

ÉCOLE DOCTORALE « SCIENCES DE LA MATIERE, DU RAYONNEMENT ET DE L'ENVIRONNEMENT » (ED104)

UNIVERSITE de LILLE 1

Filière doctorale : Molécules et Matière Condensée (MMC)

Titre de la thèse : Conception de Matériaux Fonctionnels par des Méthodes de Chimie Topotactique

Direction de thèse : Olivier MENTRE, Houria KABBOUR
Laboratoire(s) de Rattachement : UCCS – UMR CNRS 8181

SUJET DE THÈSE

Nouveaux Matériaux : La recherche de nouveaux matériaux fonctionnels est plus que jamais nécessaire dans le contexte énergétique actuel. La recherche de composés innovants est donc indispensable pour l'anticipation des transitions énergétiques futures. L'équipe OXID (Oxydes Innovants et Diffraction Avancée) de l'UCCS, a développé une expertise internationale dans la conception raisonnée et la cristallographie de nouvelles phases inorganiques aux propriétés remarquables. De nombreux nouveaux matériaux ont ainsi été synthétisés et étudiés pour des applications en tant qu'électrodes des piles à combustibles^{1, 2} ou en catalyse hétérogène³ par exemple, des domaines clés liés à l'énergie renouvelable. Nous disposons d'une vaste boîte à outils de réactions chimiques, caractérisations et outils de calculs/simulation pour la conception de tels matériaux aux propriétés ciblées. Notre méthodologie implique une approche modulaire des structures des composés inorganiques, c'est-à-dire leur description en blocs « autonomes » chacun amenant ses propres spécificités. Ceci rend possible la modification ciblée de certaines sous unités structurales ainsi que leur assemblage dans des inter-croissances originales. Dans le cadre de cette thèse nous envisagerons notamment dans des composés de métaux de transition, l'empilement de blocs à sous-réseaux anionique non conventionnels, e.g. oxydes non stœchiométriques, oxo-halogénures, oxo-hydrures ... qui permettra de moduler les états de valence des sous-réseaux cationiques (Mn, Fe, Co, Ni...). Les techniques de synthèses seront aussi variées que les synthèses à l'état solide, la croissance cristalline, les voies hydrothermales, l'utilisation de hautes pressions, les conditions redox extrêmes, les voies topotactiques etc ...

Chimie Topotactique : Au niveau des méthodes de synthèse « *topotactique* », au cœur de cette thèse, le travail bénéficiera des compétences acquises par notre groupe⁴ et de collaborations avec des groupes leaders. Ces méthodes s'appuient sur la modification non destructrice de phases présentant une aptitude à la désinsertion/insertion d'oxygène (réduction/oxydation *topotactique*) par exemple ou plus généralement à la modification du réseau anionique, y compris par incorporation d'autres anions (→ oxy-hydrures, oxy-sulfures, oxy-nitrides...). Il est ainsi possible de modifier la structure électronique autour du niveau de Fermi qui dicte les potentialités au niveau de l'énergie, de l'optique, du magnétisme, du transport électronique et de la catalyse, propriétés qui seront étudiés dans notre travail.

Date de début de la thèse : octobre 2015

Financement envisagé : Université Lille 1

Contacts : olivier.mentre@ensc-lille.fr ; houria.kabbour@univ-lille1.fr

¹ Ehora, G. et al. *Chemistry of Materials* **20**, p7425-7433 (2008)

² Rolle, A. et al. *Solid State Ionics* **184**, p31-34 (2011)

³ Perillat-Merceroz, C. *Chemistry of Materials* **23**, p1539-1550 (2011)

⁴ David, R. et al. *Angewandte Chemie - International Edition* **53**, p13365-13370 (2014)