



## Soutenance de thèse

*Tamara OVRAMENKO*

*ISMO (Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay), Orsay*

### Étude STM de molécules organiques individuelles à la surface de carbure de silicium

Contrôler l'interaction de molécules organiques avec les surfaces semiconductrices permet de maîtriser les propriétés physiques des molécules et des surfaces, en jouant sur les couplages électroniques entre les orbitales moléculaires et la surface.

Cette thèse présente l'étude expérimentale par microscopie à effet tunnel de l'adsorption de molécules sur la surface semiconductrice à large gap de 6H-SiC(0001)-3x3. Les résultats ont été comparés à des études théoriques employant des calculs selon la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Trois molécules ont été étudiées: Trima, C<sub>60</sub>, et Caltrop.

La molécule de Trima contient deux groupements cétone permettant la fonctionnalisation de la surface du SiC. Les calculs DFT sont en très bon accord avec les images STM. Je montrerai qu'il s'agit d'un exemple rare car deux liaisons datives sont formées.

Ensuite, je montrerai que la molécule de C<sub>60</sub> est chimisorbée sur la surface de carbure de silicium à travers la formation d'une seule liaison Si-C avec un seul adatome de silicium. Trois sites d'adsorption ont été observés. Pour expliquer les observations STM, les forces de Van der Waals entre la molécule de C<sub>60</sub> et les atomes de la surface voisins ont dû être prises en compte.

La molécule de Caltrope a été étudiée sur les surfaces de Si(100) et SiC. Nos résultats montrent un comportement remarquable : le dépôt de molécules individuelles est induit sur la surface de manière efficace par la pointe du STM. L'adsorption sur le silicium à travers une seule liaison permet la molécule de Caltrope de se comporter comme un moteur moléculaire activé thermiquement.

**Attention !**  
**Jour inhabituel**

**Jeudi 29 novembre 2012 à 14h00**

**Bât. 210 - Amphi 1 (2<sup>ème</sup> étage)**

**Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex**

*La soutenance sera suivie d'un pot auquel vous êtes chaleureusement conviés.*