

## UNITE THEMATIQUE D'ENSEIGNEMENT ET DE RECHERCHE Physique

### PRESENTATION DE L'EQUIPE

#### Responsable de l'équipe :

- **Hervé Martinez**, Professeur des Universités à l'Ecole Centrale Casablanca.

#### Membres permanents de l'équipe :

- **Belhboub Anouar**, Enseignant Chercheur en Physique. Il a préparé son doctorat en physique au sein du laboratoire Charles Coulomb de l'Université de Montpellier. Par la suite, il a intégré le laboratoire CEISAM de l'Université de Nantes en tant que chercheur assistant. Pour une deuxième expérience de chercheur assistant, il a travaillé au sein du Centre Interdisciplinaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux de l'Université Paul Sabatier de Toulouse où il a aussi assuré des missions d'enseignement en tant qu'enseignant vacataire. Il est l'auteur de plusieurs publications portant sur l'utilisation de méthodes théoriques pour la modélisation des systèmes atomiques et moléculaires.
- **Bouhani Hamza** est titulaire d'un double doctorat en physique des matériaux spécialisés dans les matériaux magnétocaloriques de l'Université de Lorraine et de l'Université Mohammed V de Rabat. Ses recherches visent à comprendre l'interaction entre le magnétisme et le réseau qui donne naissance à des phénomènes émergents tels que l'effet magnétocalorique dans le but ultime de concevoir de nouveaux matériaux magnétiques fonctionnels pour des applications technologiques. Il a publié sur les matériaux magnétiques plusieurs articles évalués par des pairs dans des revues réputées.
- **Ait Labyab Nadia** est titulaire d'un doctorat de l'UIT (Ibn Tofail University, Kenitra-Morocco) en physique des matériaux et énergie. Les domaines d'expertise du Dr Ait Labyad comprennent l'étude des dispositifs spintroniques pour le stockage et transfert d'énergie dans des films minces basés sur des alliages métalliques de transition (Modélisation des propriétés des nanomatériaux par des approches numériques). Elle aborde également la conception théorique de nouvelles structures inorgano-organiques basées sur des grappes NbO (par simulation DFT) utilisant les logiciels turbomole 6.4 et gaussian 09 pour le traitement du cancer pour des applications biomédicales. Récemment, elle a entrepris la conception théorique de nouvelles structures du phosphore, matériaux pour le stockage de l'énergie par DFT et dynamique moléculaire.
- **Martinez Hervé** est Ingénieur en Génie Physique des Matériaux, diplômé de l'Institut National des Sciences Appliquées (INSA) de Toulouse (1992), poursuivi par un Master Recherche en Physique du Solide à l'Université Paul Sabatier (1993). Titulaire d'un Doctorat de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA) en 1996 dans la spécialité Chimie-Physique, il obtient un poste de Maître de conférences en 1998 après une période post doctorale aux USA (Carnegie Mellon University - Pittsburgh and Lawrence Berkeley Laboratory – Berkeley) et soutient son habilitation à diriger des recherches en 2004. Il est professeur des universités en 2008 et promu à la classe exceptionnelle en 2016. Au cours de sa carrière, il a occupé différentes fonctions d'administration de la recherche et de l'enseignement (Directeur d'unité CNRS, Directeur de la Recherche UPPA périmètre Scientifique, Directeur de département). Il est aujourd'hui Directeur de la recherche à Centrale Casablanca et également Directeur d'une Fédération de Recherche « Spectroscopies de Photoémission » CNRS qui regroupe 45 laboratoires sur le territoire Français. Il est titulaire d'une Chaire de recherche avec l'Université de Carnegie Mellon University (Pittsburgh – USA). Ses thématiques de recherche concernent essentiellement la chimie des surfaces et des interfaces de matériaux, appliqués à différents domaines : ♣ les matériaux pour le stockage de l'énergie (batteries Li-Na-K ions) ♣ Les phénomènes de corrosion et protection d'alliages métalliques ♣ Les nanomatériaux avec des applications liées à la santé.

Il est l'auteur de plus de 170 publications de rang A (indice H : 39), de deux chapitres de livre et a été invité dans de nombreuses conférences internationales (76). Il a assuré la coordination de

plus de 20 projets nationaux et internationaux (académiques et partenariaux) et la direction de 25 étudiants en thèse.

**Membre associé :**

- **Hervé Arribart** est diplômé de l'Ecole Polytechnique. Physicien et chimiste, il est professeur à l'ESPCI ParisTech, ancien directeur scientifique de Saint-Gobain, membre de l'Académie des technologies et Fellow de la société PRESANS.

