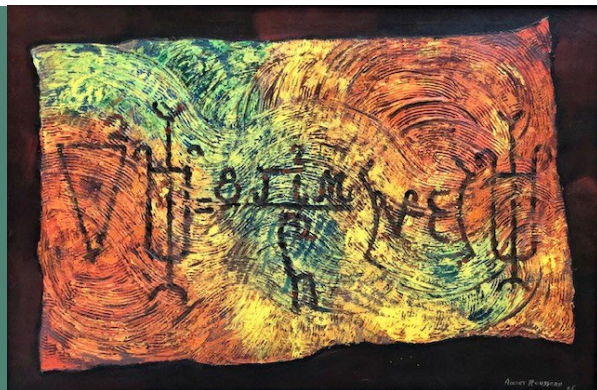


Automne 2022

Conférence

au Département de chimie



CONFÉRENCIER

Pr Michel Côté

Université de Montréal
Département de physique

DATE

Jeudi, 3 novembre 2022

10 h 30

VCH-3870

TITRE

Étude de la fonctionnalisation du graphène par simulations numériques

Résumé :

On confère au graphène un très grand potentiel pour révolutionner toutes sortes d'applications. Certaines de ces applications nécessiteront le dopage du graphène, c'est-à-dire la substitution de certains atomes de carbone par d'autres éléments comme l'azote ou le bore. Lors de cette présentation, je présenterai nos études numériques sur la fonctionnalisation du graphène par l'azote. Nos études sont effectuées à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Bien que cette approche est précise et bien adaptée pour la recherche en matériaux, il arrive que nous devons simuler des systèmes avec un très grand nombre d'atomes pour lesquels cette méthode est trop coûteuse d'un point de vue numérique. Afin d'étudier ces systèmes, nous nous sommes tournés vers des méthodes d'intelligence artificielle. Je présenterai nos plus récents travaux dans cette direction dans le cadre du graphène dopé.

Bio:

Le professeur Michel Côté est un expert du calcul de structure électronique. En particulier, son groupe utilise la théorie de la fonctionnelle de la densité afin de calculer les propriétés des matériaux. Ceci permet d'expliquer les observations et aussi de prédire les propriétés de matériaux qui n'ont pas encore été synthétisés. Dans ce contexte, ses recherches permettent de guider les efforts expérimentaux dans les directions les plus prometteuses. Il est professeur au département de physique de l'Université de Montréal depuis 2000. Auparavant, il a effectué un stage postdoctoral à l'Université de Cambridge en Angleterre et son doctorat à l'Université de la Californie à Berkeley.

Cordiale invitation à toutes et à tous !

Professeur hôte : Mario Leclerc
Mario.leclerc@chm.ulaval.ca

Responsable des conférences départementales
Raoul-Marie Couture
Raoul.Couture@chm.ulaval.ca

Département de chimie



UNIVERSITÉ
LAVAL