République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche scientifique



UNIVERSITE DE MEDEA

FACULTE DE TECHNOLOGIE

Département du génie des procédés et de

l'environnent

Option Génie des Matériaux

Mémoire de fin d'étude Pour obtenir le diplôme de master en Génie des procédés

Etude de l'effet des groupements terminaux Tx sur les propriétés structurales et mécaniques d'un MXène Cr_2C: cas du Fluor

Réalisé par : Melle Boutalba Rima

Melle Zaoui Nasserine

Encadré par : Pr. Krea Mohamed

Année universitaire 2022/2023

Remerciment :

Tout d'abord, je remercie Dieu Tout-Puissant de m'avoir donner le courage, la volonté et la patience d'accomplir ce travail.

Ce travail a été réalisé à la Faculté de Technologie de l'Université de Médée.

Je tiens à remercier le respecté professeur Mohammed Krea pour ses efforts pour nous guider, et nous donner des conseils.

Je remerciement infiniment les nombres de jury pour avoir le sion d examier ce travail

depuis mon arrivée à l'université de Médéa, j'ai eu une très belle expérience si c'était à refaire je le referai, ainsi à tout le personnel de l'université et un spécial remerciement à Madame le chef de département Madame Ferhat.

Je remercie infiniment mes parents, qui m'ont soutenu et encouragé, et je leur offre cette réussite. Et un grand merci à mon Marie qui était avec moi tout le temps pour m'encourager.

Cette action de grâce ne serait pas complète sans mentionner mes frères ma deuxième mère, mon grand-père, ma grand-mère

et mes amis.

Dédicaces

A tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire. Je dédie ce modeste travail aux personnes qui me sont les plus chers au monde

A ma très chère mère BELHADJE EL ZINE . F

Tu représentes pour moi la source de tendresse. Ta prière et ta bénédiction m'ont été d'un grand secours pour mener à bien mes études. Je te dédie ce travail en témoignage de mon profond amour. Puisse Dieu, le tout puissant, te préserver et t'accorder santé, longue vie et bonheur.

A mon très cher père AMARA BOUTALBA

Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour toi. Rien au monde ne vaut les efforts fournis jour et nuit pour mon éducation et mon bien être. Ce travail est le fruit de tes sacrifices que tu as consentis pour mon éducation et ma formation. Puisse Dieu, le tout puissant, te préserver et t'accorder santé, longue vie et bonheur.

A mes adorables frères OUSSAMA et AMINE BOUTALBA

Pour le soutien qu'ils n'ont pas cesser de me porter

Je te souhaite un avenir plein de joie, de bonheur, de réussite et de séré

nité. Je t'exprime à travers ce travail mes sentiments de fraternité et d'amour

A mon Marie KAIDI MOULOUD

Pour votre encouragement inlassable, votre amabilité, votre aide méritent toute admiration, je n'oublie jamais votre générosité et soutien, m'oblige de leur témoigner mon profond respect et mon loyale considération.

Rima

Toutes les lettres ne sauraient trouver les mots qu'il faut… Tous les mots ne sauraient exprimer la gratitude, l'amour, Le respect, la reconnaissance… Aussi, c'est tout simplement queJe dédie cette modeste travail…?

-A MA TRÈS CHÈRE MÈRE : ***AMI Ruqyah***

Autant de phrases aussi expressives soient-elles ne sauraient montrer le degré d'amour et d'affection que j'éprouve pour toi. Tu m'as comblé avec ta tendresse et affection tout au long de mon parcours. Tu n'as cessé de me soutenir et de m'encourager durant toutes les années de mes études, tu as toujours été présente à mes cotés pour me consoler quand il fallait. En ce jour mémorable, pour moi ainsi que pour toi, reçoit ce travail en signe de ma vive reconnaissance et mon profond estime. Puisse le tout puissant te donner santé, bonheur et longue vie afin que je puisse te combler à mon tour.

A MON TRÈS CHER PÈRE ***: OTHMANI AZZEDINE***

Autant de phrases et d'expressions aussi éloquentes soit-elles ne sauraient exprimer ma gratitude et ma reconnaissance. Tu as su m'inculquer le sens de la responsabilité, de l'optimisme et de la confiance en soi face aux difficultés de la vie. Tes conseils onttoujours guidé mes pas vers la réussite. Ta patience sans fin, ta compréhension et ton encouragement sont pour moi le soutien indispensable que tu as toujours su m'apporter. Je te dois ce que je suis aujourd'hui et ce que je serai demain et je ferai toujours de mon mieux pour rester ta fierté et ne jamais te décevoir. que

Nessrin

ملخص

يبحث هذا العمل في تأثير الطبيعة الكيميائية للمجموعات الطرفية F على الخواص التركيبية والميكانيكية لمادة Cr2C MXene. MXene مادة ثنائية الأبعاد لها العديد من التطبيقات المحتملة بسبب خصائصها الفريدة. أظهرت هذه الدراسة تأثير المجموعة الطرفية F على الخواص التركيبية ، مثل المسافة بين الطبقات وبين الذرات في الشبكة ، وكذلك على الخواص الميكانيكية مثل مقاومة الشد والليونة. هذه النتائج مهمة لتصميم وتحسين مواد MXene الجديدة بخصائص محددة.

.

Résumé :

Ce travail examine l'effet de la nature chimique des groupements terminaux F sur les propriétés structurales et mécaniques d'un MXène Cr_2C. Le MXène est un matériau bidimensionnel qui présente de nombreuses applications potentielles en raison de ses propriétés uniques. Cette étude a montré l'effet du groupement terminaux F sur les propriétés structurales, telles que la distance entre les couches et entre les atomes dans la maille, ainsi que sur les propriétés mécaniques, telles que la résistance à la traction et la ductilité. Ces résultats sont importants pour la conception et l'optimisation de nouveaux matériaux MXène avec des propriétés spécifiques.

Abstruct::

This work investigates the effect of the chemical nature of the end groups Fon the structural and mechanical properties of a Cr_2C MXene. MXene is a two-dimensional material that has many potential applications due to its unique properties. This study showed the effect of the terminal group F on the structural properties, such as the distance between the layers and between atoms in the cell, as well as on the mechanical properties, such as the tensile strength and the ductility. These results are important for the design and optimization of new MXene materials with specific properties.

الكلمات المفتاحية:

مراحل max – الملكية الهيكلية الميكانكية فوق les mxénes- برنامج castep

Les mots clés :

les phrases max – propriétes structruelle et mécanique de mxénes- logiciel castep

key words :

Phrases max – structural – properties méchanical on the mxenes

- Software cassteps

Liste des figures :

Chapitre 1

Figure1-1 : *Tableau périodique des éléments qui peuvent composer les phases MAX. Les éléments M sont en rouge, les éléments A en bleuet les éléments X en noir*.....3
eiugiF1-2 :Structures cristallographiques des phases MAX : M_2AX (211), M_3AX_2 (312) et M_4AX_3(413).....4
Figure.1-3 : Structures cristallographiques des phases Mo_2TiAlC_2 (A), M_2Ga_2C (B) et MoAlB (C)......5
Figure 1-4 – (a) Eléments M, A et X constituants les phases MAX. (b) Représentation schématique de la structure des phases MAX.....7
Figure 1-5 : *P*hotographies et images MEB de la réaction et synthèse à l'état solide pour 500g de Cr_2AlC blindée de sel fondu.....8
Figure 1-6: (A), échantillons denses de Cr_2AlC de 100 et 45 mm de diamètre frittés par SPS, (B) schéma d'approche du lit de carbone SPS pour formés le complexe aggloméré, et (c)RoueTi_2AlC très dense (98,2 %) frittée à l'aide de l'approche à lit de carbone SPS.....10
eigure2-1 : *Représentations de la structure cristalline du MXène vue de côté (A) et vue de dessus (B) avec les éléments M (en rouge) et X (en noir).*.....13
***Figure.2-2**: Représentation de l'augmentation du paramètre de maille c après exfoliation de la phase MAX Adaptée de la référence*.....14
Figure 2-3 : Synthèse de MXéne à partir des phases MAX correspondantes.....15

Chapitre2

Figure2-1 :représente les types et le système cristallin.....21
Figure2-2 : Résultat d'un essai de traction sur une éprouvette.....23
Figure 2-3 : La courbe contrainte-déformation.....**Erreur ! Signet non défini.**
Figure2-4 :représentation du cisaillement du cube.....32

Chapitre4

Figure4-1: structure cristalline du Cr_2CF_2.....35
Figure4-2 : Ouverture du logiciel Matériaux Studio.....35
Figure4-3 : mportation du fichier CIF a exploitée.....36
Figure4-4 : la représentation de la maille.....36
Figure4-5 :Visualisation des paramètres de la maille.....37
Figurre 4-6:(a) affichage de la symétrie, (b) du groupe de symétrie.....38
Figure4-7 :(a) ouverture du code CASTEP, (b), (c), (d) et (e) les paramètres modifiés avant l'optimisation.....40
Figure4-8 : Optimisation en cours.....41
Figure4-9 : fin de l'optimisation.....41
Figure4-10 : (a) choisir l'option calcul avec le code CASTEP, (b) sélectionné l'élément optimisé, (c) choisir la tâche du calcul des propriétés élastiques.....43
Figure4-11 :Lancement du calcul.....43
Figure 4-12 : Les résultats du calcul.....44
Figure4-13 :(a) construction de la super cellule, (b) modification des dimensions de la cellule.....45
Figure 4-14: Modèle de supercellule employé dans les calculs des propriétés structurales et élastiques. A) Maille 1*1*1, b) maile 3*3*3, c) maille 6*6*6.....46

Figure 4-15 : Représentation graphique de la variation des propriétés élastique en fonction de la pression pour le SC1. 47
Figure4-16 : Evolution des constantes élastiques en fonction de la pression (a), (b), (c) et (d),(e) ,(f) sont les représentations graphiques des tenseurs de contrainte t pour SC1 à différentes pressions. 50
Figure 4-17: représentation graphique de la variation des propriétés élastique en fonction de la pression pour le SC1..... 51
Figure4-18: représentation du rapport β/G. 52
Figure4-19 : (a), et (b) variation des constantes a, et c en fonction de la pression, (c) variation du rapport a/c en fonction de la pression, (d), (e) variation du volume et densité en fonction de la pression pour le SC1 54
Figure4-20 : (a), (b), (c), (d) et (e) (f) sont les représentations des tenseurs d'élasticité pour les quatre super cellules..... 55
Figure 4-21: (a), (b), (c), et (d) sont les courbes des modules de cisaillement ß, Compression G, Coefficient de poisson υ et de Young E, pour les quatre super cellule. 57
Figure4-22 : (a), et (b) variation des constantes a, b en fonction de la pression, (c) variation du rapport a/c en fonction de la pression, (d), (e) variation du volume et densité en fonction de la pression pour le SC1. 58
Figure4-23: (a), (b), (c), (d) et (e) sont les représentations des tenseurs d'élasticité. 60
Figure4-24: (a), (b), (c), et (d) sont les courbes des modules de cisaillement ß, Compression G, Coefficient de poisson υ et de Young E..... 61

Liste des Tableaux

Chapitre1

Tableau 1-1 : Positions de Wyckoff des atomes des phases MAX de type 211, 312 et 413.....7
Tableau 2-1 :Conditions d'obtention de différents MXenes par traitement He 16

Chapitr2

Tableau 2-1:représente système cristallin,le type ,comportement métallique… ect 22
Tableau2-2 :montre la correspondance entre ces indices.....26
Tableau2-3: Le nombre de constants élastiques en fonction de la structure cristalline. 27
Tableau2-4: unité les plus utilisées.....33

Chapitre4

Tableau4-1 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression....46
Tableau 4-2: les tenseurs de contraintes pour SC1 a pression 0 GPa 48
Tableau4-3 : les tenseurs de contraintes pour SC2 a pression 10 GPa .....**Erreur ! Signet non défini.**
Tableau 4-4: Valeurs des tenseurs de contrainte pour SC1. 48
Tableau4-5 : comportement des propriétés élastique à la compression pour SC1 50
Tableau4-6 :présenter le rapport de β/G. 52
Tableau 4-7 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression de la super cellule sc3 53
Tableau 4-8 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression de la super cellule sc6 53
Tableau4-9 : Valeurs des tenseurs de contraintes pour SC3 54
Tableau4-10 : Valeurs des tenseurs de contraintes pour SC6 55
Tableau4-11 : comportement des propriétés élastique à la compression pour SC3.....56
Tableau4-12 : comportement des propriétés élastique à la compression pour SC6.....56
Tableau4-13 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression .57
Tableau4-14 : Valeurs des tenseurs de contraintes. 59
Tableau 4-15:comportement des propriétés élastique à la compression.....**Erreur ! Signet non défini.**

Sommaire

Introduction générale..... 1

Chapitre 1

1 LES PHASE MAX et MXENES 3

1.1 La phase MAX.....3

1.2 Description des phases MAX.....3

1.3 Historique les phases MAX.....5

1.4 Structure cristallogphique.....6

1.5 Synthèse les phases MAX.....7

1.5.1 Synthèse sans pression (PLS):.....7

1.5.2 Synthèse à haute température auto-propagée (SHS).....8

1.5.3 Pressage à chaud (HP).....9

1.5.4 Pressage isostatique à chaud (HIP).....9

1.5.5 erittage plasma d'étincelles (SPS).....9

1.5.6 Micro-ondes (MW):.....10

1.6 Propriétés et applications.....11

2 Les phases MXénes.....11

2.1 Introduction..... Erreur ! Signet non défini.

2.2 Historique des MXénes.....11

2.3 Structure cristallographique.....12

2.4 Synthèse des MXénes.....15

2.5 Conclusion.....16

2 Propriétés structurelle et mécanique des MXènes.....19

2.1 Propriétés structurelle des MXènes.....19

2.1.1 Introduction.....19

2.1.2 Structure cristallines des MXèenes.....19

2.1.3 Définition.....**Erreur ! Signet non défini.**

2.1.4 les types des structure.....21

2.2 propriétés mécanique.....22

2.2.1 Contraintes.....25

1.1.1 Tenseur de contrainte.....25

1.1.2 Tenseur de déformation.....26

1.1.3 Tenseur d'élasticité (rigidité).....26

2.2.2 Définition de déformation.....27

2.2.3 Types de déformation.....28

2.2.4 Limite d'élasticité.....29

2.2.5 Loi de Hooke.....30

2.2.6 Propriétés mécaniques pour les structures hexagonales à pression nulle.....33

2.2.7 Conclusion.....33

3 Effet des groupements terminaux 33

3.1 Introduction 33

3.2 Définition des groupes terminaux 33

3.3 Effet sur les propriétés mécaniques 34

3.4 Effet sur les propriétés électroniques 34

3.5 Effet sur les propriétés catalytiques 34

3.6 Effet sur la maille 35

3.7 Effet sur les MXènes 35

3.8 Conclusion 35

4 Etude des propriétés du matériau phases Mxen Cr_2CF_2 34

4.1 Introduction 34

4.2 Description de la structure cristalline du matériau phase MXENE Cr_2CF_2 34

4.3 Optimisation géométrique de la structure 38

4.3.1 Calcul des tenseurs l'élasticité 42

4.3.2 Augmentation de la taille de la supercellule 44

4.3.3 Effet de la variation de la pression sur les propriétés élastiques du $Cr2CF_2$ 45

4.4 Variation des propriétés structurales 46

4.4.1 Comportement des constants du réseau lors de la compression de la supercellule sc1 46

4.4.2 Variations des propriétés élastiques 47

4.4.3 Etude de la variation des tenseurs d'élasticités du SC1 48

4.4.4 Effet de la variation de la pression sur les propriétés élastiques du Cr_2CF_2 de SC1 50

4.4.5 Etude de la ductilité du cristal Cr_2CF_2 Pour SC1 52

4.5 Effet de la taille de la supercellule sur les propriétés des matériaux Cr_2CF_2 52

4.5.1 Effet de la taille de la super cellule sur les Comportement des constants du réseau lors de la compression de la super cellule sc3 rt sc6 53

4.5.2 Effet de la taille de la super cellule sur les tenseurs d'élasticités lors de la Compression 54

4.5.3 Effet de la taille de la super cellule sur les propriétés élastiques lors de la compression 56

4.6 Evolution des paramètres de maille de la structure sans et avec la présence du F en fonction de la pression 57

4.7 Comparaison des tenseurs de contraintes 58

4.8 Comparaison des propriétés élastique du MXène sans et avec F à la compression 60

Conclusion générale 62

Introduction générale

Introduction générale :

Historiquement, les matériaux 2D ont joué un rôle important dans la recherche en science des matériaux en raison de leurs propriétés extraordinaires. Le graphène a été découvert par Novoselov et Geimen 2004[1], et ses propriétés extraordinaires ont mise évidence l'intérêt de ces matériaux dans les thèmes de recherche actuels. En effet, le graphème possè de la plus grande mobilité électronique connue (>100000$cm^2V^{-1}s^{-1}$vs. 1500$cm^2V^{-1}s^{-1}$pour le silicium)un module de Young le plus élevés jamais trouvés (1TPa). Ces propriétés extraordinaire souvrent la voie à de nombreuses applications telles que les membranes électroniques flexibles, les matériaux de détection et les super condensateurs. Comptetenu des propriétés du graphème, la recherche sur les matériaux 2D s'est considérablement accélérée ces dernières années et de nombreux nouveaux matériaux 2D ont vule jour [2] en particulier les phases MAX et Les MXènes.

Les Phases MAX est une nouvelle classe de matériaux nano lamellaires aux propriétés intermédiaires entre céramiques et métaux. Leurs propriétés thermiques, élastiques, chimiques et électriques, sont communes avec leurs homologues en carbures ou en nitrures. Elles ont un module d'élasticité le vêts ont d'excellents conducteurs électriques et thermiques. Cependant, ils sont mécanique ment très différents. Elles sont usinables, ont une faible dureté, résistentaux chocs thermiques et présentent une durabilité étonnante. Ceci découle de la présence de défauts dans leurs microstructures et de la combinaison de deux types de liaisons dans leurs structures: des liaisons des métaux fortes sont présentes dans chaque couche de la structure nano lamellaire et des liaisons entre ces couches contre nativement faibles.

La synthèse de nouveaux matériaux 2D, sous forme de poudres à partir de précurseurs nano-lamellaire tridimensionnels phases MAX, appelée MXène par analogie aux phases MAX et au graphène, est constituée de feuillets d'octaèdres de carbures ou de nitrures de métaux de transition "fonctionnalisés" par des groupements de surface hydroxyle, oxygène ou fluor, notés en général "T". Cette classe des matériaux possède l'avantage dotée d'une flexibilité chimique importante en raison du nombre important de phases MAX existantes actuellement (>70). Les propriétés rapportées dans la littérature pour cette nouvelle classe de matériaux, et notamment pour les systèmes à base titane qui sont actuellement les plus étudiés, sont aussi très intéressantes, dans les domaines du stockage de l'énergie [1], de

l'optoélectronique ou encore comme matériaux pour la catalyse. Une grande partie des propriétés des MXènes est influencée par la nature chimique et la localisation des groupements de surface T. Devant leur rôle majeur, de nombreuses études ont donc été réalisées sur ces groupements terminaux [3]. Cependant, il est difficile de trouver un consensus sur ce sujet en raison de l'absence de moyens d'analyse capables de détecter ces groupements et l'information sur les impuretés inhérentes aux processus de leur synthèse. De ce point de vue, le manque d'échantillons modèles, tels que des monocristaux ou des films minces, constitue de fait un frein aux études des propriétés des MXenes.

Ce travail qui constitue une suite logique des travaux précédents entrepris dans le laboratoire LME sur ce thème et constitue un complément sur les travaux menés sur l'étude des propriétés structurales et mécaniques du matériau MXène Cr_2C en utilisant la structure parfaite [2]. L'objectif de ce travail est de déterminer les propriétés structurales et mécaniques du matériaux MXène avec un groupement terminale T (cas du F) en utilisant la structure modèle Cr_2CF_2 avec le logiciel Materials Studio et de les comparer avec ceux de la structure parfaite Cr_2C.

Ce mémoire est organisé selon 4 chapitres :

Le premier chapitre expose par définition les phases MAX et MXènes et leurs : description, historique, structure cristallographique, synthèse, propriété et leurs applications.

Le deuxième chapitre concerne les concepts structuraux et mécaniques de ces matériaux surtout les contraintes (stress), les déformations (strain), le module élastique, les tenseurs, et la limite d'élasticité.

Le troisième chapitre expose les effets des regroupements terminaux sur les propriétés des MXènes dans les travaux publiés.

Le dernier chapitre est dédié aux calculs obtenus à l'aide du logiciel Materials Studio des propriétés élastiques leurs résultats et discussions.

Chapitre 1 :
LES PHASE MAX et MXENES.

1 LES PHASE MAX et MXENES

1.1 La phase MAX :

Les phases MAX sont des structures cristallines du système hexagonal observées dans certaines céramiques de formule générique $M_{n+1}AX_n$, où n = 1 à 4, M est un métal de transition essentiellement des groupes 4, 5 et 6, A est un élément essentiellement des groupes 13, 14 et 15, et X est le carbone ou l'azote[4], le nombre n détermine le nombre de couches d'octaèdres de M_6X présentes entre les planes d'éléments A, soit une couche d octaèdres pour les phases M_2AX, deux couches pour les phases M_3AX et trois pour les phases M_4AX_3.

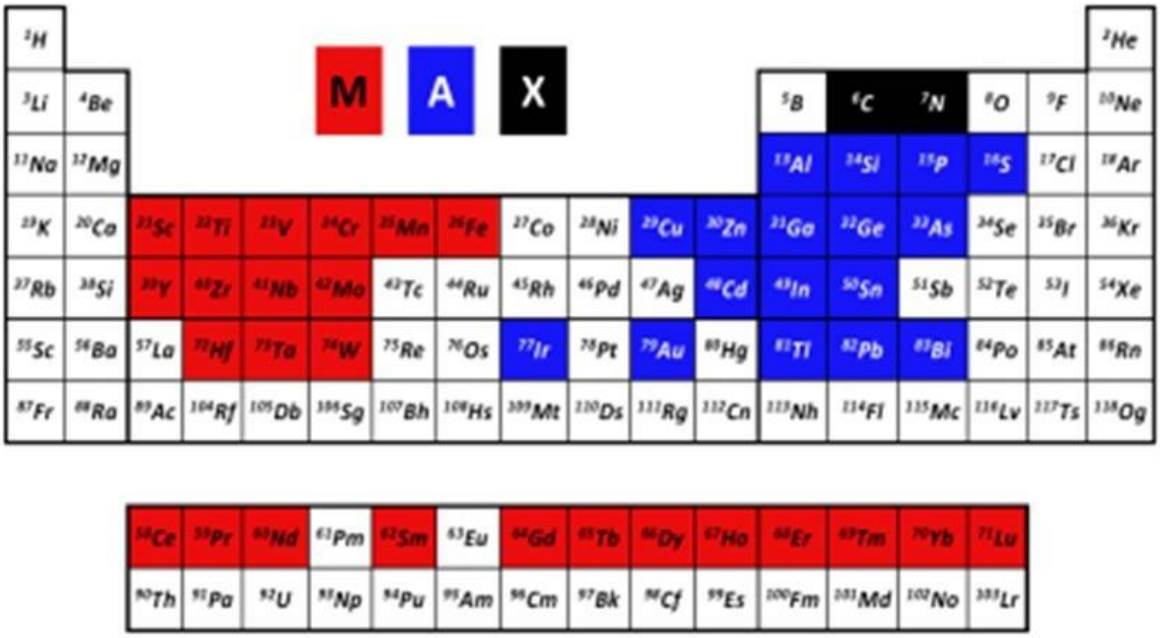


Figure1.1 :*Tableau périodique des éléments qui peuvent composer les phases MAX. Les éléments M sont en rouge, les éléments A en bleuet les éléments X en noir. Adaptée de la référence* [*1*].

1.1.1 Description des phases MAX :

Le terme de phase MAX qui provient de leur formule chimique est n dans les années 2000 au sein du groupe de recherche dirigé par le professeur M. Bar soum de l'université de Drexel[5].

$M_{n+1}AX_n$ avec :

* M : Métal de transition.

* A :Eléments majoritairement de colonnes 13 et 14du tableau périodique.

* X : carbone ou azote.

* N : Nombre entier entre 1 et 3.

Ces composés stœchiométriques stratifiés tridimensionnels dans structure Hexagonale avec le groupe spatial P63/MMC. Dans la même structure, il existe des liaisons M-X fortes de type covalent et des liaisons M-A plus faible de type métallique La structure est constituée d'une grille de base composée de n couches d'octaèdres M_6X (n vient de la formule chimique de la phase MAX), suivies de La couche atomique de l'élément A, comme le montre (la Figure1.1 :Par exemple, la maille élémentaire de la phase MAX Ti_2AlC_2, contient deux couches d'octaèdres Ti_6C (soit 3 plans d'atomes de titane espacés d'un plan hexagonal d'aluminium). Cette alternance se traduit par une anisotropie prononcée le long de l'axe c[4].

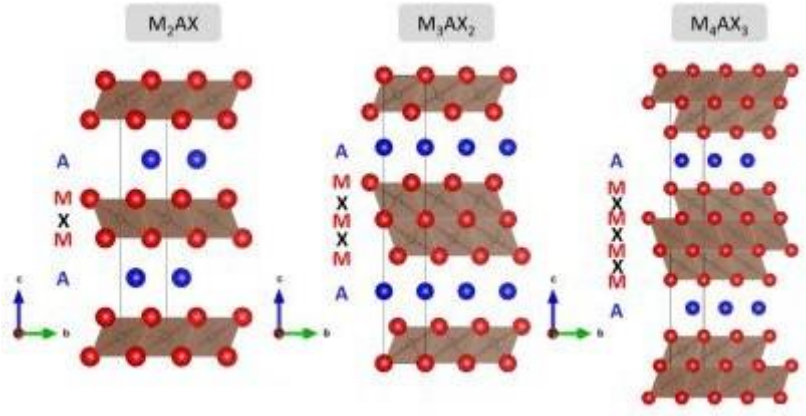


Figure 1.2 *:Structures cristallographiques des phases MAX : M_2AX (211), M_3AX_2 (312) et M_4AX_3(413)*[4].

