



Ph.D Thesis

Electronic structure and functionalization of two-dimensional transition metal carbides (so-called MXenes) : simulation of spectroscopic data.

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

Scientific context : The MXenes are a particularly large family of two-dimensional materials based on transition metal carbide or nitride sheets, the surface of which are functionalized with different kinds of terminal groups such as -O, -F, -OH[1,2]. Because of the possibility to both modify the chemical composition of the sheets and their surface functionalization, the physical and chemical properties of these materials can be significantly optimized for many diverse applications.[1,3] In this context the MXene-CAT project, which is funded by the french National Research Agency (ANR) and to which is associated the here-proposed PhD, aims at optimizing MXene materials for electrocatalytic applications. The targeted reactions are the oxygen evolution and/or reduction reactions, these two reactions being important for fuel cells or water electrolyzers.

Research project: Because of their structural and chemical complexity, the characterization of MXenes by standard spectroscopic techniques such as X-ray photoelectron spectroscopy, nuclear magnetic resonance or electron energy-loss spectroscopy requires a theoretical support for a quantitative understanding of the experimental data.[4,5] It is the purpose of the here-proposed PhD to simulate such data using state-of-the art methods based on density functional theory. Our goal is to be able to identify the nature of the surface functionalization groups, evidence their impact on the electronic structure and related properties of selected MXene materials.

The Ph.D will be done under the co-supervision of V. Mauchamp (Pprime Institute) and F. Boucher (IMN) and in collaboration with the other members of the consortium in charge of the experimental part of the project (*i.e.* synthesis, spectroscopic characterizations): IC2MP (Poitiers), Pprime Institute (Poitiers), IMN (Nantes) and CEMHTI (Orléans).

Candidate: We are looking for a well-motivated student holding a master degree attesting for a strong background in solid state physics or chemistry (or equivalent) with skills and interest in electronic structure calculation methods applied to materials sciences. Although not mandatory, knowledge in the above mentioned spectroscopic techniques will also be appreciated. CV and application letters should be sent to vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr and florent.boucher@cnrs-immn.fr.

References:

- [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).



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).