

DES CALCULS AB INITIO AUX MODELISATIONS ATOMISTIQUES DE NANOPARTICULES ET NANOALLIAGES

Christine Goyhenex

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, Université de Strasbourg, CNRS UMR 7504
23 rue du Loess, BP 43, F-67034 Strasbourg Cedex 2, France

Les nanoparticules et les nanoalliages font l'objet de très nombreuses études en raison de leurs remarquables propriétés dans des domaines aussi variés que la catalyse, le magnétisme, l'optique et la santé. Ils reçoivent une attention grandissante en raison de leur possibilité de répondre à des enjeux économiques et sociétaux aussi importants que les traitements du cancer, la mise en œuvre de dispositifs énergétiques pour un développement durable, la dépollution, le stockage massif des données, etc. Dans ce contexte, un défi scientifique important est de modéliser conjointement la structure et les propriétés de base de ces objets, aussi précisément que possible, en vue de participer au design de nouveaux matériaux pour des applications bien ciblées. En particulier, la modélisation de (nano)matériaux réalistes nécessite généralement des approches à différentes échelles spatio-temporelles, impliquant d'aller des calculs de premiers principes à des modèles phénoménologiques en passant par les simulations atomistiques. Dans cette conférence, un état de l'art dans le domaine de la modélisation des nanoparticules et des nanoalliages sera donc présenté en premier lieu. La complémentarité des études à différentes échelles spatio-temporelles sera ensuite illustrée par la présentation d'études associant des calculs de DFT (Density Functional Theory) et des simulations atomistiques de nanoparticules métalliques et de nanoalliages magnétiques et/ou catalytiques. Une attention particulière sera portée aux perspectives d'améliorer les modèles énergétiques usuels pour traiter, dans une approche simplifiée mais flexible, basée sur le formalisme des liaisons fortes, les interactions dépendant de la polarisation en spin et les liaisons métal-hydrogène impliquées dans le domaine de la catalyse.