

Avis de Soutenance

Monsieur Iéuan CORNU

Physique

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Etude par RMN de la Relation Propriété/Structure et de la Dynamique des Réseaux Métallo-Organiques Cristallins et Vitreux

dirigés par Monsieur Pierre FLORIAN

Ecole doctorale : Energie, Matériaux, Sciences de la Terre et de l'Univers - EMSTU

Unité de recherche : CEMHTI - Conditions Extrêmes et Matériaux : Haute Température et Irradiation

Soutenance prévue le **vendredi 03 novembre 2023** à 10h00

Lieu : Délégation du CNRS, 3 Avenue de la Recherche Scientifique, 45100 Orléans

Salle : Amphithéâtre Charles Sadron

Composition du jury proposé

M. Pierre FLORIAN	Université d'Orléans	Directeur de thèse
M. Franck FAYON	Université d'Orléans	Examinateur
M. Frédéric BLANC	University of Liverpool	Rapporteur
Mme Frédérique POURPOINT	Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille	Rapporteuse
Mme Anne LESAGE	ENS-Lyon	Examinatrice
Mme Christel GERVAIS	Sorbonne Université	Examinatrice

Mots-clés : Structure, MOF, Dynamique, RMN Haute Résolution, Haute Température, ZIF

Résumé :

La famille des Zeolitic Imidazolate Framework (ZIF), un sous-ensemble des réseaux métallo-organiques (MOF) microporeux, sont des réseaux polymères tridimensionnels construits à partir d'ions métalliques inorganiques, tels que le Zn^{2+} , interconnectés par des liants organiques, tels que les anions imidazole $C_3H_3N_2^-$ ('Im') ou benzimidazole $C_7H_6N_2^-$ ('blm'). Comme leur nom l'indique, ils adoptent des topologies de réseau identiques à celles des zéolithes inorganiques, et pour certains d'entre eux peuvent même posséder des formes amorphes et/ou vitreuses. Ils ont trouvé des applications principalement dans la capture des gaz à effet de serre grâce à leur porosité nettement plus élevée que celle de leurs cousins inorganiques. Ce tout nouveau domaine de la science du verre, apparu il y a moins d'une décennie, n'a pas été beaucoup étudié à l'aide de techniques spectroscopiques telles que la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN). L'installation RMN du CEMHTI a la capacité de suivre ex-situ, ainsi qu'in-situ, cette série de transformations conduisant à l'amorphisation et/ou à la formation du verre en appliquant une variété d'expériences à une et deux dimensions impliquant par exemple 1H , 2H , ^{13}C , ^{15}N , et ^{67}Zn . Nous proposons d'aller au-delà des études RMN précédentes en mettant en œuvre, par exemple, la diffusion de spin $^1H/^1H$ et la corrélation DQ/SQ, des expériences de corrélation 2D $^1H/^{13}C$, l'observation directe du métal à très haute résolution, pour établir des relations structure-propriété. Malgré leur nature extrêmement difficile, des expériences de RMN in situ à haute température seront également mises en œuvre pour mettre en lumière la dynamique qui se produit lorsque la température augmente jusqu'à la fusion ainsi que dans la phase vitreuse par RMN in-situ. Nous proposons une étude approfondie de la structure du ZIF-62, très proche du ZIF-4 bien connu, par différentes techniques RMN, à haut champ et haute vitesse associé avec des calculs de premiers principes « DFT ». De plus, l'approche dynamique in-situ dans les ZIFs est quant à elle toute nouvelle et apporte un nouveau point de vue novateur dans ce domaine.