

Axes : NC

- Nanoparticules supportées : croissance, structure, mouillage et adhésion
- Réactivité à l'échelle atomique
- Catalyseurs modèles
- Croissance de nanoparticules en phases gaz ou liquide

Oxydes en basses dimensions

<http://www.insp.jussieu.fr/-Oxydes-en-basses-dimensions-.html>

Institut des Nanosciences de Paris (INSP – UMR 7588)

CNRS et UPMC, Campus Jussieu, 75252 Paris

<http://www.insp.jussieu.fr/>

Contact C'nano de l'équipe

Jacques JUPILLE

Responsable d'équipe :

JUPILLE Jacques

jacques.jupille@insp.jussieu.fr

Membres permanents de l'équipe :

BRUNET-BRUNEAU Aline

aline.brunet-bruneau@insp.jussieu.fr

CRUGUEL Hervé

herve.cruquel@insp.jussieu.fr

DEPONDY Philippe

philippe.depondt@insp.jussieu.fr

FINOCCHI Fabio

fabio.finocchi@insp.jussieu.fr

GEYSERMANS Pascale

pascale.geysermans@insp.jussieu.fr

GONIAKOWSKI Jacek

jacek.goniakowski@insp.jussieu.fr

LAZZARI Rémi

remi.lazzari@insp.jussieu.fr

NOGUERA Claudine

claudine.noguera@insp.jussieu.fr

STANKIC Slavica

slavica.stankic@insp.jussieu.fr

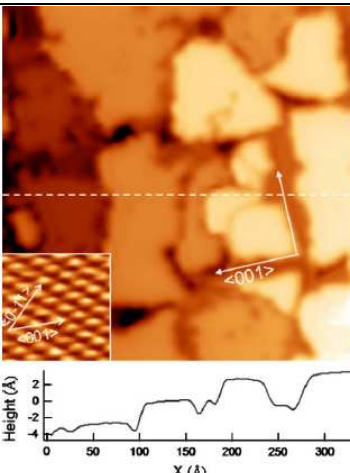
- **Activité scientifique de l'équipe :**

La science des surfaces et des interfaces, qui examine les propriétés structurales, électroniques et réactionnelles, accorde de nos jours un intérêt accru aux substrats isolants dont les archétypes sont les oxydes, car omniprésents, que ce soit dans l'environnement ou dans les objets manufacturés.

