

Ecole Doctorale : SMRE

Laboratoire : UCCS

Discipline : Chimie

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : ENDARA Diana

N° d'ordre : 40858

**JURY :**

**Directeur de Thèse** : HUVE Marielle, *Professeur, UCCS, Lille*

**Rapporteurs** : MARTIN Christine, *Directeur de Recherche CNRS, CRISMAT, Caen*  
MERCIER Nicolas, *Professeur, MOLTECH ANJOU, Université d'Angers*

**Membres** : COLMONT Marie, *Maitre de Conférence, UCCS, Lille*  
MENTRE Olivier, *Directeur de Recherche CNRS, UCCS, Lille*

**TITRE DE LA THESE :**

« Design » et approche prédictive de nouveaux oxyphosphates de bismuth

**RESUME :**

Ce travail a consisté, en appliquant une approche prédictive originale, à prédire et à élaborer de nouveaux composés inorganiques dans le système  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5\text{-MO}_x$  (M est un cation ou un mélange de cations de natures diverses). La rationalisation systématique des structures déjà existantes a permis de déduire que ces phases résultaient d'un point de vue structural, de l'organisation d'unités structurales basées sur des tétraèdres  $\text{O}(\text{Bi}, \text{M})_4$  formant des rubans ou des colonnes. Il s'agissait de diversifier les unités de construction, taille et arrangement de façon à élargir les possibilités d'assemblage. Des règles empiriques ont été établies permettant la prédiction réelle et rationnelle de nouvelles structures inorganiques complexes. Parmi celles-ci, des matériaux non centro-symétriques ont été obtenus. La présence de la paire libre de  $\text{Bi}^{3+}$  dans ces composés induit de fortes propriétés d'optique non-linéaires qui ont été testées. Ce travail inclut la description, la validation, l'élaboration, la structure et les propriétés des nouveaux oxyphosphates de bismuth.

**Mots clés** : *oxyphosphates, bismuth, anti-tétraèdres, prédiction, désordre, non-centrosymétrique, unités structurales, propriétés non linéaires, rationalisation.*

**Soutenance le 25 Juillet 2012 à 10H00 Heures**  
**Lieu Amphi Petit (ENSCL)**