

Vitrine d'expertise des professeurs

Université de Montréal

Profil du chercheur externe

Sommaire du profil

Portrait

Expertise(s) de recherche

Biographie

Unité(s) de recherche

Formation(s)

Activité(s)

Projet(s) de recherche



XAVIER BLASE

Électronique, optoélectronique et photovoltaïque
moléculaire : simulations quantiques ab initio

Directeur de Recherche CNRS

Institut Néel - CNRS et Université Grenoble-Alpes

(+33)(0)4 56 38 70 10

@ xavier.blase@neel.cnrs.fr



[Site web](#)



[Site web](#)



[Cv](#)

Portrait

Activité(s)

EXPERTISE(S) DE RECHERCHE

Je suis un physicien de la matière condensée avec un parcours de théoricien au service de la compréhension, et parfois de la prédiction, des propriétés de systèmes d'intérêts variés en physique du solide et en nanosciences: nanotubes, graphène, nanofils, diamant et silicium dopés supraconducteurs, bases nucléiques et systèmes organiques pour le photovoltaïque, etc. J'utilise en particulier les outils de la "simulation quantique ab initio" qui permet l'étude "in silico" des propriétés structurales et électroniques de la matière condensée sur la base des principes de la mécanique quantique. Une partie importante de mon activité concerne le développement des outils (formalismes et « codes ») permettant l'étude avec une précision croissante de systèmes plus complexes ou de « nouvelles » observables physique (e.g. conductance de systèmes désordonnés, température de transition supraconductrice, spectre excitonique, etc.) Mon activité principale depuis 2010 est ainsi le développement de « théories de perturbations à N-corps » (GW/BSE) pour l'étude des propriétés électroniques, optiques et de transport des systèmes organiques et hybrides pertinents pour le photovoltaïque, la photosynthèse ou la photocatalyse.

Champs d'expertise

- Théorie en matière condensée et nanosciences
- Simulations quantiques ab initio, de la DFT aux approches à N-corps
- Développements méthodologiques et développements de codes
- Propriétés structurales, électroniques, optiques et de transport

Nanosystèmes
Phénomènes quantiques
Modélisation et simulation
Supraconducteurs
Innovations technologiques

Objet(s)

Physique

Discipline(s)

Sciences naturelles et
génie

Secteur(s)

BIOGRAPHIE

Carrière scientifique: Après une scolarité (« undergraduate ») à l'Ecole Normale Supérieure de Lyon et une agrégation de physique, Xavier Blase a fait sa thèse de doctorat dans le département de physique de l'université de Californie à Berkeley (UC Berkeley) sous la direction de Prof. Steven G. Louie (Ph.D 1994). Il a fait ensuite un stage postdoctoral à l'EPFL, Lausanne, Suisse, sous la direction de Roberto Car (1995-1996) avant d'être recruté au CNRS en 1996 à Lyon. Il a été promu directeur de recherche en 2005 et directeur de recherche de première classe en 2011. En parallèle de ses activités de recherche au CNRS, à Lyon puis Grenoble depuis 2008, il a été Professeur chargé de cours (PCC) à l'Ecole Polytechnique (Palaiseau) de 2006 à 2009 (mécanique quantique et physique statistique).

Ses principales responsabilités d'administration de la recherche ont été conduites au service de la Société Française de Physique (secrétaire de la division Matière Condensée, 2005-2008) et

du CNRS en tant que responsable du Groupement de Recherche (GDR) « DFT » de 2010 à 2014, et membre nommé du comité national du CNRS (section 05, 2012-présent).

Publications : Il a publié plus de 110 articles avec comité de lecture dont Science, Nature (2), Nature Materials, Review of Modern Physics, Physical Review Letters (25) ; etc. Ses articles totalisent plus de 8200 citations (facteur H=45).

Distinctions : Il a reçu la médaille d'argent du CNRS en 2008 pour son travail de développement des simulations ab initio en France.

