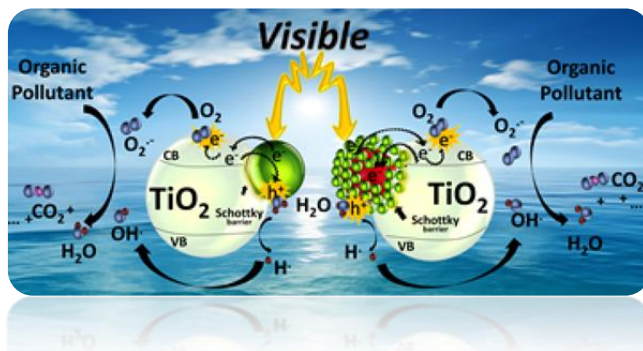


## Mise en évidence de l'activité photocatalytique de particules métalliques déposées sur TiO<sub>2</sub>.



**Superviseurs :** Franck Rabilloud, Mignon Pierre  
**Contact :** [franck.rabilloud@univ-lyon1.fr](mailto:franck.rabilloud@univ-lyon1.fr),  
[pierre.mignon@univ-lyon1.fr](mailto:pierre.mignon@univ-lyon1.fr)

**Laboratoire :** Institut Lumière Matière

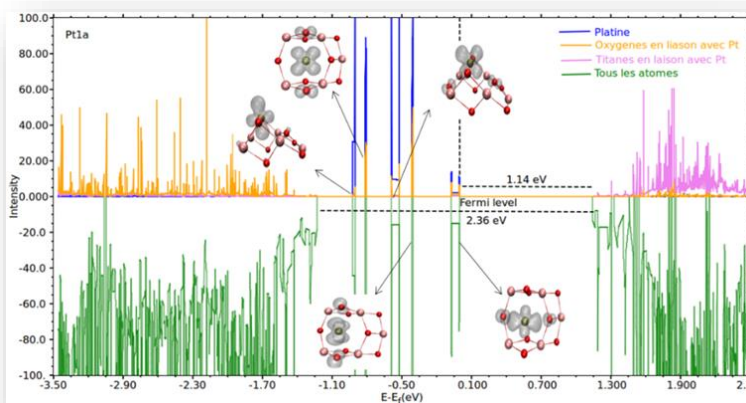
**Responsable du laboratoire :** Philippe Dugourd

**Equipe :** Physico-chimie théorique

La photocatalyse est une alternative intéressante aux productions actuelles d'énergie. Par exemple, l'énergie solaire pourrait produire de l'hydrogène à partir de la molécule d'eau. Des travaux récents mettent en évidence la capacité de certains matériaux à transférer les charges photo-induites vers les sites de surface. L'enjeu est de comprendre et mettre en évidence le transfert de charges vers les sites souhaités.

Irradié sous lumière UV, le semi-conducteur TiO<sub>2</sub> produit une paire électron/trou potentiellement utilisable pour les réactions redox lorsque les charges sont transférées en surface. Des nanoparticules de métal ou d'oxyde placées à la surface du semi-conducteur permettent de canaliser les transferts de charge suivant les propriétés de la jonction avec le semi-conducteur. Aussi l'irradiation UV ou visible peut entraîner une activité photo-catalytique différente.

La compréhension de chacun des processus (de l'absorption de la lumière à la formation de paire électron-trou et la diffusion des charges sur les sites souhaités) nécessite la mise en évidence des états électroniques pouvant intervenir dans les transferts de charge en fonction du couple métal/oxyde utilisé. Pour cela des calculs théoriques basés sur la DFT seront effectués afin de décrire ces états et d'expliquer la distribution de charge observée à la jonction semi-conducteur/ métal.

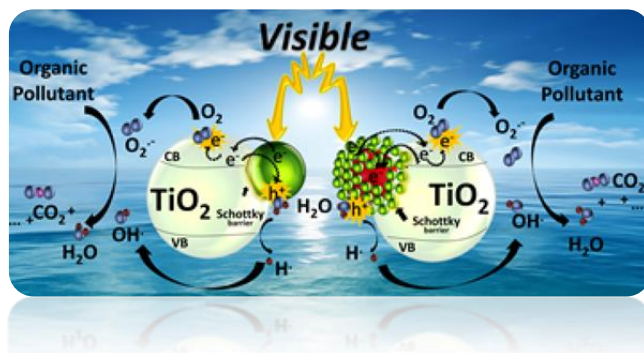


Les résultats obtenus seront confrontés aux travaux expérimentaux déjà effectués mais aussi développés par une équipe de l'IRCELYon.

Poursuite en thèse possible. Financement envisagé : école doctorale.

**Ref :** *J. Phys. Chem. C* 2016, 120, 5143–5154 ; *Applied Surface Science* 387 (2016) 89–102 ; *Applied Surface Science* 378 (2016) 37–48 ; *J. Phys. Chem. C* 2016, 120, 25010–25022

## Investigation of the photocatalytic activity of metal nano-particles deposited on TiO<sub>2</sub>.



**Supervisors :** Franck Rabilloud, Mignon Pierre

**Contact :** [franck.rabilloud@univ-lyon1.fr](mailto:franck.rabilloud@univ-lyon1.fr) ,

[pierre.mignon@univ-lyon1.fr](mailto:pierre.mignon@univ-lyon1.fr)

**Lab. :** Institut Lumière Matière

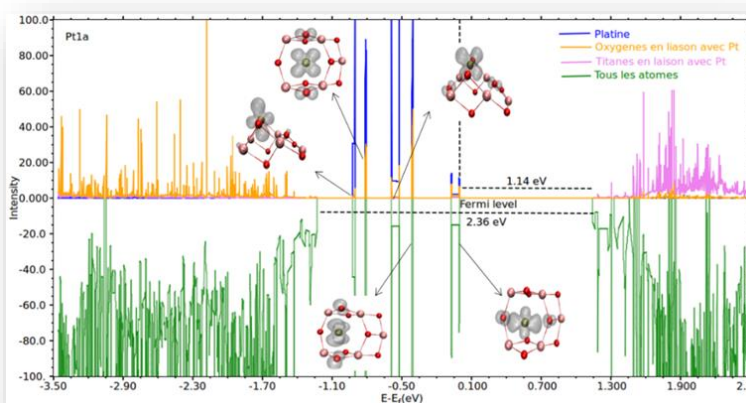
**Head Lab. :** Philippe Dugourd

**Team :** Physico-chimie théorique

Photocatalysis is an interesting alternative to current energy production processes, an example is the production of hydrogen from the water molecule by using solar energy. Numerous studies highlight the capacity of the materials for photo-induced charge transfer to the surface reactive sites. The main goal is to understand the process carrying the charges to the desired surface sites.

Due to its stability and high activity in photocatalysis, TiO<sub>2</sub> is the most widely used semiconductor which, under UV irradiation, generate an electron/hole pair directly usable for redox reactions. Nanoparticles of metal or oxides deposited on the surface of the semiconductor act as reducing or oxidizing agents depending on the properties of the electronic states involved at the junction with the semiconductor. Also UV or visible irradiations may cause different photocatalytic activities.

The understanding of each of these processes requires the investigation of the electronic states involved in charge transfer as a function of the metal/oxide used. For this purpose theoretical calculations based on the DFT will be carried out in order to describe these states and to explain the charge distribution observed at the semiconductor/metal junction.



The results obtained will be compared with the experimental work already achieved but also with those developed by a team of the IRCELyon lab.