Dans la classification des matériaux, les phases MAX présentent une singularité étant donné qu'ils combinent à la fois des propriétés des métaux et des céramiques. Ces caractéristiques offrent un ensemble de propriétés mécaniques et fonctionnelles uniques. De plus, la variabilité chimique de la nature du métal de transition (M), de l'élément A ainsi que de l'élément X offrent aux phases MAX des propriétés physiques et/ou chimiques très diverses (cf.Figure 1.2 ***:Structures cristallographiques des phases MAX : M_2AX (211), M_3AX_2 (312) et M_4AX_3(413)***[4].) . La possibilité de former des solutions solides sur les sites M, A et/ou X permet d'élargir encore le nombre de compositions possibles pour cette famille de matériaux. À titre d'exemple, des solutions solides à base de Ti/Mo ont été synthétisées telles

que Mo_2TiAlC_2 par Anasori *et al.* où les atomes de molybdène se retrouvent sur les couches externes des feuillets (cf. *Figure.1.3 :* ***Structures cristallographiques des phases Mo_2TiAlC_2 (A), M_2Ga_2C (B) et MoAlB (C)*** À ce jour, environ 155 phases MAX ont été synthétisées. Plus récemment, des phases apparentées aux phases MAX ont été développées telles que la phase Mo_2Ga_2C, obtenue par Hu *et (*cf. *Figure.1.3 :* ***Structures cristallographiques des phases Mo_2TiAlC_2 (A), M_2Ga_2C (B) et MoAlB (C)*** La structure de cette phase est un arrangement hexagonal ayant deux couches de gallium entre les couches de Mo_2C. De même, il existe les phases MAB, famille proche des phases MAX où l'élément X est remplacé par du bore. À titre d'exemple, la phase MoAlB cristallise dans une structure orthorhombique (groupe d'espace : *CmCm*) . Elle se compose de blocs MoB sous forme de prismes trigonaux avec des faces partagées. Ces blocs sont séparés par une double couche d'atomes d'aluminium en forme de « zigzag » (cf. *Figure.1.3 :* ***Structures cristallographiques des phases Mo_2TiAlC_2 (A), M_2Ga_2C (B) et MoAlB (C)***)[6] .

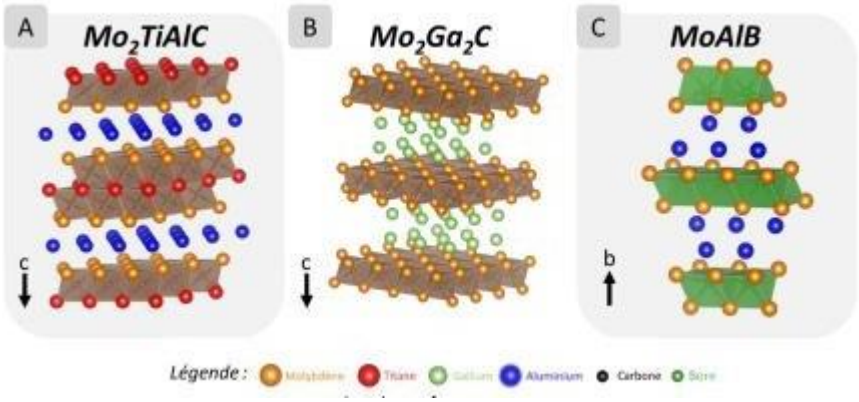


***Figure.1.3** : Structures cristallographiques des phases Mo_2TiAlC_2 (A), M_2Ga_2C (B) et MoAlB (C)*[6].

1.1.2 Historique les phases MAX :

Vers les années 60', L'équipe de Hans Nowotny a découvert plus de 30 nouvelles phases de carbures et de nitrures, appelées phases H. Malgré les réalisations remarquables, ces phases sont restées totalement inexplorées jusque dans les années 1990. Durant cette période, Barsoum et El-Raghy de l'Université Drexel (Philadelphie, USA) [7]ont réussi la synthèse à grande échelle de composants Ti_3SiC_2 de matériaux monophasiques. Les travaux préliminaires qu'ils ont effectués ont montré que ce matériau Possède une combinaison unique de performances : il a une combinaison typique des matériaux métalliques aux matériaux

céramiques. Par conséquent, comme les métaux, ils possèdent une conductivité électrique et thermique élevée, il peut être traité avec des outils traditionnels à température ambiante. Ils ont également une forte résistance à l'oxydation et ont la même faible densité et la même rigidité élevée que la céramique. Plus tard, la même équipe a découvert la phase Ti_4AlN_3.

Clairement, cette phase a la même structure de base que la phase Ti_3SiC_2, elle est similaire. Plus généralement, il a été montré qu'il y avait un grand nombre de phases avec de différents composants chimiques avec les mêmes propriétés.

De nombreuses autres phases MAX ont été synthétisées et des propriétés très inhabituelles ont été révélées, conduisant à des recherches plus fondamentales. Ces propriétés étonnantes proviennent de structures en couches (matériaux nano-couches).

La combinaison de la phase MAX et de la liaison M-X (métal covalent ionique), elles sont généralement plus fortes que la liaison M-A. Ces caractéristiques extraordinaires faites-en un matériau à fort potentiel d'application, même si leur application actuelle reste encore limitée (éléments chauffants, contacts électriques).

1.1.3 Structure cristalline :

Les phases MAX présentent une formulation chimique de type $M_{n+1}AX_n$ où M est un métal de transition, A un élément issu principalement des colonnes III.A et IV.A de la table de Mendeleïev et X représente soit le carbone soit l'azote (Figure 1.4(a)). Le nombre 'n' détermine, quant à lui, le nombre de couches d'octaèdres de M_6X présentes entre les plans d'éléments A, soit une couche d'octaèdres pour les phases M_2AX, deux couches pour les phases M_3AX_2 et trois pour les phases M_4AX_3 (Figure 1.4– (a**) Eléments M, A et X constituants les phases MAX. (b) Représentation schématique de la structure des phases MAX .**) . On dénombre aujourd'hui plus de 70 phases MAX de compositions différentes. De plus, de nombreuses études portent sur la synthèse de solutions solide[8],visant à en modifier les propriétés, comme par exemple, induire du magnétisme[9], modifier les propriétés de transport [10]ou modifier les coefficients de dilatation thermique[11]. Ces solutions solides sont possibles sur les trois éléments de la phase MAX et augmentent donc considérablement le nombre de phases MAX possibles. Ces matériaux présentent une structure nano lamellaire, constituée de 'n' plans d'octaèdres M_6X séparés par un plan pur d'élément A et cristallisent dans le groupe d'espace $P63/mmc$.

Les octaèdres forment une structure compacte dans laquelle les atomes du métal de transition

définissent des sites octaédriques occupés par un atome de carbone ou d'azote. L'élément A occupe, quant à lui, un site trigonal prismatique, le prisme étant défini par les atomes de l'élément M. La maille cristalline est très anisotrope, le rapport c/a varie de 4 (pour les phases 211) à 8 (pour les 413). Les positions de Wyckoff des atomes dans la maille pour les composés de type 211, 312 et 413 sont présentées dans(le

Tableau 1-1 : **Positions de Wyckoff des atomes des phases MAX de type 211, 312 et 413**. On peut constater que l'augmentation de 'n' joue sur le nombre de sites inéquivalents pour chaque élément. En effet, la description de la maille pour n=2 implique deux sites inéquivalents pour M. Dans le cas où n=3, la maille est construite sur deux sites inéquivalents pour M et X.

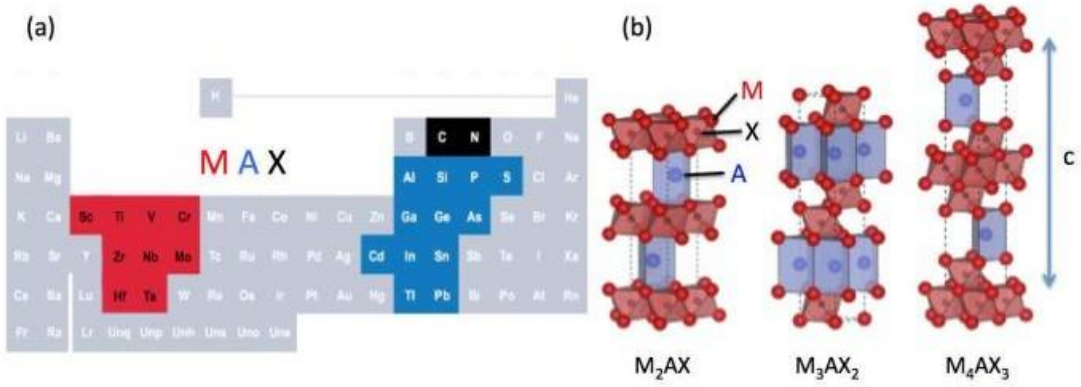


Figure 1.4– (a) Eléments M, A et X constituants les phases MAX. (b) Représentation schématique de la structure des phases MAX[12] .

Tableau 1-1 : Positions de Wyckoff des atomes des phases MAX de type 211, 312 et 413[12].

	211	312	413
M	$4f(\frac{1}{3},\frac{2}{3},z_M \approx \frac{1}{12})$	$4f(\frac{1}{3},\frac{2}{3},z_M \approx \frac{2}{16})$ $2a(0,0,0)$	$4e\ (0,0,z_M \approx \frac{3}{20})$ $4f(\frac{1}{3},\frac{2}{3},z_{M2} \approx \frac{2}{20})$
A	$2d(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{4})$	$2b(0,0,\frac{1}{4})$	$2c(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{4})$
X	2a(0,0,0)	$4f(\frac{2}{3},\frac{1}{3},z_x \approx \frac{1}{16})$	$4f(\frac{2}{3},\frac{1}{3},z_M \approx \frac{2}{20})$ 2a(0.0.0)

1.1.4 Synthèse des phases MAX :

1.1.4.1 Synthèse sans pression (PLS):

En raison de sa simplicité, PLS est l'une des méthodes de synthèse les plus couramment utilisées. Les pastilles sont placées dans un creuset et chauffées à environ 1400°C pendant plusieurs heures sous vide ou sous atmosphère d'argon. La formation de la phase MAX commence autour de 1000°C mais atteint son rendement maximum autour de 1300°C-1400°C. À des températures plus élevées, certains carbures ou nitrures commencent à être détectés en raison de la dégradation de la phase MAX. Le PLS peut produire des particules poreuses avec une pureté d'environ 95 % (poids) et une densité relative aussi élevée que 90 % à 92 %. Ce procédé est généralement utilisé pour produire les besoins en poudre, donc une étape de broyage est généralement effectuée. Un exemple de la synthèse d'un lot de 500 g de Cr_2AlC est présenté, puis le produit de PLS a été broyé pour obtenir une poudre fine. En général, PLS est simple, sont rentables et flexibles entermes de précurseurs, peuvent être mis à l'échelle jusqu'à de grandes quantités et se traduisent par une pureté relativement élevée. Ces limitations sont liées aux longs cycles thermiques, à l'impossibilité de produire des pièces parfaitement denses et à la nécessité d'une étape de broyage pour obtenir une poudre[13].

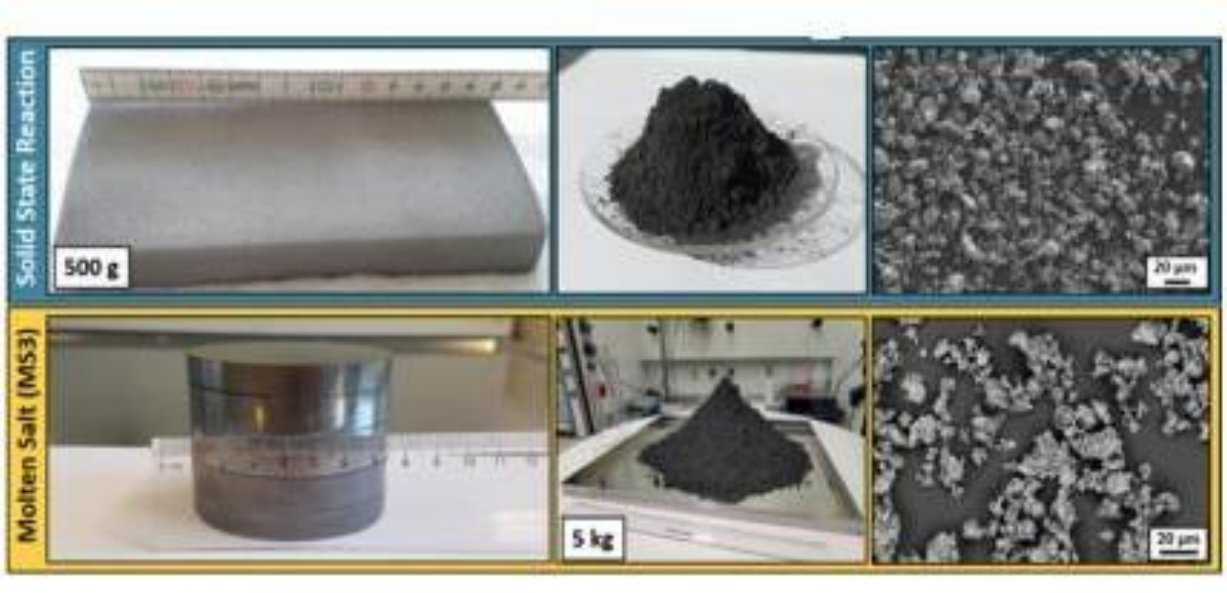


Figure 1.5 : *P*hotographies et images MEB de la réaction et synthèse à l'état solide pour 500g de Cr_2AlC blindée de sel fondu[13].

1.1.4.2 Synthèse à haute température auto-propagée (SHS) :

SHS est une méthode attrayante qui tire parti des réactions hautement ex thermiques du processus de formation de phase MAX. Fondamentalement, les précurseurs sont uniformément mélangés et compactés pour obtenir des particule les vertes de haute qualité. Un courant électrique est ensuite passé à travers le fil d'et tungstène pour enflammer les particules sous vide et empêcher l'oxydation. La température extérieure maximale atteint environ 1400℃ et la vitesse moyenne des on des de combustion atteint 10mm/s. Le procédé est rapide taut ono meet produit de grandes quantités de poudre, mais le principal inconvénient est le rendement. Plusieurs composants de départ ont été est ès pour le système Ti-Al-C, mais la vitesse de combustion élevée et le gradient de température erendent difficile d'éviter la présence de carbures et d'autres phases secondaires. Ti_3SiC_2 et Cr_2AlC donnent des résultats similaires, mais la deuxième phase est bien formée. Le principal inconvénient est la forte proportion des econ de phase et la nécessité éventuelle d'une étape de broyage[14].

1.1.4.3 Pressage à chaud (HP) :

HP est largement utilisé pour synthétiser des échantillons de phase MAX denses avec une pureté de phase élevée. La poudre de départ est coulée dans un moule en graphite, pressée axialement entre deux poinçonnes graphite extraite et thermique ment sous argon ou sous vide. La pression dépend des propriétés du graphite, mais est typiquement de 50MPa. A des températures comprises entre 1000℃ et 1200℃, des pressions plus basses (5-10MPa) sont utilisées pour faciliter la synthèse. Des températures plus élevées nécessitent l'utilisation de pressions plus élevées (jusqu'à50MPa). Augmenter pour favoriser la compression. La température de maintien maximale est typiquement de 1200℃ à 1700℃ avec un gradient de température de 20℃ /minet un temps de maintien iso thermes allant jusqu'à 10 heures. Les échantillons préparés par HP sont généralement denses et contiennent de grosses particules (>10à20μm) orientées per pendi clairement à la pression appliquée. Le principal avantage est que HP rend la phase MAX très pure et entièrement dense. Cependant, vous n'obtient direz que des disques d'une hauteur de 4-5mm et d'un diamètre de 50mm [14].

1.1.4.4 Pressage isostatique à chaud (HIP) :

HIP fournit une phase MAX très pure et dense similaire à HP, mais avec la même orientation /texture. Priorité aux particule sen raison des conditions hydrostatiques. Les microstructures isotropes sont avantageuses dans certaines applications, mais sont plus

complexes à traiter et à équiper. La poudre de départ est en capsulée dans un récipient en verre ou en métal puis traitée thermiquement à haute pression d'argon(100-300MPa)par heure. Ainsi, alors que la synthèse est possible, HIP est rarement utilisé[13].

1.1.5 Frittage plasma d'étincelles (SPS) :

La préparation des échantillons est similaire à HP, la principale différence étant le cycle de température. Le SPS permet des vitesses de chauffage plus rapides(50–200°C/min) et des temps des éjour plus courts(<10min) que le HP, limitant ainsi la croissance des grains. De plus, la température est plus basse et des échantillons de haute densité peuvent être obtenus entre1100et1400°C. Les échantillons typiques sont des disques de 4à5mm de haut et de 20à 30 mm de diamètre, mais des échantillons plus grands jusqu'à 100mm de diamètre avec des tailles de grains(<10µm)à gros grains sont possibles. Cependant, encore une fois, la principale limitation réside dans la géométrie simple des échantillons générés. [13].

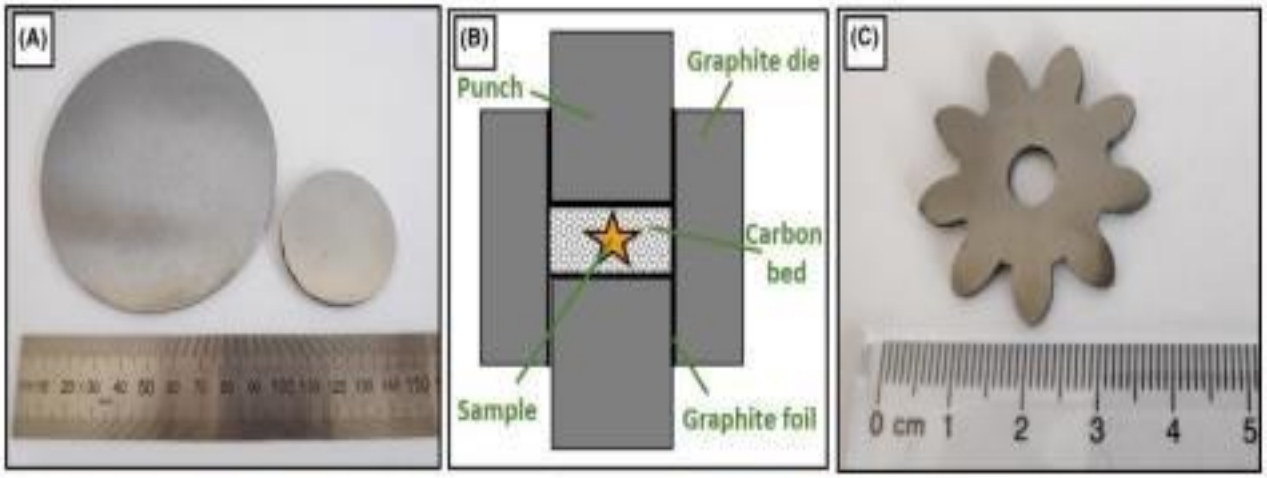


Figure 1.6: (A), échantillons denses de Cr_2AlC de 100 et 45 mm de diamètre frittés par SPS, (B) schéma d'approche du lit de carbone SPS pour formés le complexe aggloméré, et (c)RoueTi_2AlC très dense (98,2 %) frittée à l'aide de l'approche à lit de carbone SPS[13].

1.1.4.5 Micro-ondes (MW):

MW est un processus de chauffage sans pression avec des taux de chauffage élevés, des surfaces de chauffages électives ,un alimentation en énergie directes une pénétration. V_2AlC ,Cr_2AlC ,Ti_2AlN ,Ti_2AlC, Ti_2AlC_2,Ti_2SCetTi_3SiC_2ont également été rapportés ,mais sont les procédés les moins étudiés dans le procédé SSR. Le précurseur de départ est chauffé sous atmosphère d'argon, la vitesse de chauffe est portée à 200°C/min, la température maximale est

comprise entre 850°Cet1480°C, et le temps des jour peut atteindre 30 minutes. Une diminution de la température de frittage est associée à une augmentation de la diffusion du matériau due à l'interaction avec les micro-ondes. Il est rapporté que l'énergie d'activation pour la formation de Ti_3SiC_2est réduite de 233KJ/mol et les pastilles synthétisée sont une pureté élevée allant jusqu'à 97,5% et une taille de particule de 1à10µm. Les pastilles synthétisées sont généralement poreuses, avec des densités relatives jusqu'à 95% rapportées pour Ti_3SiC_2 dopé aluminium. . Par conséquent, une étape de broyage est ajoutée pour obtenir de la poudre. Les avantages sont une pureté élevée, des cycles thermiques courts, la simplicité, des économies d'énergie et de coûts et des températures de pointe plus basses. Cependant, MW présente certaines limites lors de la synthèse de grand échantillons en raison des gradients de température[13].

1.1.5 Propriétés des phases MAX :

Les phases MAX ont des propriétés mécaniques intéressantes (faible dureté, mais grande rigidité) et système de glissement des dislocations particulièrement simple et actif à température ambiante. De plus, relative comme la céramique, la phase MAX a la capacité de résister aux acides et aux alcalis. Bonnes propriétés mécaniques à haute température, résistance **à** l'oxydation à haute température, faible densité, module d'Young élevé et caractéristiques réfractaire.

Les phases MAX sont de bons conducteurs électriques : leur conductivité de L'électricité est comprise entre $0{,}37.10^{+6}$ et $14.3.10^{+6}$ $\Omega^{-1}m^{-1}$, correspondant à la valeur de résistivité comprise entre $0.07.10^{-6}$ et $2.7.10^{-6}\Omega.m$ dans le domaine de la conductivité des métaux. Les phases MAX sont plus douces que la plupart des céramiques, en particulier plus que la phase MAX correspondante.

1.2 Les matériaux MXènes :

Les MXènes sont un nouveau type de matériau 2D qui ont étaient découvertes par Naguib et al en 2011. Ils sont produits par gravure chimique sélective de l'élément « A » des phases MAX, suivies d'un processus de délaminage. Malgré leur nouveauté, les MXènes ont attiré une attention massive en raison de leur conductivité électrique élevée, l'hydrophile, leur énorme surface spécifique, leur biocompatibilité, qui les conduisent à être utilisés dans les

batteries Li- et Na-, électromagnétiques blindage contre les interférences, stockage de l'énergie, purification de l'eau et dessalement, filtration, capteurs, catalyseurs de CO, biocapteurs.

1.2.5 Historique des MXènes :

Compte-tenu des considérations précédentes, il n'est pas étonnant de constater que les phases MAX puissent servir de précurseurs pour des systèmes 2D. C'est en 2011 que Naguib *et a*[15].rapportent la synthèse d'un nouveau matériau 2D obtenu après l'immersion d'une poudre de Ti_3AlC_2 dans une solution d'acide fluorhydrique (He) dosée à 50%. Ce traitement chimique a pour conséquence d'éliminer l'élément A de la phase MAX tout en préservant la structure des couches MX. Le résultat est un empilement de feuillets 2D de carbures de titane (Ti_3C_2) passivés par des terminaisons de surface T résultant du traitement chimique. Ces terminaisons de surface peuvent être du type OH, O ou F. Ils baptisent cette nouvelle famille de matériaux MXènes par analogie aux phases MAX et au graphène. La composition chimique générale de ces matériaux est $M_{n+1}X_nT_n$et dans le cas du Ti_3AlC_2, le MXènes correspondant est $Ti_3C_2T_2$.

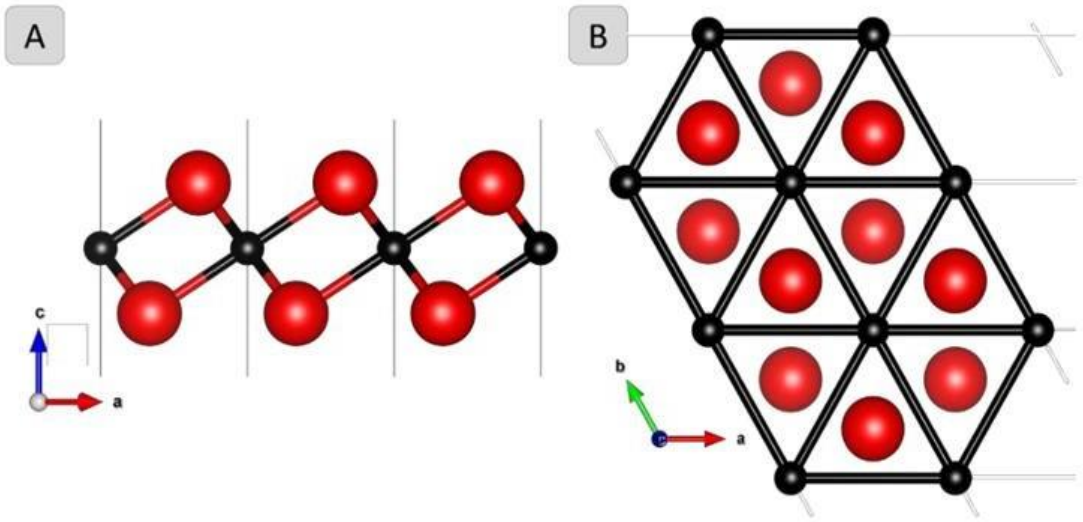
Devant la richesse de la famille des phases MAX et la possibilité de changer les terminaisons de surface, cette découverte met en évidence la possibilité d'obtenir une nouvelle famille de matériaux 2D très large, disposant d'une flexibilité très importante en terme de compositions chimiques et de nanostructures. Depuis cette date, de nombreux MXènes ont été obtenus :

Ti_2C, $N\ b_2C$,V_2C, Ti_3CN et Ta_4C_3, ainsi que des solutions solides sur le site M telles que, (*Ti*0.5, *Nb*0.5)2*C*, (*V*0.5, *Cr*0.5)3C_2, Mo_2TiC_2, $Mo_2Ti_2C_3$ et Cr_2Ti_2[16]-[17]De nouveaux procédés de synthèse ont aussi vu le jour. L'objectif de cette partie est de présenter cette nouvelle classe de matériaux que constituent les MXenes, les principaux procédés de synthèse, et leurs propriétés.

1.2.6 Structure cristallographique :

Les MXènes sont des matériaux bi-dimensionnels dont la structure dérive de celle de la phase MAX initiale. Les atomes métalliques sont disposés dans une structure compacte où les atomes de carbone et/ou d'azote remplissent les sites octaédriques formés par les atomes métalliques. Ce cristal a une structure hexagonale ainsi que le même groupe d'espace que la

phase MAX initiale comme illustré sur (la Figure1.7 :*Représentations* ***de la structure cristalline du MXène vue de côté (A) et vue de dessus (B) avec les éléments M (en rouge) et X (en noir). Adaptée de la référence .*** Cette structure est analogue au graphène qui est aussi un matériau à deux dimensions[18]**.**



1.7 :*Représentations de la structure cristalline du MXène vue de côté (A) et vue de dessus (B) avec les éléments M (en rouge) et X (en noir). Adaptée de la référence*[19] .

