

**HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES
UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**

N° d'ordre : 42183

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : KABBOUR HOURIA

Ecole doctorale : EDSMRE

Laboratoire/Etablissement : Unité de Catalyse et de Chimie du Solide

Discipline : Sciences de Matériaux

JURY :

- Garant de l'habilitation : Dr. Olivier Mentré
- Rapporteurs : Dr. Florent Boucher, Dr. Alain Demourgues, Dr. Franck Tessier
- Examineurs : Prof. Lionel Montagne, Dr. Pascal Roussel

SOUTENANCE : (9 Novembre 2016, 14h30, ENSCL)

TITRE DE L'HDR :

**Vers de Nouvelles Topologies Inorganiques Fonctionnelles de Basse Dimension :
Approche Expérimentale et Théorique**

RESUME :

La recherche exploratoire de nouvelles phases inorganiques fonctionnelles est au cœur de ces travaux. Un aperçu avec quelques exemples remarquables de prédiction, synthèse et modulation des propriétés (variées) de ces composés, est donné. Une démarche impliquant la synergie entre travail expérimental et simulations DFT est largement favorisée. Une approche modulaire complète cette synergie et permet à la fois de cibler de nouvelles phases ainsi qu'une meilleure compréhension des relations structure–propriétés. Ainsi, l'approche globale de ces travaux est illustrée autour de plusieurs thèmes. La recherche et l'étude de nouvelles phases assistées par des calculs théoriques ont été, pour une large part, axée sur des systèmes magnétiques de basse dimension (1D, 2D), représentés dans ce mémoire par la famille des pérovskites hexagonales ainsi que par des phases oxo-phosphates notamment. Des modèles de composés à entités magnétiques de basse dimension avec des comportements/structures inusuels sont présentés. Une chimie des blocs a permis une description *rationnelle* de leurs propriétés. L'élaboration de nouveaux systèmes à caractère 2D par le biais de méthodes de chimie topotactique est aussi développée. Des modifications de précurseurs oxydes permettent ainsi d'altérer les propriétés électroniques/magnétiques ou encore de générer des propriétés catalytiques. Un dernier thème concerne le développement de nouvelles phases de basse dimension en mettant à profit les avantages de systèmes à anions mixtes en termes de structurations originales et de contrôle des propriétés.

**HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES
UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**

N° order: 42183

NAME/SURNAME OF THE CANDIDATE: KABBOUR HOURIA

Doctoral School: EDSMRE
Laboratory/Institution : Unité de Catalyse et de Chimie du Solide
Discipline: Materials Sciences

HDR COMMITTEE:

- Supervisor: Dr. Olivier Mentré
- Referees: Dr. Florent Boucher, Dr. Alain Demourgues, Dr. Franck Tessier
- Examiners: Prof. Lionel Montagne, Dr. Pascal Roussel

DEFENSE: (November 9th, 2016, 2h30 PM, ENSCL)

TITLE OF THE HDR:

Towards New Inorganic Low Dimension and Functional Topologies: Experimental and Theoretical Approach

ABSTRACT :

The exploratory research of new functional inorganic phases constitutes the core of the present work. An overview with some remarkable examples of prediction, synthesis and various properties tuning of such compounds, is given. A procedure involving the synergy between experimental work and DFT simulations is in general favored. A modular approach completes the later and allows both targeting new phases and a better structure-properties comprehension. In this way, the global approach of this work is illustrated through several aspects. The search and study of new phases assisted by theoretical calculations have been, for a large part, focused on low dimension magnetic systems (1D, 2D), represented in this manuscript by the hexagonal Perovskites family as well as oxo-phosphates phases among others. Models of compounds based on low dimension magnetic entities with unusual behaviors/structures are presented. From a *blocks chemistry*, a *rational* description of their properties is possible. The elaboration of new 2D-character systems via topochemical methods is also developed. The modifications of oxides precursors enable in this manner to alter electronic/magnetic properties or to generate catalytic properties for instance. A last aspect concerns the development of new low dimension phases by taking advantage of mixed anions systems in terms of original structuration and properties control.