

Auto-assemblages moléculaires complexes

Contexte et objectifs

L'auto-assemblage moléculaire sur des surfaces métalliques fait actuellement l'objet de nombreuses études, pour des applications dans des domaines aussi variés que les jonctions électroniques, les revêtements ou la tribologie.

Alors que la grande majorité des recherches menées jusqu'à présent concerne le dépôt de molécules sur des substrats de structure simple (Ag, Au, Pt, etc), nous proposons ici d'utiliser des surfaces d'intermétalliques de géométrie complexe, de quasicristaux ou d'approximants.

L'objectif est ainsi d'élargir considérablement le type de systèmes moléculaires auto-assemblés, afin d'aboutir à une meilleure compréhension de l'auto-assemblage moléculaire, et de mettre au point des systèmes portant des propriétés physiques nouvelles, potentiellement innovants.

Méthodes, Moyens

Deux démarches complémentaires seront utilisées pour atteindre cet objectif: une approche théorique via des calculs de structure électronique, et une approche expérimentale.

Approche expérimentale: Deux plateformes expérimentales d'analyse de surface sous ultravide permettront de sonder la structure cristallographique et électronique des surfaces sur lesquelles seront adsorbées les molécules par différentes techniques: microscopie champ proche (STM/AFM), diffraction d'électrons lents (LEED), photoémission.

Approche numérique: Des simulations numériques basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (code VASP) permettront d'avoir accès à la structure atomique et électronique des systèmes étudiés. Les moyens de calcul incluent: le cluster de l'Institut (centre de compétences Ermione), le centre lorrain de calcul Explor, des moyens de calculs sur les clusters nationaux (IDRIS-CINES-TGCC). Les projets que nous déposons chaque année sont régulièrement pourvus en heures de calculs.

Cadre collaboratif

Cette thèse est prévue au sein de l'équipe Métallurgie et surfaces, au sein de l'Institut Jean Lamour. Ce projet s'inscrit dans les priorités scientifiques de l'Institut, notamment MAN (Matériaux artificiels nanostructurés). Au niveau européen, ce projet s'inscrit dans le centre européen C-MAC (European Integrated Center for the Development of New Metallic Alloys and Compounds – C-MAC) ayant pour vocation le développement de nouveaux alliages métalliques (<http://www.eucmac.eu/>).

Compétences requises

Le ou la candidat(e) doit avoir un bon niveau en physique générale (mécanique, physique statistique, physique du solide, cristallographie, etc.), ainsi que de bonnes compétences en communication (oral, écrit). Un bon niveau en langue anglaise est attendu. Posséder des connaissances sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) ou sur d'autres modélisations numériques constituerait un plus.

Contacts :

Vincent Fournée, vincent.fournee@univ-lorraine.fr
Emilie Gaudry, Emilie.Gaudry@univ-lorraine.fr