

## Mise en évidence de l'activité photocatalytique de particules métalliques déposées sur TiO<sub>2</sub>. Etude expérimentale et théorique

### *Contexte général*

La production d'hydrogène par photocatalyse peut être une alternative très intéressante aux productions actuelles, et suscite de ce fait, de nombreux travaux de recherche dans le monde. En effet, la photocatalyse peut permettre d'utiliser l'énergie solaire pour produire de l'hydrogène. Le mécanisme réactionnel repose sur une catalyse bifonctionnelle, d'une part, la génération d'espèces actives dans le semi-conducteur et d'autre part, la recombinaison d'hydrogène sur des nanoparticules de métal. La compréhension de chacun des processus, ainsi que celle de leur complémentarité, est la clef pour augmenter les performances du système. En particulier le transfert électronique des électrons photogénérés entre le semiconducteur et les particules métalliques de surface est une étape clé pour comprendre les processus chimiques. Ce processus de transfert repose sur l'interface et la structure électronique de la jonction créée entre les particules métalliques et le semiconducteur.

### *Description du projet de recherche*

La partie théorique de l'étude consistera en l'analyse de la structure électronique de la surface de TiO<sub>2</sub> (anatase et, rutile) comportant des particules métalliques telles que Pt, Ir, Rh, ... On s'intéressera plus particulièrement à la localisation des électrons en reliant les observations à l'activité photocatalytique de la surface. Le pouvoir réducteur, étant à priori dépendant du type, du nombre d'atomes et de la géométrie des particules métalliques, on cherchera à expliquer et comprendre les effets observés. Pour cela, on utilisera des méthodes de la DFT en conditions périodiques sur lesquelles le candidat bénéficiera d'une formation lui permettant d'être autonome.

La partie expérimentale de l'étude consistera à préparer différentes structures M/TiO<sub>2</sub> (M=Pt, Ir, Rh et TiO<sub>2</sub> anatase ou rutile) et à caractériser les particules métalliques déposées en terme de distribution de taille et de morphologie par microscopie électronique à transmission. L'état électronique du système M/TiO<sub>2</sub> sera caractérisé par XPS et UPS. Chaque échantillon sera testé sur un banc photocatalytique de production d'hydrogène par déshydrogénation de l'isopropanol. Différents paramètres comme la longueur d'onde et le flux de photon seront étudiés afin de déterminer la gamme de longueur d'onde active et le rendement quantique des matériaux.

L'objectif final sera de corrélérer les descriptions théoriques de la structure électronique de M/TiO<sub>2</sub> à leur activité photocatalytique.

### *Coordonnées des encadrants:*

Pierre Mignon  
Institut Lumière Matière  
Bâtiment Kastler Rez de Chaussée  
+ 33 4 72 44 83 14  
[pierre.mignon@univ-lyon1.fr](mailto:pierre.mignon@univ-lyon1.fr)

Eric Puzenat  
IRCELYON – UMR 5256  
Bât. Prettre 1<sup>ème</sup> étage  
+33 4 72 44 53 47  
[eric.puzenat@ircelyon.univ-lyon1.fr](mailto:eric.puzenat@ircelyon.univ-lyon1.fr)

*Début du stage* : 01/02/2016

*Gratification* : 546,01 €