

Recherche exploratoire de composés lamellaires à anions mixtes pour la dissociation photocatalytique de l'eau

La conception de matériaux fonctionnels basés sur la chimie des Anions Mixtes a émergé ces dernières années avec de nombreux exemples remarquables pour ajuster et/ou améliorer les propriétés dans divers domaines tels que les matériaux pour l'optique non linéaire, le magnétisme, les supraconducteurs, la photocatalyse sous lumière visible, etc.... Dans le contexte du réchauffement climatique, la dissociation photocatalytique de l'eau est un moyen simple et prometteur de produire du H₂ (un carburant durable) à partir de l'eau et de la lumière solaire si des photocatalyseurs appropriés sont développés. Les photocatalyseurs à anions mixtes ont d'abord attiré l'attention avec les oxynitrides car ils sont actifs dans le spectre solaire grâce aux états N 2p qui réduisent la bande interdite par rapport aux oxydes. Les oxychalcogénures ont récemment montré leur potentiel en tant que candidats alternatifs et pouvant offrir une bonne stabilité. Dans ce projet, nous explorerons une sélection d'oxychalcogénures en couches (structuration 2D) pour élaborer et étudier de nouveaux photocatalyseurs par substitution anionique et/ou substitution cationique avec un cation à paire libre. L'activité photocatalytique dans la région visible nécessite un matériau avec une bande interdite < 3,10 eV, qui est facilement accessible dans cette classe de matériaux, et une position appropriée des bords de bandes. Après absorption de la lumière et génération de paires électron-trou, les porteurs de charges doivent se séparer et migrer vers la surface pour réagir avec H₂O afin de générer H₂ et/ou O₂, ce processus devrait être facilité par la basse dimensionnalité (structures lamellaires) et les environnements à anion mixte (caractère acentrique des environnements et champ électrique interne). Les composés sélectionnés seront caractérisés notamment par diffraction des RX (sur poudre et monocristal) et microscopie électronique après une étape d'optimisation de la synthèse (l'emploi de techniques de chimie douce seront privilégiés lorsque cela est possible). Des tests photocatalytiques pour le water-splitting et des caractérisations photoélectrochimiques seront menées. Des techniques expérimentales et numériques (modélisation par DFT) pour caractériser la structure électronique seront également employés pour appuyer l'étude des relations structure-propriétés.

Laboratoire : Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel

Direction de thèse : Houria Kabbour (IMN/MIOPS), houria.kabbour@cnrs-imn.fr

Co-direction : Mayte Caldes (IMN/MIOPS), maite.caldes@cnrs-imn.fr

Co-encadrement : Clément Maheu (IMN-MIOPS/PCM), clement.maheu@cnrs-imn.fr

Démarrage de la thèse : 10/2024