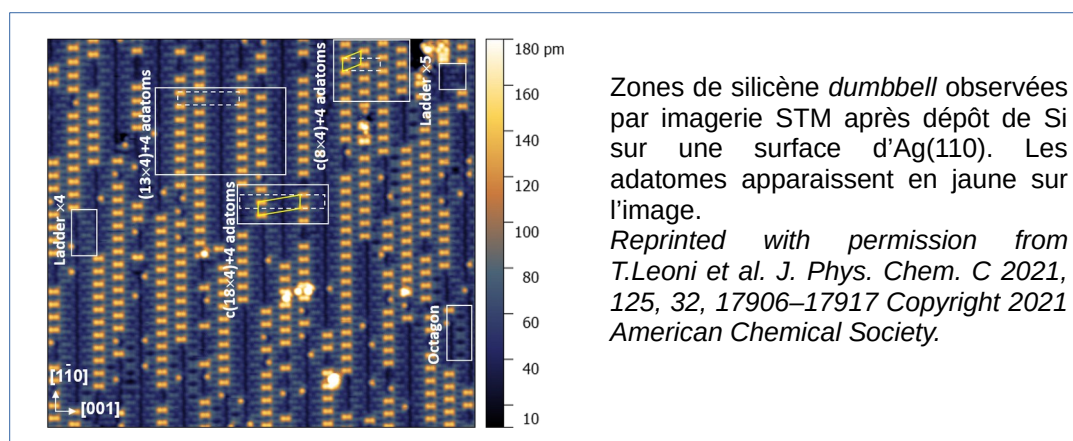


Sujet de Master 2 : Adsorption de petites molécules sur le silicène dumbbell/Ag : étude par simulations numériques quantiques

Ces dernières années ont vu de nombreuses études consacrées aux cristaux bidimensionnels de type Xènes (silicène, germanène,...) pour lesquels des propriétés électroniques remarquables sont attendues.

En 2021, Leoni et al. [1] ont démontré la formation d'une couche bidimensionnelle de silicium (silicène) sur une surface d'Ag(110). Cette couche est stabilisée par la présence d'adatoms de silicium conduisant à la structure dite *dumbbell*. Ces adatoms de Si apparaissent comme de bons candidats pour l'adsorption de molécules via la charge localisée sur leurs liaisons pendantes.



L'**objectif du stage** est d'étudier, à l'aide de simulations numériques basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), l'adsorption de petites molécules (NH_3 , O_2 , H_2O ...) sur la couche de silicène *dumbbell*/Ag(110). Ce travail se fera en collaboration étroite avec le groupe d'expérimentateurs de Geoffroy Prévot à l'INSP (Institut des NanoSciences de Paris).

Après une première familiarisation avec le code et la technique DFT, il s'agira d'étudier l'adsorption d'une première molécule de petite taille chimisorbée sur silicène *dumbbell*/Ag.

[1] Leoni et al. *J. Phys. Chem. C* 2021, 125, 17906-17917

Profil du candidat : Souhaiter faire des simulations numériques, apprécier de travailler sur ordinateur. Une connaissance de Linux serait un atout.

Personne à contacter : Prof. Marie-Christine Hanf (marie-christine.hanf@uha.fr)
Prof. Régis Stephan (regis.stephan@uha.fr)