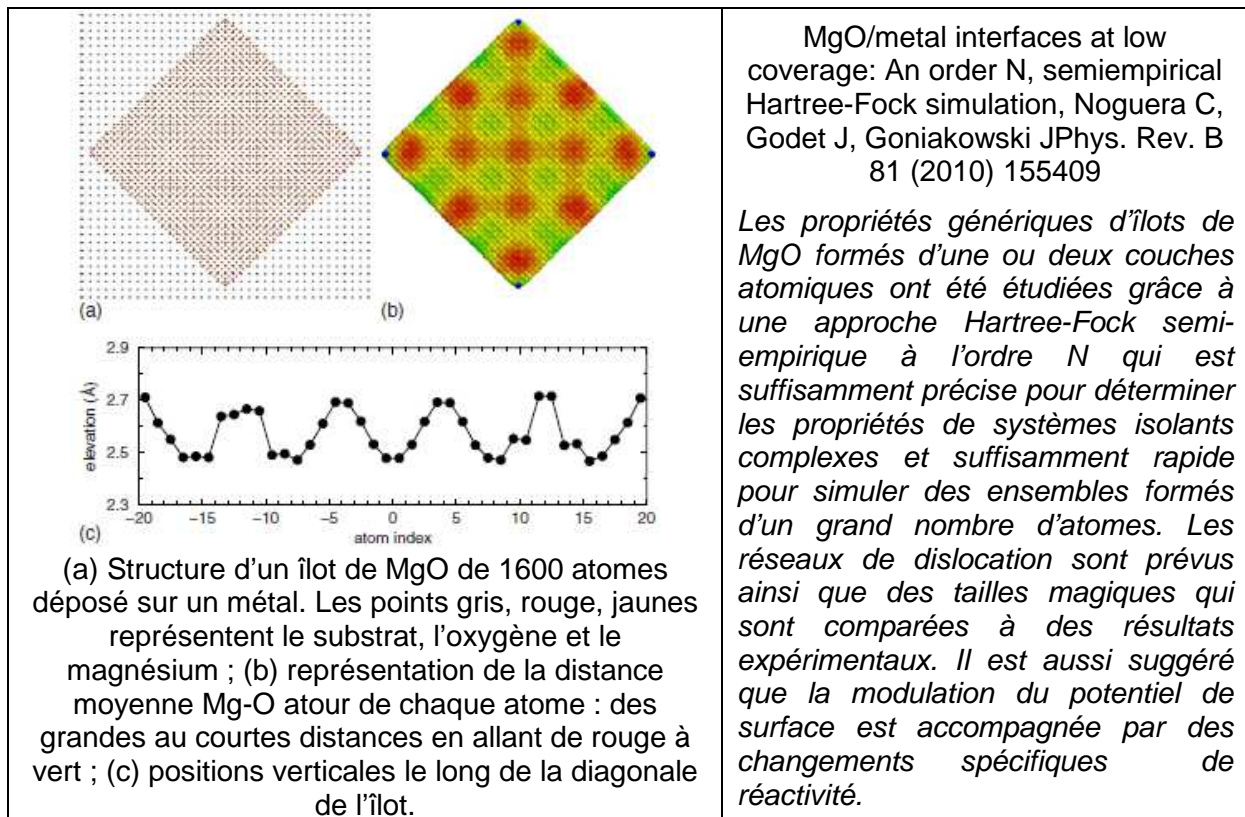
A l'échelle nanométrique, les propriétés des oxydes présentent des variations dramatiques, dues aux interactions à longue portée qui ne sont pas écrantées dans les isolants. Les propriétés électroniques, magnétiques et de réactivité dépendent fortement de la coordinence des atomes, de l'orientation cristallographique, de l'épaisseur, de la taille latérale et de la stoechiométrie. Il en résulte des propriétés nouvelles, telles une variabilité du gap, une électro-négativité et une réactivité spécifiques des atomes sous-coordonnés, des variations de moments magnétiques et de températures critiques de transitions magnétiques, sur lesquelles on peut tenter de jouer pour fabriquer des objets artificiels aux propriétés prédéfinies. L'équipe regroupe expérimentateurs et théoriciens travaillant sur les oxydes en basses dimensions. Son objectif est d'explorer la structure des surfaces, des films minces, des agrégats d'oxydes et leurs interfaces avec d'autres matériaux (en particulier les métaux), pour en comprendre leurs propriétés électroniques, magnétiques, de réactivité et d'adhésion. L'intérêt se porte spécifiquement sur les propriétés locales, grâce à l'utilisation de diverses techniques, telles que la microscopie à champ proche, la spectroscopie d'électrons, les approches théoriques des propriétés d'état fondamental et excité, et la modélisation multi-échelle de systèmes complexes..

- **Recherche(s) et résultat(s) obtenu(s) dans les domaines d'actions des nanosciences :**

Signature commune de marches hydroxylées non-polaires sur fumées de MgO et films supportés de MgO

 <p>Image 33 nm x 33 nm par microscopie tunnel d'un film de MgO (1,5 couche atomique) supporté sur Ag(100) (résolution atomique en insert). Profil le long de la ligne tiretée.</p>	<p>Common fingerprint of hydroxylated non-polar steps on MgO smoke and MgO films, Savio L, Smerieri M, Orzelli A, Vattuone L, Rocca M, Finocchi F, Jupille J, Surf. Sci. 604 (2010) 252.</p> <p><i>L'hydroxylation d'un film de MgO supporté sur Ag(100) et de nanoparticules de fumée de MgO ont été comparées avec l'appui de simulations numériques fondées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Les spectres vibrationnels correspondant à l'hydroxylation de marches monoatomiques <100> sur la face (100) de MgO ont été observés dans les deux cas (par spectroscopie de pertes d'énergie d'électrons à haute résolution dans le cas du film et par spectroscopie infrarouge dans le cas des fumées) : il est formé de deux bandes à 3460-3480 cm⁻¹ et 3710-3715 cm⁻¹. Ces marches, dont l'existence a été prévue par l'expérience et le calcul à la surface des cristallites qui forment les fumées de MgO, sont observées directement par observation du film (figure).</i></p>
--	---

