

CONTRACTS DOCTORAUX 2025

Titre du projet de thèse : Étude théorique des interactions molécule-surface pour des systèmes d'intérêt atmosphérique : Combinaison de la dynamique moléculaire *ab initio* et des surfaces d'énergie potentielle basées sur l'apprentissage automatique.

Directeur de thèse : Maurice MONNERVILLE

Co-directeur et co-encadrants (le cas échéant) : Alejandro RIVERO-SANTAMARIA

Laboratoire(s) d'accueil : PhLAM

Équipe : Physico Chimie Moléculaire Théorique (PCMT)

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

Les interactions molécule-surface jouent un rôle crucial en chimie atmosphérique, car elles influencent des processus tels que l'adsorption, la catalyse et les réactions hétérogènes. Comprendre ces interactions est essentiel pour élucider les mécanismes impliqués dans les transformations des polluants et pour orienter le développement de solutions catalytiques avancées.

Parmi ces processus, les interactions entre des molécules comme le NO, le NO₂, le SO₂ et le O₃ avec des surfaces fonctionnalisées ou défectueuses jouent un rôle clé. Ces molécules, souvent considérées comme des polluants majeurs, peuvent interagir avec des surfaces carbonées comme le graphite, qui servent de modèles pour les particules de suie. Les groupes fonctionnel -OH, -O, -CO et les défauts structurels modifient significativement la réactivité de ces surfaces, influençant directement les mécanismes d'adsorption et de réaction.

S'appuyant sur l'expertise démontrée de notre groupe dans l'étude de la réactivité hétérogène du NO sur des surfaces fonctionnalisées de graphite (O-HOPG) via la dynamique moléculaire *ab initio* (AIMD) [1] et l'intelligence artificielle, ce projet permettra au doctorant de poursuivre ces recherches en les étendant à d'autres systèmes d'intérêt atmosphérique. Les données DFT obtenues serviront à construire des surfaces d'énergie potentielle basées sur l'apprentissage automatique (ML-PES), réduisant le temps de calcul tout en améliorant la précision des résultats. Cette approche offrira une description détaillée des interactions molécules-surface et contribuera à des applications telles que la capture de polluants ou la conception de matériaux catalytiques.

Références

[1] Alou et al. *Ab Initio Molecular Dynamics Calculations on NO Oxidation over Oxygen-Functionalized Highly Oriented Pyrolytic Graphite*. J. Phys. Chem. C. **2024** 128 (42), 17894-17904

Contact : alejandro.rivero@univ-lille.fr