**Doctorants :**

- **Badre Laharib**, Doctorant chercheur inscrit à l'Université de Pau et Pays de l'Adour, en thèse sous l'encadrement de **H. Martinez** (ECC), avec une expérience dans les domaines du stockage d'énergie et de l'électrochimie, plus précisément sur de nouvelles batteries Potassium-ion et ses mécanismes de vieillissement lors des cycles électrochimiques (étudiant recruté dans le cadre de l'ANR TROPIC).
- **Camille Ferris**, Doctorante chercheure inscrit à l'Université de Pau et Pays de l'Adour, en thèse sous l'encadrement de **H. Martinez** (ECC), travaillant sur l'Analyse de membranes métalliques multi compositions pour des applications dans les domaines de l'Energie et l'environnement (étudiante recrutée dans le cadre de la chaire internationale UPPA-Carnegie Mellon University).
- **Mathieu Caspard**, Doctorant chercheur inscrit à l'Université de Pau et Pays de l'Adour, en thèse sous l'encadrement de **H. Martinez** (ECC), dont le sujet d'étude est l'analyse de sulfures complexes utilisés comme matériaux d'électrode positive à forte capacité pour des accumulateurs tout solide au lithium (étudiant recruté dans le cadre d'un contrat UPPA – CEA Tech Liten).
- **Karama Ghamgui**, Doctorante chercheure inscrit à l'Université de Pau et Pays de l'Adour, en thèse sous l'encadrement de **H. Martinez** (ECC). Son sujet porte sur la caractérisation physico-chimique des interfaces électrodes/électrolyte des batteries Li-ion à haute tension constituées d'une anode de TNO (étudiante recrutée dans le cadre d'un contrat CIFRE avec TOTAL-SAFT).
- **Brice Talompa**, doctorant chercheur inscrit à l'Université Mohammed VI (UM6P), sous la supervision de Abdelouahed El Fatimy (UM6P), co-encadré par **Anouar Belhboub** (ECC). Le sujet de thèse consiste à aborder sur le plan expérimental et théorique les processus de dépôt par CVD du phosphore sur des substrats de nickel afin de former des feuillets de phosphore.
- **Gaelle Boudre**, Doctorante chercheure inscrite à l'Université de Pau et Pays de l'Adour, en thèse sous l'encadrement de P. Carbonniere (UPPA) et co-encadrée par **Hamza Bouhani** (ECC). Son sujet de thèse concerne l'étude théorique des interfaces électrode-électrolyte pour batteries tout solide (étudiante recrutée dans le cadre du projet RAISE2024 – E2S UPPA).

### THEMATIQUES DE RECHERCHE

Les thématiques de recherche au sein de l'unité Physique abordent, entre autres, d'une part les questions clefs du comportement des matériaux d'électrodes et des électrolytes en cyclage au sein des batteries M(Li, Na, K) ions. Plus précisément, l'étude expérimentale et théorique des principaux phénomènes d'oxydo-réduction lors des cycles de décharge/charge au sein d'une batterie et des phénomènes aux interfaces constituent les éléments clés de ces dispositifs. D'autre part, nous abordons les phénomènes d'adsorption et de diffusion à l'interface électrode/électrolyte dans les supercondensateurs à base de carbone et de phosphore par des approches théoriques multi-échelles se basant sur des méthodes classiques et quantiques, ainsi que des modèles mésoscopiques. Les applications visées sont le véhicule électrique et le stockage d'énergie pour les dispositifs de conversion (photovoltaïque et éolien). Nous proposons également d'aborder la conception d'une nouvelle classe de matériaux d'alliages métallique ternaires et leurs caractérisations, qui constituent une voie de recherche originale pour de nombreuses applications dans les domaines de l'énergie et de l'environnement.

## AXES DE RECHERCHE

- **Analyse des processus redox au sein des batteries M-ions et phénomènes aux interfaces** : Approches expérimentales et théoriques. Cet axe aborde l'étude du comportement des matériaux d'électrodes et des électrolytes sur le plan expérimental et théorique. L'analyse des processus redox et de la nature des interfaces électrode / électrolyte sont deux paramètres essentiels pour la compréhension du fonctionnement des accumulateurs M-ions et l'optimisation de leurs performances au sens large. De plus, une étude parallèle théorique abordée pour le prisme de la simulation moléculaire à l'échelle atomique et plus précisément par l'approche dite de dynamique moléculaire permet de modéliser la diffusion ionique dans les matériaux d'électrodes mais également au sein de l'interface électrode/électrolyte vis à vis de possibles fonctionnalisations et formulations. Les modifications chimiques et structurales qui s'opèrent aux interfaces sont également les objectifs de cet axe.
- **Etude d'alliages ternaires et de leurs propriétés.** La grande majorité des matériaux technologiquement pertinents répondent à des formulations complexes, parfois mises en œuvre sous forme d'alliages de type  $AxByC(1-x-y)$ ,  $x=0 \square 1, y=0 \square 1-x$ ) avec de multiples phases en coexistence. Ces matériaux, utilisés aussi bien dans les domaines de l'énergie ou de l'environnement (batteries pour le stockage de l'énergie, turbines pour la production d'électricité, catalyseurs pour la réduction des émissions, sorbants pour le captage du CO<sub>2</sub>...) sont souvent complexes à synthétiser. Les méthodes traditionnelles qui étudient à la fois des matériaux d'une composition, d'une phase ou d'une morphologie exigent un effort expérimental énorme pour recueillir des données couvrant des régions continues de l'espace de composition ( $AxByC(1-x-y)$ ,  $x=0 \square 1, y=0 \square 1-x$ ), de phases ou de morphologie. Pour résoudre ce problème, nous proposons une nouvelle voie basée sur le développement de méthodes expérimentales d'élaboration permettant pour un même échantillon de quelques cm<sup>2</sup>, de concevoir un objet couvrant un espace large de compositions et de phases. Néanmoins, pour orienter ces synthèses, puis l'étude des propriétés résultantes, un travail de caractérisation impliquant aussi bien le volume matériaux, sa surface et les interfaces entre domaine de composition est essentiel. L'ensemble de ces aspects, incluant les applications potentielles, seront abordés au sein de cet axe de recherche.
- **Modélisation multi-échelle des systèmes physiques hybrides:** La compréhension des mécanismes d'interaction au sein des systèmes physiques hybrides constitue une étape indispensable pour la modulation de leurs propriétés physiques. Dans ce contexte, les théories et approches de modélisation physique sont des outils de choix pour sonder les propriétés électroniques, magnétiques et vibrationnelles de ces systèmes nanométriques. En effet, tenant compte des échelles d'espace et de temps des structures hybrides et des mécanismes physiques en jeu, une caractérisation globale de ce genre de systèmes fera appel à plusieurs type de modélisation : (i) des modélisations quantiques de type ab initio pour décrire les interactions à l'échelle de l'atome permettant ainsi d'étudier des systèmes cristallins et moléculaires (ii) des modélisations classiques de type dynamique moléculaire pour simuler des systèmes à grand nombre de particules (iii) des modélisations mésoscopiques permettant de lier les grandeurs microscopiques aux grandeurs macroscopiques. Cette démarche permet en effet une compréhension multi-échelle globale pour des applications en électronique, énergétique, mécanique.

