure and chemical composition of edges and individual defects at an atomic resolution:

- Core loss EELS
- High angle annular dark field images.



Spectroscopy of individual defects :

- Cathodoluminescence