****

**Proposition de sujet de thèse (octobre 2024)**

**Titre : Spectroscopies optiques avancées pour l’étude des interactions et de la réactivité de polluants atmosphériques adsorbés dans des matériaux poreux photoactifs.**

**Contexte :** Les composés MOF (Metal-Organic Framework) constituent une famille très prometteuse de matériaux poreux pour développer de nouveaux adsorbants photoactifs pour la capture, le stockage et la dégradation des polluants atmosphériques. Ils sont formés par un assemblage de clusters d’oxydes métalliques associés avec des ligands organiques. Cette partie organique de la structure du MOF peut être choisie de sorte à moduler les performances et les spécificités du matériau telles que, par exemple la taille des pores, en changeant la longueur du ligand. Il est par ailleurs possible de fonctionnaliser ces ligands en ajoutant des groupements donneurs ou accepteur d’électrons afin de favoriser la capture des molécules sondes étudiées et d’orienter la (photo-)réactivité de ces matériaux.

**Objectif du projet :** De par leur structure associant une partie organique et des métaux, les MOFs présentent des propriétés d’adsorption différentes de celles des zéolithes, autres matériaux microporeux mais de type aluminosilicate. La compréhension des différences de réactivité dans ces milieux poreux en termes de mécanismes, de piégeage, de stabilisation des polluants voire d’efficacité est essentielle. Ainsi, La présente étude a pour objectif de caractériser les interactions entre des matériaux poreux de type MOF ou zéolithe avec des polluants moléculaires atmosphériques (composés organiques volatils, composés polyaromatiques) piégées à leur surface ou adsorbées dans leurs pores, et leurs conséquences sur les mécanismes de capture en vue du stockage voire de la (photo-) dégradation de ces molécules adsorbées. Les matériaux poreux ciblés pour cette étude seront des MOF d’intérêt industriel constitués de métaux tels que Fe, Ti, Zr et de ligands photosensibles ainsi que des zéolithes. Les processus d’adsorption et de désorption des molécules seront caractérisés au moyen de techniques de spectroscopies optiques vibrationnelles (RAMAN, IR) et électronique (absorption et émission UV-vis) en régime stationnaire et résolues en temps et par spectroscopie de spin (RPE) en ondes continue et pulsée. Les facteurs favorisant le piégeage et la stabilisation des molécules ainsi que leur réactivité dans le volume poreux seront particulièrement étudiés. L’utilisation de techniques spectroscopiques résolues en temps permettra la mise en évidence des espèces intermédiaires réactionnelles mises en jeu lors des différents processus investigués.

**Environnement:** La thèse sera réalisée au sein de l’équipe Photodynamique, Confinement, Solvatation (PCS) du LASIRE (http://lasir.cnrs.fr/pcs/) à l’université de Lille et sera effectuée en collaboration avec les chercheurs de l’équipe Matériaux Hybrides (MATHYB) de l’Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS).

**Mots-Clés :** Metal Organic Framework (MOF), zéolithe, spectroscopies optiques (régime stationnaire et résolues en temps), matériaux poreux.

**Connaissances et compétences requises :** Le candidat devra avoir obtenu un master en chimie ou chimie-physique. Une expérience dans le domaine des matériaux micro et nanoporeux et/ou en photochimie et spectroscopie appliquées aux solides sera appréciée.

**Procédure de co-financement envisagé :** Région Hauts de France (en cours)

**Candidature :** Les étudiants sont invités à envoyer un CV et une lettre de motivation ainsi que toute information relative à la formation (relevés de notes Master et Licence, stages, …).

**Contact :** Pr. Alain Moissette,

LAboratoire de Spectroscopie pour les Interactions, la Réactivité et l'Environnement (LASIRE), UMR CNRS 8516 - Université de Lille, Sciences et Technologies,

alain.moissette@univ-lille.fr