La différence de structure entre la phase MAX initiale et MXènes'observe sur les diffracto gramme. En effet , un décalage de spics liés aux plans(00l)[20] vers les bas angles est observé(cf.1.7 :Représentations ***de la structure cristalline du MXène vue de côté (A) et vue de dessus (B) avec les éléments M (en rouge) et X (en noir). Adaptée de la référence .*** puisque ce phénomène est associé à l'extension de la distance entre les feuillets de MXène qui

entraîne une augmentation du paramètre de maille c, lors de l'exfoliation

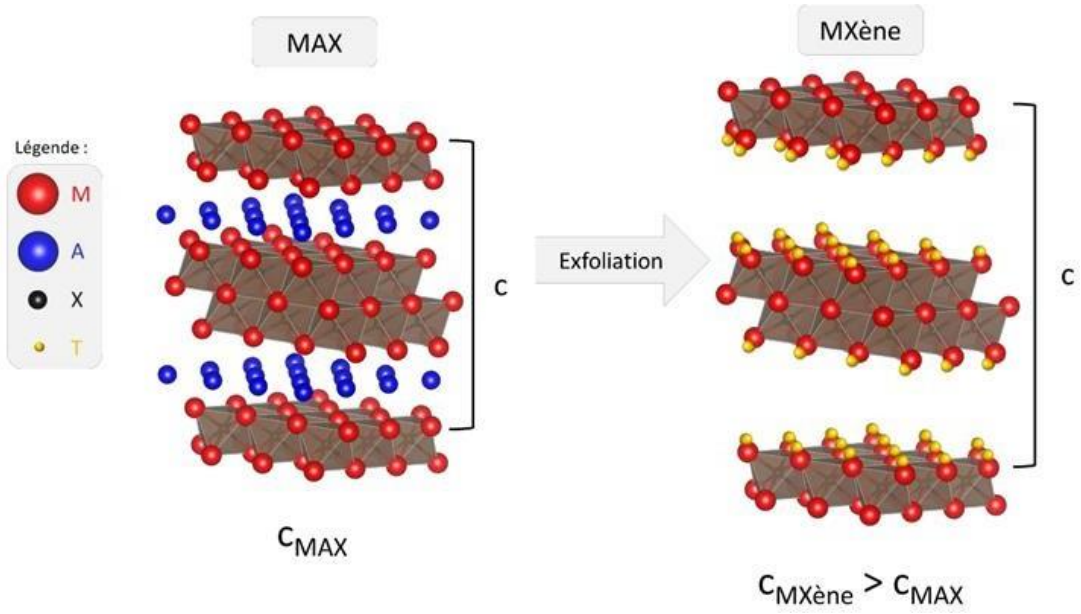


***Figure.1.8**: Représentation de l'augmentation du paramètre de maille c après exfoliation de la phase MAX Adaptée de la référence*[21].

La structure en feuillets induit la présence de pics intenses (*00l*) sur le diffracto grammes à l'image de ce qui est observé pour les matériaux argileux[22]. Ghidiu *et al*[23]. Ont montré une expansion de la structure discontinue avec l'augmentation du taux d'humidité relative quand un milieu exfoliant composé d'HF et de LiCl est utilisé. Pour ces auteurs, cette expansion est due à l'intercalation d'une ou de deux couches de molécules d'eau stabilisées par les cations de lithium. Cependant, cette description simplifiée ne prend pas en compte la coexistence d'états d'hydratation différents au sein du même cristal.C'est ainsi que Célérieretal[24]. ont mis en évidence le phénomène d'interstratification, c'est-à-dire l'hétérogénéité d'hydratation au sein de la structure des MXènes. Ce phénomène a été démontré en modélisant les diffractogrammes du MXène Ti_3C_2Tx enregistrés en fonction du taux d'humidité. La transition des états d'hydratation s'est faite progressivement en incluant des structures interstratifiées. Cette étude permet de mieux appréhender les diffractogrammes des MXènes.

1.2.7 Synthèse des MXénes :

Le procédé utilisé à l'origine pour la synthèse de MXenes est une immersion de poudre de phase MAX dans une solution de He concentrée pour éliminer l'élément A. Par la suite, d'autres traitements ont été utilisés afin d'améliorer la qualité des MXenes obtenus et de pallier l'utilisation de He concentré dont la manipulation est complexe. Les échantillons obtenus sont des ensembles de feuillets, liés par des interactions faibles de type hydrogène ou Van Der Waals[23].

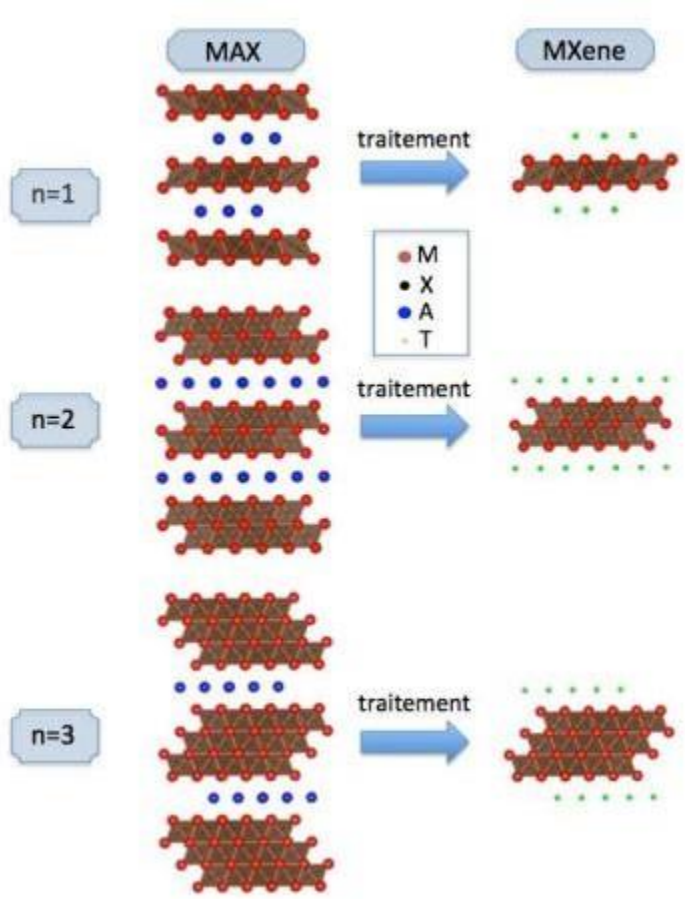


Figure 1.9 - Synthèse de MXéne à partir des phases MAX correspondante[25].

Des différentes séquences d'empilement (n=1, 2 ou 3) permet de modifier l'épaisseur du feuillet 2D obtenu. Du fait de la présence des groupes de surface. Les paramètres clés de la synthèse sont le temps de traitement, la concentration et la température. De plus, certains paramètres jouent un rôle très important indépendamment de la nature de la phase MAX, comme par exemple, la taille des particules. En effet, la taille des grains de poudre a une grande influence sur le temps de traitement. Il a par exemple été démontré que, dans le cas de V_2AlC, la réduction de la taille des particules permettait de réduire le temps de traitement HF

de 90h à 8h. Ainsi, la synthèse de MXene par HF consiste à utiliser des poudres de taille homogène et à ajuster le temps de traitement ainsi que la concentration de He. L'ensemble des temps de traitement et des concentrations utilisées est présenté dans le Tableau 1-2 :Conditions d'obtention de différents MXenes par traitement He[25]. , la taille des particules étant de l'ordre de quelques dizaines de micron et la température de synthèse de 30 à 80 ◦*C*[25].

Tableau 1-2 :Conditions d'obtention de différents MXenes par traitement He[25].

MXene	HF%	Temps(H)
Ti_2 C	10	10
Ti_3C_2	50	2
Ta_4C_3	50	72
Ti_3CN	30	18
Nb_2C	50	90
V_2C	50	90

1.2.8 Conclusion :

Au travers de cette étude bibliographique, il a été montré que le nombre de publications sur les MXènes est en croissance exponentielle depuis leur découverte en 2011.La raison de cet engouement est la richesse chimique, la conductivité électronique élevée et les propriétés diverses et versatiles des MXènes. Leurs propriétés sont dictées par la nature des éléments chimiques présents au sein de la phase MAX mais dépendent aussi de la nature des groupements terminaux obtenus après l'exfoliation. Cela permet d'adapter le choix dumatériau selon l'application visée. De plus, le comportement argileux de ces matériaux leur permet d'être facilement mis en forme pour concevoir des films ou des encres, ce qui représente un atout majeur pour la mise en œuvre de ces matériaux dans des procédés industriels.

Chapitre 2 :

Propriétés structurales et mécaniques des MXènes.

2 Propriétés structurales et mécaniques des MXènes:

2.1 Propriétés structurales des MXènes :

2.1.1 Introduction :

Les MXènes possèdent une symétrie essentiellement sphérique, presque tous les éléments de transition cristallisent avec des structures à coordinence élevée (hexagonal compact, cubique à faces centrées, cubique centré). Ils forment soit entre eux, soit avec d'autres métaux des solutions solides, continues ou non, selon leurs structures et leurs rayons atomiques. La nature des phases intermétalliques susceptibles d'apparaître découle des *règles de Hume-Rothery*, en considérant comme nul le nombre d'électrons de valence des groupes du fer et du platine. Hydrures, borures, carbures et nitrures des éléments de transition correspondent généralement à des phases d'insertion de l'élément léger dans le réseau métallique**.**

Les matériaux bidimensionnels de type graphène ont suscité un énorme intérêt en tant que dispositif émergent matériaux pour la nanoélectronique en raison de leurs propriétés remarquables. Cependant, leurs applications en spintronique ont été limités par le manque de magnétisme intrinsèque. Ici, en utilisant la densité hybride théorie fonctionnelle, nous prédisons le comportement ferromagnétique dans un Cr_2C bidimensionnel de type graphène cristal qui appartient à la famille MXènes. Le ferromagnétisme, issu du Crd itinérant électrons, introduit un demi-métal licité intrinsèque dans Cr_2C MXene, avec un écart semi-métallique aussi grand comme 2,85 eV. De plus, la bande interdite de l'état isolant antiferromagnétique est contrôlable par changer le type de groupes fonctionnels. Il a été souligné en outre que la localisation des électrons Cr d induite par la fonctionnalisation de surface est responsable de la relation ferromagnétique antiferromagnétique et les transitions métal-isolant.

2.1.2 Structure cristallines des MXènes :

Les MXènes sont une classe émergente de matériaux bidimensionnels qui ont récemment attiré une attention considérable dans la communauté scientifique. Les MXènes sont des dérivés des céramiques de composition chimique $M_{n+1}X_nT_x$, où M représente un élément de transition, X est un élément léger (généralement du carbone ou de l'azote), et T_x représente un groupe terminant comme -OH, -F, ou -O.

La structure cristalline des MXènes peut varier en fonction de leur composition chimique, mais ils présentent généralement une structure en couches.

La structure cristalline des MXènes est basée sur un empilement de couches de carbone ou de nitrure d'un élément léger (X) entre des couches d'éléments de transition (M). Les couches d'éléments de transition sont généralement octaédriques ou prismatiques, tandis que les couches d'éléments légers sont planes. Ces couches sont reliées par des liaisons chimiques fortes, telles que des liaisons covalentes.

Les MXènes peuvent adopter différentes structures cristallines en fonction de la combinaison d'éléments de transition et d'éléments légers utilisés. Par exemple, certains MXènes peuvent adopter une structure hexagonale, similaire à celle du graphène, tandis que d'autres peuvent avoir une structure tétragonale ou orthorhombique. La structure cristalline des MXènes peut également être modifiée par l'intercalation de molécules ou d'ions entre les couches, ce qui peut conduire à des variations dans leurs propriétés physiques et chimiques. Il convient de noter que les MXènes sont un domaine de recherche en évolution rapide, et de nouvelles découvertes sur leur structure cristalline peuvent encore être faites.

2.1.3 les types des structure :

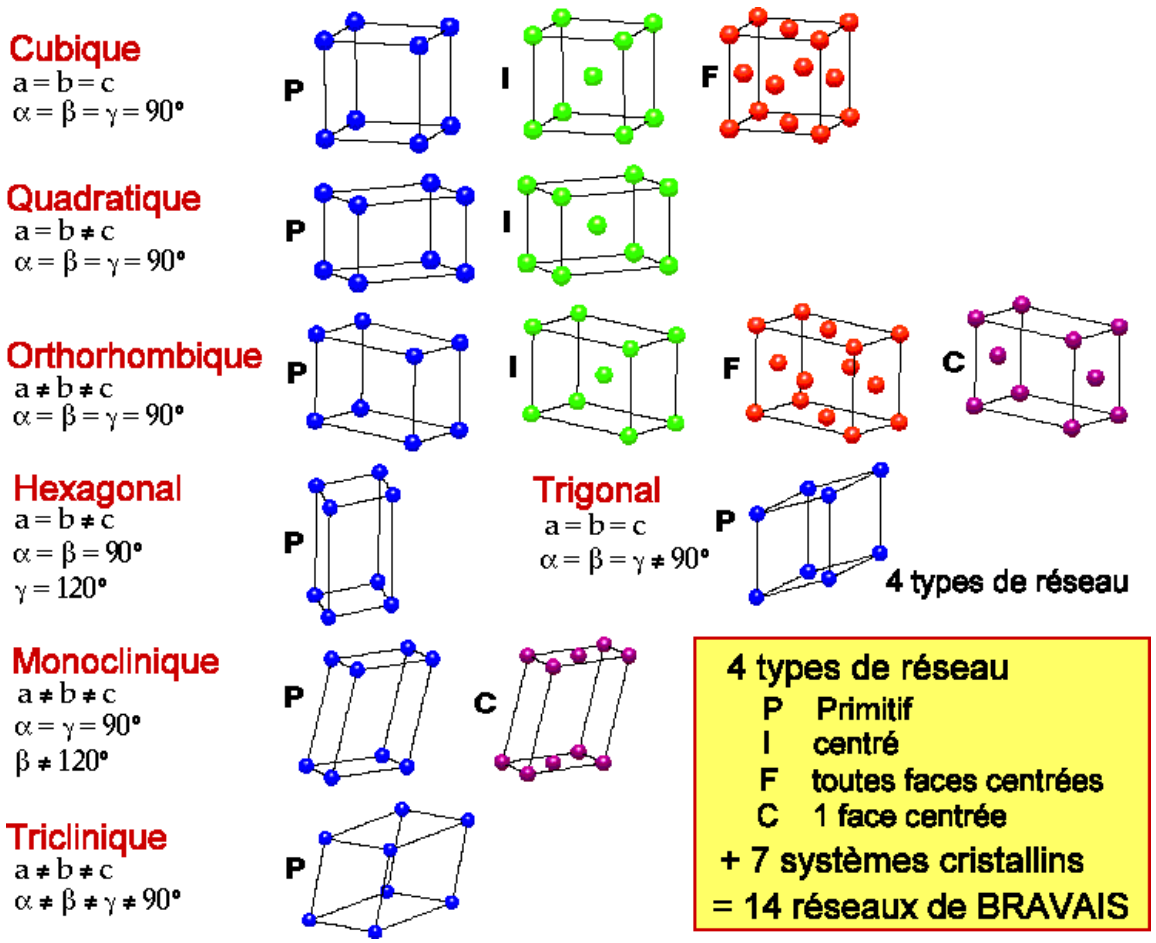


Figure2.1 : Les différents types du système cristallin**.**

Tableau 2-1:représente système cristallin, le type ,comportement métallique… ect.

Composé	**Comportement métallique**	**Système cristallin**	**Classe**	**Le type de cristaux**	Référence
Cr_2CF_2	Semi-conducteur.	Hexagonale	-3m1	Cubique a face centré	
Cr_2C	Moitié-métallique	Hexagonal	-3m1	Cubique centré	[26].
Cr_2N	Métallique.	Trigonale	P-31m	Cubique a face centré	[27]
Cr_2AlC	Métallique.	Hexagonale	6/mmm	Cubique Centré	[28]
Ti_2C	Presque à moitié - métallique.	Trigonale	m3m	Cubique a face centré	[29]
V_2C	Semi-conducteur.	Orthorhombique	p-3m1		[30]
Ti_2N	Presque moité-Métalliqe	Trigonale	P4/mnm	Cubique a face centré	[29]

2.2 Propriétés mécanique :

Une propriété mécanique est une propriété caractéristique d'un matériau qui décrit son comportement lorsqu'il est soumis à une ou plusieurs contraintes mécaniques.

Les propriétés mécaniques sont liées à toute déformation du matériau. Une déformation, notéeε, se définit comme la variation relative des dimensions de la pièce déformée. Elle correspond donc au rapport $\Delta L/L$ avec L, la dimension de la pièce considérée (la déformation est sans dimension). Elle est négative lorsque le matériau se contracte, positive lorsqu'il se dilate.

Ces déformations sont définies par rapport à la force qui est appliquée sur le maté- Riau. En fait, la force nécessaire pour déformer un matériau va dépendre de la section du matériau. Pour éviter toute dépendance en fonction de la forme et de la taille de la pièce qui est déformée, on n'utilise pas la force mais sa normalisation par rapport à la section de la pièce. Cette grandeur est appelée contrainte mécanique et a la dimension d'une pression4.

Nous la noterons :σ_m Pour déterminer le comportement mécanique d'un matériau, il est courant de tracer la courbe de contrainte en fonction de la déformation appliquée (σ_m= $f(\varepsilon)$), c'est-à-dire que l'on fixe la valeur de la déformation et l'on mesure la contrainte nécessaire pour obtenir cette déformation. Cette mesure s'effectue à l'aide de machines de traction, sur des éprouvettes de matériau, ayant des tailles normalisées.

Le comportement mécanique d'un matériau est bien décrit par sa courbe de traction (Figure2.2 : **Résultat d'un essai de traction sur une éprouvette.**). Sur celle-ci, il est possible de distinguer trois régions :

– Entre A et B, la contrainte varie linéairement avec le déplacement. Le matériau a alors un comportement élastique, c'est-à-dire que toute déformation dans cette zone est réversible et que si la contrainte appliquée est ramenée à 0 Pa, le maté- Riau reprend ses dimensions de départ. La constante de proportionnalité est appelée

le module d'Young et notée *E*. Sa dimension est celle d'une pression ou d'une

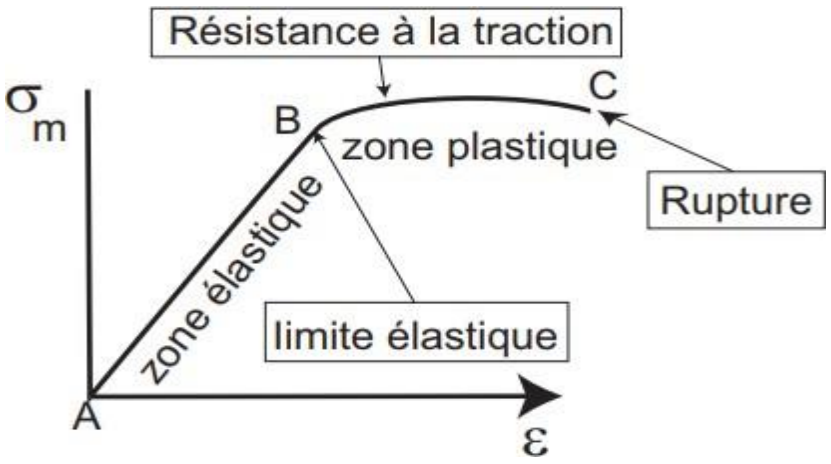


Figure2.2 : Résultat d'un essai de traction sur une éprouvette[31].

contrainte et représente donc la facilité avec laquelle le matériau peut être déformé (plus *E* est grand, plus la contrainte et donc la force à appliquer doit être grande pour déformer le matériau).

$$E = \frac{d\sigma_m}{d\varepsilon} = \frac{\sigma_m}{\varepsilon} \quad (2\text{-}1)$$

dans la partie linéaire

– Entre B et C, la contrainte n'est plus proportionnelle à la déformation. La déformation varie alors très rapidement pour une contrainte qui reste pratiquement constante. Le matériau a un comportement plastique. Les déformations deviennent irréversibles.
– Après C, le matériau rompt, c'est la rupture.

Note : lorsque la limite entre zone élastique et plastique n'est pas nette, on définit la limite élastique comme la valeur de la contrainte lorsque l'on considère un allongement élastique de 0,2% supplémentaire. C'est l'intersection entre la courbe réelle et la droite parallèle décalée vers la droite de 0,2% de s. À partir de ces comportements mécaniques, nous pouvons définir différents types de matériaux.

Un matériau est dit ductile s'il peut être déformé plastiquement avant rupture. C'est le cas des métaux, des polymères... À l'opposé, un matériau est dit fragile quand il y a rupture sans que le matériau ne soit passé par un comportement plastique. Il se casse directement après la déformation élastique. C'est notamment le cas des verres... En fonction du type de sollicitations mécaniques, le comportement du matériau ne se résume pas uniquement à ductile ou fragile. Il existe ainsi un grand nombre de définitions en mécanique du solide dont voici quelques exemples.

– La dureté : la dureté définit la capacité d'un matériau à résister à la pénétration d'un autre matériau plus dur. Les essais de dureté se font donc par pénétration d'une pointe pyramidale (la pénétration se fait à vitesse et force constante) dans le matériau à tester. La dureté est alors quantifiée à partir de la largeur de la trace créée à la surface du matériau par la pointe. Un matériau dur est difficile à rayer.
– La ténacité : la ténacité détermine la capacité d'un matériau à résister à la rupture sous l'effet d'un choc.

– La fatigue : la fatigue correspond à la dégradation (qui aboutit à la rupture) d'un matériau au cours du temps sous l'effet d'utilisations répétées. Les essais de fatigue.

2.2.1 Contraintes :

Une contrainte est un effort par unité de surface qui s'exerce dans le matériau. Elle dépend de la valeur de la sollicitation et de la surface du solide. Pour une même sollicitation, la contrainte sera d'autant plus faible que la surface est grande et inversement. Dans la mécanique, la contrainte normale σ est proportionnelle à l'allongement relatif ε par la constante du module de Young[2].

$$\sigma = E \times \varepsilon \qquad (2\text{-}2).$$

2.2.2 Tenseur de contrainte :

La contrainte est définie comme l'intensité de force à un point donnée du matériau. sur une surface infinitésimale on a donc :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\delta F}{\delta A} \qquad (2\text{-}3).$$

.Lorsque la force agit perpendiculairement à la surface, on par le de ,contraint enormale.Si la force est parallèle à la surface, la contrainte sera une contrainte de cisaillement. est le tenseur du secondor dreutilisé pour caractériser l'état des tress. H.Force sinterne sagissant pendant la partie de déformation centrale. Le terme a été introduit par Cauchyen1822.

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma \mathbf{ij} = \begin{matrix} \boldsymbol{\sigma 11} & \boldsymbol{\sigma 12} & \boldsymbol{\sigma\ \ 3} \\ \boldsymbol{\sigma 21} & \boldsymbol{\sigma 22} & \boldsymbol{\sigma 23} \\ \boldsymbol{\sigma 31} & \boldsymbol{\sigma 32} & \boldsymbol{\sigma 33} \end{matrix} \qquad (2\text{-}4).$$

Dans le cas général, l'état de contrainte sur un élément infinitésimal du matériau est décrit par un tenseur à neuf composants

L'indice i indique la direction de la force et l'indice j indique la normale au plan sur lequel la force est appliquée [28].

Ce tenseur est symétrique σij = σji sinon l'élément de volume subirait une accélération illimitée en rotation. Donc six des composants du tenseur des contraintes σ sont réellement indépendants.

L'une des propriétés d'un tenseur symétrique est d'être diagonalisable. Autrement dit, on peut toujours trouver un système de coordonnées pour lequel le tenseur des contraintes est représenté par une matrice diagonale :

2.2.3 Tenseur de déformation:

Il s'agit d'un tenseur symétrique du second ordre utilisé pour décrire l'état de déformation local provoqué par la contrainte.

$$\varepsilon = \varepsilon_{ij} = \begin{matrix} \mathcal{E}11 & \mathcal{E}12 & \mathcal{E}13 \\ \mathcal{E}21 & \mathcal{E}22 & \mathcal{E}23 \\ \mathcal{E}31 & \mathcal{E}32 & \mathcal{E}33 \end{matrix} \quad \textbf{(2-5).}$$

.En raison de la symétrie des tenseurs de contrainte et de déformation = et σij = σji . Le nombre de leurs composantes indépendantes est réduit à 6, trois composantes normales σ11, σ22 et σ33 et trois composantes de cisaillement σ12 , σ21et σ32 [[28].

1.1.1 Tenseur d'élasticité (rigidité) :

Il s'agit d'un tenseur de composante du quatrième ordre (81 composantes) qui peut décrire quantitativement le comportement élastique linéaire des matériaux. En raison de la symétrie des tenseurs de contrainte et de déformation (εij =εij et σij = σji), le tenseur de rigidité est réduit à 36 composants (matrice 6 × 6 composants), donc Cijkl = Cjikl = Cijlk = Cjilk (donc, Sijkl = Sjikl = Sijlk = Sjilk). Afin de simplifier la notation matricielle des composantes rigides, Voigt propose d'utiliser m au lieu de kl pour ij, et n au lieu de kl. Les deux exposants m et n varient entre 1 et 6. Le tableau suivant montre la correspondance entre ces indices.

Tableau2-2 :montre la correspondance entre ces indices[28].

Notation tensorielle (ij)	11	22	33	23(ou32)	13(ou31)	12(21)
Notation matricielle (mn)	1	2	3	4	5	6

La notation de Voigt précédente peut convertir le tenseur de contrainte et de déformation en un vecteur à 6 composantes, et peut convertir la loi de Hooke en la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\\ \sigma_4\\ \sigma_5\\ \sigma_6\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56}\\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66}\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}\varepsilon_1\\ \varepsilon_2\\ \varepsilon_3\\ \varepsilon_4\\ \varepsilon_5\\ \varepsilon_6\end{bmatrix}$$

- **(2-4).**

Pour des considérations thermodynamiques Cmn = Cnm cela rend la matrice C (et donc S) symétrique par rapport à sa diagonale principale, réduisant ainsi le nombre de constantes indépendantes à 21. Une autre réduction est causée par la symétrie du cristal, et a pour effet de réduire le nombre de constantes élastiques indépendantes. Ceci est étroitement lié à la symétrie de la structure cristalline montrée dans le tableau ci-dessous[28].