Simulation Hartree-Fock semi-empirique à l'ordre N d'îlots de MgO supportés par un métal



• **Programme de recherche :**

1. Développement expérimentale et théorique relatifs à la structure et aux propriétés réactives des îlots d'oxyde supportés contraints
2. Etude expérimentale et théorique du mouillage des oxydes par les métaux en fonction de l'environnement.
3. Croissances de particules d'oxydes ou de métaux en phase liquide ou gaz.
4. Réactivité de l'or supporté
5. Plasmonique pour l'analyse des structures cœur-coquille.

• **Références :**

1. A systematic study of ideal and double layer reconstructions of ABO₃(001) surfaces (A = Sr, Ba; B = Ti, Zr) from first principles, Iles N, Finocchi F, Khodja KD, J. Phys. Cond Mat. 22 (2010) 305001.
2. Oxygen-Induced Transformations of an FeO(111) Film on Pt(111): A Combined DFT and STM Study Giordano L, Lewandowski M, Groot IMN, Sun YN, Goniakowski,

- Noguera C, Shaikhutdinov S., Pacchioni G, Freund HJ, *J. Phys. Chem. C* 114 (2010) 21504.
3. Interfacial layering and capillary roughness in immiscible liquids, Geysersmans P, Pontikis V, *J. Chem. Phys.* 133 (2010) 074706.
 4. Zinc oxide scaffolds on MgO nanocubes, Stankic S, Sternig A, Finocchi F, Bernardi J, Diwald O, *Nanotechnology* 21 (2010) 355603.
 5. X-ray diffraction analysis of thermally-induced stress relaxation in ZnO films deposited by magnetron sputtering on (100) Si substrates, Conchon F, Renault PO, Goudeau P, Le Bourhis E, Sondergard E, Barthel E., Grachev S, Gouardes E., Rondeau V, Gy R, Lazzari R, Jupille J, Brun N, *Thin Solids Films* 518 (2010) 5237.
 6. Thermodynamics and kinetics of the Schottky defect at terraces and steps on the MgO(001) surface, Antoshchenkova E, Hayoun M, Geneste G, Finocchi F., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12 (2010) 7251.
 7. The Interplay between Structure and CO Oxidation Catalysis on Metal-Supported Ultrathin Oxide Films, Sun YN, Giordano L, Goniakowski J, Lewandowski M, Qin ZH, Noguera C, Shaikhutdinov S, Pacchioni G, Freund HJ, *Angew. Chem. Int. Ed.* 49 (2010) 4418.
 8. Polarity of ultrathin MgO(111) films deposited on a metal substrate, Goniakowski J, Giordano L, Noguera C, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 205404.
 9. MgO/metal interfaces at low coverage: An order N, semiempirical Hartree-Fock simulation, Noguera C, Godet J, Goniakowski J, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 155409.
 10. Simulation of the growth of metal nanoclusters on the MgO(100) surface, Goniakowski J, Mottet C, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 155443.
 11. Latex-Templated Silica Films: Tailoring Porosity to Get a Stable Low-Refractive Index, Guillemot F, Brunet-Bruneau A, Bourgeat-Lami E, *Chem. Mat.* 22 (2010) 2822.
 12. Common fingerprint of hydroxylated non-polar steps on MgO smoke and MgO films, Savio L, Smerieri M, Orzelli A, Vattuone L, Rocca M, Finocchi F, Jupille J, *Surf. Sci.* 604 (2010) 252.
 13. Simulation of the nucleation and growth of binary solid solutions in aqueous solutions, Noguera C, Fritz B, Clement A, Amal, Y., *Chem. Geol.* 269 (2010) 89.
 14. X-ray diffraction study of thermal stress relaxation in ZnO films deposited by magnetron sputtering, F. Conchon, P.O. Renault, E. Le Bourhis, C. Krauss, P. Goudeau, E. Barthel, S. Yu. Grachev, E. Sondergard, V. Rondeau, R. Gy, R. Lazzari, J. Jupille, N. Brun, *Thin Solid Films* 519 (2010) 1563.