## PROJETS DE RECHERCHE

- **Batteries K-ions (KIBs)** : (Ecole Centrale Casablanca, IPREM, ICMCB, ICG\*). Ce sujet s'inscrit dans le développement de nouvelles générations de batteries type potassium-ions, qui représentent une alternative pertinente pour les prochaines années à l'approvisionnement en lithium, élément critique dû à une utilisation intensive et croissante de la technologie Li-ions. Le développement des KIBs s'envisage en deux temps : Une première partie se focalise sur l'étude des matériaux d'électrode positive et négative en configuration demi-cellule afin de définir les matériaux prometteurs : dans cette configuration, l'électrode étudiée fait face à du potassium métal. Une deuxième partie s'appuie sur des travaux en cellule complète, afin de connaître le comportement de la cellule dans une configuration proche de celle des batteries commerciales. Les objectifs principaux de cette thèse sont de comprendre le fonctionnement de certains matériaux d'électrode, et d'étudier les phénomènes survenant aux interfaces électrodes-électrolytes afin de connaître leur impact sur les performances de la cellule.
- **Dynamique moléculaire** : Ce sujet théorique (Ecole Centrale de Casablanca, IPREM) consiste à utiliser les outils de la dynamique moléculaire (par une approche quantique) pour observer qualitativement les formations d'espèces aux interfaces des batteries Li-ions, qui contrôlent les performances au sens large