UNITÉ(S) DE RECHERCHE

Directeur

- Groupement de Recherche national (GDR CNRS) « DFT »

Membre

- Institut Néel, UPR CNRS et Université Grenoble-Alpes, France

FORMATION(S)

Physique

- | | |
|------|---|
| | Diplôme (undergraduate studies in physics)
Ecole Normale Supérieure de Lyon (France) |
| 1995 | Doctorat
Physics Department, UC Berkeley (États-Unis) |
| 1996 | Études postdoctorales (1995-1996)
École polytechnique fédérale de Lausann (Suisse) |

PROJET(S) DE RECHERCHE

Simulations ab initio innovantes pour le photovoltaïque

Coordinateur: Xavier Blase (Institut Néel, Grenoble)
 Responsables du projet pour les unités partenaires : Silvana Botti (LPMCN, Lyon) ; Ismaila Dabo (CERMICS, ParisTech)

Durée du projet: 2013 – 2015
Source(s) de financement: ANR Blanche « PANELS »

Lieu(x) de recherche

- France

Ce projet rassemble trois groupes français expert dans le développement méthodologique d'approches quantiques ab initio dans le cadre des théories de perturbations à N-corps pour l'étude des propriétés électroniques et optiques des cellules photovoltaïques de troisième génération. Il s'agit de rendre possible l'étude, par des approches ab initio innovantes, de plusieurs propriétés centrales au fonctionnement des cellules photovoltaïques tels que les décalages de bande et les excitations à transfert de charge aux interfaces donneur/accepteur des cellules organiques ou hybride (organique/inorganique), les mécanismes responsables de la mobilité et de la dissociation des paires électron-trou (excitons) photogénérées dans ces systèmes, et l'exploration de nouvelles molécules organiques ou agrégats semiconducteurs de type donneur ou accepteur, afin de comprendre, et potentiellement conduire à l'amélioration, des rendements quantiques.

Quantum and Atomistic Modeling of Nanodevices

Coordinateur: Marc Bescond (CNRS Marseille)
 Responsables du projet pour les unités partenaires Xavier Blase (Institut Néel, Grenoble) ; Christophe Delerue (IEMN, Lille) ; Yann-Michel Niquet (CEA, Grenoble) ; Marco Pala (INPG, Grenoble)

Durée du projet: 2008 – 2010
Source(s) de financement: ANR Nanosciences et Nanotechnologie « QuantaMonde »

Lieu(x) de recherche

- France

Ce projet visait à développer une nouvelle génération d'outils de simulation pour le transport quantique en traitant les problèmes émergeant à l'échelle atomique; condition capitale pour la compréhension des dispositifs semi-conducteurs de faibles dimensions. Sur la base d'un formalisme de fonction de Green éprouvé les expertises complémentaires des partenaires allant d'approches ab initio les plus pointues à des modèles sophistiqués de liaisons fortes et de masse effective seront combinées afin de développer des codes multi-échelles 3D de simulation de dispositifs. Ils permettront une analyse détaillée des propriétés de transport quantique sur des modèles réalistes de transistors: les MOSFETs ultimes obtenus par approches top-down et les nanofils semi-conducteurs fabriqués par croissance CVD (bottom-up).

Supraconductivité dans les semiconducteurs dopés : diamant et systèmes voisins

Coordinateur: Etienne Bustarret (LEPES, Grenoble)
 Responsables du projet pour les unités partenaires Xavier Blase (LPMCN, Lyon) ; Christophe Marcenat (CEA, Grenoble)

Durée du projet: 2006 – 2008
Source(s) de financement: ANR Blanche « SupraDiam »

Lieu(x) de recherche

- France

Ce projet avait pour ambition de rassembler théoriciens (Blase, LPMCN, Lyon) et

Objet(s)

Physique

Discipline(s)

Sciences naturelles et
 génie

Secteur(s)

expérimentateur (Etienne Bustarret, LEPES, Grenoble, et Christophe Marcenat, CEAGrenoble) pour une étude conjointe de la transition supraconductrice dans les semiconducteurs fortement dopés. Le résultat marquant de cette collaboration a été la mise en évidence d'une transition supraconductrice dans le silicium sous fort dopage au Bore (Bustarret et al., Nature 2006; Blase et al., Nature Mater. 2009).

