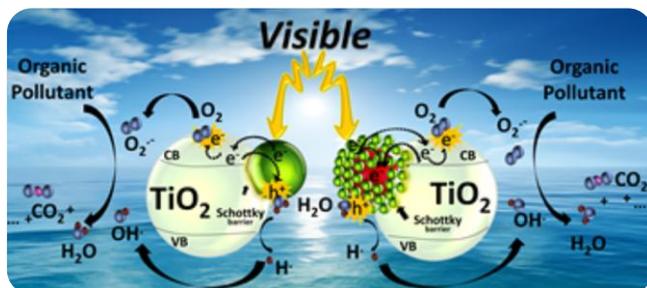


## Investigation of the photocatalytic activity of metal nano-particles deposited on TiO<sub>2</sub>.



**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

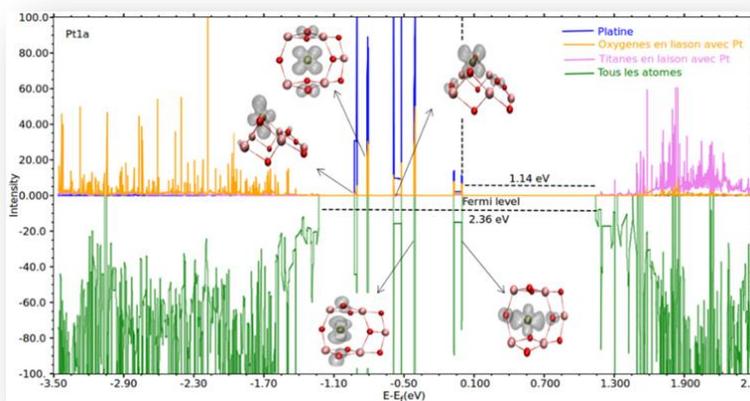
**Head Lab. :** Philippe Dugourd

**Team :** Physico-chimie théorique

Photocatalysis may be an appealing alternative to current energy production processes, an example may be the production of hydrogen from the water molecule by using solar energy. Numerous studies highlight the capacity of the materials for charge transfer to the surface sites where the oxido-reduction reactions may take place. 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 oxidizers 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.

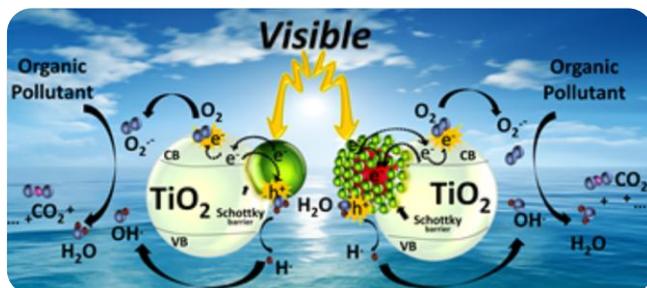
The understanding of each of these processes requires the investigation of the electronic states involved in charge transfer as a function of the metal/oxide used. For this purpose theoretical calculations based on the DFT will be carried out in order to describe these states and to explain the charge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

**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

## 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

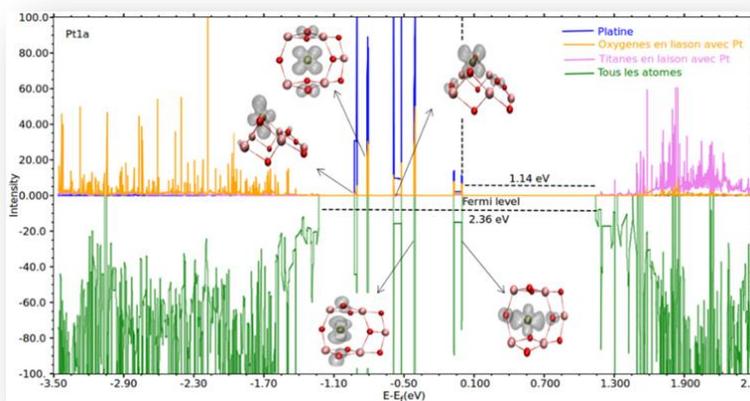
**Responsable du laboratoire :** Philippe Dugourd

**Equipe :** Physico-chimie théorique

La photocatalyse est une alternative intéressante aux productions actuelles d'énergie, par exemple en utilisant l'énergie solaire pour produire de l'hydrogène à partir de la molécule d'eau. De nombreux travaux actuels mettent en évidence la capacité des matériaux à transférer les charges vers les sites de surface où se réalisent les réactions d'oxydoréduction. Le but étant de comprendre le processus permettant de canaliser les charges vers les sites souhaités.

Du fait de sa stabilité et de sa grande activité en photocatalyse TiO<sub>2</sub> est le semi-conducteur le plus largement utilisé qui permet sous irradiation UV de produire une paire électron/trou directement utilisable pour les réactions redox. Des nanoparticules de métal ou d'oxydes placées à la surface du semi-conducteur jouent le rôle de réducteur ou d'oxydant suivant les propriétés des états électroniques rentrant en jeu à la jonction avec le semi-conducteur. Aussi l'irradiation UV ou visible peut entraîner une activité photo-catalytique différente.

La compréhension de chacun de ces processus, nécessite la mise en évidence des états électroniques pouvant intervenir dans les transferts de charge en fonction du 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 du laboratoire de l'IRCELyon.

**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