



SEMINAIRE ISMO

Holger Vach

CNRS, LPICM, Ecole Polytechnique, Université Paris-Saclay, Palaiseau

La magie des nanocristaux aromatiques de silicium

En raison du rôle clé de l'aromaticité dans le domaine de la chimie organique, un phénomène similaire a été recherché dans les composés de silicium depuis plus d'un siècle. L'approche consistant à imiter l'aromaticité du benzène sur la base de liaisons multiples, mais avec des atomes de silicium, a récemment conduit à des progrès considérables. Contrairement au benzène, cependant, ces molécules de silicium doivent être stabilisées par des substitués organiques complexes et encombrants. Comme alternative, nous utilisons ici un large éventail de méthodes théoriques, tel que des calculs de modèles fluides, des simulations de dynamique moléculaire, et des calculs *ab initio* pour démontrer qu'il est possible d'obtenir un comportement aromatique avec des nanocristaux simples de silicium hydrogéné, sans la nécessité de liaisons multiples.

A cette fin, nous montrons que les plasmas standards de silane / hydrogène présentent l'environnement idéal pour exploiter la tendance naturelle du silicium pour la sur-coordination donnant des molécules avec des structures déficientes en électrons. Ces nanocristaux se forment spontanément par auto-assemblage dans le plasma. Nous montrons que les structures résultantes sont plus stables que tout autre nanocluster de silicium connu jusque-là et ont de fortes propriétés aromatiques, en raison de leur délocalisation électronique élevée. Alors que les agrégats standards d'une taille d'un nanomètre ne peuvent absorber la lumière que dans l'ultraviolet, nos nanoclusters de silicium pur, mais non-tétraédriques, absorbent la lumière dans l'ultraviolet, le visible et l'infrarouge et cela sans la nécessité d'ajouter des métaux coûteux ou toxiques. Au-delà de leurs excellentes propriétés optiques et chimiques, nous prévoyons également que ces nanocristaux émettent spontanément un rayonnement térahertz en raison de l'oscillation de l'atome central à des températures non-zéro.

Par conséquent, nous envisageons des applications possibles dans le domaine de photovoltaïques et peut-être même à la thérapie photo-thermique du cancer.

**Attention !
Jour
inhabituel**

**Vendredi 23 octobre 2015 à 11h
Bât 210 – Amphi 1 (2^{ème} étage)
Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex**