

SOUTENANCE D'HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Le 27/09/2012 à 14h00

Amphithéâtre 8 de la Faculté des Sciences, Université de Lorraine, Vandœuvre-lès-Nancy,
« Apport de la Cristallographie à l'étude de systèmes hybrides (molécule@microporeux) »

Florence PORCHER

DSM/IRAMIS/LLB

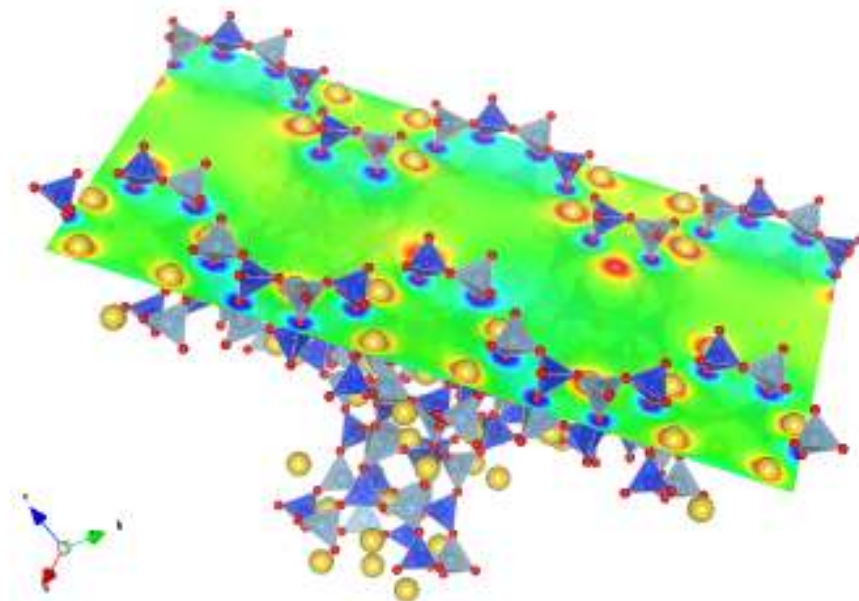
Les zéolithes sont utilisées depuis les années 60 dans de nombreuses applications industrielles, dont la production de gaz par séparation sélective, la pétrochimie et la catalyse hétérogène. Contrairement aux autres tamis moléculaires comme les mésoporeux ou les charbons, les zéolithes et la famille apparentée des MOFs (Metal-Organic-Frameworks) sont cristallines et possèdent des canaux de dimensionnalité et de géométrie bien définies. Pour cette raison, ce sont également des matrices idéales pour étudier les effets de confinement sur de petites molécules. Ce phénomène, comme la séparation sélective, est régi principalement par les interactions entre les molécules adsorbées et leur matrice inorganique, interactions qui peuvent être appréhendées à partir de la distribution électronique dans le cristal. Dans le cas des zéolithes, qui sont des systèmes relativement complexes de plusieurs centaines d'atomes par maille, la diffraction X à haute résolution offre une alternative aux calculs *ab initio* comme base pour développer de nouveaux potentiels d'interaction pour les simulations de dynamique moléculaire. Cependant, la porosité de ces matériaux et leur qualité cristalline souvent médiocre compliquent les analyses par diffraction X.

Une première partie des études présentées est consacrée à la modélisation de la densité électronique de matériaux modèles simples, construits à partir des mêmes « briques » TO_4 ($T=Al, Si, P, Ga \dots$) que les tamis moléculaires. Elle évalue les conditions de transférabilité des paramètres atomiques (charges, moments multipolaires) obtenus sur ces matériaux vers des systèmes (zéolithe-molécule adsorbée) plus complexes où l'interaction avec les molécules invitées désordonnées déforme le squelette flexible de la zéolithe.

La seconde partie des travaux porte sur l'élaboration et l'étude structurale et dynamique de systèmes (zéolithe - molécule hôte) à propriétés optiques remarquables utilisables en tant que colorant stable ou pour le doublage de fréquence.

La troisième partie est consacrée à l'étude cristallographique des défauts dans ces matériaux (maclage, épitaxie, défauts d'empilement), en lien avec leur croissance ou avec les propriétés de diffusion des molécules invitées.

Enfin, une dernière partie présente les développements de spectromètres de diffraction sur poudre réalisés ou prévus au LLB, et leur intérêt, entre autres, pour les études sur les systèmes poreux.



Potentiel électrostatique dans les canaux en zig-zag de la zéolithe Na-X (FAU).