Tableau2-3: Le nombre de constants élastiques en fonction de la structure cristalline.

Ce travail est limité aux systèmes symétriques cubiques et tétragonaux, et leurs nombres constants sont réduits à 3 et 6 composants, respectivement[28].

STRUCTURES CRISTALLINE	**LE NOMBRE DE CONSTANTES**
MONOCLINIQUE	13
TRICLINIQUE	21
ORTHORHOMBIQUE	9
TÉTRAGONAL	6 ou 7
HEXAGONALE	5
CUBIQUE	3

2.2.4 Définition de déformation :

La déformation mécanique est la compagne de la déformation physique, elle définit le changement de forme d'un corps quand les forces appliquées sur celui-ci ou générées à l'intérieur lui font atteindre un nouvel état d'équilibre. La déformation est quantifiée par l'allongement relatifε, encore appelé déformation[32].

$$\mathcal{E} = \frac{\Delta l}{l_0} \qquad \textbf{(2-5)}.$$

2.2.5 Types de déformation :

On reconnaît trois principaux types de déformations qui affectent la croûte terrestre: élastique, plastique et cassante (un quatrième type n'est pas discuté ici, la déformation visqueuse qui s'applique aux liquides).

2.2.5.1 Déformation élastique:

Linéaire pour certains matériaux. Pour d'autres, la fracture ou le fluage interviennent. Voir plus en physique, l'élasticité est la propriété d'un matériau solide à retrouver sa forme d'origine après avoir été déformé. La déformation élastique est une déformation réversible. Un matériau solide se déforme lorsque des forces lui sont appliquées. Un matériau élastique retrouve sa forme et sa taille initiales quand ces forces ne s'exercent plus, jusqu'à une certaine limite de la valeur de ces forces. Les tissus biologiques sont également plus ou moins élastiques.

Les raisons physiques du comportement élastique diffèrent d'un matériau à un autre. Pour les métaux, le treillis atomique change de taille et de forme quand des forces leur sont appliquées (ajout d'énergie au système). Quand les forces sont supprimées, le système retourne à son état original où l'énergie est la plus faible. Pour le caoutchouc et autres polymères, l'élasticité est due à l'extension des chaînes de polymère lorsque les forces sont appliquées. Dans les tissus biologiques élastiques (muscle par exemple), plusieurs de ces causes peuvent être mobilisées.

L'élasticité linéaire concerne les *petites* déformations proportionnelles à la sollicitation. Dans cette gamme, l'allongement est proportionnel à la force dans le cas d'un étirement, selon le module de Young, et l'angle est proportionnel au couple dans le cas d'une torsion, selon le module de Coulomb.

Aux plus grandes déformations, l'élasticité devient non basse.

2.2.5.2 Déformation plastique :

La théorie de la plasticité traite des déformations irréversibles indépendantes du temps, elle est basée sur des mécanismes physiques intervenant dans les métaux et alliages mettant en jeu des mouvements de dislocations (un réarrangement de la position relative des atomes, ou plus généralement des éléments constitutifs du matériau) dans un réseau cristallin sans influence de

phénomènes visqueux ni présence de décohésion endommageant la matière. Une des caractéristiques de la plasticité est qu'elle n'apparaît qu'une fois un seuil de charge atteint.

Lorsqu'une pièce est sollicitée (on la tire, on la comprime, on la tord, etc.), celle-ci commence par se déformer de manière réversible (déformation élastique), c'est-à-dire que ses dimensions changent, mais elle reprend sa forme initiale lorsque la sollicitation s'arrête. Certains matériaux, dits fragiles, cassent dans ce mode de déformation si la sollicitation est trop forte.

2.2.6 Limite d'élasticité :

La limite d'élasticité est la contraint eau-de là de laquelle un matériau ne peut passe déformer élastiquement et réversiblement et commence à se déformer demanière irréversible. Habituellement ,cela est déterminé ou vérifié par une ssaidetraction, donnant une courbe de traction (diagramme contrainte-déformation).Un exemple est illustré dans la figure de droite. Pour les matériaux fragiles, il s'agit de la contrainte à laquelle le matériau casse, notamment en raison de microfissures internes. Le critère de Griffith permet d'estimer ce seuil limite. Pour les matériaux ductiles, il s'agit de la valeur R_e de la contrainte à la jonction entre les zones bleue et rouge dans les figure sa adjacentes. La zone bleue correspond à la zone élastique, qui subit une déformation réversible lorsque la contrainte augmente au relâchement de la contrainte(souvent très linéairement en fonction de la contrainte dont la pente est le module d'Young).Une fois la limite d'élasticité dépassée, la déformation induite dans la région rouge est permanente et devient une déformation plastique. Les matériaux très ductiles n'ont pas de transition claire entre les régions la stiques et plastiques. La limite d'élasticité conventionnelle (ou limite élastique conventionnelle) est alors définie en spécifiant une valeur(souvent0,2%)pour la déformation plastique résiduelle(des seuil inférieurs existent également). c'est les symbole R_e0.2. Il est aussi souvent appelé R_p 0.2en raison de salègre plasticité. La technologie moyenne et l'abus d'un outillassent souvent limite élastique "pour décrire la limite élastique, mais cela est inapproprié car la limite elle-même est une quantité. Non élastique.

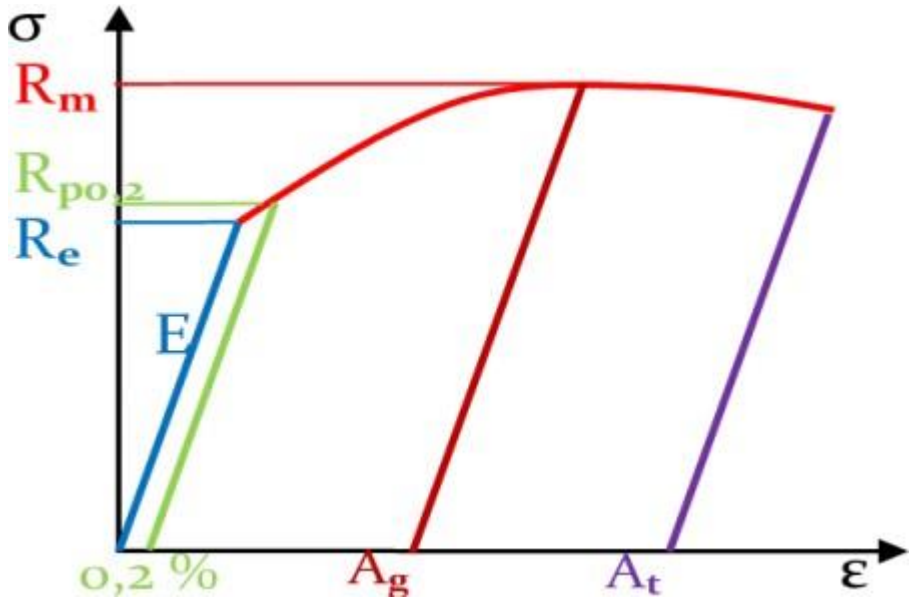


Figure 2.3 : La courbe contrainte-déformation[2].

2.2.7 Loi de Hooke :

En physique, la loi de Hooke modélise le comportement des solides élastiques soumis à des contraintes. Elle stipule que la déformation élastique est une fonction linéaire des contraintes. Sous sa forme la plus simple, elle relie l'allongement (d'un ressort, par exemple) à la force appliquée. Cette loi de comportement a été énoncée par le physicien anglais Robert HOOK en 1676.

La loi de Hooke est en fait le terme de premier ordre d'une série de Taylor. C'est donc une approximation qui peut devenir inexacte quand la déformation est trop grande. Au-delà d'un certain seuil, la déformation peut aussi devenir permanente, ce qui invalide aussi la loi. En revanche, la loi de Hooke peut être considérée à toutes fins pratiques comme exacte quand les forces et les déformations sont suffisamment petites, aussi est-elle utilisée dans de très nombreux domaines de la physique et de l'ingénierie, tels que la séimologie, la mécanique moléculaire et l'acoustique. La forme la plus simple de la loi de Hooke est :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathrm{s} \times \boldsymbol{E} \qquad \textbf{(2-6).}$$

2.2.7.1 Module de Young :

Le module de Young ou module d'élasticité longitudinal est un rapport entre la contrainte de traction appliquée à un matériau, et la déformation qui en résulte (un allongement relatif) est constante, tant que cette déformation reste petite et que la limite d'élasticité du matériau n'est pas atteinte. Le module de Young est la contrainte mécanique qui engendrerait un allongement de 100% de la longueur initiale d'un matériau (il doublerait donc de longueur), si l'on pouvait l'appliquer réellement : dans les faits, le matériau se déforme de façon permanente, ou se rompt, bien avant que cette valeur soit atteinte. Il ne faut pas confondre élasticité et rigidité puisque la rigidité d'une poutre par exemple dépend de son module de Young mais aussi du moment d'inertie de sa section[33].

Dans le système d'unités (naturelles) atomique, le module de Young vaut, pour un matériau isotrope :

$$E=E_0=\frac{m^4{}_S 10}{h^8}. \qquad \textbf{(2-7).}$$

Ceci dit, compte tenu des problèmes où il apparaît (bilaplacien), il paraît assez naturel de le rationaliser soit :

$$E1 = E0/16\pi^2. \qquad \textbf{(2-8).}$$

ou

$$E2 = E0/64\pi 6. \qquad \textbf{(2-9).}$$

$$E=2.(1+\mu).G \qquad \textbf{(2-10)}.$$

$$E=\frac{(3\lambda+2.\mu).\mu}{\lambda+\mu} \qquad \textbf{(2-11)}.$$

Avec : λ : *coefficient de Lamé* .

μ : aussi appelé *coefficient de Lamé.*

Ce coefficient est aussi parfois noté *G* .

2.2.7.2 Module de Poisson :

C'est le rapport négatif entre la contrainte latérale et longitudinale donné par [33]:

$$V = -\frac{s_T}{s_L}. \qquad \textbf{(2-12).}$$

2.2.7.3 Loi similaire pour le cisaillement :

La loi de Hooke est une loi de déformation en traction/compression. Il existe une loi similaire pour le cisaillement :

$$r = G\gamma \qquad (2\text{-}13).$$

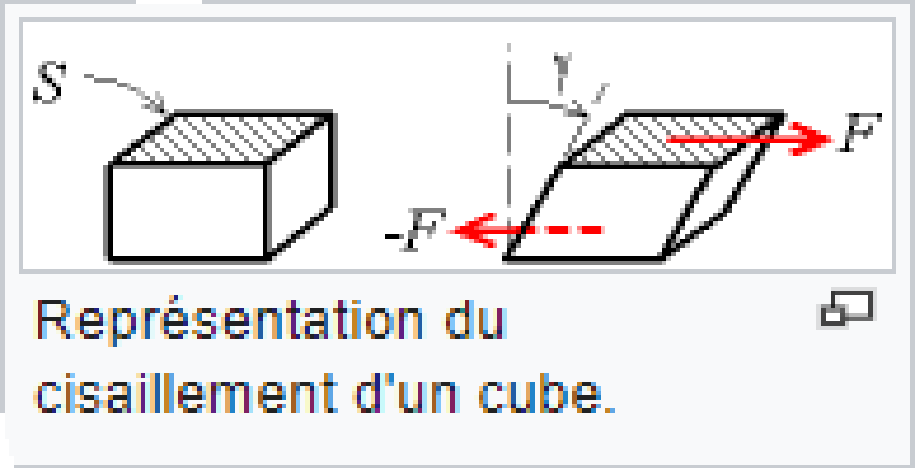


Figure2.4 :représentation du cisaillement du cube[33].

- r est la cission contrainte de cisaillement) ;
- G est le module de cisaillement ou module de Coulomb, également noté μ ;
- γ est l'angle de déformation relative (écart à l'angle droit).

Tableau2-4: unité les plus utilisées[33].

Grandeur	Symbole	Unité SI	Autre unités usuelle
Cission	r	Pa	MPa
Module de cisaillement	G^2	Pa	MPa,GPa
Angle de déformation	γ	Rad	°

2.2.8 Propriétés mécaniques pour les structures hexagonales à pression nulle :

En raison de la symétrie cristalline, le nombre de groupe d'espaceP63/mmc des phases MAX diminue à 5, par constantes élastiques uniques, à savoir C11, C12, C13, C33 et C44
Pour un cristal hexagonal compact, les critères de stabilité élastique sont[28] :

$C_{11}-C_{12}>0$

$C_{44}>0$

$C_{33}>0$

C_{11}

$C_{11}+C_{12}+C_{33}>0$

$(C_{11}+C_{12})C_{33}-C^2_{13}>0$

Les valeurs Cij des trois composantes remplissent ces conditions, indiquant ainsi La stabilité mécanique des structures.
Le facteur d'anisotropie est donné par la relation suivante :

$$A=\frac{2C44}{C11-C12} \qquad \textbf{(2-14).}$$

2.2.9 Conclusion :

En conclusion, l'étude de l'effet de la nature chimique des groupements terminaux Tx sur les propriétés structurales et mécaniques du MXène a révélé des relations importantes entre la

composition chimique et les performances du matériau. Les résultats obtenus soulignent l'importance de prendre en compte les groupements terminaux lors de la conception et de la fabrication de MXènes pour des applications spécifiques.

Du point de vue des propriétés structurales, il a été démontré que la nature des groupements terminaux a un impact significatif sur la structure cristalline du MXène. Différentes combinaisons de groupements terminaux entraînent des variations dans l'arrangement atomique, la symétrie cristalline et les propriétés électroniques du matériau. Ces résultats offrent de nouvelles possibilités pour l'ingénierie des propriétés optiques et électroniques des MXènes.

En ce qui concerne les propriétés mécaniques, il a été constaté que les groupements terminaux jouent un rôle crucial dans la résistance et la déformabilité du MXène. Les groupements terminaux spécifiques peuvent renforcer les liaisons interatomiques, améliorer la résistance à la traction et augmenter la rigidité du matériau. Ces caractéristiques mécaniques peuvent être exploitées pour des applications nécessitant des matériaux à haute résistance et à faible poids, tels que les composites renforcés.

Il est important de souligner que l'interaction entre les groupements terminaux Tx et l'environnement peut également influencer les propriétés structurales et mécaniques du MXène. Des études supplémentaires sont nécessaires pour comprendre pleinement ces interactions et développer des MXènes adaptés à des environnements spécifiques.

En conclusion, l'étude de l'effet de la nature chimique des groupements terminaux Tx sur les propriétés structurales et mécaniques du MXène ouvre de nouvelles perspectives dans le domaine de l'ingénierie des matériaux. Ces connaissances approfondies permettront de concevoir des MXènes sur mesure avec des propriétés optimisées pour des applications variées, allant de l'électronique à haute performance aux matériaux structurels légers.

Chapitre3 :

Effet des groupements terminaux.

3 Effet des groupements terminaux :

Ce chapitre est inclus pour mettre en évidence que les propriétés des MXènes sont fortement influencées par le milieu exfoliant et les groupements T résiduels. Une étude bibliographique serait judicieuse à mener pour expliquer les différences observées par modification de la nature du milieu exfoliant sur une même phase MAX. En effet, l'influence à la fois la structure cristallographique, la nature des ions insérés et des groupements terminaux T.

3.1 Introduction :

Les MXenes, forme une famille de carbures et de nitrures de métaux de transition en couches, se sont révélés très prometteurs pour une utilisation dans les nouveaux dispositifs électrochimiques de stockage d'énergie, y compris les batteries et les super condensateurs. Les surfaces des MXene sont terminées par des groupes fonctionnels mixtes -O, -F et -OH à la suite du processus de production de gravure chimique. Ces groupes fonctionnels sont connus pour être répartis de manière aléatoire sur les surfaces, avec contrôle expérimental limité sur leur composition. Il existe un débat considérable concernant la contribution de ces groupes fonctionnels aux propriétés du matériau MXène.

3.2 Définition des groupes terminaux :

Les groupements terminaux sont des groupements résiduels de l'étape d'attaque chimique de la phase MAX en milieu aqueux pour obtenir le Mxène par exfoliation.

Groupe situé à une extrémité d'une macromolécule. En chimie des polymères, un groupe terminal est une unité constitutive localisée à une extrémité d'une macromolécule ou d'un oligomère. Par exemple, le groupe terminal d'un PET peut être Motif constitutif localisé à une extrémité d'une macromolécule ou d'une molécule oligomère Note Un groupe terminal n'est lié qu'à une seule unité constitutive d'une macromolécule ou d'une molécule oligomère.

3.3 Effet sur les propriétés mécaniques :

Zha et al .[34]ont mené une étude théorique pour déterminer l'effet du type de groupe terminal sur la durabilité mécanique des MXènes. Par exemple, MXene HF_2CO_2 a une résistance mécanique de 488,5GPa, tandis que Hf_2CF_2 et $Hf_2C(OH)_2$ ont des valeurs de 277,1GPa et 247,8GPa, respectivement. Par conséquent, ces valeurs démontrent l'impact de la fonctionnalisation de surface MXene sur les propriétés mécaniques. Les MXènes fonctionnalisés avec des groupes terminaux de type ont des constantes de réseau significativement plus petites et une résistance mécanique plus élevée que ceux fonctionnalisés avec des groupes terminaux de type Fou OH[35].

3.4 Effet sur les propriétés électroniques :

Celles-ci dépendent fortement des propriétés chimiques des éléments M et X qui composent le MXène. En fait, ces propriétés de transport électronique sont différentes pour les métaux que pour les, le MXèn econtenant du molybdène présente des propriétés électroniques proches de celles d'un semi-conducteur [32]. En ce qui concerne les atomes X, le nitrure de titane a de meilleures propriétés métalliques quele carbure de titane en raison de la présence d'électrons supplémentaires dans les atomes d'azote par rapportaux atomes de carbone. Ce la signifie que la densité d'états électroniques a un niveau de Fermi est plus importante. [36]Le type de groupe terminal affecte également les propriétés électroniques. En effet, la présence de seuls groupements terminaux F ou OH implique la formation de matériaux aux propriétés semi-conductrices.

ces études sont basées sur des approches théoriques en modélisant une surface de MXène ne présentant qu'une seule nature chimique de groupements terminaux ce qui est rarement observé dans des études expérimentales.

3.5 Effet sur les propriétés catalytiques :

Le MXène(Ti_2CO_2) avec uniquement des groupes terminaux de type-O présente une stabilité, présentant des énergies d'adsorption proches de 0eV pour les atomes d'hydrogène. H. équivalent à ce qui est observée surface. Selon des études théoriques, en platine [37]. On pense que ce type de MAX a des performances électro catalytiques intéressantes par apportaux réactions de dégagement d'hydrogène en milieu acide.

3.6 Effet sur la maille :

En effet, les couches d'élément A en phase MAX sont remplacées par des groupements terminaux lors de l'exfoliation, ce qui augmente la constante de réseau. De plus, selon l'exfoliant utilisé, des cations et des molécules d'eau peuvents' intercaler entre les feuilles, ce qui augmente également la constante de réseau. En effet, de l'eau et des cations stabilisés par les charges négatives des groupes de surface peuvents' intercaler entre les couches de MXène[38].

3.7 Effet sur les MXènes :

Les MXènes sont une classe de composé avec une structure en couches bidimensionnelle. La formule chimique du MXène peut être résumée comme suit: $M_{n+1}T_x$ où M représente le métal de transition initial, X représente le carbone et/ ou l'azote, et T représente les groupes fonctionnels de surface. Cependant, Ti_3C_2Tx (où T représente une terminaison de surface telle que -O, -OH ou -F) est le Mxène le plus étudié. Les MXènes sont généralement synthétisés à partir de 10 couches de matériau céramique appelé phase MAX[39].

La nature des groupes terminaux joue un rôle important dans l'activité le carbochimiques des MXènes. La fonctionnalisation des MXènes avec des groupes O, OH et F a été largement étudiée par des approches théoriques, et les s surfaces des MXènes ne sont fonctionnalisées que par des atomes.

3.8 Conclusion :

En conclusion, les groupements terminaux exercent un impact significatif sur les propriétés de la maille, les propriétés mécaniques et les propriétés électroniques des matériaux. Au niveau de la maille cristalline, les groupements terminaux peuvent modifier la géométrie, l'ordre et la connectivité des atomes, ce qui influence la structure cristalline et la disposition des molécules ou des ions dans le matériau. Cela peut entraîner des changements dans la symétrie, la densité, la compacité et la stabilité de la maille. En ce qui concerne les propriétés mécaniques, les groupements terminaux peuvent jouer un rôle crucial dans la résistance, la rigidité, l'élasticité et la flexibilité des matériaux. Ils peuvent affecter la force des liaisons intermoléculaires ou intramoléculaires, la capacité à absorber l'énergie, la résistance aux

contraintes mécaniques et la résilience du matériau. En ce qui concerne les propriétés électroniques, les groupements terminaux peuvent influencer la conductivité électrique, l'absorption et l'émission de lumière, les niveaux d'énergie et les propriétés de transport électronique des matériaux. Les groupements terminaux fonctionnalisés peuvent introduire des états de surface, des bandes interdites ou modifier les niveaux de Fermi, ce qui peut avoir un impact significatif sur les performances électroniques des matériaux. En résumé, les groupements terminaux ont un effet considérable sur la maille cristalline, les propriétés mécaniques et les propriétés électroniques des matériaux. Leur présence, leur nature et leur arrangement peuvent influencer la structure, la résistance, la conductivité et d'autres caractéristiques essentielles des matériaux. Comprendre l'effet des groupements terminaux permet d'optimiser la conception de nouveaux matériaux avec des propriétés spécifiques pour une large gamme d'applications dans les domaines de l'électronique, de la mécanique, de la photonique et bien d'autres encore.

Chapitre 4 :

Etude des propriétés du matériau phases Mxène Cr_2CF_2.

4 Etude des propriétés du matériau phases Mxène Cr_2CF_2 :

4.1 Introduction :

Dans ce chapitre nous expliquons les résultats obtenus avec le CASTEP inclus dans le logiciel Matériel studio. Nous avons analysé les résultats obtenus à partir de nos calculs de propriétés structurelles et comportement mécanique (élastique) du matériauCr_2CF_2en fonction de la pression appliquée sur ce matériau. Ces propriétés sont prédites par des calculs ab initio basés sur la méthode du pseudo potentiel, Ondes planes (PP-PW), dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité périodique (DFT) Implémenté dans le code de calcul CASTEP. L'effet de la pression sur ce matériau MXène Cr_2CF_2 se traduit des phénomènes qui accompagnent les propriétés structurelles et mécaniques du micro-échelle qui dépend aussi de la taille du modèle de la supercellule choisi.

De tels calculs nous permettent de mieux comprendre les changements dans les propriétés structurelles quand le matériau change à l'échelle microscopique sous l'action de la pression ou contrainte appliquée au matériau.

4.2 Description de la structure cristalline du matériau phase MXENE Cr_2CF_2 :

En absence de structure prête dans les bases de données comme il a été le cas de la structure parfaite Cr_2C. Nous avons essayé de positionner les atomes de F en utilisant la symétrie de la maille cristalline élémentaire du système hexagonal du groupe de symétrie 164 $P\bar{3}m1$. et en l'optimisation géométrique de la structure jusqu'à l'obtention d'une énergie minimale. Cette approche nous a permis d'obtenir la structure cristalline stable du Cr_2CF_2 illustré sur la Figure4.1 dont les paramètres de la maille sont :

a=3.018552A˚ , b=3.018552A˚, c=6.555563A˚.

$\alpha=\beta=90^\circ$;$\gamma=120$.

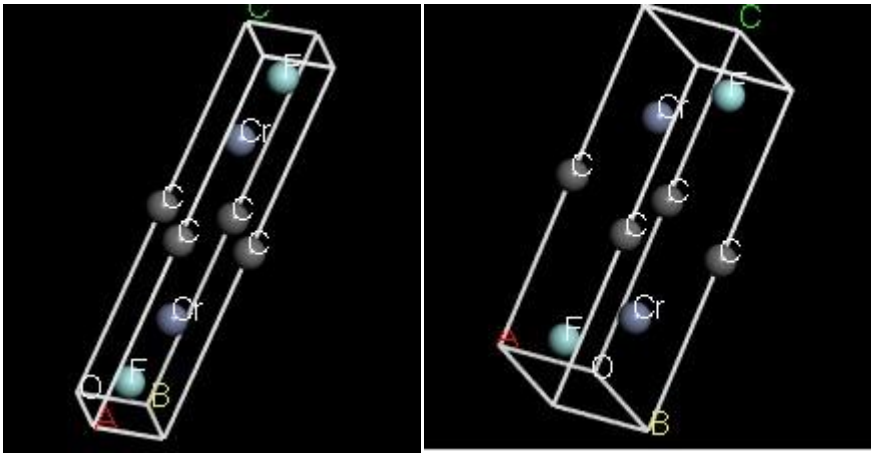


Figure4.1: structure cristalline du Cr_2CF_2 établie par optimisation géométrique.

Les figures suivantes résumé la procédure d'ouverture et le traitement de la structure Cr_2CF_2 par le logiciel Matériel Studio.

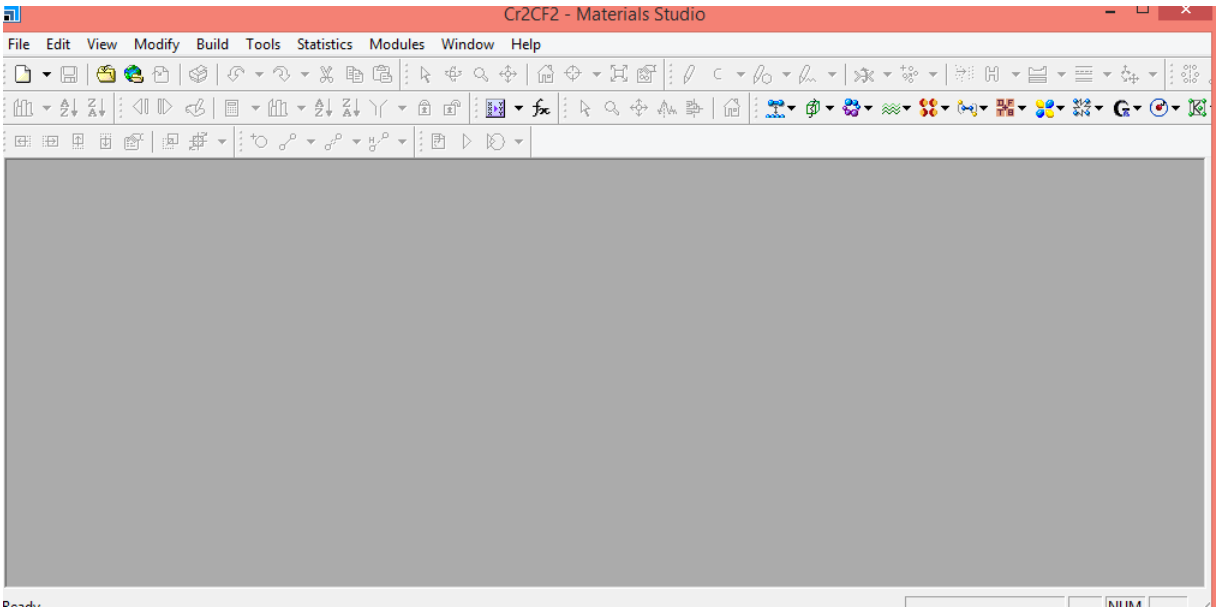


Figure4.2 : Ouverture du logiciel Matériaux Studio.