- des accumulateurs. L'effet de la présence de couches interfaciales artificielles passivantes en vue de limiter la dégradation de l'électrolyte est un élément clé de l'étude.
- **Modélisation et diffusion du lithium au sein d'électrolytes polymères solides** / Comportement des interfaces solide/solide (Ecole Centrale Casablanca, IPREM, DMEX): Ce sujet expérimental et théorique concerne les batteries dites « tout solide ». Cette nouvelle génération de batteries pour véhicule électrique doit conduire à augmenter sensiblement la densité d'énergie, en toute sécurité et pour un cout moindre que les systèmes à électrolyte liquide. L'un des verrous de cette nouvelle technologie se situe au niveau des interfaces solide/solide qui concernent l'ensemble des éléments clés des dispositifs (électrode négative/électrolyte solide, électrode positive-catholite, électrode positive/électrolyte solide). Ces interfaces sont enfouies dans le cœur de la batterie ce qui rend leur étude complexe et les dispositifs pour y avoir accès nécessite un environnement expérimental spécifique disponible au sein du consortium. Sur le plan théorique, l'utilisation des outils de la dynamique moléculaire (approche classique), pour l'étude de la diffusion ionique au sein des matériaux électrolytes en fonction de leur modification fonctionnelle et de la présence d'additifs doit permettre d'élaborer de nouveaux systèmes performants. Il sera également question de simuler la diffusion ionique à l'interface électrodes/électrolytes en présence de couches interfaciales naturelles ou artificielles.
  - **Alliages métalliques ternaires** : L'objectif principal du projet est de mettre en œuvre un programme de recherche collaboratif entre l'école centrale de Casablanca, l'IPREM (CNRS-UPPA) et le College of Chemical Engineering de l'Université Carnegie Mellon (USA, Pittsburgh) pour développer des alliages métalliques ternaires de type  $AxByC(1-x-y)$ ,  $x=0 \rightarrow 1$  and  $y=0 \rightarrow 1-x$  avec de multiples phases en coexistence. Le cœur de l'approche commence par la préparation de « bibliothèques » de matériaux. Dans notre cas, il s'agit de films d'alliage « Spread Alloy Films :Csafs » qui sont élaborés (prototype de dépôt physique en phase sous Ultra vide) avec l'objectif d'obtenir des compositions locales couvrant tout l'espace de composition en alliage binaire ou ternaire,  $AxByC(1-x-y)$ ,  $x=0 \leq 1, y=0 \leq 1-x$ . La deuxième étape est la caractérisation en surface de la bibliothèque « CSAF ». Le point clé est la caractérisation avec une résolution spatiale suffisante afin que l'analyse point par point puisse être effectuée. Cette analyse à deux voire trois dimensions peut être effectuée à l'aide de méthodes telles que la spectroscopie de photoémission de rayons X, la nanosonde Auger ou le ToF-Sims. Enfin, la troisième étape de ce projet consiste à effectuer des mesures résolues spatialement des propriétés ciblées comme l'activité catalytique ou la résistance à la corrosion. Celles-ci peuvent alors être corrélées aux caractéristiques des matériaux concernés (composition en surface, structure électronique, etc.). A titre d'exemple, pour un matériau de type AlFeNi, il est possible d'identifier la trajectoire à travers l'espace de composition de la concentration critique en aluminium en dessous de laquelle l'alliage subit une oxydation en volume et au-dessus de laquelle il est passivé contre la corrosion en surface. Un intérêt particulier sera porté à des membranes sous la forme d'alliages de Palladium (Pd) qui sont capables de purifier le dihydrogène de diverses sources de flux de gaz. L'obtention d'un niveau de haute pureté de H<sub>2</sub> est nécessaire pour une application au sein des piles à combustible. En général, le Pd est allié à un deuxième composant (Cu, Ag, Au, et autres) qui assure la stabilité mécanique en empêchant la formation de phases hybrides. Le rôle du troisième composant au sein de l'alliage ternaire joue en général le rôle de stabilité à haute température du matériau. Cette étude pourra être étendue à la résistance à la corrosion de gaz soufrés, qui passivent la surface de la membrane et empêchent l'adsorption dissociative du H<sub>2</sub> qui précède le transport des atomes d'hydrogène dans la majeure partie de la membrane. Comprendre la dépendance entre la composition et la résistance à la corrosion en alliage de Pd est essentiel pour optimiser les propriétés.
  - **La modélisation des mécanismes de dégradation des dispositifs à base GaN** : (Ecole Centrale Casablanca, UM6P). L'objectif de ce projet est d'étudier la physique fondamentale du transport d'électrons dans des nanodispositifs de GaN afin d'étudier leurs mécanismes de dégradation. La méthodologie de recherche se compose de trois parties : la première est théorique et concerne un modèle macroscopique pour décrire le transport des électrons dans les nanodispositifs. La deuxième partie concerne la modélisation microscopique pour décrire le transport quantique dans les nanodispositifs afin d'en extraire des quantités macroscopiques. La troisième partie porte sur la conception d'un protocole expérimental pour étudier les mécanismes de dégradation de nos nanodispositifs et de les confronter avec les deux modèles théoriques.
  - **La modélisation de la croissance du phosphore par dynamique moléculaire** : (Ecole Centrale Casablanca, UM6P). Ce travail s'intéresse à l'étude de la croissance du phosphore sur des substrats métalliques par approche de dynamique moléculaire. La stabilité des structures est traitée tenant compte de l'orientation des feuillets de phosphore par rapport aux substrats de cuivre sur des

- intervalles donnés de température et de pression pour comprendre la corrélation entre ces différents facteurs. L'extraction des feuillets de phosphorène est aussi explorée d'un point de vue énergétique.
- **Modélisation des propriétés structurales et capacitives des supercondensateurs à base de carbone :** (Ecole Centrale Casablanca, CIRIMAT Toulouse). Ce travail s'intéresse au développement d'un modèle mésoscopique pour prédire les performances électrochimiques des supercondensateurs carbone-carbone à un coût de calcul beaucoup plus faible (presque 10000 fois plus rapide) que les simulations microscopiques de type dynamique moléculaire. Nous adaptons un modèle sur réseau qui a montré des résultats prometteurs pour la simulation de la diffusion des ions et la prédiction des spectres RMN pour des espèces adsorbés sur des carbones poreux neutres. La mission est d'implémenter de nouvelles fonctionnalités pour introduire la possibilité d'appliquer un potentiel aux électrodes modélisées, et de modifier la façon dont la diffusion est traitée pour tenter de se rapprocher de la réalité. Ceci permettra des études systématiques plus précises de structures contentant une gamme de carbones poreux ayant différentes distributions de taille de pores (unimodale et bimodale). Les fonctionnalités mises en œuvre contribueront également à étudier l'effet de la solvatation et de la taille des pores sur les propriétés capacitives.
- **Nouveaux matériaux à effet magnétocalorique géant à très basse températures :** Nous allons travailler sur la conception et l'optimisation des nouveaux matériaux à effet magnétocalorique géant à très basse températures pour les applications cryogéniques.
- **Modélisation et simulation des propriétés thermodynamiques et cinétiques de stockage d'Hydrogène dans les matériaux 2D :** Simulation et modélisation des matériaux 2D (Arsenene). L'objectif de ce projet est d'étudier la capacité de certains matériaux 2D pour le stockage de l'hydrogène en utilisant la dynamique moléculaire et la théorie de la fonctionnelle de la densité.

