

Physique Numérique, Champ Proche & Interfaces de Systèmes Complexes

S. Cao^{a,b}, A. Roslowska^a, G. Reecht^c, F. Scheurer^a, V. Speisser^a, B. Carrière^a, B. Doppagne^a,
M. C. Chong^a, A. Boeglin^a, M. Romeo^a, M. Féron^d, F. Chérioux^d, F. Mathevet^e, G.
Schull^a, and H. Bulou^{a,*}

- a. Université de Strasbourg, CNRS, IPCMS, UMR 7504, F-67000 Strasbourg, France,
- b. Department of Applied Physics, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing, 210016, China,
- c. Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin, Arnimallee 14, 14195 Berlin, Germany,
- d. Université Bourgogne Franche-Comté, FEMTO-ST, UFC, CNRS, 15B avenue des Montboucons, F-25030 Besançon, France.
- e. Sorbonne Université, Faculté des Sciences, CNRS, Institut Parisien de Chimie Moléculaire (IPCM), UMR 8232, 4 Place Jussieu, 75005, Paris, France

* email : herve.bulou@ipcms.unistra.fr

Depuis maintenant un peu plus d'un demi-siècle, les simulations numériques jouent un rôle important dans les avancées scientifiques et techniques. Les progrès accomplis dans le domaine de la physique numérique d'une part et les avancées technologiques en électronique et en microélectronique d'autre part permettent aujourd'hui de disposer d'algorithmes et de machines de calcul permettant de réaliser des simulations numériques sur des objets similaires à ceux étudiés expérimentalement. Il s'agit d'un atout considérable pour les recherche en nanoscience car des quantités telles que la répartition des niveaux d'énergie ou la distribution des électrons à l'échelle du nanomètre peuvent être directement confrontées aux mesures réalisées par des techniques de champ proche.

Dans cette communication, nous présenterons une série d'études illustrant les stratégies que nous déployons pour étudier à la fois numériquement et expérimentalement les interfaces de systèmes complexes. Tous ces systèmes ont en commun la double nécessité de prendre en compte plusieurs centaines d'atomes, pour disposer d'une description réaliste des interfaces, et d'avoir recours à des méthodes de la physique quantique pour en calculer les propriétés en raison de la nature hybride des interactions impliquées dans ces systèmes (liaisons covalentes, liaisons ioniques, dispersives, ...). Nous montrerons comment la confrontation des résultats de simulations numériques aux mesures expérimentales permet de comprendre le fonctionnement des nano-résonateurs de Fourier à base de molécule de cyclo-thiophène [1], de suivre optiquement de l'état redox d'une molécule unique reposant sur du sel [2] et de comprendre les transferts énergétiques intermoléculaire [3].

[1] G. Reecht, H. Bulou, F. Scheurer, V. Speisser, B. Carrière, F. Mathevet, and G. Schull, "*Oligothiophene nanorings as electron resonators for whispering gallery modes*", Phys. Rev. Lett. **110**, 056802 (2013).

[2] B. Doppagne, M. C. Chong, H. Bulou, A. Boeglin, F. Scheurer and G. Schull, "*Electrofluorochromism at the single-molecule level*", Science **361** (6399), 251 (2018).

[3] S. Cao, A. Roslowska, B. Doppagne, M. Romeo, M. Féron, F. Chérioux, H. Bulou, F. Scheurer, and G. Schull, "*Energy funnelling within multichromophore architectures monitored with subnanometre resolution* », Nat. Chem. (2021).