

## Séminaire P2M

Mercredi 11 mai 2022 à 11h en visio (teams)

Gael Reecht

Institut für Experimentalphysik, Freie Universität Berlin, Germany

### Etude STM de molécules uniques sur du disulfure de molybdène : stabilisation de radicaux et spectroscopie vibrationnelle haute résolution.

Adsorbé sur un métal, une molécule a tendance à interagir fortement avec le substrat avec des effets drastiques sur ses propriétés électroniques, optoélectroniques, magnétiques, ... Afin de pouvoir s'affranchir de ces interactions molécule-substrat et ainsi mesurer par STM les propriétés intrinsèques d'une molécule, une solution communément utilisée est d'insérer entre le substrat et la molécule une couche fine inerte qui permet ainsi de découpler la molécule du substrat métallique. Sels ioniques, oxydes, nitrures ou matériaux 2D (graphène, H-BN), ont notamment été déjà utilisés pour découpler des molécules de leur substrat métallique.

Dans ces travaux, je propose d'utiliser une monocouche de disulfure de molybdène ( $\text{MoS}_2$ ) pour jouer ce rôle de couche découplante dans l'étude STM de molécules uniques. J'introduirai les spécificités d'une monocouche de  $\text{MoS}_2$  sur Au(111), notamment le rôle majeur l'hybridation avec le substrat métallique sur les propriétés du matériau 2D. Puis, à travers l'étude STM/STS de deux systèmes moléculaires (phthalocyanine et dérivé de thiophène) sur du  $\text{MoS}_2/\text{Au}(111)$ , je montrerai l'avantage d'utiliser un tel substrat pour étudier les propriétés intrinsèques de molécules uniques.

Premièrement, une molécule de  $\text{H}_2\text{Pc}$ , peut sous l'influence de la pointe STM être déshydrogène, provoquant un changement drastique de la structure électronique qui s'explique par la stabilisation de la molécule comme radical. Secondement des mesures spectroscopiques réalisées sur un dérivé de thiophène (BTBT) révèlent des états moléculaires avec une structure riche en résonance vibronique, rendu possible par le faible couplage électron-phonon entre la molécule et le  $\text{MoS}_2$ . Cette particularité permet d'obtenir une énergie résolution des états électroniques et vibrationnelle seulement limité par la température. A l'aide de simple calcul DFT en phase gazeuse, plus d'une dizaine de modes vibrationnels différents sont identifiés, permettant même de différencier des variations minimales dans la structure des molécules. Enfin, des divergences du modèle d'excitation vibronique expliqué précédemment me permettra de mettre en évidence un nouveau mécanisme d'excitation vibrationnel, spécifique aux mesures STS.

Lien teams :