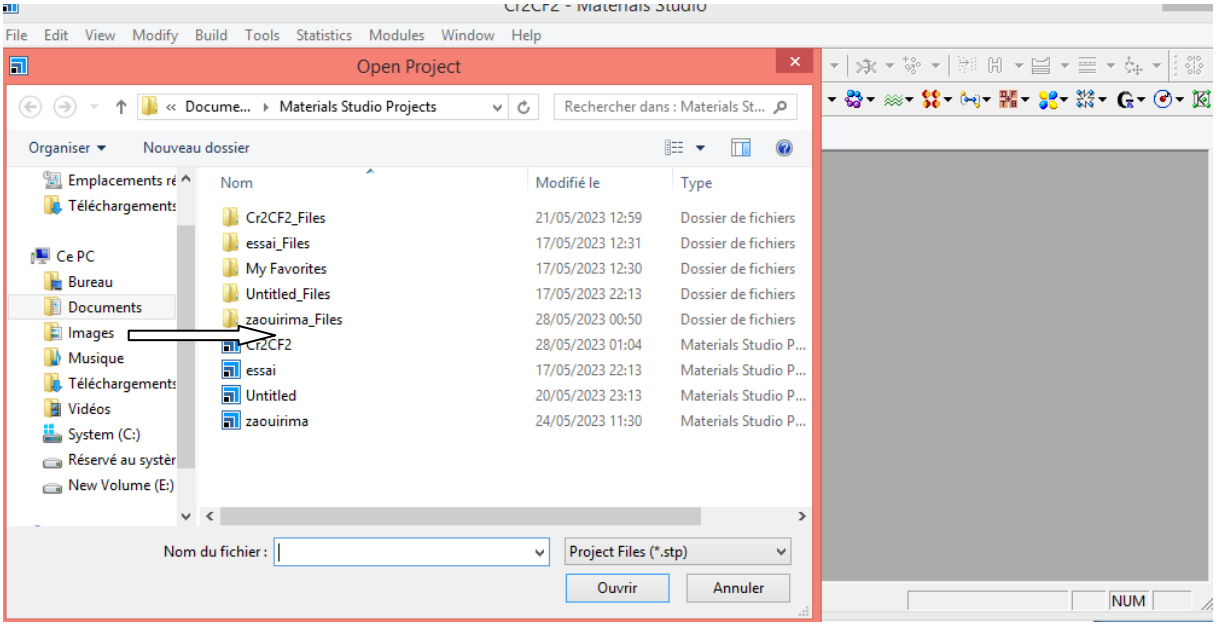


Figure4.3 : Importation du fichier de la structure a exploiter.

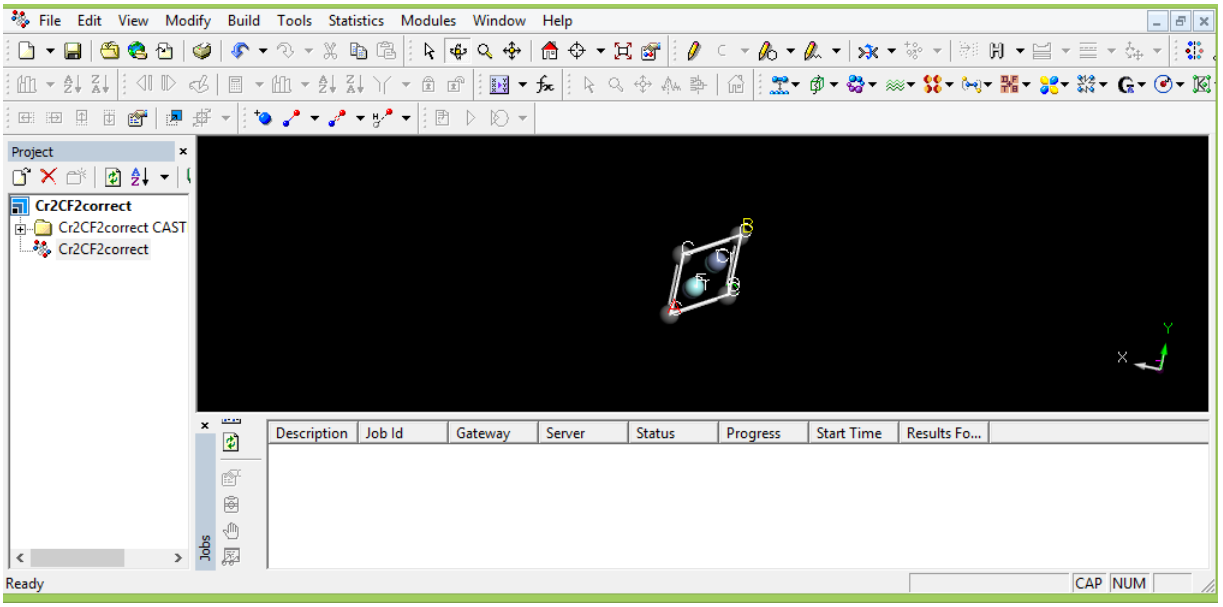


Figure4.4 : la représentation de la maille.

Pour tirer parti de ce graphique, vous de vez effectuer manuellement la symétrie des cellules, l'alignement de saxes et la multiplication et tel élonge des trois saxes à l'aide de Studio Materials comme suit :

1. Build.

2. Symmetry.

3. Find Symmetry.

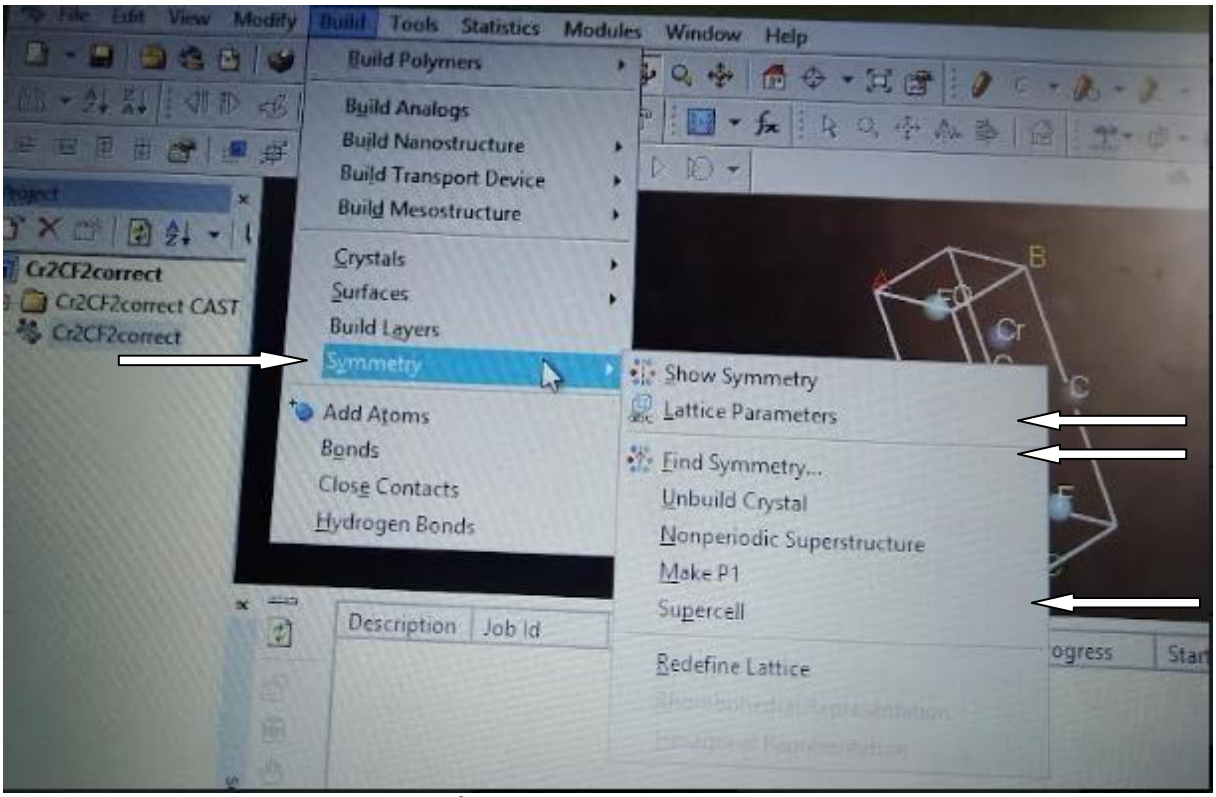
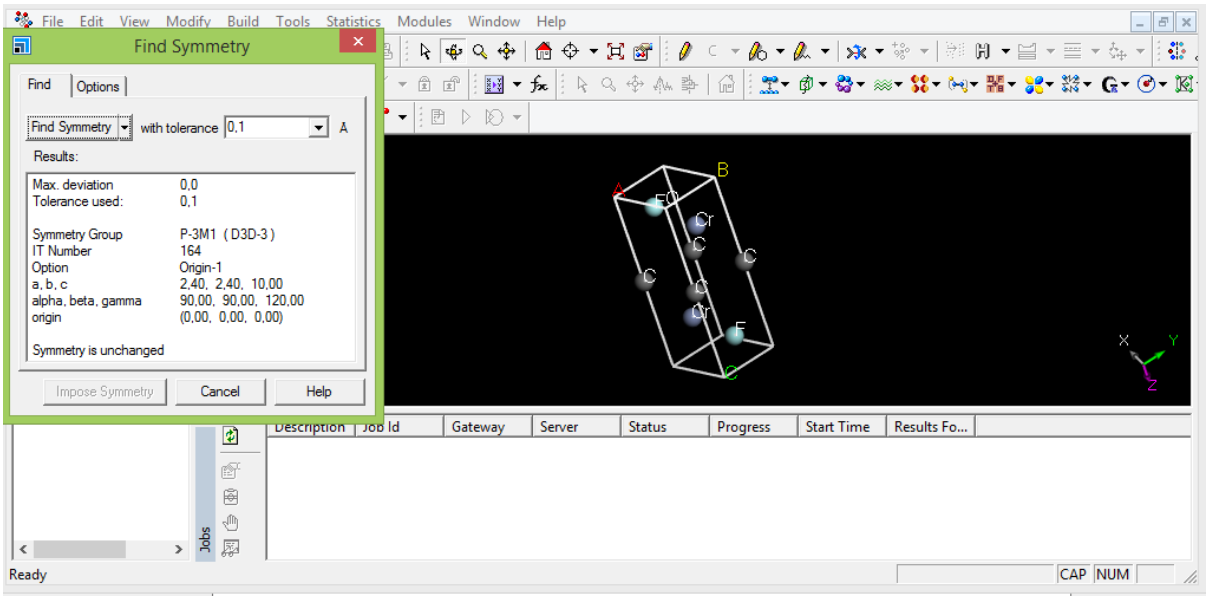
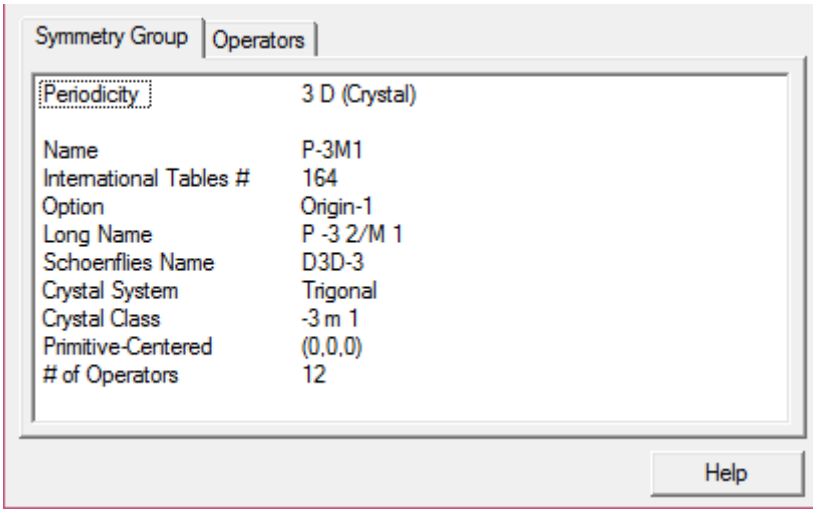


Figure4.5 : Visualisation des paramètres de la maille.



(a)



(b)

Figure 4.6:(a) affichage de la symétrie, (b) du groupe de symétrie.

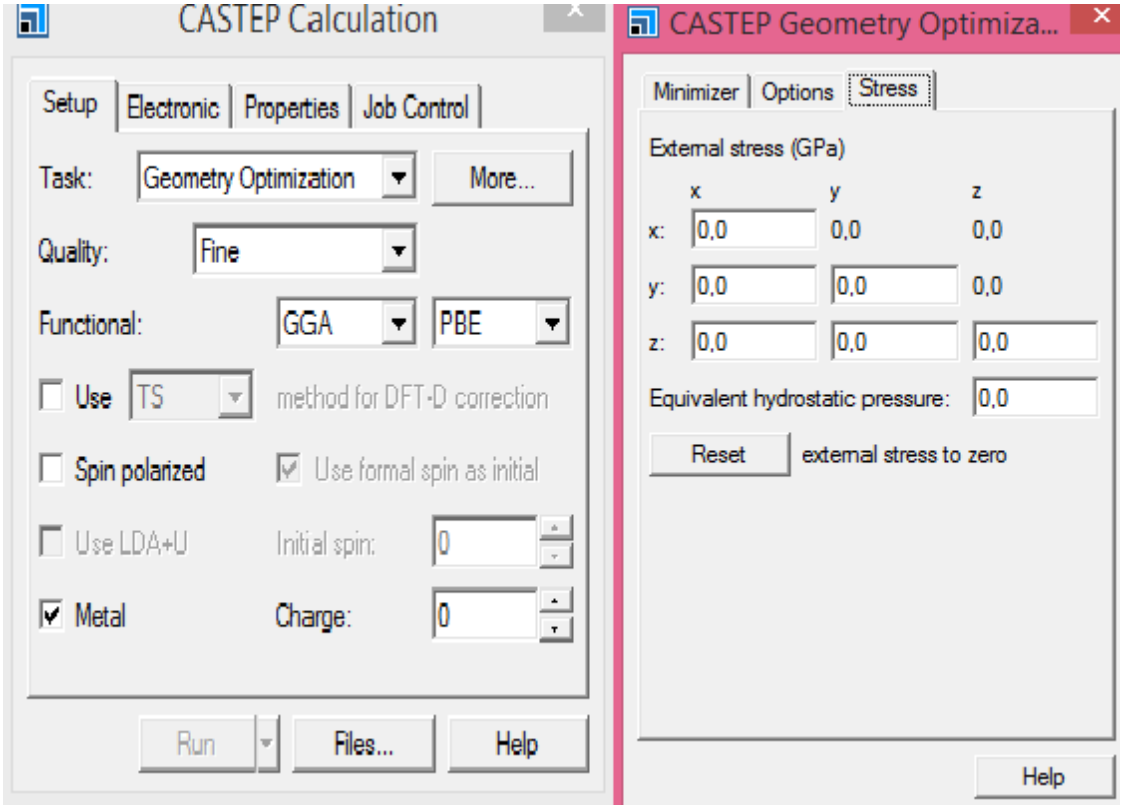
4.3 Optimisation géométrique de la structure :

Une étape d'optimisation de la géométrie est nécessaire. En effet, une contrainte (pression) appliquée à une structure provoque une déformation de volume (compression, traction, cisaillement) et deforme. Par conséquent, nous devons trouver la géométrie optimale basée sur laminimisation de l'énergie de toute la structure. Materials Studio accomplit cette tâche comme suit :

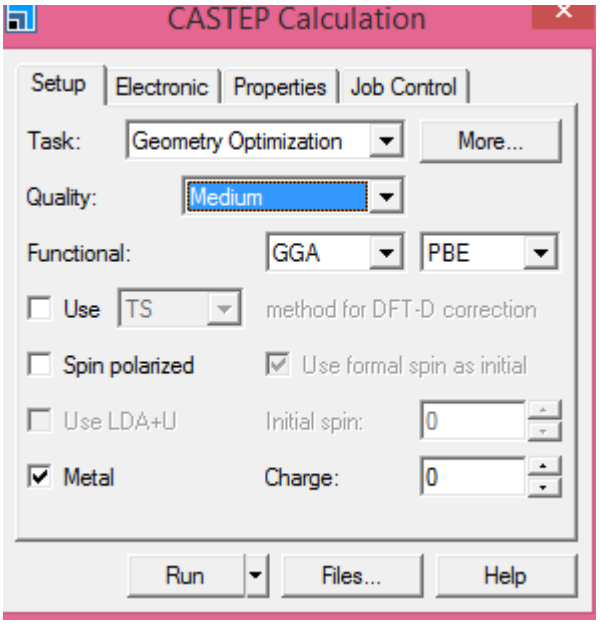
1.Compose zleco de CASTEP.

2.Puis calculez.

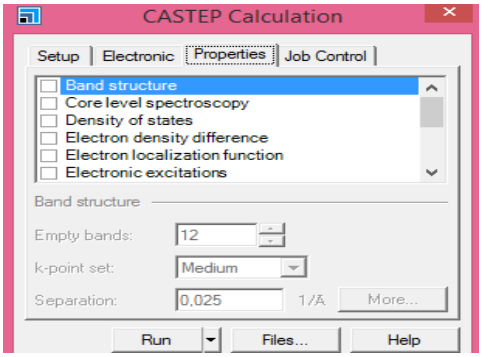
3.Appuyez sur"Appliquer"à la fin des modifications pour démarrer l'optimisation.


CASTEP Calculation
Setup
Electronic
Properties
Job Control
Task:
Geometry Optimization
More...
Quality:
Fine
Functional:
GGA
PBE
Use
TS
method for DFT-D correction
Spin polarized
Use formal spin as initial
Use LDA+U
Initial spin:
0
Metal
Charge:
0
Run
Files...
Help
CASTEP Geometry Optimiza...
Minimizer
Options
Stress
External stress (GPa)
x
y
z
x:
0,0
0,0
0,0
y:
0,0
0,0
0,0
z:
0,0
0,0
0,0
Equivalent hydrostatic pressure:
0,0
Reset
external stress to zero
Help

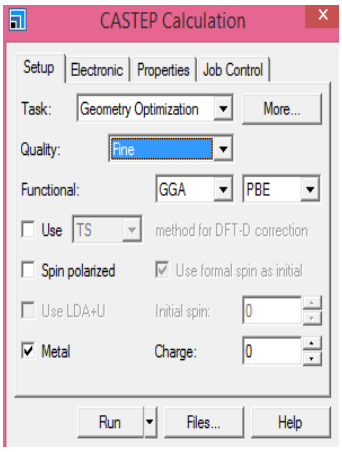
(a)


CASTEP Calculation
Setup
Electronic
Properties
Job Control
Task:
Geometry Optimization
More...
Quality:
Medium
Functional:
GGA
PBE
Use
TS
method for DFT-D correction
Spin polarized
Use formal spin as initial
Use LDA+U
Initial spin:
0
Metal
Charge:
0
Run
Files...
Help

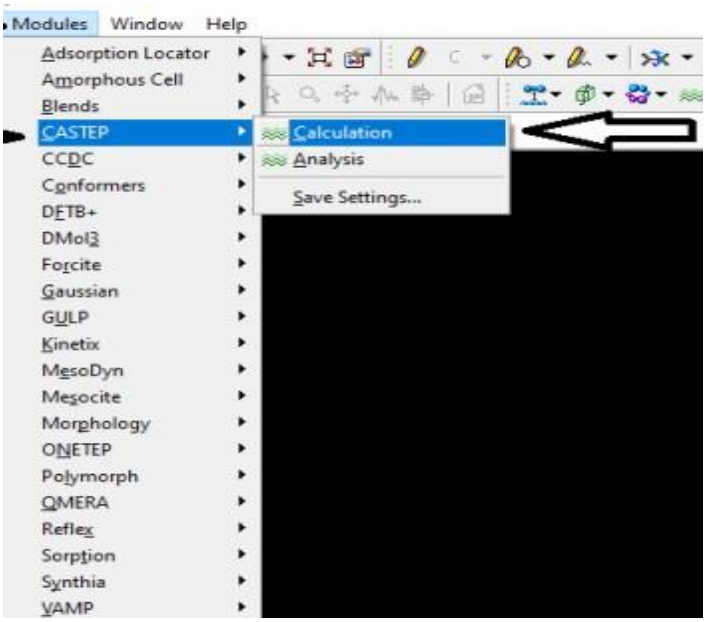
(b)



(c)



(d)



(e)

Figure4.7 :(a) ouverture du code CASTEP, (b), (c), (d) et (e) les paramètres modifiés avant l'optimisation.

Le logiciel indique le lancement de l'optimisation.

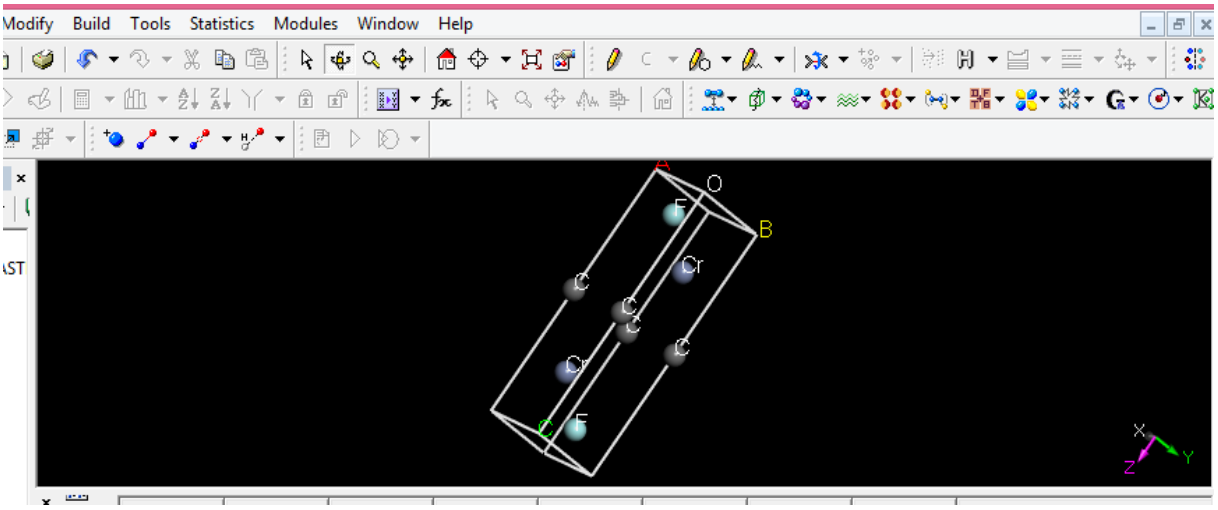


Figure4.8 : Optimisation en cours.

