



Sujet de thèse

Structure électronique et fonctionnalisation de feuillets bidimensionnels de carbures de métaux de transition (MXènes) : simulation de données spectroscopiques.

Contacts : vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr / Florent.Boucher@cnrs-imn.fr

Contexte scientifique : Les MXènes forment une classe particulièrement large de matériaux bidimensionnels constitués de feuillets de carbures ou nitrures de métaux de transition fonctionnalisés par différents groupements « T » (T = -O, -F, -OH)[1,2]. Les possibilités de jouer à la fois sur la nature de ces groupements fonctionnels et la composition de cœur des feuillets offrent des perspectives extrêmement vastes dans la modification et l'optimisation des propriétés physico-chimiques de ces matériaux.[1,3] Dans ce contexte, le projet ANR MXene-CAT à travers lequel est financée cette offre de thèse, vise à optimiser les propriétés de certains MXènes afin de les utiliser comme électrocatalyseurs pour les réactions d'évolution et/ou de réduction de l'oxygène (*i.e.* des réactions clés pour les dispositifs de pile à combustible et électrolyseurs notamment).

Projet de recherche : Compte-tenu de la complexité structurale et chimique des MXènes, leur caractérisation par des méthodes de spectroscopie (*e.g.*, spectroscopie de photoélectrons X -XPS -, résonance magnétique nucléaire – RMN – ou spectroscopie de perte d'énergie des électrons – EELS-) requière un support théorique pour une meilleure interprétation des mesures. [4,5] La présente offre de thèse porte sur la simulation de telles données par des méthodes basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité dans le but, notamment, d'identifier les groupements terminaux, de caractériser les effets de solution solide et l'influence de ces groupements sur la structure électronique de ces matériaux et propriétés associées.

Ce travail de thèse sera réalisé en collaboration entre l'institut Pprime (V. Mauchamp) et l'Institut des Matériaux de Nantes (Florent Boucher) et en interaction avec les autres membres du consortium en charge des aspects expérimentaux du projet (*i.e.*, synthèse, caractérisations spectroscopiques) : IC2MP (Poitiers), Institut Pprime (Poitiers), IMN (Nantes) et CEMHTI (Orléans).

Candidat(e) : Nous recherchons un(e) étudiant(e) motivé(e) titulaire d'un master attestant d'une solide formation en physique/chimie du solide (ou équivalent) avec des compétences et une attirance pour les méthodes de calcul de structure électronique des matériaux. Des connaissances dans les techniques de spectroscopies mentionnées dans le descriptif du sujet seront appréciées.

CV et lettres de candidatures doivent être envoyés à vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr et Florent.Boucher@cnrs-imn.fr.

Références :

- [1] B. Anasori *et al.*, Nature Reviews Materials vol. 2, 16098 (2017)
- [2] M. Naguib *et al.*, Advanced Materials vol. 23, 4248 (2011)
- [3] M. Khazaei *et al.*, Journal of Materials Chemistry C vol 5, 2488 (2017)
- [4] D. Magné *et al.*, Physical Review B vol 91, 201409 (2015)
- [5] D. Magné *et al.*, Physical Chemistry Chemical Physics vol. 18, 30946 (2016).