

Etude *ab initio* du transport électronique dans les nanotubes, nanofils, et le graphène

Xavier Blase, Institut Néel, CNRS/UJF, Grenoble.

La communauté *ab initio* a développé depuis les années 2000 des codes de transport dans le cadre du formalisme de Landauer avec pour applications principales l'étude de la conductance de systèmes moléculaires ou systèmes 1D tels que nanotubes, nanofils, rubans de graphène. L'objectif est d'essayer de combiner une expertise dans la description microscopique de systèmes réels (étude de la structure atomique, des états électroniques, de la nature des liaisons chimiques, *etc.*) avec des formalismes de transport développés depuis les années 80 dans le cadre d'Hamiltoniens modèles. Nous illustrerons les perspectives offertes par ces développements en étudiant le cas des nanotubes, nanofils et rubans de graphène. Ces systèmes offrent en effet une problématique assez intéressante : alors que l'utilisation de ces objets 1D en optoélectronique, électronique moléculaire, spintronique, *etc.* requiert souvent que ces systèmes soient dopés ou bien fonctionnalisés (par des molécules photoactives, magnétiques, *etc.*), la modification du canal de conduction induite par le dopant ou le greffon covalent conduit rapidement à une destruction de la conductance. Nous montrerons que le choix du dopant ou de la molécule chimisorbée n'est pas innocent et que la chute de conductance peut être ou bien limitée ou au contraire exploitée pour des applications en électronique et spintronique.

Remerciements : cette présentation repose sur le travail de Ch. Adessi, M.-V. Fernández-Serra, R. Margine (LPMCN, Lyon), F. Triozon (LETI/Grenoble), B. Biel, A. Lopez-Bezanilla, S. Latil (CEA/Saclay), S. Roche (INAC, Grenoble).

Références significatives :

- [1] Effect of the Chemical Functionalization on Charge Transport in Carbon Nanotubes at the Mesoscopic Scale, A. Lopez-Bezanilla, F. Triozon, S. Latil, X. Blase, S. Roche, *Nano Letters* **9**, pp 940944 (2009).
- [2] Resonant spin-filtering in cobalt-decorated nanotubes, X. Blase and R. Margine, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 173103 (2009).
- [3] Anomalous Doping Effects on Charge Transport in Graphene Nanoribbons, B. Biel, X. Blase, F. Triozon and S. Roche, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 096803 (2009).
- [4] Preserved conductance in covalently functionalized silicon nanowires, X. Blase and M.-V. Fernandez-Serra, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 046802 (2008).
- [5] Surface segregation and backscattering in doped silicon nanowires, M.V. Fernandez-Serra, Ch. Adessi, X. Blase, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 166805 (2006).