

Laboratoire Léon Brillouin



Antonino Marco SAITTA

Institut de minéralogie et de physique des milieux condensés, Université Pierre et Marie Curie

Calculs atomiques et moléculaires en matière condensée : synergie théorie/expérience

Mardi 1^{er} décembre 2009 à 11h

Salle de conférence 15 – Bâtiment 563

Mon parcours de formation de théoricien m'a permis d'acquérir des compétences dans le domaine des calculs ab initio appliqués à l'étude des propriétés structurales, vibrationnelles et électroniques de l'état solide et des matériaux. L'intérêt vers la matière molle et les systèmes désordonnés m'a également motivé à la maîtrise des méthodes « classiques ». Dans ce séminaire je présenterai quelques unes des études que j'ai effectuées au cours de ma carrière scientifique récente, en étroite collaboration avec les expérimentateurs.

La première partie sera consacrée aux études ab initio des propriétés vibrationnelles et électroniques de nano-matériaux carbonés à la frontière des nouvelles technologies, comme les nanotubes de carbone et le graphène. Je montrerai en particulier comment le dopage modifie quantitativement la réponse spectroscopique de ces systèmes, ce qui a des implications expérimentales immédiates. Au passage, l'importance des effets « non-adiabatiques » dans ces systèmes sera mise en évidence.

La deuxième partie de mon exposé portera sur mes recherches autour de l'eau dans ses formes cristallines et désordonnées. J'ai étudié, en étroite collaboration avec les expérimentateurs, les propriétés structurales de l'eau liquide sous conditions extrêmes de pression (et température), ainsi que l'existence et la structure de nombreuses formes vitreuses (polyamorphisme), et leur mécanisme de formation.

La dernière partie du séminaire sera consacrée à mes intérêts actuels, notamment dans le domaine des systèmes complexes et d'intérêt écologique. L'un des principaux axes de recherche porte sur les solutions aqueuses sous conditions variées de pression et température. On a déjà mis en évidence l'existence inattendue d'une glace salée cristalline à haute pression, et je m'intéresse au comportement de ces solutions en phase(s) désordonnée(s). En perspective, l'étude de ces systèmes à l'état supercritique peut avoir d'importantes conséquences en sciences de l'environnement. En parallèle, l'étude de l'interaction eau-CO₂ revêt également un grand intérêt, notamment l'étude des propriétés de séquestration de molécules de CO₂ (et de méthane) dans des cages d'hydrates d'eau (clathrates).

Formalités d'entrée : Contacter le Secrétariat pour votre autorisation d'entrer sur le Centre de Saclay :

Chantal MARAIS Tél. 01 69 08 52 41 - Fax : 01 69 08 95 36 - e.mail : cmarais@cea.fr.

Le délai minimum est de 24 heures pour les ressortissants des pays de l'Union Européenne et de 5 jours pour les autres.

Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le Centre de Saclay. Dans tous les cas, se munir d'une pièce d'identité.