

Titre de la thèse : Activation de molécules inertes adsorbées sur une surface par un champ électrique intense dans une jonction tunnel d'un STM

Laboratoire d'accueil : FEMTO-ST

Spécialité du doctorat préparé : Sciences pour l'ingénieur

Mots-clefs : STM, AFM, Sciences des surfaces, nanosciences, sciences physiques

Descriptif détaillé de la thèse :

Introduction / contexte :

L'objectif scientifique principal de cette thèse de doctorat est de démontrer qu'une jonction tunnel peut servir de réacteur chimique individuel en utilisant le champ électrique intense présent dans cette jonction tunnel d'un microscope à effet tunnel (STM) pour activer de petites molécules originellement inertes chimiquement. Ce type d'activation reste encore inexploité alors qu'il devrait permettre de transformer ces molécules inertes en produits chimiques plus réactifs ou moins polluants tout en limitant la consommation d'énergie nécessaire à leurs transformations

Travaux envisagés :

La/le candidat(e) aura pour objectif de démontrer expérimentalement que les champs électriques présents dans la jonction tunnel d'un microscope STM sous vide sont capables de favoriser l'activation de petites molécules inertes comme l'azote ou le dioxyde de carbone. Pour ce faire, il étudiera le dépôt de complexes métalliques de type phthalocyanines ou porphyrines métallées, qui sont connues pour fixer ce type de molécules, sur des surfaces métalliques ou semi-conductrices. Il élaborera ensuite des réseaux supramoléculaires constitués par ces molécules et l'adsorption de N₂ et de CO₂. Il/elle étudiera ensuite l'effet du champ électrique sur les propriétés structurales et électroniques (orbitales frontières) de ces systèmes par microscopie et spectroscopie tunnels. La structure de bande des complexes supportés avec ou sans molécules greffées sera déterminée par des techniques de photo-émission directe ou inverse afin de rationaliser les propriétés des complexes en fonction de leur structure électronique. Ces expériences seront effectuées au laboratoire de physique du solide à Orsay ou au synchrotron SOLEIL grâce à une collaboration établie et financée. Enfin, l'étudiant(e) provoquera ce type d'activation en présence d'hydrogène moléculaire ou atomique pour étudier la formation de composés hydrogénés à haute valeur ajoutée énergétique ou environnementale (CH₄, NH₃ etc.). Les résultats seront comparés en matière d'efficacité (taux de conversion), de sélectivité (détection de sous-produits) et de stabilité des catalyseurs dans ces conditions expérimentales par rapport à l'état de l'art.

Références bibliographiques :

<https://www.femto-st.fr/fr/personnel-femto/fredericcherioux>

Profil demandé : Candidat(e) dynamique, curieux, persévérant avec un goût prononcé pour la physique expérimentale. Une expérience en technique de l'ultra-vide serait un plus.

Financement : MESRI établissement

Dossier à envoyer pour le XXX

Début du contrat : octobre 2021

Direction / codirection de la thèse :

Pr. Frank PALMINO frank.palmino@univ-fcomte.fr

PhD title : Activation of inert molecules by intense electric field in a STM tunnel junction

Host laboratory : FEMTO-ST

Speciality of PhD: Physical sciences

Keywords : STM, AFM, Sciences des surfaces, nanosciences, sciences physiques

Job description :

Carbon dioxide (CO₂) and Nitrogen (N₂) is readily accessible and comparatively inexpensive, so that it is highly desirable to include this small molecule into syntheses of value-added products or to use it as reservoir of chemical energy.

The purpose of this thesis is to alter the thermodynamics and the kinetics of activation of CO₂ by using intense electric fields (more than 10⁹ V/m) located in a Scanning Tunneling Microscope (STM)-probe (used as an individual nanoreactor) as a powerful catalyst.

To achieve this ambitious scientific challenge, the student will investigate by ultra-high vacuum STM the structural properties of tailored adsorbates with or without controlled amounts of CO₂ or N₂. STM will be the primary tool used to detect the presence of new distinctive features by fixation of gas molecules on the prepared catalysts. He/She will precisely adjust the experimental conditions (e.g., pressure, temperature, and bias voltage) to promote CO₂ and N₂ activation.

References :

<https://www.femto-st.fr/fr/personnel-femto/fredericcherioux>

Candidate Profile: The ideal candidate is an innovative and analytical thinking person, who has good communication skills and a very good knowledge in surface science, physics as well as in scanning probe microscopies (STM, AFM).

Financing Institution:

Application deadline :

Start of contract : october 2021

Supervisor(s) :

Pr. Frank PALMINO frank.palmino@univ-fcomte.fr

Dr. Frédéric CHERIOUX frederic.cherioux@femto-st.fr