



## Séminaire



Jeudi 21 avril 2022 à 14h00

Salle 129, bâtiment 520 - Lien en ligne envoyé par mail

---

### Caractérisation des effets de surface, de désordre et d'empilement de feuillets dans le MXène $Ti_3C_2T_x$ par microscopie électronique en transmission

**T. Bilyk**

Les effets de chimie de surface, de désordre et d'empilement jouent des rôles majeurs sur les propriétés des matériaux 2D et l'étude de ces effets sur la structure électronique représente un enjeu fondamental. Les MXènes, des empilements de feuillets bidimensionnels  $M_{n+1}X_nT_x$ , n'échappent pas à cette règle. Ainsi, l'esprit de cette étude est une caractérisation fine des paramètres structuraux du MXène  $Ti_3C_2T_x$ , en couplant des expériences de TEM à des simulations de type DFT.

La structure électronique sondée par spectroscopie de pertes d'énergie des électrons est comparée à des spectres simulés par DFT. D'une part, une étude aux pertes de cœur démontrera que le seuil K du carbone apparaît comme marqueur permettant de découpler les modifications en surfaces des feuillets et les perturbations dans le volume.

D'autre part, au niveau des pertes faibles, une sensibilité à des paramètres structuraux à l'échelle du feuillet sera mise en évidence. La possibilité d'une mesure quantitative et précise au feuillet près de l'épaisseur d'un empilement de quelques feuillets sera discuté. Pour ce second objectif des expériences de diffraction d'électrons en faisceau convergent ont été menées, ainsi que des simulations par la théorie de Bethe des ondes de Bloch.

Il sera donc montré qu'il est possible de mener une étude complète de l'architecture d'un empilement de feuillets de MXène par TEM-EELS, permettant alors une caractérisation fine des paramètres influant sur les propriétés du matériau.