

Proposition de sujet de thèse - année universitaire 2010-2011

Titre : Relation structure – fonctionnalité des molécules photosensitives encapsulées dans des matrices poreuses

Title: Structure-property relationship of photosensitive molecules incorporated in porous matrices

Unité de recherche : Institut Jean Barriol, Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations – CRM2, UMR CNRS 7036, Université Henri Poincaré, Nancy I

Domaine scientifique principal de la thèse : Science de la matière et des matériaux, nanocristallographie

Thème : Structure - Fonctionnalité

Projet de thèse :

La nanocristallographie s'occupe de la détermination des structures nanométriques, par exemples des nanocristaux, des espèces encapsulées en matrices mésoporeuses ou encore des dispositifs structurés à l'échelle du nanomètre. Même si le domaine des nanotechnologies a augmenté d'une manière quasi exponentielle et par conséquent le besoin d'une caractérisation nanocristallographique, il n'existe pas encore de méthodologie en nanocristallographie généralement admise comme c'est le cas pour la cristallographie sur les poudres ou les monocristaux. Tout de même il y a quelques approches actuellement expérimentées pour faire avancer la méthodologie en nanocristallographie, dont la PDF (fonction de distribution de paires) qui utilise des données collectées à très haute résolution.

Le travail de thèse se joue dans le cadre de ce problème fondamental de la cristallographie structurale. Une étude systématique des composés mésoporeux chargés de molécules fonctionnelles (photochromes et photoréfractives) serait fait en adressant les questions scientifiques suivantes

- Quelle est la structure d'une molécule isolée dans l'environnement poreux ou nanométrique?
- A partir de quelle taille de cluster ou de nanoparticule on peut observer des effets coopératifs?
- Quelle est l'influence de l'environnement et de la largeur de la particule incorporée sur ses propriétés fonctionnelles?

Le système de modèle pour ces études est une molécule de type ML_5NO incorporée dans les matrices silice, préparées par procédé sol-gel, p.ex. $K_2[RuCl_5NO]$ dans une matrice silice.

Les méthodes expérimentales utilisées sont la diffraction de poudre (rayons X et neutrons), SAXS/SANS (détermination des tailles de pores et particules), TEM (microstructure), RMN et EXAFS (structure locale). Ces mesures structurales seront accompagnées par des mesures optiques pour vérifier la fonctionnalité des échantillons.

Compétences requises:

Formation physique du solide, cristallographie, diffraction, optique

Instrumentation/programmation: connaissances d'un langage de programmation (fortran, python)

Forte motivation pour un travail expérimental et l'utilisation des grands instruments (synchrotron, source de neutrons)

Contact et encadrant:

Dominik Schaniel: dominik.schaniel@crm2.uhp-nancy.fr