

Sujet Master 2 – 2023

Intitulé du sujet proposé :

Etude théorique des phénomènes d'adsorption sur capteurs pour des applications spatiales

Encadrement : département INTERFACES

Céline Dupont – celine.dupont@u-bourgogne.fr

Jérôme Rossignol – jerome.rossignol@u-bourgogne.fr

Projet scientifique :

Dans le cadre d'un projet supporté par l'ESA (European Space Agency), nous envisageons le développement de nouveaux capteurs pour des applications spatiales. En étroite collaboration avec un stage et un post-doctorat expérimentaux, l'objectif de ce stage est l'étude théorique des matériaux modèles pour les capteurs. Plus particulièrement, nous nous intéresserons à TiO_2 et BaTiO_3 . La première partie de ce stage sera consacrée à une étude bibliographique permettant l'identification des molécules modèles représentant les grandes familles de polluants atmosphériques. L'étude des propriétés d'adsorption des deux matériaux d'intérêt (TiO_2 et BaTiO_3) vis-à-vis de ces molécules modèles sera ensuite réalisée, en particulier nous nous intéresserons à la sélectivité d'adsorption entre les différentes familles.

Cette étude sera réalisée via des calculs DFT+U à l'aide du code VASP [1].

Bibliographie :

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