#### PROJETS FINANCES

- **2019-2025 HUB RAISE 2024 E2S :** Développement de batteries tout Solide (partenaires industriels : Total-SAFT & Arkema).
- **2020- 2024 projet ANR TROPIC** 'TowaRds inOvative Potassium-ion full-Cell'. Développement de nouveaux systèmes de stockage électrochimique alternative au lithium. (Thématique : Une énergie durable, propre, sûre et efficace),
- **2020 – 2025 Chaire Internationale E2S UPPA, USA (CMU – Pittsburgh) – UPPA (France) – Maroc (ECC):** Etude d'intermétalliques ternaires et des phénomènes de corrosion
- **2021- 2024 projet ANR Hyperslim :** 'High Performance Stretchable Li-ion Microbattery' : Développement de micro-batteries au lithium modulable sous contrainte mécanique. (Thématique : Une énergie durable, propre, sûre et efficace).
- **2022 – 2025 Commissariat aux Energies Alternatives CEA Tech Bordeaux :**
- **2022 – 2025 CIFRE TOTAL-SAFT – IPREM – ECC :** caractérisation physico-chimique des interfaces électrodes/électrolyte des batteries Li-ion à haute tension constituées d'une anode de TNO

#### PARTENAIRES

- IPREM – Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux, Unité mixte (UMR 5254) du CNRS et de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour - (France)
- DMEX - Université de Pau et des Pays de l'Adour - UMS CNRS 3360 (France)
- Fédération de Recherche Nationale « Spectroscopies de Photoémission » CNRS 2050 (France) – 46 UMR CNRS
- ICMCB – Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux, Unité mixte (UMR 5026) du CNRS et de l'Université de Bordeaux et Bordeaux INP, (France)
- ICG Institut Charles Gerhardt Montpellier – Unité mixte (UMR 5026) du CNRS et de l'Université de Montpellier, UMR CNRS 5253 (France)
- Carnegie Mellon University, Chemical Engineering, Pittsburgh, Pennsylvania (USA)
- Institut Jean Lamour Unité mixte (UMR 7198) du CNRS et de l'Université de Lorraine (France)

- Université Mohammed VI Polytechnique, Ben Guerir, Morocco
- CIRIMAT, Unité mixte (UMR 5085) du CNRS et de l'Université de Toulouse (France)
- CEA Tech Nouvelle Aquitaine

## PUBLICATIONS DE L'EQUIPE (2019-2023)

### 2023

- Morey, J., Ledeuil, J.-B., Madec, L., **Martinez, H.**, Operando Auger/XPS using an electron beam to reveal the dynamics morphology of Li plating and interphase formation in solid-state batteries, *Journal of Material Chemistry A*, 2023, DOI 10.11039/d3ta00386h
- Madec, L., Ledeuil, J.-B., Morey, J., **Martinez, H.**, Cross-section nano-Auger/SEM analysis to reveal bulk chemical/morphological properties of composites for energy storage, *Electrochimica Acta*, 2023, 448, 142185
- Karbak, M., Baazizi, M., Sayah, S., Chafik, T., **Martinez, H.**, Ghamouss, F., Unraveling high-performance oxygen-deficient amorphous manganese oxide as the cathode for advanced zinc ion batteries, *Journal of Materials Chemistry A*, 2023, 11(6), pp. 2634–2640
- Touja, J., Salembier Peyrovi, P., Tison, Y., **Martinez, H.**, Stievano, L., Monconduit, L., Effects of the Electrolyte Concentration on the Nature of the Solid Electrolyte Interphase of a Lithium Metal Electrode, *Energy Technology*, 2023, 11(1), 2201037

### 2022

- S. Jmal, **H. Bouhani**, O. Mounkachi, and M. Balli, *Materials Chemistry and Physics* 294 (2022)
- I. Zdeg, A. Al-Shami, G. Tiouichi, H. Absike, V. Chaudhary, P. Neugebauer, K. Nouneh, **A. Belhboub**, O. Mounkachi, A. El Fatimy Electrical Transport Properties of Layered Black Phosphorus grown by Chemical Vapor Transport I, *Cryst. Res. Technol.*, 58, 2200164, 2022.
- **H. Martinez**, R. Dedryvere, Énergie : comment vont évoluer les batteries lithium-ion, très consommatoires de métaux en tension ?, *The Conversation*, 2022
- M. Amou, H. Aziam, B. Larhrib, N. Sabi, **H. Martinez**, H. Ben Youcef, I. Saadoune, Fe1.5V2(PO4)3/C phosphate as a negative electrode material for high-rate performance lithium-ion batteries *Journal of Power Sources*, Elsevier, 2022, 532, pp.231310.
- L. Monconduit, A. Roland, J. Fullenwarth, J-B. Ledeuil, **H. Martinez**, How carbon coating or continuous carbon pitch matrix influence the silicon electrode/electrolyte interface sand the performance in Li-ion batteries. *Battery Energy*, 2022. doi: 10.1002/bte2.20210009.
- L. Moses Koudia, S. Blanc, S. Joseph, C. Miqueu, F. Pannier, **H. Martinez**. Characterization of Clay Materials from Ivory Coast for Their Use as Adsorbents for Wastewater Treatment, *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering*, Scientific Research Publishing, 2022, 10, pp.319 - 337. (10.4236/jmmce.2022.104023)
- Larhrib, B., Madec, L., Monconduit, L., **Martinez, H.**, Optimized electrode formulation for enhanced performance of graphite in K-ion batteries, *Electrochimica Acta*, 2022, 425, 140747
- Girardet, T., Venturini, P., **Martinez, H.**, Cleymand, F., Fleutot, S., Spinel Magnetic Iron Oxide Nanoparticles: Properties, Synthesis and Washing Methods, *Applied Sciences (Switzerland)*, 2022, 12(16), 8127
- Mawélé Loudy, C., Allouche, J., Bousquet, A., Billon, L., **Martinez, H.**, Functional nanoparticle-driven self-assembled diblock copolymer hybrid nano-patterns, *Polymer Chemistry*, 2022, 13(13), pp. 1920–1930
- B. F P Mcvey, R. A Swain, D. Lagarde, W.-S. Ojo, K. Bakkouche, C. Marcelot, B. Warot-Fonrose, Y. Tison, **H. Martinez**, B. Chaudret, C. Nayral, F. Delpech. Cd3P2/Zn3P2 Core-Shell Nanocrystals: Synthesis and Optical Properties. *Nanomaterials*, 2022, 12, (10.3390/nano12193364)
- Morey, J., Ledeuil, J.-B., Madec, L., **Martinez, H.**, Methodological developments to expose and analyse buried interfaces in lithium solid state batteries using exsitu, in situ and operando cycling, *EPJ Web of Conferences*, 273, 01007 (2022), *JNSPE* 2022

