

Etude d'hydroxydes doubles lamellaires par spectroscopies vibrationnelles

Cédric Carteret¹, Erwan André¹

¹ Laboratoire de Chimie Physique et Microbiologie pour les Matériaux et l'Environnement, CNRS – Université de Lorraine, Nancy, France

Les Hydroxydes Double Lamellaires (HDL) sont des hydroxydes lamellaires naturels ou synthétiques, constitués de feuillets brucitiques contenant des cations métalliques M^{II} (Mg, Fe, Co, Ni, Cu, Zn,...) et M^{III} (Al, Cr, Fe, Ga...) placés au centre d'octaèdres d'ions hydroxydes [1-2]. La présence des cations trivalents M^{III} induit une charge positive des feuillets des HDL qui est compensée par des anions A^{n-} , solvatés par des molécules d'eau, se plaçant dans l'espace interfoliaire. Ces composés s'écrivent sous la formule générale : $[M^{II}_{(1-x)}M^{III}_x(OH)_2]^{x+} \cdot [(x/n) A^{n-}, m H_2O]^{x-}$ où x représente la charge nette du feuillet. La structure des phases HDL et leurs capacités d'échange autorisent l'introduction d'une grande variété d'anions dans l'espace interfoliaire, de petits anions inorganiques (Cl^- , CO_3^{2-} , NO_3^- ...) à des espèces organiques de plus grandes dimensions (acides aminés, cyclodextrines, ...), ce qui multiplie encore les possibilités de composition chimique. Ces matériaux sont étudiés notamment pour leurs applications en tant qu'échangeurs anioniques, catalyseurs, matériaux d'électrodes,...

Les spectroscopies vibrationnelles (infrarouge et Raman) sont des outils précieux pour l'étude des propriétés structurales et de la réactivité de ces matériaux. En effet, les signatures vibrationnelles des matériaux synthétisés permettent de sonder, à l'échelle moléculaire, la structure, la dynamique, et les interactions entre les feuillets et les espèces insérées dans l'espace interfoliaire. Mais pour cela, il faut combiner et exploiter les informations obtenues par spectroscopie Raman et par spectroscopie infrarouge sur une large gamme spectrale (du lointain au proche IR), être capable d'isoler les signatures caractéristiques des différents constituants du matériau (feuillet et espèce intercalées), et effectuer des études *in situ*, en conditions contrôlées (pression, température, humidité). L'interprétation des données expérimentales, et en particulier des spectres vibrationnels, bénéficie de l'apport des méthodes de simulation quantiques.

Cette communication se focalisera sur le suivi par spectroscopies vibrationnelles expérimentales et théoriques de l'hydratation (déshydratation) d'hydroxydes doubles lamellaires (HDL) intercalés par différents anions inorganiques, et sur la dynamique d'échange avec le CO_2 atmosphérique [3-4].

[1] V. Rives *Layered double hydroxide: Present and Future*, Nova publisher, 2001.

[2] X. Duan, D. G. Evans *Layered Double Hydroxides*, Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co., (2006).

[3] S. Ishihara et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 135 (2013), 18040.

[4] A. Di Bitetto, G. Kervern, E. André, P. Durand, C. Carteret, *J. Phys. Chem. C* 121 (2017) 6104.