

## Séminaire de Chimie Théorique

Salle conference ISM 3eme Est, Bat. A12  
Vendredi 18 Novembre 2011 à 14:30

---

**Dr. Serge Monturet,**

Nanoscience Group, Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES), CNRS, Toulouse

---

### **Un modèle pour le transport inélastique d'électrons à travers des fils atomiques de surface.**

Lorsque l'on veut faire passer un courant à travers une molécule adsorbée sur une surface pour en sonder la structure électronique ou vibrationnelle, deux configurations sont possibles: une solution "verticale" qui correspond à une situation STM pointe-molécule-substrat, et qui se trouve en général en régime tunnel; et une solution "horizontale", comme par exemple dans les jonctions à cassure ou dans les fils atomiques de surface, dans un régime de transport balistique ou pseudo-balistique.

Une surface de silicium passivée avec des atomes d'hydrogène peut être fonctionalisée en conducteur unidimensionnel, lorsque, l'un après l'autre, des atomes de d'hydrogène voisins sont désorbés par la pointe d'un STM. Les liaisons pendantes présentent ainsi un support pour le transport d'électrons à la surface. Quelle est donc la valeur maximale du courant pouvant s'établir dans dans un tel fil? Est-il mécaniquement stable? Qu'en est-il du chauffage? Ces interrogations convergent toutes vers la question du transport électronique avec interactions avec les noyaux. Et pour les aborder, je présenterai un modèle simple, mixte classique/quantique de type Ehrenfest capable d'explorer la dynamique d'un tel système.

Contact : [p.larregaray@ism.u-bordeaux1.fr](mailto:p.larregaray@ism.u-bordeaux1.fr)