## 2021

- A.Sasikumar **A.Belhboub**, C. Bacon , A. C. Forse, J. M. Griffin, C. P. Grey, P. Simon, C. Merlet , "Mesoscopic simulations of the in situ NMR spectra of porous carbon based supercapacitors: electronic structure and adsorbent reorganisation effects" **Phys. Chem. Chem. Phys.**, **,23**, 15925-15934 **2021 Q1**
- L. Caracciolo, L. Madec, G. Gachot, **H. Martinez**, Impact of the Salt Anion on K Metal Reactivity in EC/DEC Studied Using GC and XPS Analysis, *ACS Applied Materials & Interfaces*, Washington, D.C. : American Chemical Society, 2021, 13 (48), pp.57505-57513. (10.1021/acsami.1c19537)
- L. Caracciolo, L. Madec, **H. Martinez**, XPS Analysis of K-based Reference Compounds to Allow Reliable Studies of Solid Electrolyte Interphase in K-ion Batteries (2021) *ACS Applied Energy Materials*, ACS, 2021, 4 (10), pp.11693-11699. (10.1021/acsael.1c02400)
- Atout, H., Bouguettoucha, A., Chebli, D., Crespo, J., Dupin, J.-C., López-De-Luzuriaga, J.M., **Martinez, H.**, Monge, M., Olmos, M.E., Rodríguez-Castillo, M. An improved plasmonic Au-Ag/TiO<sub>2</sub>/rGO photocatalyst through entire visible range absorption, charge separation and high adsorption ability (2021) *New Journal of Chemistry*, **45** (26), pp. 11727-11736.
- Rivera-Cárcamo, C., Scarfiello, C., García, A.B., Tison, Y., **Martinez, H.**, Baaziz, W., Ersen, O., Le Berre, C., Serp, P. Stabilization of Metal Single Atoms on Carbon and TiO<sub>2</sub> Supports for CO<sub>2</sub> Hydrogenation: The Importance of Regulating Charge Transfer (2021) *Advanced Materials Interfaces*, **8** (8), art. no. 2001777
- Charles-Blin, Y., Gimello, O., Flahaut, D., Guérin, K., Dubois, M., Monconduit, L., Louvain, N., **Martinez, H.** Surface atomic layer fluorination of Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub>: Investigation of the surface electrode, *Applied Surface Science* (2020) **527**, (S0169433220315919), (10.1016/j.apsusc.2020.146834)) (2021) *Applied Surface Science*, **542**, art. no. 148703. .
- Madec, L., Tang, C., Ledeuil, J.-B., Giaume, D., Guerlou-Demourgues, L., **Martinez, H.** Cross-section auger analysis to study the bulk organization/ structure of mn-co nano-composites for hybrid supercapacitors (2021) *Journal of the Electrochemical Society*, **168** (1), art. no. 010508, . DOI: 10.1149/1945-7111/abd606
- V.Vachitana, D. Foix, M. Menta, **H. Martinez**, F. Seby Optimization of elemental selenium (Se(0)) determination in yeasts by anion-exchange HPLC-ICP-MS (2021) *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **413** (7), pp. 1809-1816. doi:10.1007/s00216-020-03129-y
- Roland, B. Delarre, J-B. Ledeuil, N. Louvain, **H. Martinez**, L. Monconduit, Silicon-based electrodes formulation in buffered solution for enhanced electrode-electrolyte interfaces (2021) *Journal of Power Sources*, **489**, art. no. 229465