Simulation multi-échelle du transport dans les nanotubes de carbone: de l'atomistique au circuit

Coordinateur: Stephan Roche (CEA, Grenoble) Responsables du projet pour les unités académiques partenaires Xavier Blase (LPMCN, Lyon) ; Christophe Delerue (IEMN, Lille, Grenoble); Philippe Dolfus (IEF, Orsay)

Durée du projet: 2007 – 2009

Source(s) de financement: ANR Nanosciences et Nanotechnologies « ACCENT »

Lieu(x) de recherche

- France

Ce projet avait pour but la simulation multi-échelle des transistors à nanotubes de carbone. Il réunit des partenaires experts dans les principales techniques de simulation : calculs ab-initio fonctions de Green hors-équilibre simulation Monte-Carlo de nano-dispositifs modèles analytiques et compacts et simulation de circuits. Un enjeu important du projet est d'établir des liens entre ces techniques complémentaires. Les techniques de simulation les plus fines seront utilisées pour étudier les effets quantiques liés aux dimensions nanométriques le rôle des contacts métalliques le couplage électron-phonon l'effet d'impuretés adsorbées ou substitutionnelles ainsi que le transport en présence de molécules fonctionnelles greffées sur le nanotube.

Simulation multi-échelle en science des matériaux : de la nanostructure aux propriétés physico-chimiques

Coordinateur: Xavier Blase (LPMCN, Lyon)

Responsables du projet pour les unités académiques partenaires ce projet rassemblait neuf laboratoires en région Rhône-Alpes représentés par leur direction.

Durée du projet: 2003 – 2005

Source(s) de financement: Action prioritaire « Matériaux » Région Rhône-Alpes

Lieu(x) de recherche

- France

L'objectif de ce projet régional était de fédérer l'activité " Simulations numériques en physique des matériaux " à l'échelle de la région Rhône-Alpes. Il s'agit de mettre en commun des compétences qui existent dans la région afin de développer des outils plus performants au service de la communauté universitaire et industrielle. Le rapprochement de ces savoir-faire autour de thématiques communes est un enjeu important pour développer l'activité Simulations numériques dans la région. Les simulations proposées sont/seront développées et appliquées en contact étroit avec les problématiques expérimentales disponibles et sur des matériaux réels d'intérêt industriel actuel ou potentiel. Le réseau proposé couvre trois villes (Lyon, Grenoble, Saint Etienne) et les domaines de la physique, chimie, et sciences de l'ingénieur. Les universités (UCBL, UJF), l'Ecole Normale Supérieure, le CNRS, le CEA, l'INSA, un centre de calcul européen sont impliqués. Trois axes de recherche communs à plusieurs laboratoires et d'intérêt pour les partenaires industriels se dégagent, couvrant la caractérisation structurale et les propriétés physiques qui en résultent : 1. Structure et diagramme de phase des alliages et matériaux complexes ; 2. Propriétés mécaniques et thermiques des matériaux ; 3. Propriétés électroniques des systèmes complexes et/ou nanostructures.

Understanding organic solar cells with embedded many-body perturbation theory: the Fiesta initiative

Coordinateur: Xavier Blase (Institut Néel, Lyon)

Responsables du projet pour les unités académiques partenaires Ivan Duchemin (CEA, Grenoble)

Durée du projet: 2012 – 2014

Source(s) de financement: Moyens de calcul européen (projets Européens PRACE)

Lieu(x) de recherche

- France
- Belgique



Ce projet Européen, reconduit sur deux ans, rassemblant CEA et CNRS à Grenoble, en collaboration avec l'université de Mons en Belgique, avait pour objectif de proposer un « défi numérique » dans le cadre des simulations quantiques ab initio pour le photovoltaïque. L'Europe met ainsi chaque année des moyens de calculs spécifiques (plusieurs millions d'heures) sur les supercalculateurs européens pour quelques défis dont les besoins numériques excèdent les capacités des centres nationaux traditionnels.

