**Proposition de sujet de thèse – 2020**

**Intitulé du sujet proposé :**

**Photoélectrolyse de l’eau : étude théorique d’hétérojonctions ferroélectriques.**

Département : INTERFACES

Nom, prénom et courriel du directeur (et co-encadrant) de thèse :

Bruno Domenichini bruno.domenichini@u-bourgogne.fr

Céline Dupont (HDR en cours) celine.dupont@u-bourgogne.fr

Domaines scientifiques de la thèse : Chimie/Matériaux/simulation

**Projet scientifique :**

Un des grands défis actuels est la recherche et le développement de sources d’énergie propre. Dans ce contexte, l’utilisation de l’énergie solaire est l’une des voies les plus prometteuses, notamment en raison de sa grande disponibilité. Pour cela, une possibilité est de réaliser la photoélectrolyse de l’eau, au cours de laquelle l’hydrogène est produit directement à partir de l’eau et de la lumière. Même si de nombreux oxydes métalliques ont déjà été testés pour réaliser cette réaction, leur faible efficacité reste un obstacle majeur.

L’enjeu de cette thèse est de développer de nouveaux matériaux plus efficaces, en couplant deux oxydes métalliques pour tirer profit de leurs avantages respectifs et surmonter leurs défauts. En particulier, alors que les oxydes de fer, Fe2O3, présentent un gap adapté à l’énergie solaire, leur utilisation nécessite l’application d’un champ électrique externe. En revanche, BaTiO3 connu pour ses propriétés ferroélectriques, possède un gap non adapté à la photoélectrolyse.

Au cours de cette thèse nous focaliserons notre étude sur l’association de 𝛾-Fe2O3 et BaTiO3 au sein d’hétérojonctions épitaxiées sur un substrat de platine. Si la croissance épitaxiée de BaTiO3 sur platine a déjà été considérée dans le groupe [1], ce n’est pas le cas de la maghemite. Dans un premier temps nous nous intéresserons donc à la croissance épitaxiée de 𝛾-Fe2O3 sur Pt. Une fois cette étude préliminaire menée, les deux oxydes seront associés au sein de deux types d’hétérojonctions : Pt/Fe2O3/BaTiO3 et Pt/BaTiO3/Fe2O3. L’influence de différents paramètres sera considérée : épaisseur relative des deux oxydes, sens de polarisation et selon le temps, le dopage sera également considéré.

Cette étude sera basée sur des calculs DFT (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité) dans le cadre du formalisme « DFT+U », à l’aide du code VASP.[2]

Bibliographie :

[1] P.M. Deleuze, A.Mahmoud, B. Domenichini and C. Dupont, *.,*  *Phys. Chem. Chem. Phys.,* **2019** 21, 4367

[2] G. Kresse, J. Hafner, *Phys. Rev. B,* **1993**, 47, 558 ; G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B,* **1996**, 54, 11169