## 2020

- E. H. Lahrar, **A. Belhboub**, P. Simon, C. Merlet, Ionic liquids under confinement : from systematic variations of the ion and pore sizes towards an understanding of structure and dynamics in complex porous carbons, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **12**, 1789, 2020.
- **H. Bouhani**, A. Endichi, D. Kumar, O. Copie, H. Zaari, A. David, A. Fouchet, W. Prellier, O. Mounkachi, M. Balli, A. Benyoussef, A. E. Kenz, and S. Mangin "Engineering the magnetic and magnetocaloric properties of epitaxial oxide thin films by strain effects", *Appl. Phys. Lett.* **117**, 072402. <https://doi.org/10.1063/5.0021031> **2020 Q1**
- **H. Bouhani** et al. " On the origin of the giant magnetocaloric effect in HoMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> single crystals: First principles and Monte carlo simulation", *J. Mater. Chem. Phys.* **231**, 366. **2019 Q1**
- Endichi, **H. Bouhani** et al., "Electronic and magnetic properties of the multiferroic TbMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub>" *Appl.Phys. A* **126**, 410. **2020**
- Y. Min, F. Leng, B. F. Machado, P. Lecante, . P. Roblin, **H. Martinez**, T. Theussl, A. Casu, M. Barcenilla, S. Coco. B. M. I. Martínez, N. Martin, M. Rosa Axet, P. Serp 2D and 3D Ruthenium Nanoparticle Covalent Assemblies for Phenyl Acetylene Hydrogenation (2020) *European Journal of Inorganic Chemistry, Wiley-VCH Verlag*, **43**, pp.4069-4082.
- Mawélé Loudy, S. Chasvised, C. Paybou, C. Courreges, J. Allouche, A. Bousquet, **H. Martinez**, L. Billon Revealing surface functionalities via microwave for the para-fluoro-Thiol click reaction (2020) *Polymer, Elsevier*, **2020**, **202**, pp.122675
- Rivera-Cárcamo, C. Scarfiello, A. B. García, Y. Tison, **H. Martinez**, W. Baaziz, C. Le Berre, P. Serp Stabilization of Metal Single Atoms on Carbon and TiO<sub>2</sub> Supports for CO<sub>2</sub> Hydrogenation: The Importance of Regulating Charge Transfer (2020) *Advance Materials Interfaces* doi : 10.1002/admi.202001777
- L. Madec, C. Tang, J.B.Ledeuil, D. Giaume, L. Guerlou Demourgue, **H. Martinez** Cross-Section Auger Analysis to Study the Bulk Organization/Structure of Mn-Co Nano-Composites for Hybrid Supercapacitors (2020) *Journal of the Electrochemical Society*, **168**(1), 010508

- L. Caracciolo, L. Madec, E. Petit, E. Gabaudan, D. Carlier, L. Groguennec, H. Martinez Electrochemical redox processes involved in carbon-coated KVPO<sub>4</sub>F for high voltage K-ion batteries revealed by XPS analysis (2020) *Journal of the Electrochemical Society*, 167 (13), 130527
- J.Touja, V. Gabaudan, F. Farina, S. Cavaliere, L. Caracciolo, L. Madec, H. Martinez, A. Boulaou, J. Wallenstein, P. Johansson, L. Stievano, L. Monconduit Self-supported carbon nanofibers as negative electrodes for K-ion batteries: performance and mechanism (2020) *Electrochimica Acta* 362, 137125
- S. Kim, E. J. Kim, Y. Charles-blin, K. Guérin, M. Dubois, H. Martinez, M. Deschamps, L. Monconduit, N. Louvain, Atomic Layer Fluorination of 5 V Class Positive Electrode Material LiCoPO<sub>4</sub> for Enhanced Electrochemical Performance. (2020) *Batteries & Supercaps*, (doi : 10.1002/batt.202000041)
- Y. Charles-Blin, D. Flahaut, K. Guérin, M. Dubois, L. Monconduit, N. Louvain, H. Martinez, Surface atomic layerfluorination of Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub>: Investigation of the surface electrode reactivity and the outgassing behavior in LiBs. (2020) *Applied Surface Science* 527, 146834
- L. Madec, G. Coquil, J-B. Ledeuil, G. Gachot, L. Monconduit, H. Martinez, How the Binder/Solvent Formulation Impacts the Electrolyte Reactivity/Solid Electrolyte Interphase Formation and Cycling Stability of Conversion Type Electrodes. (2020) *Journal of The Electrochemical Society*, 167 (6), pp.060533
- Mawélé Loudy, J. Allouche, A. Bousquet, H. Martinez, L. Billon A nanopatterned Dual Reactive Surface Driven by Block copolymer Self-Assembly (2020) *Nanoscale*, 12 (14), pp.7532-7537
- N. Gauthier, C. Courreges, J. Demeaux, C. Tessier, and H. Martinez Influence of the Cathode Potential on Electrode Interactions within a Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> vs LiNi<sub>3/5</sub>Mn<sub>1/5</sub>Co<sub>1/5</sub>O<sub>2</sub> Li-Ion Battery (2020) *Journal of The Electrochemical Society*, Volume 167, Number 4, 040504
- Flamary-Mespoulie, A. Boulineau, H. Martinez, M. R Suchomel, C. Delmas, B. Pecquenard, F. Le Cras. Lithium-rich layered titanium sulfides: Cobalt- and Nickel-free high capacity cathode materials for lithium-ion batteries. (2020) *Energy Storage Materials*, 26, 213–222
- Y. Min, H. Nasrallah, D. Poinsot, P. Lecante, Y. Tison, H. Martinez, P. Roblin, A. Falqui, R. Poteau, I. Gerber, J-C. Hierso, M. Rosa Axet, P. Serp. 3D Ruthenium Nanoparticle Covalent Assemblies from Polyman-tane Ligands for Confined Catalysis. (2020) *Chemistry of Materials*, 32(6), 2365–2378
- N. Gauthier, C. Courreges, J. Demeaux, C. Tessier, and H. Martinez. Impact of the cycling temperature on electrode/electrolyte interfaces within Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> vs LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub> cells. (2020) *Journal of Power Sources*, 448, 227573
- R. Swain, B. McVey, H. Virieux, F. Ferrari, Y. Tison, H. Martinez, B. Chaudret, C. Nayral, F. Delpech. Sustainable quantum dot chemistry: effects of precursor, solvent, and surface chemistry on the synthesis of Zn<sub>3</sub>P<sub>2</sub> nanocrystals, (2020) *Chemical Communications*, 56(22), p 3321-3324
- N. Gauthier, C. Courreges, J. Demeaux, C. Tessier, and H. Martinez, Probing the in-depth distribution of organic/inorganic molecular species within the SEI of LTO/NMCand LTO/LMO batteries: A complementary ToF-SIMS and XPS study. (2020) *Applied Surface Science*, 501, 144266