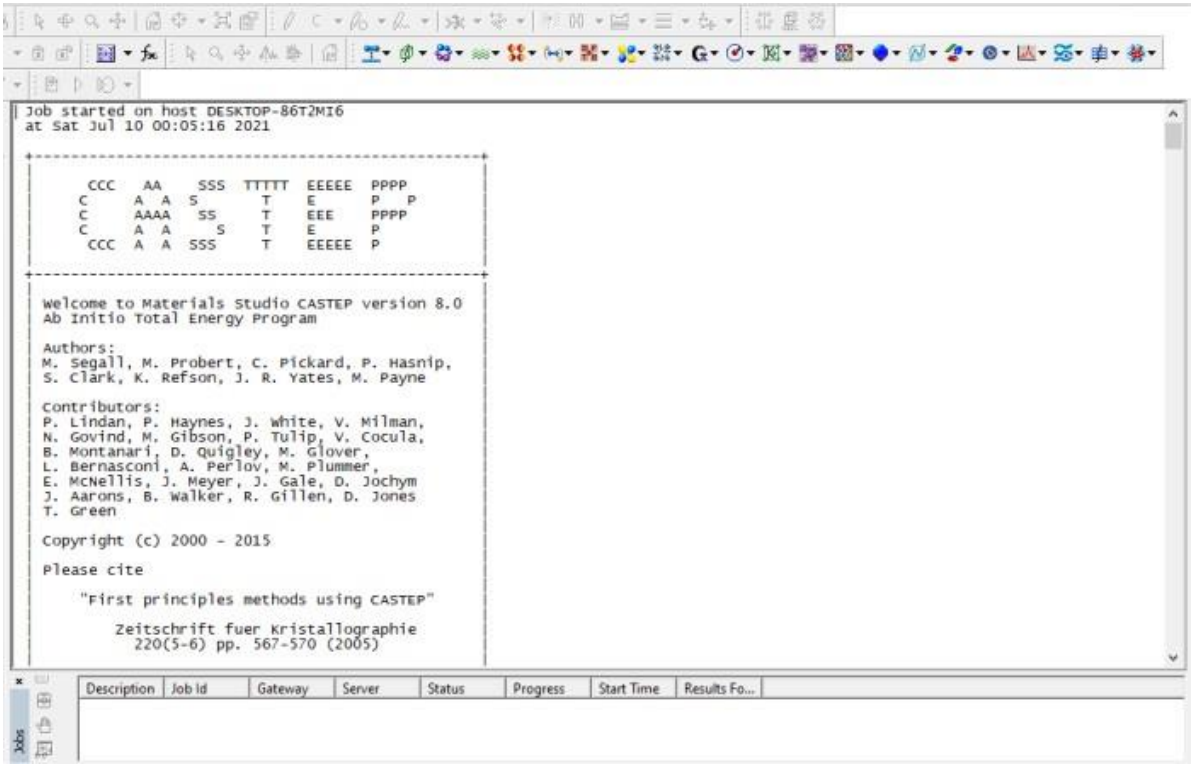
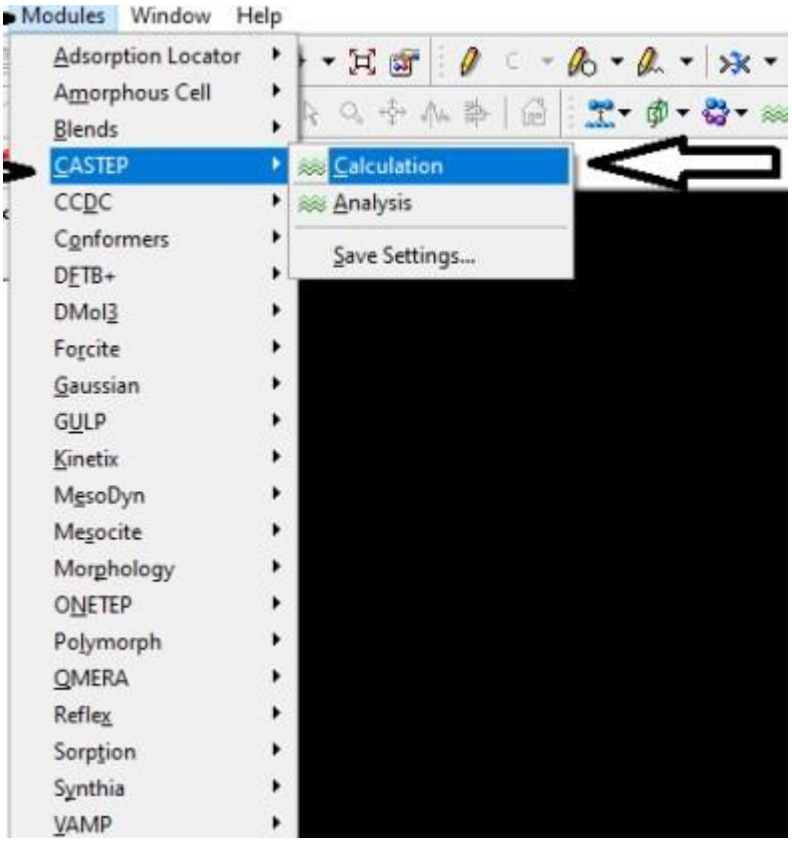
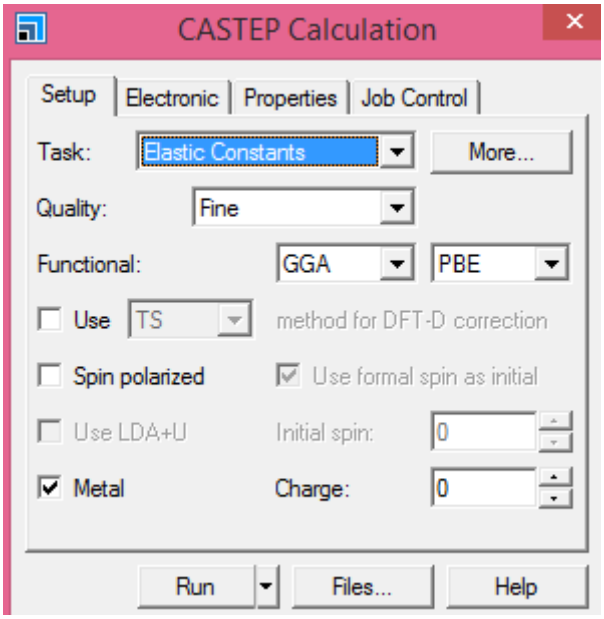


Figure4.9 : fin de l'optimisation.

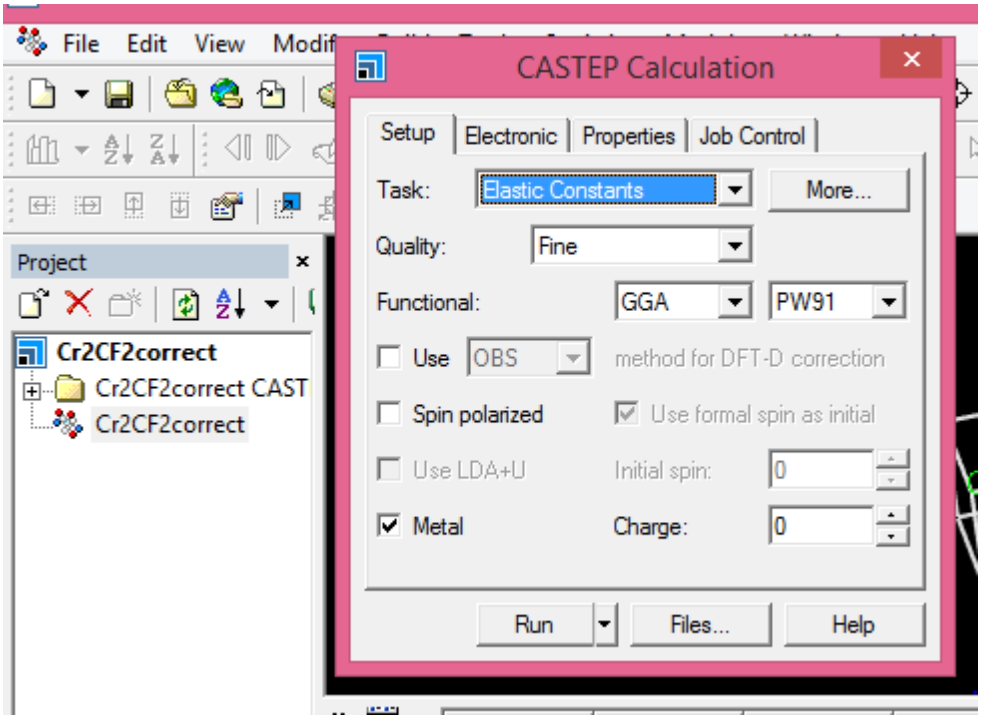
4.3.1 Calcul des tenseurs l'élasticité :



(a)



(b)



(c)

Figure4.10 : (a) choisir l'option calcul avec le code CASTEP, (b) sélectionné l'élément optimisé, (c) choisir la tâche du calcul des propriétés élastiques.

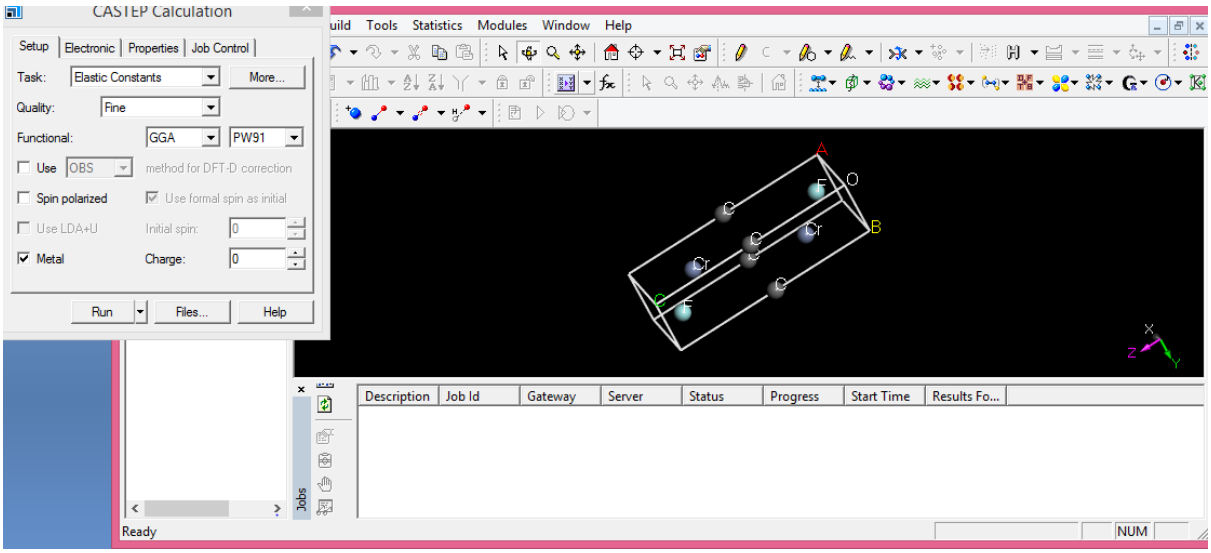


Figure4.11 :Lancement du calcul.

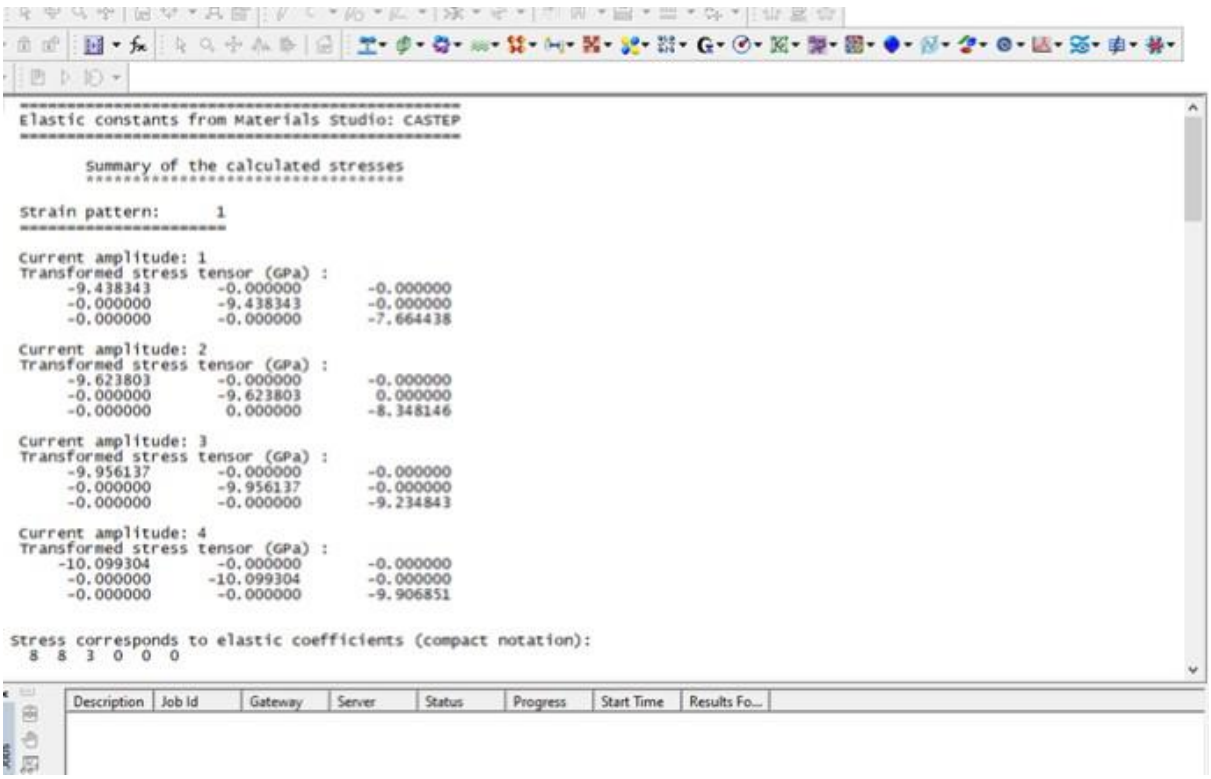
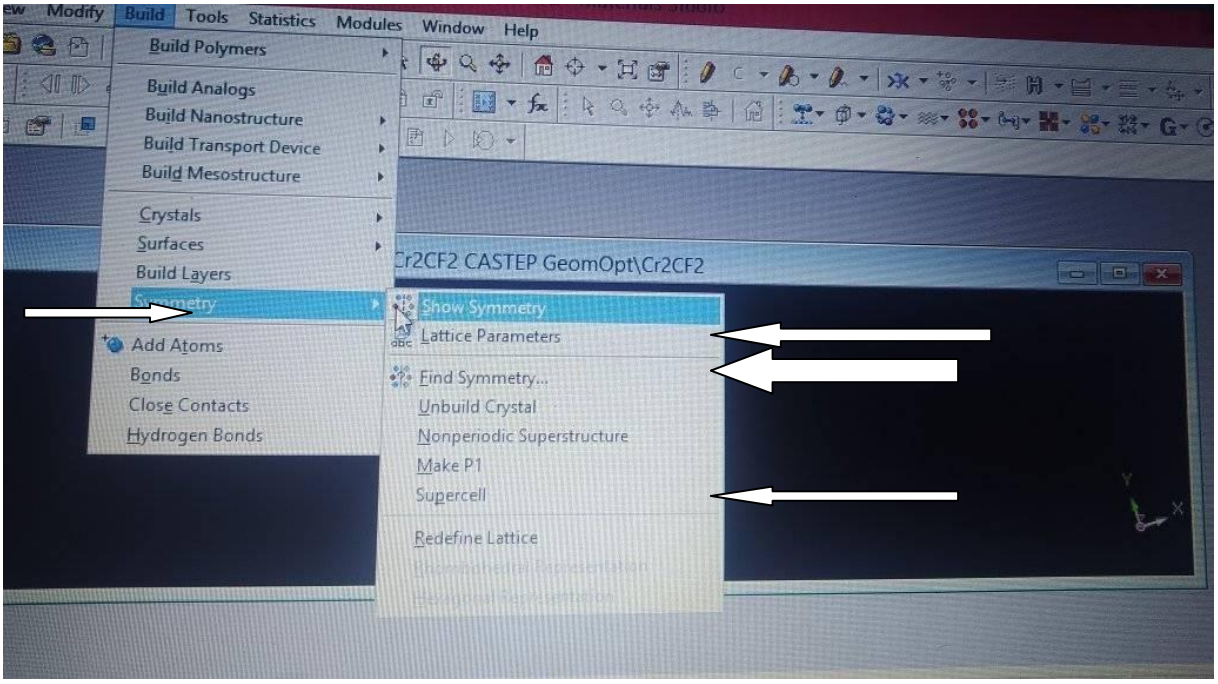
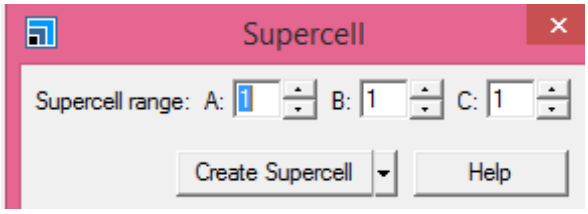


Figure 4.12 : Les résultats du calcul.

4.3.2 Augmentation de la taille de la supercellule :



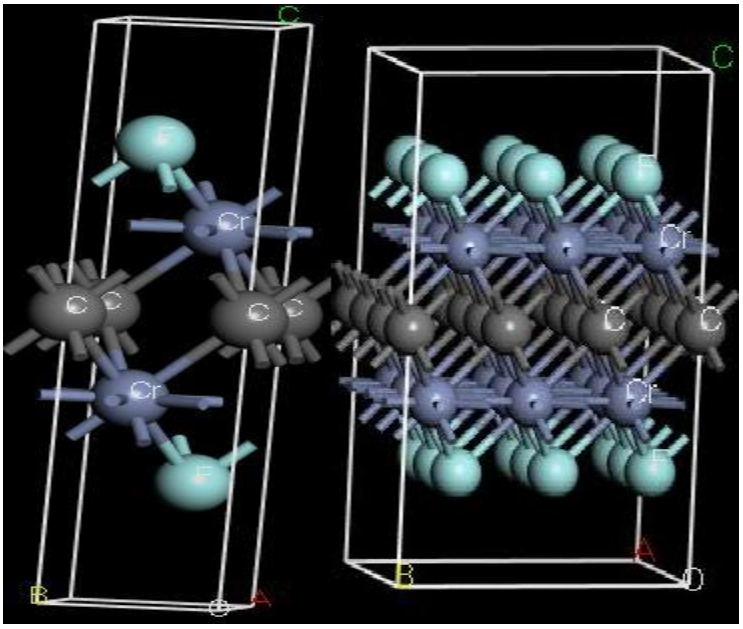
(a)



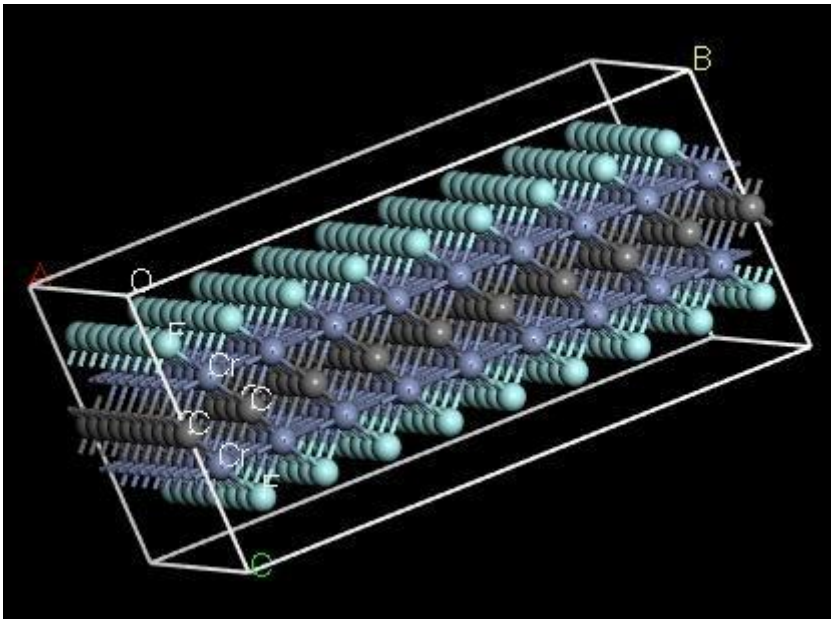
(b)

Figure4.13 :(a) construction de la super cellule, (b) modification des dimensions de la cellule.

4.3.3 Effet de la variation de la pression sur les propriétés élastiques du Cr_2CF_2 :



(a) (b)



(c)

Figure 4.14: Modèle de supercellule employé dans les calculs des propriétés structurelles et élastiques. A) Maille 1*1*1, b) maile 3*3*3, c) maille 6*6*6.

4.4 Variation des propriétés structurelles :

4.4.1 Comportement des constants du réseau lors de la compression de la supercellule sc1 :

L'optimisation géométrique de la supercellule SC1 sous la pression d'une manière croissantes donne des constantes de maille différentes sont le résultats des déformations illustrées dans le Tableau4-1.

Tableau4-1 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression.

Pression (GPa) **Paramètre de maille.**	**0**	**10**	**20**	**25**	**30**	**40**	**50**	**60**
a (A°)	3.018552	2.983485	2.951372	2.951431	2.592030	2.61387	2.56694	2.6166
C (A°)	6.555563	6.098752	5.868910	5.634288	6.744605	6.73477	6.75769	6.2790
a/c	0.460456	0.489195	0.496155	0.45060	0.48116	0.48116	0.49854	0.4167
V(A3)**	51.72945	47.01315	44.272709	43.444532	39,243439	39.8496	38.5622	37.239
d(amu/A^{**3})	2.977008	3.275658	3.478418	3.544727	3.924197	3.864499	3.993521	4.13532

Selon ce tableau, nous remarquons que pour chaque pas d'application de pression (contrainte) 25GPa, la constante a/c change, ce qui signifie que le matériau MXène Cr_2CF_2 ne conserve pas sa structure hexagonale au-delà de cette pression qui constitue la limite de son domaine élastique. C'est la raison pour laquelle nous allons se limiter dans nos calculs antérieur au domaine élastique 0-30GPa uniquement .

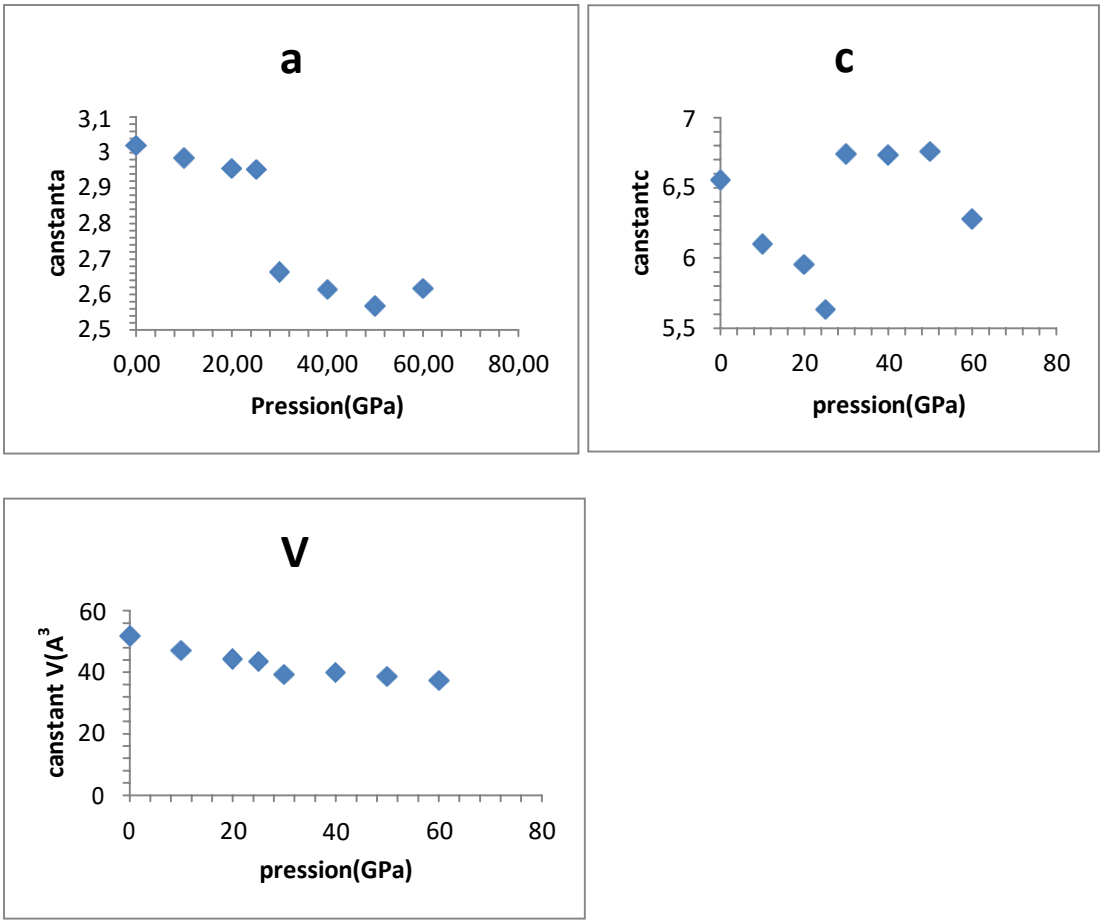


Figure 4.15 : Représentation graphique de la variation des propriétés structurales en fonction de la pression pour le SC1.

4.4.2 Variations des propriétés élastiques :

Sur la base des résultats de nos calculs, nous avons vérifié les conditions des tabilité de la structure vis-à-vis des contraintes appliquées.

Tell que :

C11-C12>0

C44>0

C33>0

C11

C11+C12+C33>0

$(C11+C12)C33-2C_{13}^{2}>0$

Nous vérifions les conditions de stabilité pour toutes les contraintes appliquées [0GPA à25GPA] confirmé, à [30GPA] on voit quel a condition de stabilité n'est pas vérifier, il ya donc une déformation notable qui rendl a structure différente de l'originale.

Nous avons rassemblé dans le Tableau 4-2 les constantes d'élasticité pour la pression 0GPa comme exemple Tableau 1-2.

Tableau 4-2: les tenseurs de contraintes pour SC1 a pression 0 GPa :

C_{ij}	C_{i1}	C_{i2}	C_{i3}	C_{i4}	C_{i5}	C_{i6}
C_{i1}	310.21360	163,93400	28,16875	1,76045	0	0
C_{i2}	163.93400	310.21360	28,16875	-1,76045	0	0
C_{i3}	28.16875	28,16875	0	280.32445	0	0
C_{i4}	1.76045	-1.7604445	0	47.00080	21,04675	1,76045
C_{i5}	0	0	0	0	21,04675	1,76045
C_{i6}	0	0	0	0	1,76045	73,13980

4.4.3 Etude de la variation des tenseurs d'élasticités du SC1 :

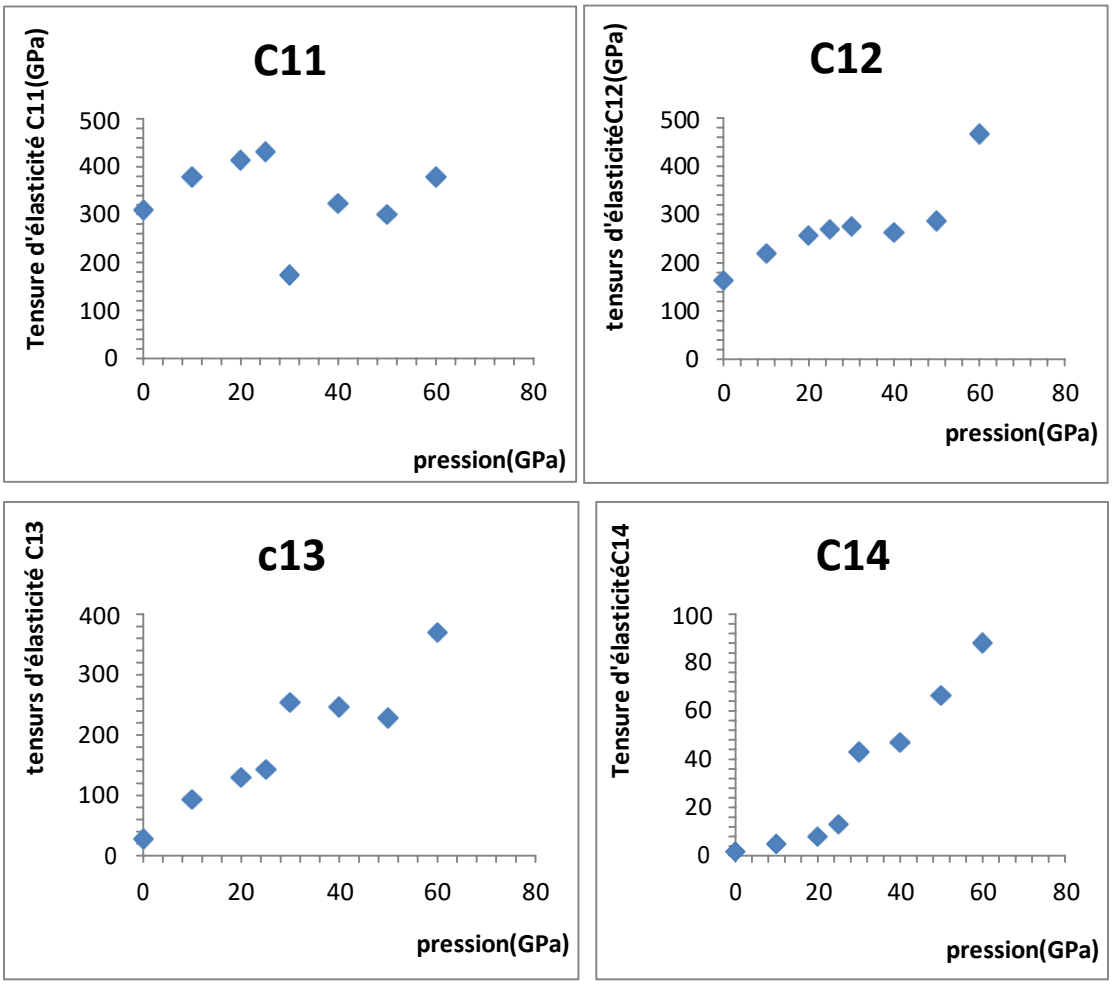
A partir des calculs DFT-GGA sur SC1, nous avons collecté 5 Constantes élastiques indépendantes Sachons que les constantes élastiques C11 et C33 représentent la raideur du matériau lors de l'application d'une contrainte unidirectionnelle le long de la direction principale. La constante C44 représente la contrainte de cisaillement appliquée à un plan parallèle à x le long de la direction y.

