

# Etude du transfert de charge dans des assemblages moléculaires par simulation numérique

DIRECTEUR DE THÈSE : MARIE-CHRISTINE HANF

IS2M UMR 7361-CNRS/UHA, 15 RUE JEAN STARCKY 68057 MULHOUSE

TEL : 03 89 33 64 36 ; E-MAIL : [MARIE-CHRISTINE.HANF@UHA.FR](mailto:MARIE-CHRISTINE.HANF@UHA.FR)

Le processus de transfert de charge (TC) est au cœur de nombreux phénomènes naturels et applications dans des domaines variés tels que le transport électronique, les cellules photovoltaïques ou encore les systèmes biologiques... Les études réalisées jusqu'à présent n'ont pas pu apporter une compréhension à l'échelle nanométrique de tous les phénomènes impliqués.

Il s'agit ici d'étudier un petit assemblage moléculaire adsorbé sur une surface de silicium fonctionnalisée par une couche isolante. Les travaux de nos partenaires de l'ISMO (Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay) ont montré la possibilité de découpler électroniquement et de mettre en évidence le TC sur des homo-dimères de tétraphénylporphyrine de fer, notée Fe-TPP [1]. Le projet dans lequel s'inscrit cette thèse est de travailler sur des dimères covalents ou non de métalloporphyrines (Fe-TPP, Zn-TPP) adsorbées sur  $\text{CaF}_2/\text{Si}(100)$ , d'un point de vue expérimental par STM (microscopie tunnel, ISMO), et théorique par DFT (théorie de la fonctionnelle de la densité, IS2M) et TDDFT (théorie de la fonctionnelle de la densité dépendant du temps, FEMTO-ST-Montbéliard). Ce projet s'effectue dans le cadre d'un projet financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR).

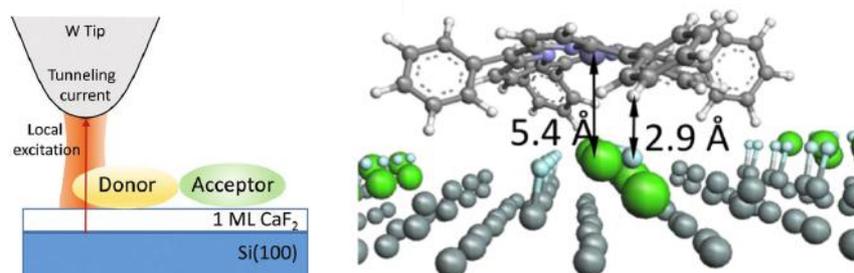


Figure 1 : Principe du procédé de TC inter-moléculaire et de son étude [1]  
Simulations numériques d'une molécule de Fe TPP sur  $\text{CaF}_2/\text{Si}(100)$  [2]

**Le sujet de thèse** proposé s'intégrera dans la partie "**simulation numérique**" du projet et sera consacré aux **calculs DFT** en utilisant principalement les codes VASP et SIESTA. Le travail s'articulera autour des principales tâches suivantes:

- Etude de la conformation sur la surface  $\text{CaF}_2/\text{Si}(100)$  d'homo-dimères et d'hétéro-dimères
- Etude de leur structure électronique à l'aide de fonctionnelles hybrides (densité électronique, différences de charge, calcul d'images STM).
- Etude dynamique du TC par TDDFT

Les calculs TDDFT s'effectueront en collaboration directe avec le FEMTO-ST.

[1] P.Ramos, M.Mankariou, M.Pavanello, D.Riedel *Probing charge transfer dynamics in a single iron tetraphenylporphyrin dyad adsorbed on an insulating surface*, *Nanoscale* **10**, 17603 (2018)

[2] E. Duverger, A.-G. Boyer, H. Sauriat-Dorizon, Ph. Sonnet, R. Stephan, M.-C. Hanf, D. Riedel, *Two-dimensional functionalized ultrathin semi-insulating  $\text{CaF}_2$  layer on the  $\text{Si}(100)$  surface at a low temperature for molecular electronic decoupling*, *Appl. Mater. Interfaces* **12**, 29661 (2020)