## 2019

- Y. Almadori, A.C. Selvati, G. Delport, A. Belhboub, N. Izard, B. Jousselme, S. Campidelli, P. Hermet, R. Aznar, R. Le Parc, F. Fossard, T. Saito, Y. Sato, K. Suenaga, P. Puech, J.S. Lauret, G. Cassabois, J-L. Bantignies, L. Alvarez, Fermi level shift in carbon nanotubes by dye confinement Carbon, 149, 772-780, 2019
- A. Belhboub, E. H. Lahrar, P. Simon, C. Merlet, On the development of an original mesoscopic model to predict the capacitive properties of carbon-carbon supercapacitors, *Electrochimica Acta*, 327, 135022, 2019
- L. Madec, J-B. Ledeuil, G. Coquil, G. Gachot, L. Monconduit, and H. Martinez. Cross-section Auger imaging: A suitable tool to study aging mechanism of conversion type electrodes. (2019) *Journal of Power Sources*, 441, 227213
- H. Bouhani, A. Endichi, H. Zaari, A. Benyoussef, M. Hamedoun, M. Balli, A. E. Kenz, and O. Mounkachi, *Materials Chemistry and Physics* 21, 366 (2019)
- Gakis, C. Vahlas, H. Vergnes, S. Dourdain, Y. Tison, H. Martinez, J. Bour, D. Ruch, A. Boudouvis, B. Caussat, and E. Scheid. Investigation of the initial deposition steps and the interfacial layer of Atomic Layer Deposited (ALD) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on Si. (2019) *Applied Surface Science*, 492:245-254
- Y. Charles-Blin, D. Flahaut, J-B Ledeuil, K. Guerin, M. Dubois, A-M. Perbost, L. Monconduit, H. Martinez, and N. Louvain. Atomic Layer Fluorination of Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> Surface: a multiprobing survey. (2019) *ACS Applied Energy Materials*, 2(9), 6681-6692
- L. Madec, J-B Ledeuil, G. Coquil, L. Monconduit, and H. Martinez. Cross-Section Auger/XPS Imaging of Conversion Type Electrodes: How Their Morphological Evolution Controls the Performance in Li-Ion Batteries. (2019) *ACS Applied Energy Materials*, 2(7):5300-5307

- Y. Charles-Blin, D. Flahaut, J-B. Ledeuil, K. Guerin, M. Dubois, N. Louvain, L. Monconduit, and **H. Martinez**. Surface Layer Fluorination of TiO<sub>2</sub> Electrodes for Electrode Protection LiBs: Fading the Reactivity of the Negative Electrode/Electrolyte Interface. (2019) *Journal of The Electrochemical Society*, 166(10):A1905-A1914.
- M. Poulain, H. Messabeb, A. Lach, F. Contamine, P. Cezac, J-P. Serin, J-C. Dupin, **H. Martinez**. Experimental Measurements of Carbon Dioxide Solubility in Na-Ca-KCl Solutions at High Temperatures and Pressures up to 20 MPa. (2019) *Journal of Chemical and Engineering Data*, 64(6):2497-2503.
- Mawele Loudy, J. Allouche, A. Bousque, C. Courreges, **H. Martinez**, and L. Billon. Core@Corona Functional Nanoparticles-driven Rod-Coil Diblock Copolymer Self-Assembly. (2019) *Langmuir*, 35 (51), 16925-16934
- Z. Luo, Y. Min, W. Bacsa, D. Nechiyil, Y. Tison, **H. Martinez**, P. Lecante, I. Gerber, P. Serp, and M. R. Axet. Chemoselective reduction of quinoline over Rh-C 60 nanocatalysts. (2019) *Catalysis Science & Technology*, 9 (24), 6884-6898.
- Mcvey, R. Swain, D Lagarde, Y. Tison, H. Martinez, Bruno Chaudret, Céline Nayral, F. Delpech Unraveling the Role of Zinc Complexes on Indium Phosphide Nanocrystal Chemistry. (2019) *The Journal of physical chemistry*, 151 (19), pp.191102.
- T. Cabaret, N. Harfouche, L. Leroyer, J-B Ledeuil, **H. Martinez**, B. Charrier A study of the physico-chemical properties of dried maritime pine resin to better understand the exudation process (2019) De Gruyter Holzforschung, 73(12), 1093-1102