Tableau 4-3: Valeurs des tenseurs de contrainte pour SC1 pour différentes pressions appliquées.

C_{ij} Pression(GPa)	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{33}	C_{44}
0	**310 ,21360**	**163,93400**	**28,16875**	**1,760445**	**66,78865**	**21,04675**
10	**378,52690**	**219,46635**	**93,50235**	**4,97915**	**191,69310**	**66,37025**

20	**414,00365**	**256,63795**	**130,11545**	**8,02260**	**264,62215**	**89,47820**
25	**430,62440**	**269,22335**	**143,12230**	**13,08295**	**292,62290**	**99,97250**
30	**174,37145**	**275,11190**	**254,14555**	**42,95630**	**325,54055**	**95,93055**
40	**323,41470**	**263,33075**	**246,02620**	**46,99835**	**468,17825**	**120,55960**
50	**300,42195**	**287,35835**	**228,12395**	**66,40925**	**510,06770**	**146,09040**
60	**378,66250**	**467,71435**	**370,42585**	**88,18880**	**686,95505**	**158,55675**

D'après ce tableau on remarque que les valeurs des tenseurs C_{ij} [C_{11}jusqu'à C_{44}] augmentons linéairement en fonction de la pression jusqu'à la limite du domaine élastique du MXène .



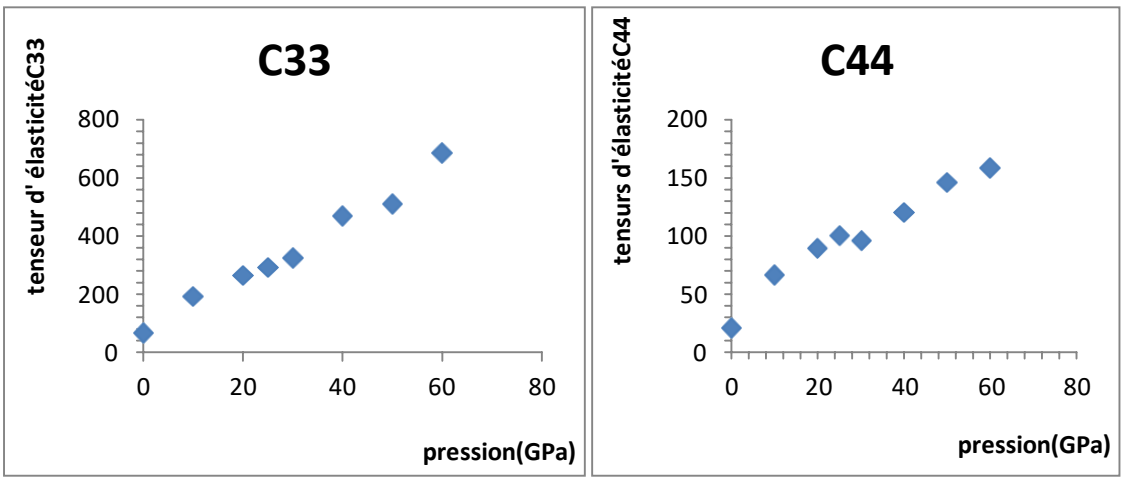


Figure4.16 : Evolution des constantes élastiques en fonction de la pression sont les représentations graphiques des tenseurs de contrainte pour SC1 à différentes pressions.

4.4.4 Effet de la variation de la pression sur les propriétés élastiques du C□$_2$CF$_2$ de SC1 :

A chaque contrainte, le code CASTEP calcule le tenseur des contraintes, plusieurs propriétés élastiques du matériau Cr_2CF_2 sont aussi calculé notamment le module de cisaillement et de compression (β, G), le coefficient de Poisson P et le module de Young E en utilisant l'approximation de Hill selon la formule suivante calculer :

$$E = \frac{9\beta G}{3\beta + G} \quad \text{et} \quad \frac{3\beta - 2G}{2(3\beta + G)} \qquad (4\text{-}1).$$

Tableau4-4 :comportement des propriétés élastique à la compression pour SC1 .

Propriétés Pression(GPa)	β(GPa)	G(GPa)	ϑ(GPa)	E(GPa)
0	93,03477	44,02439	0,29563	114,07898
10	177,84411	76,26760	0 ,31240	200,18646
20	223,81407	87,99831	0,32619	233,40516
25	240,76969	93,48594	0,32811	248,31878
30	208,02347	34,43468	0,42156	97 ,902004
40	288,40369	50,23656	0,41769	142,43925
50	285.06576	10.65821	0,4815	31,58105
60	285.06576	322,76752	1,01272	-1,29928

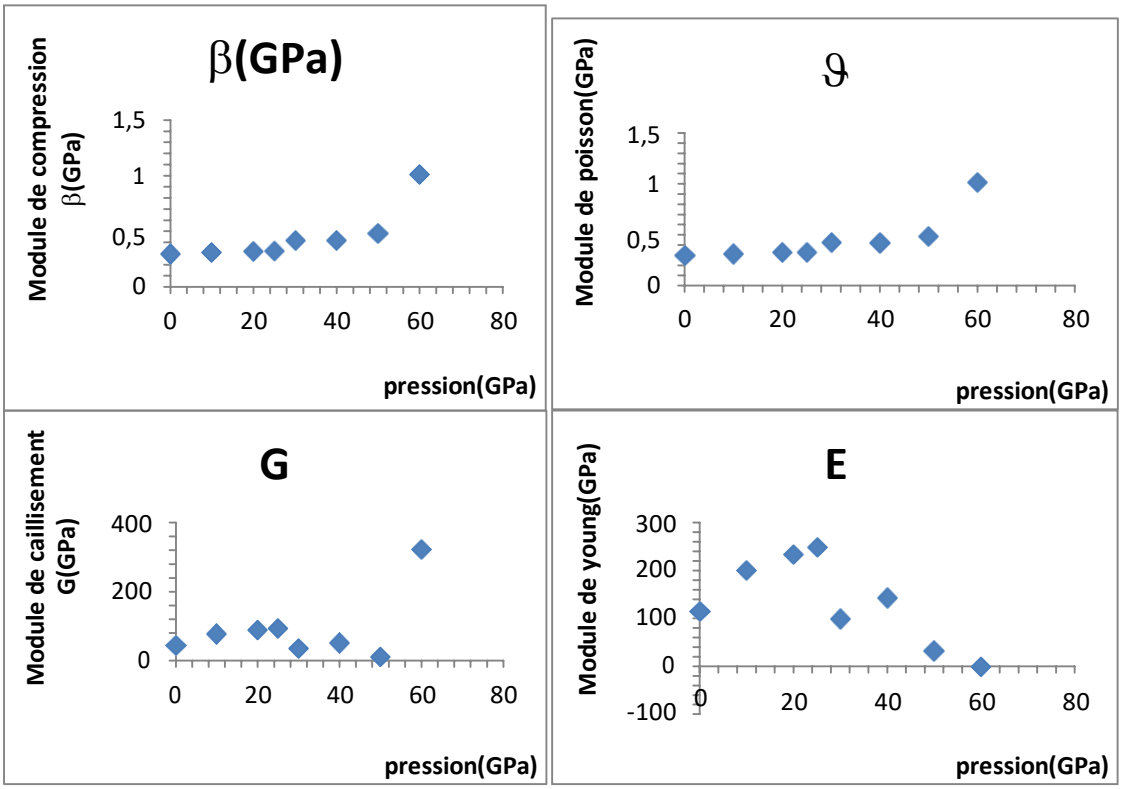


Figure 4.17: représentation graphique de la variation des propriétés élastique en fonction de la pression pour le SC1.

Le module de compression β a une valeur plus élevée par rapport au module de cisaillement G, des ortie quele matériau que nous étudions est moins résistant aux changements de volume (compression) qu'aux changements deforme (cisaillement).

Le module de Young décrit la déformation du matériau dans la direction d'application d'une contrainte mécanique uni axiale jusqu'à une pression (30 GPA) qui se déforme sans faire le retour à l'état initiale, donc il y'a une déformation plastique.

Dans notre cas, le module d'Young E augmente linéairement en fonction de la pression. On note que dans la plage de 0 à 20, le module d'Young augmente de sorte que la décroissance commence à partir de 25GPa.

Le coefficient de poisson fait partie de constantes élastique qui mesure la stabilité de cristal contre le cisaillement, d'après les calculs le coefficient augmente en fonction de la pression, et comme les valeurs sont supérieure ou égale 0.3 (limite des matériau métallique), on peut conclure que le matériau prend un comportement céramique.

4.4.5 Etude de la ductilité du cristal Cr_2CF_2 Pour SC1 :

Nous avons calculé le rapport de β/G qui représente la ductilité du MXène et reporter dans le Tableau4-5.La variation du rapport de Peugh β/G en fonction de la pression est représentée sur la Figure4.18 on constate que ce rapport est strictement supérieur à 0.57, donc il s'agit bien d'un matériaux très ductile.

Pression (GPa)	β/G
0	2 ,11325
10	2,3318
20	2,54339
25	2,57546

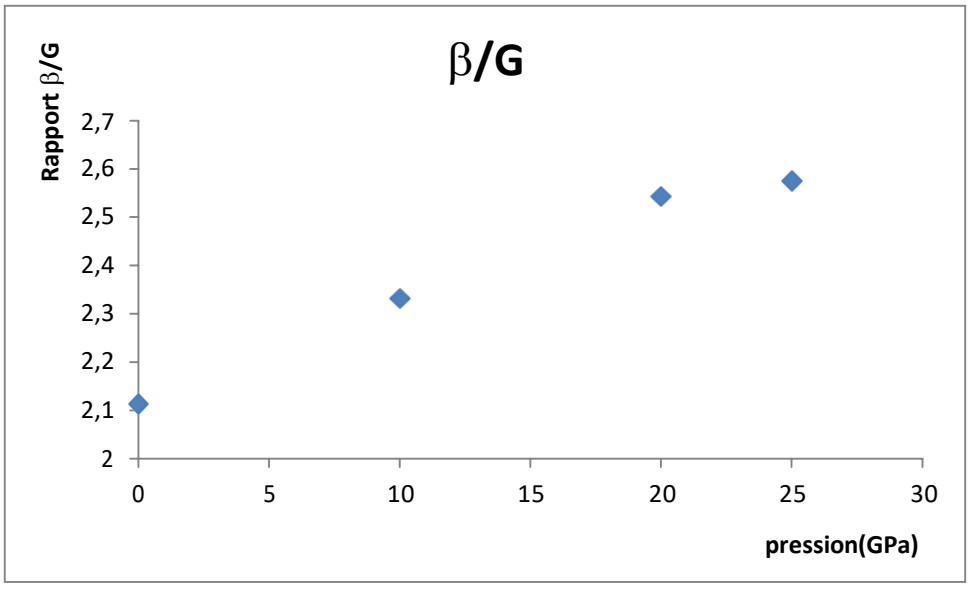


Figure4.18: Variation du rapport β/G rn fonction de la pression.

4.5 Effet de la taille de la supercellule sur les propriétés des matériaux Cr_2CF_2 :

4.5.1 Effet de la taille de la super cellule sur les Comportement des constants du réseau lors de la compression de la super cellule sc3 et sc6 :

Nous avons rassemblé les résultats de calcul des paramètres de maille en fonction de la pression dans les tableaux Tableau 4-6 et Tableau 4-7.

Tableau 4-6 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression de la super cellule sc3 :

Pression(GPa) / Paramètre de maille	0	10	20	30	40
a (A°)	3,018556	2,983503	2,954004	2,662849	2,909342
c(A°)	6,55904	6,098365	5,895409	6,737537	5,618038
a/c	0,46021	0,489229	0,50106	0,395225	0,51785
V(A**^{3})	51,740197	47,010718	44,551937	41,373735	41,181745
d (amu/A**^{3})	2,976390	3,275827	3,456617	3,722144	3,739497

Tableau 4-7 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression de la super cellule sc6 :

Pression Paramètre de maille	0	10	20	30
a	3,018556	2,9883503	2,954022	2,662624
C	6,556904	6,098365	5,895603	6,737603
a/c	0,46036351	0,490024	0,501055	0,395188
V(A**3)	51,740197	47,010718	44,553960	41,367172
d(amu/A**3)	2,976390	3,275827	3,456460	3,722734

Nous avons rapporté dans la Figure4.19 les variations de a de c et v. On constate que dans le domaine élastique du matériaux l'augmentation de la taille de la supercellule dans les deux directions x et y n'affecte pas les calculs et ils sont identiques à SC1.

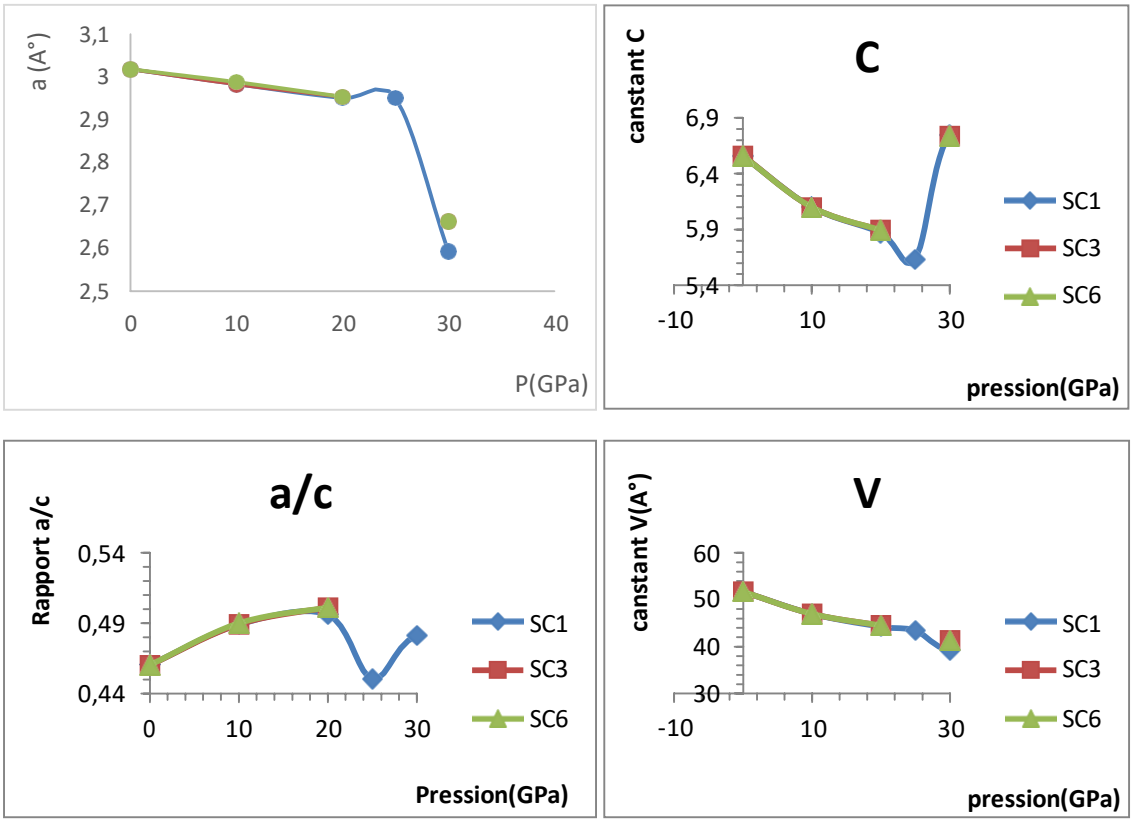


Figure4.19: variation des constantes (a) et (c) en fonction de la pression, variation du rapport (a/c)en fonction de la pression, (v) variation du volume fonction de la pression pour le SC1 et SC3 et SC6 .

4.5.2 Effet de la taille de la supercellule sur les tenseurs d'élasticités lors de la Compression :

Tableau4-8 : Valeurs des tenseurs de contraintes pour SC3 :

Tenseurs de contrainte(GPa) / pression (GPa)	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{33}	C_{44}
0	297 ,72915	149,46415	13,63755	4,27010	49,90200	21,95155
10	370,26585	211,29560	85,07040	5,10355	194,47160	65,38400
20	426,86240	265,00010	142,11695	10,44210	264,36345	89,72800
30	225,53830	305,65355	306,15025	43,51498	379,07950	92,17125
40	494,97790	334,10770	204,52990	23,34505	340,53970	143,02535

Tableau4-9 : Valeurs des tenseurs de contraintes pour SC6 :

C_{ij}	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{33}	C_{44}
0	303,67080	157,80785	21,52790	1,25030	51,19365	24,64640
10	376,50250	218,74360	92,11640	4,20420	198,04005	64,29970
20	414,52060	256,59590	129,65085	8,31435	264,80775	87,82620
30	175,22955	256,85315	252,96425	42,37730	359,52565	93,60120

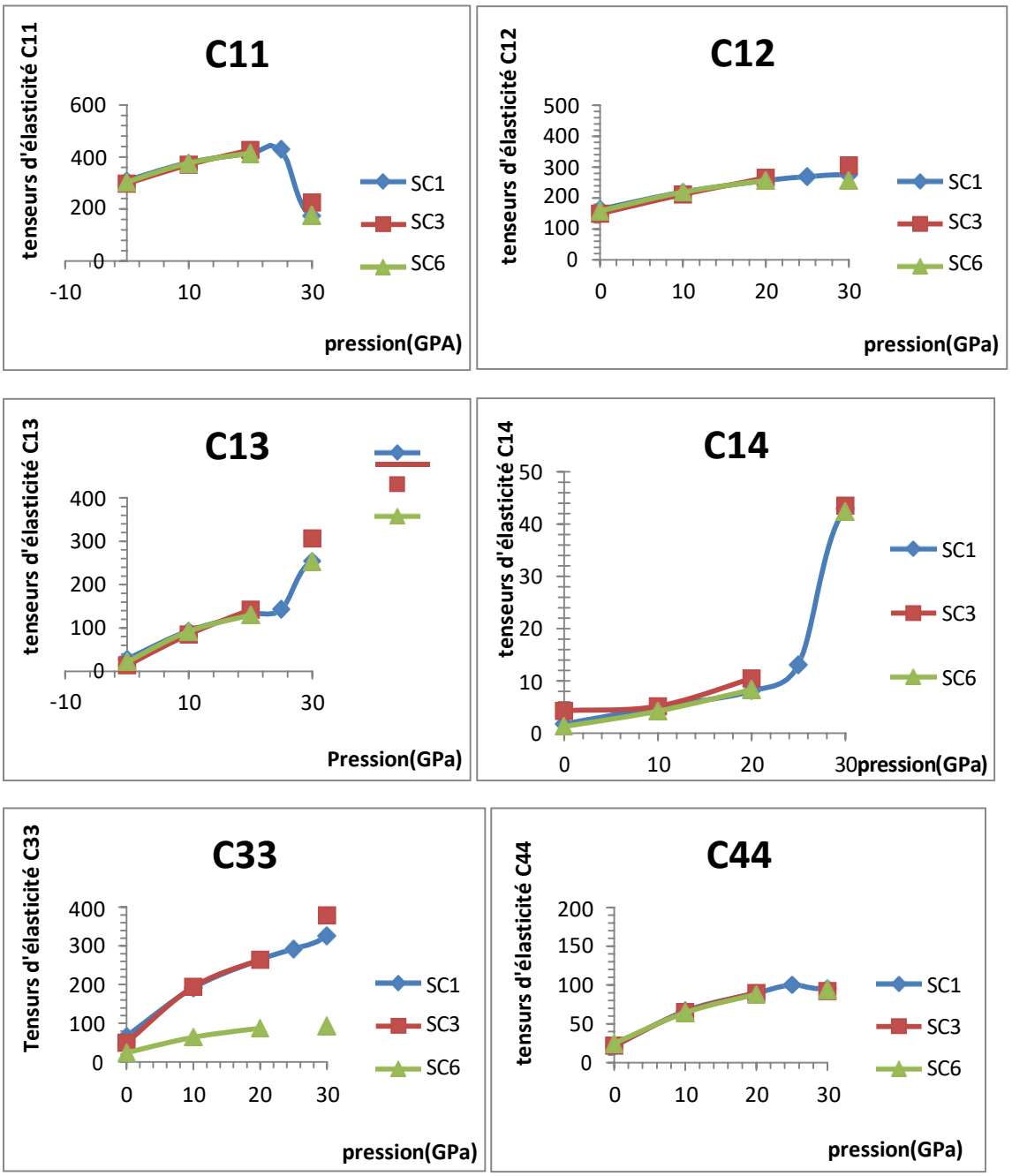


Figure4.20: les représentations des tenseurs d'élasticité pour les quatre super cellules.

Les valeurs des tenseurs d'élasticité augmentent d'une manière linéaire, ce qui indique que plus la cellule est petite le matériau possède une résistance importante à la déformation dans l'axe X et Y.il y a un compactage.

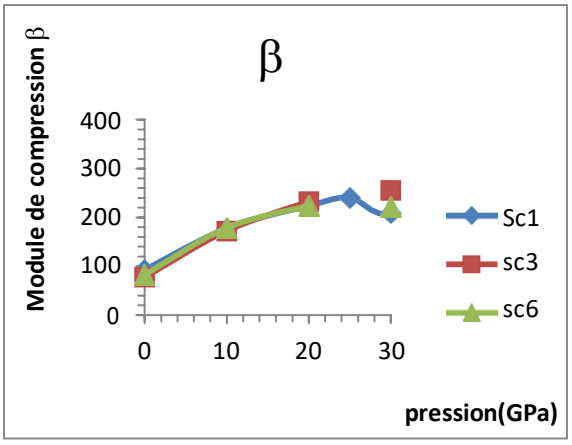
4.5.3 Effet de la taille de la supercellule sur les propriétés élastiques lors de la compression:

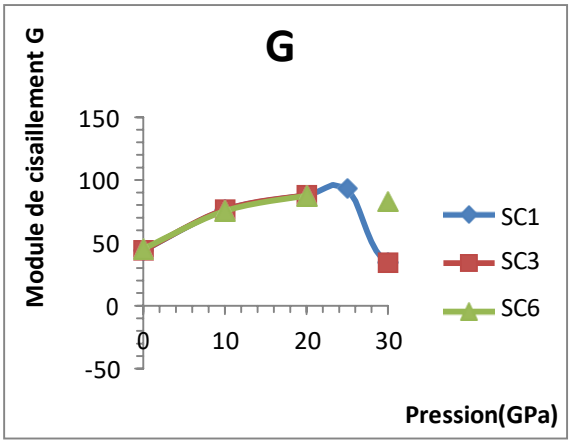
Tableau4-10 : comportement des propriétés élastique à la compression pour SC3 :

Propriétés Pression(GPa)	β(GPa)	G(GPa)	ϑ(GPa)	E(GPa)
0	77,77148	44,11632	0,26147	111,30316
10	172,57116	76,50994	0,30687	199,97643
20	232,40745	88,03891	0,33183	234,50551
30	255,51253	34,40915	0,43556	98,79273
40	300,03001	105,99486	0,34197	284,48369

Tableau4-11 : comportement des propriétés élastique à la compression pour SC6 **:**

Pression	**β(GPa)**	**G(GPa)**	**ϑ(GPa)**	**E(GPa)**
0	82,65823	45,36000	0,26805	115,03717
10	178,61764	75,36913	0,31446	198,84862
20	223,71524	87,52058	0,32696	232,27234
30	22,42938	82,97318	0,33411	221,39093





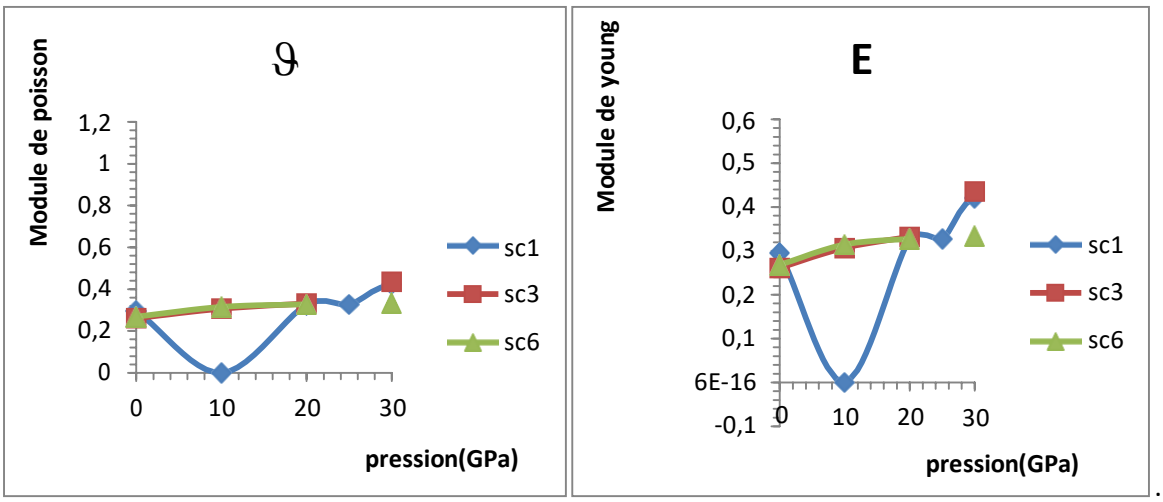


Figure 4.21: les courbes des modules de cisaillement ß, Compression G, Coefficient de poisson ʊ et de Young E, pour les quatre supercellule**.**

La taille de la supercellule n'affecte pas les modules élastiques ß, G et E du matériau, mais pour Coefficient de Poisson ʊ On voit que les courbes des supercellules SC3 et SC6 sont similaires Identique et supérieur aux autres supercellules, ce qui nous renseigne sur le matériau (phase MXEN) Plus malléable si la cellule est grande.

