

Sujet de stage de Master 2

Films transparents et conducteurs de feuillets bidimensionnels de carbures de titane (MXène) : propriétés optiques et électriques.

Encadrants : Simon Hurand, Vincent Mauchamp (Institut PPRIME), Stéphane Celerier (IC2MP)

Mots-clés : MXène, propriétés optiques, propriétés électriques, film transparent conducteur

Contexte :

De nombreuses applications requièrent l'utilisation de films minces de matériaux qui soient à la fois transparents et conducteurs : affichage à cristaux liquides, photovoltaïque, ou encore boucliers électromagnétiques. Ces technologies reposent largement sur l'utilisation de l'oxyde d'indium dopé à l'étain (ITO), dont l'approvisionnement pose aujourd'hui problème.

Parmi les alternatives envisagées, la famille des MXènes mise en évidence pour la première fois en 2011 [1] présente un fort potentiel [2, 3]. Il s'agit de feuillets bidimensionnels de carbure ou nitrure d'un métal de transition, obtenus par exfoliation de la phase MAX tridimensionnelle correspondante (figure 1). Leur faible épaisseur (1,6 nanomètres pour un feuillet de Ti_3C_2) les rend pratiquement transparents, tandis que leur structure électronique présente un caractère métallique marqué, ce qui en fait de très bons conducteurs.

Sujet du stage :

L'objectif de ce stage est de préparer des films minces de MXène, de caractériser leurs propriétés optiques et électriques, et de les comparer aux prédictions issues de calculs ab initio afin d'optimiser les performances de ces films en améliorant notamment la compréhension du rôle de la fonctionnalisation de surface des feuillets de MXène (terminaisons $-O$, $-OH$ et $-F$).

Le stage inclura la préparation par enduction centrifuge (spincoating), la caractérisation microstructurale (MEB, AFM), et l'optimisation des films minces, en collaboration étroite avec Stéphane Celerier de l'IC2MP pour l'exfoliation par voie chimique [4] et la fonctionnalisation des MXènes. Les propriétés optiques seront caractérisées grâce au matériel de pointe récemment acquis à l'Institut PPRIME (ellipsométrie généralisée visible et infrarouge), et au développement de nouveaux modèles optiques adéquats, incluant notamment la prise en compte de l'anisotropie (aspect lamellaire). L'effet Hall et la résistance des films seront mesurées à l'aide d'un cryostat (77 Kelvin et 0,6 Tesla), et leur dépendance en température permettra, par comparaison avec les mesures optiques, de remonter à la mobilité inter-grain et intra-grain. Enfin, tous ces résultats seront rationalisés du point de vue de la structure électronique de ces matériaux par comparaison avec des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [5-7]. Ces derniers permettent de prédire les constantes diélectriques et les densités de porteurs pour les différentes terminaisons de surfaces possibles. Des premiers résultats prometteurs, reproduisant bien les données de la littérature [2, 3], ont pu être obtenus récemment dans notre équipe. La comparaison avec les calculs ab initio de ces mesures est aussi très encourageante (figure 2).

Profil du candidat :

Nous recherchons un(e) étudiant(e) de Master 2 ayant une solide formation en physique du solide ou physique des matériaux, faisant preuve d'une grande curiosité scientifique et d'une bonne motivation pour mener l'ensemble des travaux expérimentaux et leur interprétation. Des compétences en techniques de caractérisation (microscopique, optique, électrique) seront appréciées. Enfin, bien que ce stage soit essentiellement expérimental, une sensibilisation à la DFT est un plus.

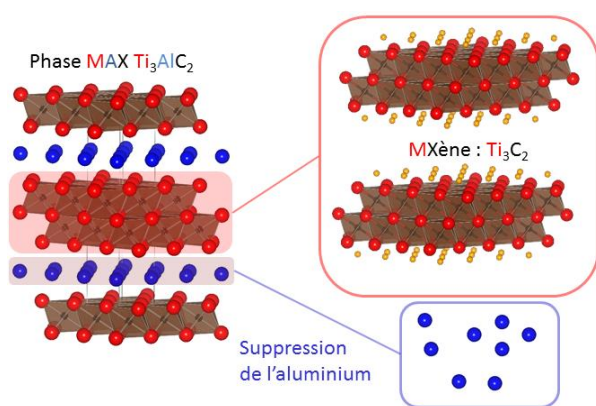


Figure 1 - Schéma de l'exfoliation de la phase MAX Ti_3AlC_2 en MXène Ti_3C_2 par dissolution de l'aluminium en solution acide (HF).

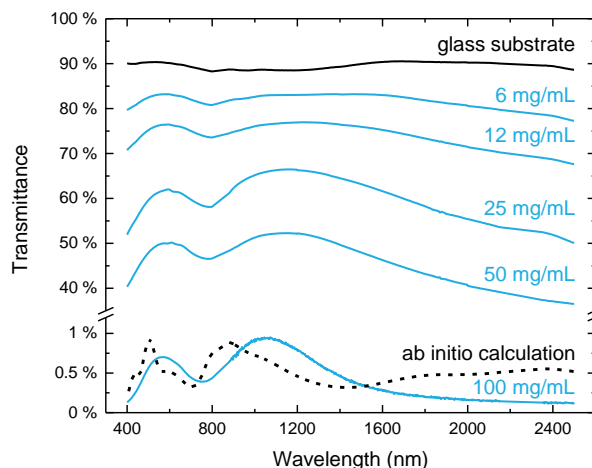


Figure 2 – Premiers résultats : transmission dans le visible-proche infrarouge de films minces de Ti_3C_2 déposés sur substrat de verre par enduction centrifuge pour différentes concentrations en MXène. Pour le film le plus épais (concentration maximale), on a représenté la prédiction du calcul ab initio par DFT.

Durée du stage : 5 à 6 mois, à partir de mars 2019

Gratification : Ce stage est financé par l'institut Pprime à hauteur d'approximativement 547 €/mois. De multiples possibilités d'hébergement à moindre frais existent.

Contacts :

simon.hurand@univ-poitiers.fr, 05 49 49 66 49
vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr, 05 49 49 67 36
stephane.celerier@univ-poitiers.fr, 05 49 45 36 74

Références :

[1] M. Naguib et al., *Advanced Materials* 23.37 (2011): 4248-4253
[2] A. Dillon et al., *Advanced Functional Materials* 26.23 (2016): 4162-4168
[3] G. Ying et al., *Materials Research Letters* 5.6 (2017): 391-398
[4] X. Wang et al., *Journal of Materials Chemistry A* 5.41 (2017): 22012-22023
[5] V. Mauchamp et al., *Physical Review B* 89.23 (2014): 235428
[6] D. Magné et al., *Physical Review B* 91, (2015): 201409 (R)
[7] D. Magne et al., *Physical Chemistry Chemical Physics* 18.45 (2016): 30946-30953