

Département Matériaux et Nanosciences

Equipe Théorie, modélisation, simulation

Responsable J.M. Debierre, campus Saint Jérôme et Château-Gombert



Permanents

Anne-Marie Daré, maître de conférences, Université de Provence
Jean-Marc Debierre, professeur, Université Paul Cézanne
Rahma Guérin, maître de conférences, Université Paul Cézanne
Roland Hayn, professeur, Université Paul Cézanne
Pierre Lombardo, maître de conférences, Université de Provence
Vincent Oison, maître de conférences, Université Paul Cézanne
Laurent Raymond, maître de conférences, Université de Provence
Steffen Schaefer, maître de conférences, Université de Provence

Doctorants

Thomas Chanier, doctorant
Tristan Ducouso, doctorant
Matthieu Dufay, doctorant

Stagiaires

Michel Sassi, Master 2 SMN

Equipe Théorie Modélisation Simulations

Etudes multi-échelles des matériaux pour l'électronique par la réunion de compétences dans les domaines croissance-structure et propriétés

- **Techniques employées**

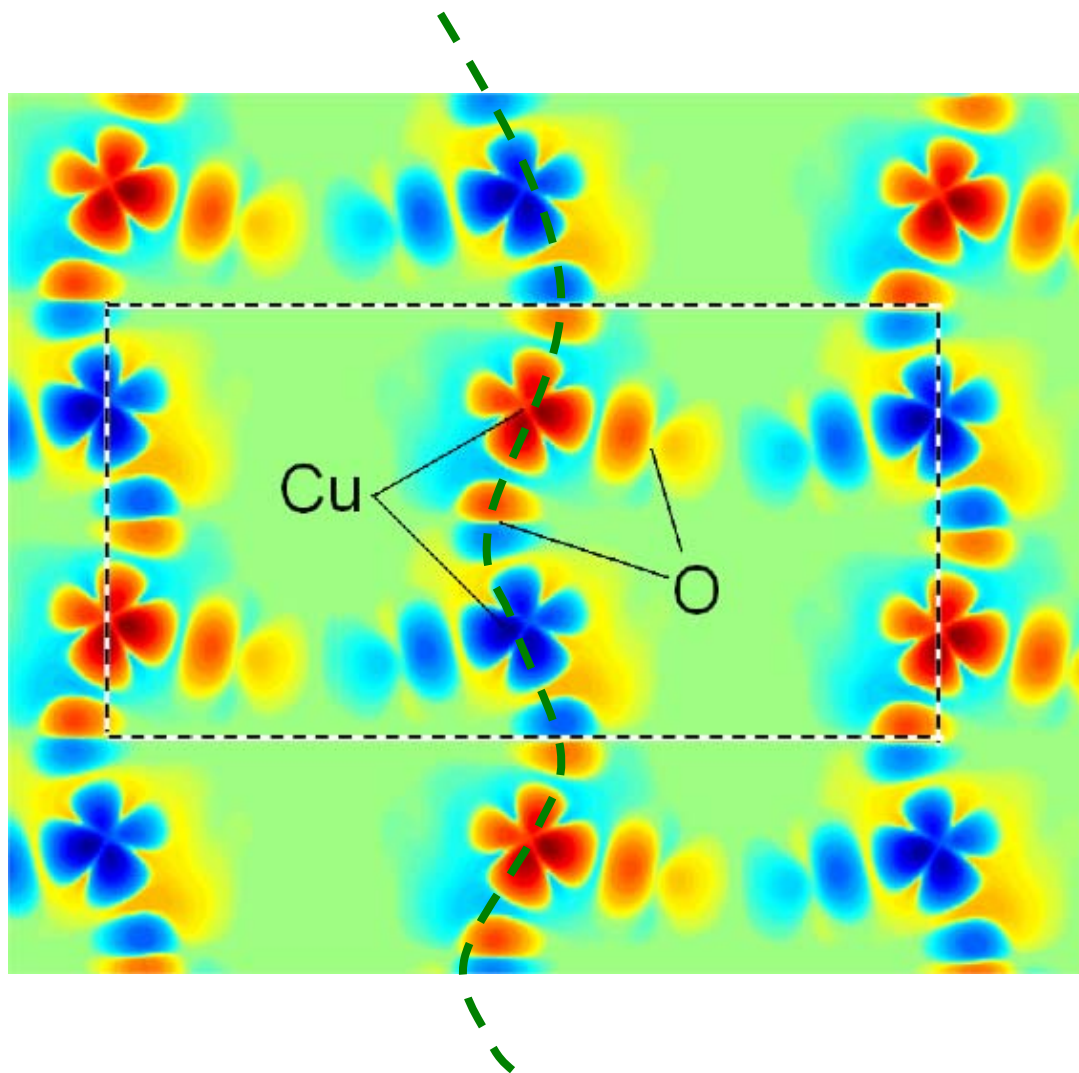
- calcul analytique, calcul ab initio (DFT)
- corrélations fortes entre électrons
- champ de phase
- Monte Carlo quantique

- **Thèmes abordés**

- propriétés magnétiques (anisotropie, échange, susceptibilité, ...)
- formation et stabilité d'auto-assemblages moléculaires
- mécanismes de transport et propriétés diélectriques
- électromigration sur les surfaces vicinales du silicium
- densités d'états en relation avec les propriétés spectroscopiques
- formes et modes de croissance en solidification.

- **Publications** *Phys. Rev. Lett., Phys. Rev. B, Phys. Rev. E, J. Cryst. Growth, J. Phys.Chem A, Eur. J. Phys. B, ChemPhysChem, ...*

Magnétisme quantique dans les chaînes de spin : TMS \leftrightarrow Magnétisme



Assemblages moléculaires : TMS <-> Nanostructuration