4.6 Evolution des paramètres de maille de la structure sans et avec la présence du F en fonction de la pression :

Afin de voir l'effet de la présence du groupe terminal eluor dans la structure du MXène, nous avons comparé les résultats de nos calculs de la structure Cr_2CF_2avec ceux de la structure Cr_2C dans le Tableau4-12. La Figure4.22 représente l'évolution des paramètres de maille en fonction de la pression. Nous constatons que l'introduction du eluor dans la structure augmente sa taille (a et c) et réduit le rapport a/c par rapport à la structure idéale.

Tableau4-12 : évolution des paramètres de maille de la structure Cr_2CF_2 en fonction de la pression .

	Propriété élastique									
	Sans F					Avec F				
Pression	**a(A°)**	**C**	**a/c**	**V(A^3)**	**d(amu/A^3)**	**a (A°)**	**C**	**a/c**	**V(A^3)**	**d(amu/A^3)**
0	2,869	4,220	0,680	30,086	3,086	3,019	6,556	0.460456	51,729	2,977
10	2,818	4,194	0,672	28,852	4,021	2,983	6,099	0,489	47,013	3,276
20	2,777	4,175	0,665	27,878	4,161	2,951	5,869	0,496	44,273	3,478
30	2,744	4,152	0,661	27,064	4,286	2,592	6,745	0,481	39,243	3,924
40	2,714	4,132	0,657	26,365	4,286	2,614	6,735	0,481	39,850	3,864

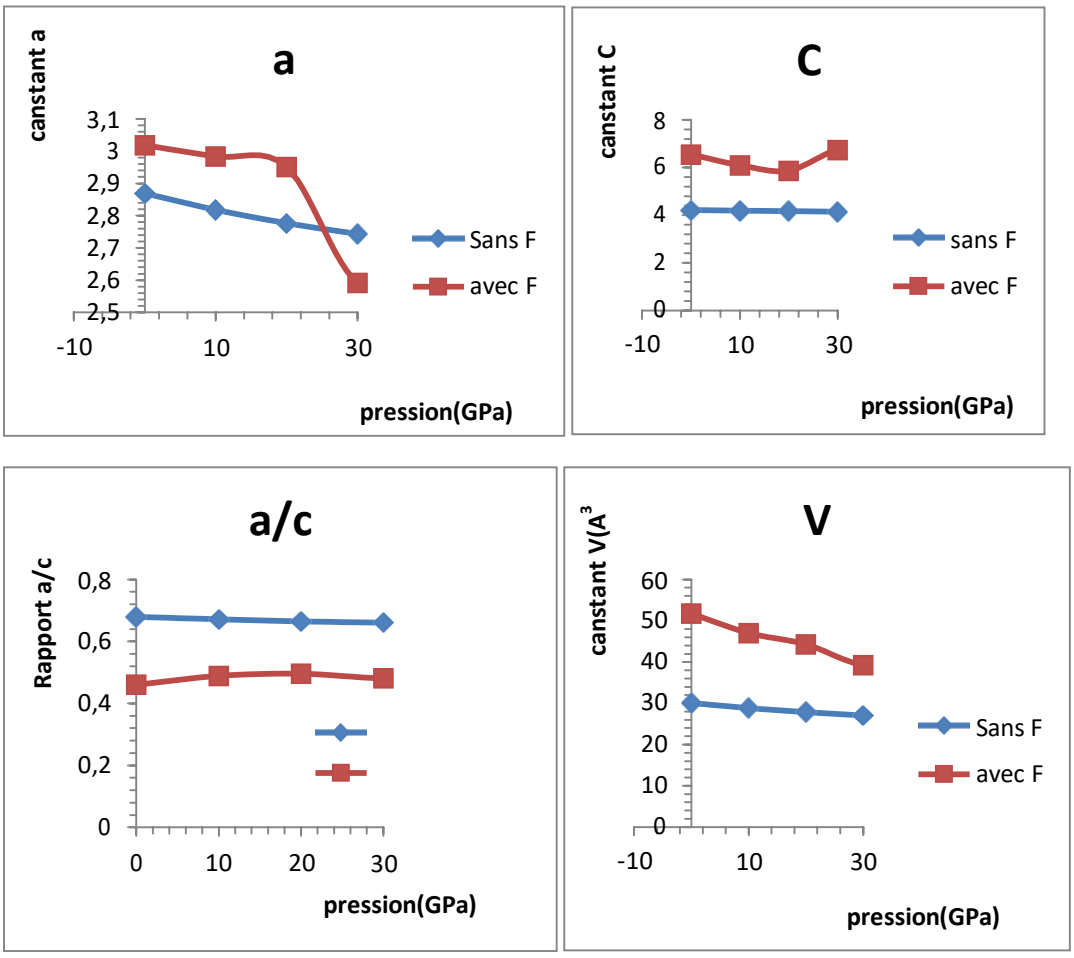


Figure4.22: Evolution des paramètres de maille en fonction de la pression(a), et (b) variation des constantes a en fonction de la pression, (c) variation du rapport a/c en fonction de la pression, (d), variation du volume en fonction de la pression pour le SC1

4.7 Comparaison des tenseurs de contraintes :

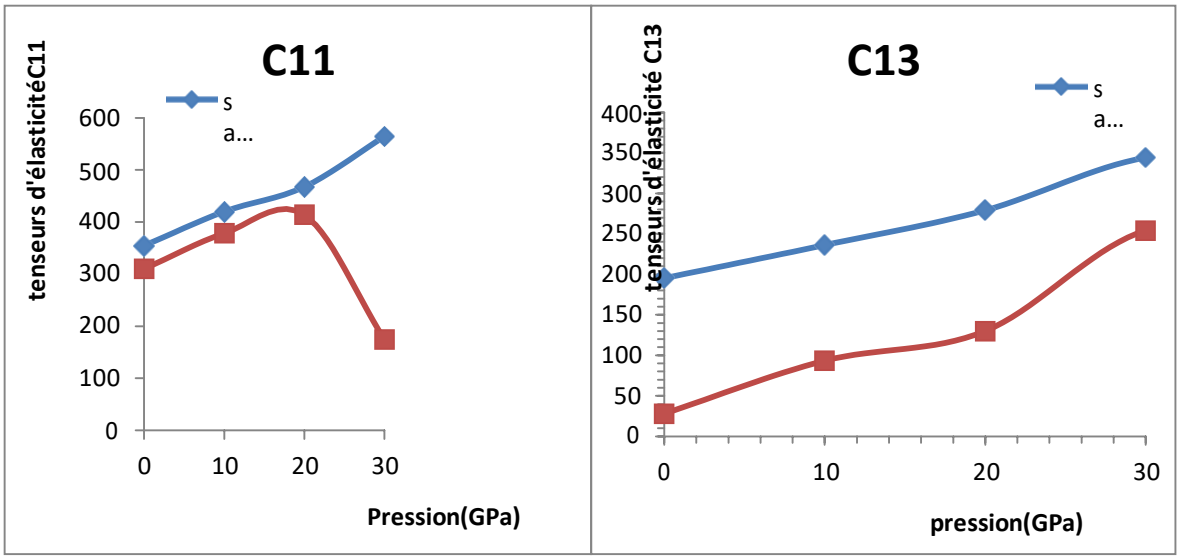
Pour voir l'effet du groupement terminal e sur les propriétés élastiques du MXène, nous avons rapporté dans le

Tableau4-13 les valeurs du tenseur de contrainte sans et avec F pour les différentes pressions appliquées.

Tableau4-13 : Valeurs des tenseurs de contraintes.

	Propriétés élastiques											
	Sans F						**Avec F**					
pression	**C_{11}**	**C_{12}**	**C_{13}**	**C_{14}**	**C_{33}**	**C_{44}**	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{33}	C_{44}
0	354 ,50555	109,10	195,39	5,52	381,63	65,66	310,21	163,93	28,17	1,76	66,79	21,05
10	419,97	127,82	236,26	-1,39	469,31	79,56	378,53	219,47	93,50	4,98	191,69	66,37
20	467,46	171,09	279,24	5,03	513,33	79,84	414,00	256,64	130,12	8,02	264,62	89,48
30	564,35	215,20	344,23	-17,36	549,66	111,58	174,37	275,11	254,15	42,96	325,54	95,93
40	585,73	219 ,1654	348,22	-21,95	595,99	118,44	323,41	263,33	246,03	47,00	468,18	120,56

Pour élucider l'effet du groupement terminal nous avons tracé cote à cote ces constantes sans et avec F dans Figure4.23. Nous remarquons une faible différence entre les deux cas pour C11, C14 et C44 et une différence notoire dans les constantes C13 et C33.



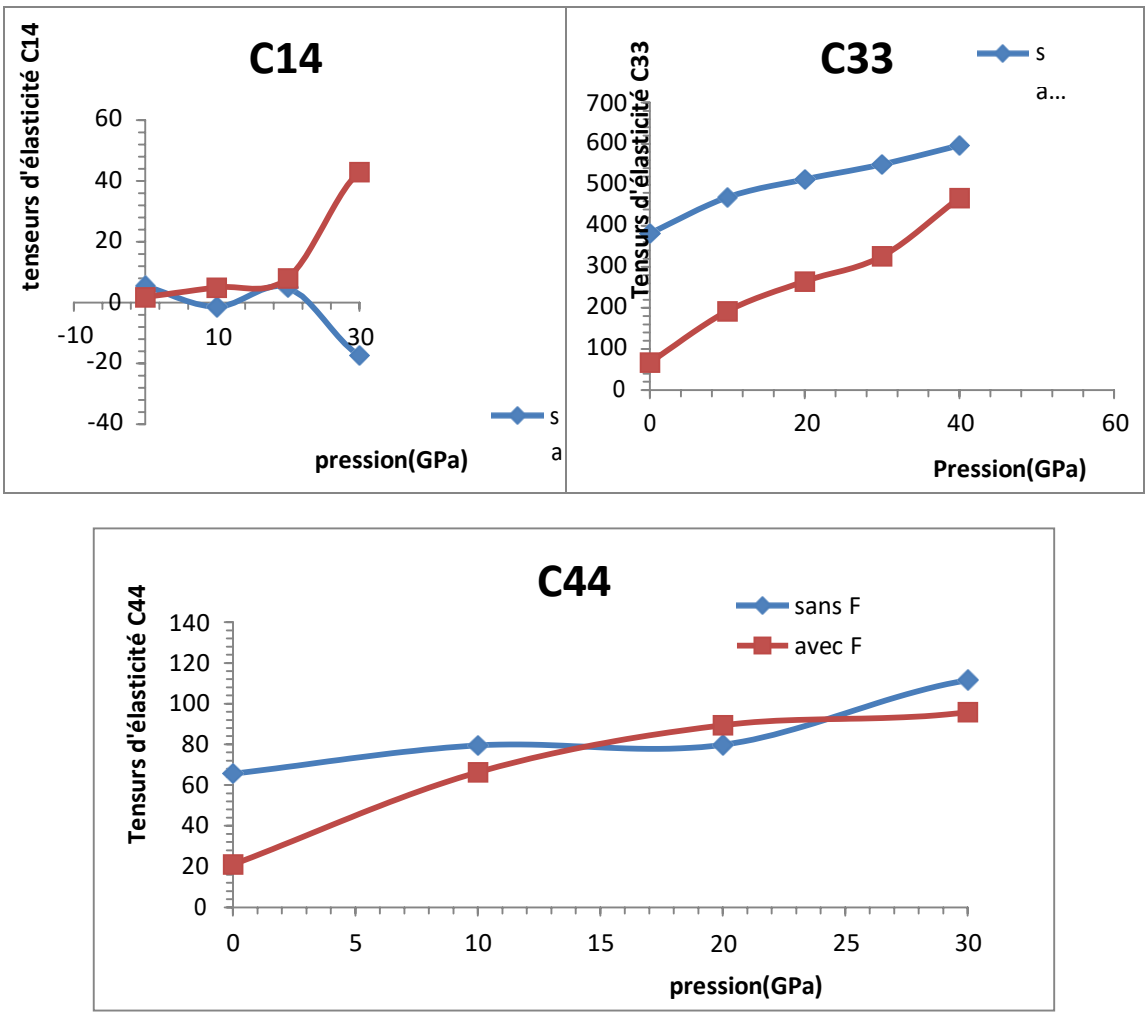


Figure4.23: les représentations des tenseurs d'élasticité.

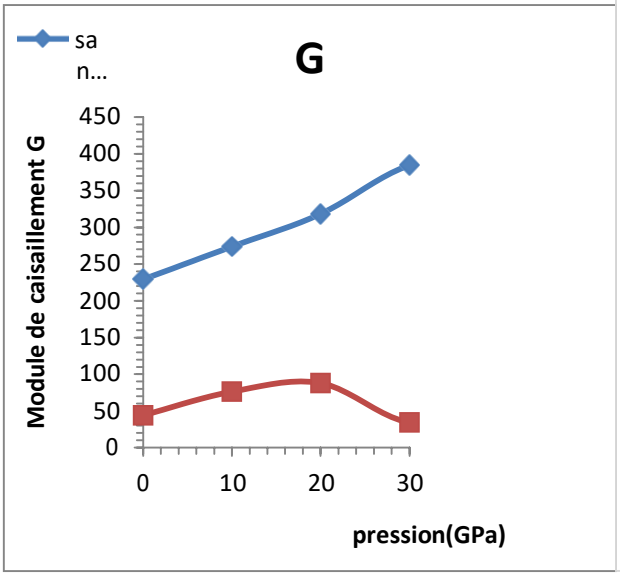
4.8 Comparaison des propriétés élastique du MXène sans et avec F à la compression :

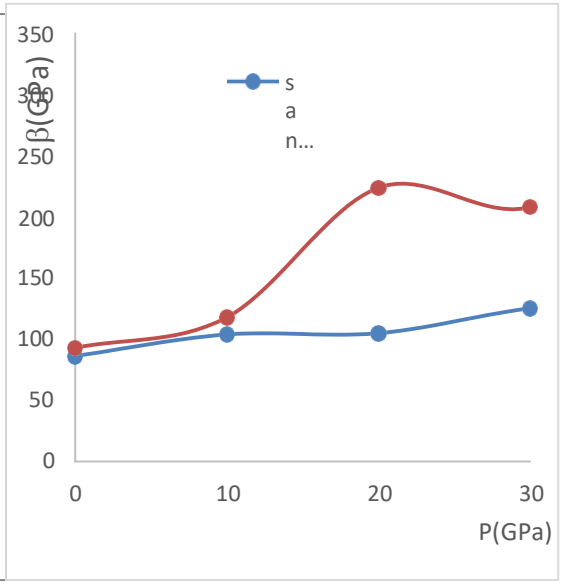
Pour mettre en relief la présence du Fluor comme groupe terminal sur les propriétés élastiques, Nous avons reporté dans le -14 Les propriétés élastiques de la structure idéale avec celle du Fluor. La

Figure4.**24** montre clairement la différence entre les deux cas. Bien qu'au niveau de la compression la différence est faible, elle est importante au niveau du module de Young et encore plus prononcée au niveau du module de cisaillement. L'introduction du eluor améliore la résistance au compactage mais elle réduit la résistance au cisaillement et à la traction.

Tableau4-14 : Valeurs des propriétés élastiques en fonction de la pression du MXène sans et avec un groupement terminal F.

Pression	Propriété élastique							
	Sans F				Avec F			
	β(ГПα)	G(GPa)	ϑ(ГПα)	E(GPa)	β(ГПα)	G(GPa)	ϑ(ГПα)	E(GPa)
0	86,22	229,06	0,33	229,81	93 ,03477	44,02	0,30	114,08
10	103,81	273,77	0,33	276,48	117,84	76,27	0,31	200,19
20	104,83	318,23	0,35	283,39	223,81	88,00	0,33	233,41
30	125,15	384,40	0,35	338,70	208,02	34,43	0,42	97,90
40	135,27	396,28	0,35	364,35	288,40	50,24	0,42	-1,30





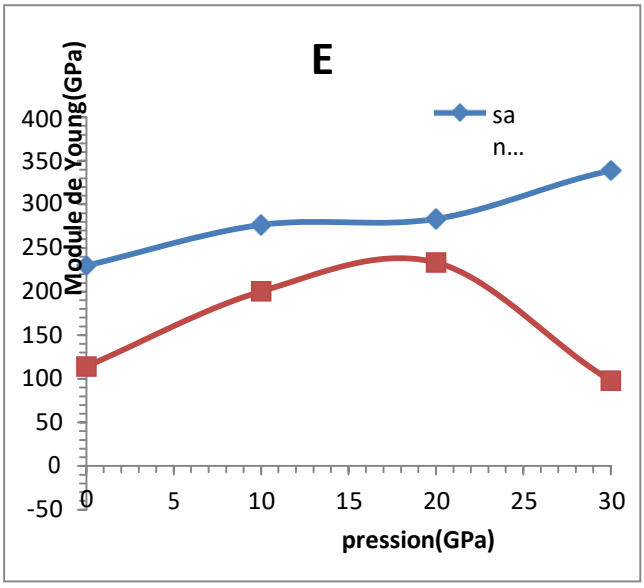


Figure4.24: Evolution des propriétés du MXène sans et avec F comme groupe terminal sont les courbes des modules de cisaillement ß, Compression G, Coefficient de poisson υ et de Young E pour les deux structures .

Conclusion générale

En conclusion, l'étude de l'effet de la nature chimique des groupements terminaux Tx sur les propriétés structurales et mécaniques du MXène a permis de mettre en évidence plusieurs observations significatives. Les résultats obtenus démontrent que la présence du groupement terminal F affecte la stabilité et les performances mécaniques du matériau MXène.

Tout d'abord, il a été constaté que les groupements terminaux F influence la structure cristalline du MXène. Il entraîne des variations dans l'arrangement atomique et la symétrie cristalline en augmentant les paramètres de maille et son volume et son interaction avec les autres atomes présents dans la maille a pu modifier la résistance à la traction, la rigidité et la résistance à la déformation du matériau.

Des études supplémentaires sont nécessaires pour comprendre pleinement les effets d'autres groupements tels que O et OH et la présence mixte de ces groupements à la surface du MXène sur les propriétés de ce matériau.

Reference bibliographique:

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science 306, 666 – 669 (2004).

[2] D. Abdenour « Etude de la transition phase MAX-Mxene et son impact sur les propriétés structurales et mécaniques d'un matériau type Cr2C » mémoire Master , université de Medea,2022.

[3] M. Naguib, V.N. Mochalin, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi. 25th anniversary article : MXenes : A new family of two-dimensional materials. Advanced Materials 26(7), 992–1005 (2014).

[4]e. MERCIER, "Phases MAX : élaboration, propriétés et applications," *Ref TIP551WEB - "ÉtgdF piopiiétés dFs métagx,"* vol.33, no. 0, 2019.

[5] L. LOUPIAS. « Synthèse et caractérisation de matériaux à base de MXène : application à l'électrolyse de l'eau en milieu alcalin ».thése de doctora, université de poitiers ,28 juin 2022.

[6]Huiyu Liu. « Two-dimensional transition metal carbides and nitrides (MXenes) based biosensing and molecular imaging ».From the journal Nanophotonics, November 14, 2022.

[7] G-Julian, J, Processing Of Max Phases « From Synthesis To Applications, Journal Of The American Ceramic Society » 104(2021) 659-690.

[8] A. Mockute, P.O.Å. Persson, F. Magnus, A.S. Ingason, S. Olafsson, L. Hultman, and J. Rosen. « Synthesis and characterization of arc deposited magnetic (Cr, Mn)2AlC MAX phase films ». Physica Status Solidi RRL ,7April2014.

[9] Z. Liu, E. Wu, J. Wang, Y. Qian, H. Xiang, X. Li, Q. Jin, G. Sun, X. Chen, J. Wang, and M. Li. « Crystal structure and formation mechanism of (Cr2/3Ti1/3)3AlC2 MAX phase ». Acta Materialia ,july 2014.

[10] w. yu, v. mauchamp, t. cabioch, d. magne, l. gence, l. piraux,v. gauthier-brunet, and s. dubois. « solid solution effects in the ti2al(CxNy) MAX phases : synthesis, microstructure, electronic structure and transport properties ». Acta Materialia ,November2014.

[11] T. Cabioch, P. Eklund, V. Mauchamp, M. Jaouen, and M.W. Barsoum. « Tailoring of the thermal expansion of Cr2(Alx, Ge1-x)C phases ». Journal of the European Ceramic,April 2013.

[12] m. bugnet. « synthèse, structure électronique et comportement sous irradiation aux ions de films minces de phases max ». thèse de doctorat université de Poitiers,7Aout 2006.

[13] Gonzalez-Julian, Jesus. « Processing Of Max Phases: From Synthesis To Applications ». Journal Of The American Ceramic Society, 29October2020.

[14] M.W. Barsoum. « MAX Phases : properties of machinable ternary carbides and nitrides ». Wiley,properties of Materials , November 2013.

[15] D. Magne. « Synthèse Et Structure Electronique De Phases Max Et Mxènes ».these de doctorat 'université De Poitier,25 mai 2016.

[16] M. Naguib, O. Mashtalir, J. Carle, V. Presser, J. Lu, L. Hultman, Y. Gogotsi, and M.W. Barsoum. « Two-dimensional transition metal carbides ». National Library of Medicine,13 February2012.

[17]B. Anasori, Y. Xie, M. Beidaghi, J. Lu, B.C. Hosler, L. Hultman, P.R.C. Kent, Y. Gogotsi, and M.W. Barsoum. « *Two-dimensional, ordered, double transition metals carbides (MXenes) »*. ACS Publications,24july2015.

- [18] J. Zhu , En Ha « Recent advance in MXenes: A promising 2D material for catalysis, sensor and chemical adsorption ». The Hong Kong Polytechnic UniversityDepartment of Applied Biology and Chemical Technolog,2017.

[19] Sun , Y.Li et B Wong , X jiang , M Katsnelson , P Korzhavyi , O Eriksson and I Di Marco. « A new 2D monolayer BiXene, M2C (M = Mo, Tc, Os) ». from the journal :Nanoscale,2016.

[20] C. Shi , M. Beidaghi , M. Naguib , O.shtalir , Y. Gogotsi, and S. J. L. Billinge. « Structure of nanocrystalline Ti3 C2 MXeneusing atomic pair distribution function ». Phys Rev Lett National Library of Medicine,26 Mar2016.

[21]M. J. Ghidiu. « Ions in MXene: Characterization and Control of Interlayer Cations and their Effects on Structure and Properties of 2D Transition Metal Carbides ».thesis (Ph.D.)-Drexel University, 2018.

[22]D. M. Moore and R. C. Reynolds Jr. « X-Ray Diffraction and the Identification and Analysis of Clay Minerals-Oxford ». UniversityPress, 1989.

[23]M. Ghidiu , J. Halim ,S. Kota , D. Bish e,Y. Gogotsi, and M. W. Barsoum. « Ion-Exchange and Cation Solvation Reactions inTi3C2MXene ». Linköping University Electronic Press , 2016.

[24]S. Célérier *et al.* « Hydration of Ti 3 C 2 T x MXene: An Interstratification Process with Major Implications on Physical Properties ». *Article.copyright American Chemical Society*,20December2018.

[25]M. Naguib , J. Halim , J. Lu , K.M. Cook , L. Hultman ,Y. Gogotsi, and M.W. Barsoum. « *New two-dimensional niobium and vanadium carbides as promising material ».Highlighting excellence in agriculturale research from India,8October2013.*

[26]H .Jian, Z. Jing « Hydropyridylation of α,β-Unsaturated Esters through Electroreduction of 4-Cyanopyridine »Article, April 6, 2022.

[27]X.Zhang, M . Paice, J. Deng « Self-Supported Construction of Three-Dimensional MoS_2 Hierarchical Nanospheres with Tunable High-Performance Microwave Absorption in Broadband »Article, September 6, 2016.

[28]B. Hiba .« ETUDE DES PROPRIETES STRUCTURALES ET ELASTIQUES DU MATERIAU PHASE MAX Cr2AlC ».mémoire Master,université de Medea,2021.

[29]G.Gao, G. Ding, K. Yao, M. Wu , M Qian « Monolayer MXenes: promising half-metals and spin gapless semiconductors »Article,2016.

[30]Khazaei M, Arai M, Sasaki T, Chung C Y, Venkataramanan N S, Estili M, Sakka Y and Kawazoe Y « Novel electronic and magnetic properties of two dimonsional transition metal carbides and nitrid »view,,universty of tehran,2013.

[31]L.H.Thomas . « the calculation of atomic fields ».Published Online By Cambridage University Press, 24 October2008.

[32]M. A. Meyers And K. K. Chawla. « Mechanical Behavior Of Materials ». Cambridage University Press,8 December2008.

[33]C. kittel(trad. Nathalie Bardou, Évelyne Kolb). « *PhysiqgF dF l'état solidF* ».Le chapitre 18,Nonostructure a été écrit par le professeur Paul McEuen de l université Cornell , 1998 .

[34]X. Zha *et al.* « Role of the surface effect on the structural , electronic and mechanical properties of the carbide MXenes ».A Letters journal exploring the frontiers of physics,17August2015.

[35]B. Anasori *et al.* « Control of electronic properties of 2D carbides (MXenes) by manipulating their transition metal layers ».From the journal : *Nanoscale Horizons*, 2016.

[36]L. Li. « Lattice dynamics and electronic structures of Ti3C2O2 and Mo2TiC2O2 (MXenes): The effect of Mo substitution ». *Computational Material Science*, November2016

[37]H. Lashgari et M. R. Abolhassani et A. Boochani, S. M. Elahi, and J. Khodadadi,. « Electronic and optical properties of 2D graphene-like compounds titanium carbides and nitrides: DFT calculations ». *Solid State Communication* ,October2014

[38]M. J. Ghidiu. « Ions in MXene: Characterization and Control of Interlayer Cations and their Effects on Structure andProperties of 2D Transition Metal Carbides ». Drexel University, 2018.

[39]L. Jin, C . Zhang, X. Zhou, Zhen. « Recent Advances In Mxene: Preparation, Properties, And Applications, Frontiers Of Physics ».springer LinK, 13 june2015.