

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Date de la soutenance : **12 décembre 2025**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur BUGNET Matthieu**

Titre des travaux : *Visualisation et compréhension des matériaux à l'échelle atomique par microscopie in situ et spectroscopie de niveau de coeur*



Résumé

La microscopie électronique en transmission permet aujourd'hui de sonder la structure et certaines propriétés physiques et chimiques de matériaux cristallins à l'échelle de la colonne atomique, en collectant de manière corrélative des signaux pour l'imagerie, la diffraction ou la spectroscopie, sous (ultra-)haut vide ou dans diverses conditions dites *in situ*. En particulier, le contrôle de l'atmosphère gazeuse autour de l'échantillon offre des conditions uniques d'analyse, et la spectroscopie de perte d'énergie des électrons pour les excitations des niveaux de coeur combinée à la microscopie électronique en transmission à balayage corrigée des aberrations apparaît comme une approche robuste pour étudier la structure électronique résolue spatialement. La portée et l'impact de ces deux techniques sont illustrés dans ce manuscrit au travers de plusieurs exemples. Tout d'abord, la mobilité des cations en surface de facettes de CeO_2 est mise en évidence et contrôlée par la nature de l'atmosphère gazeuse introduite autour de l'échantillon, jusqu'à sa disparition liée à l'adsorption de molécules comme le dioxyde de carbone. Les possibilités offertes par la microscopie sous atmosphère contrôlée sont utilisées dans des conditions proches de l'*operando*, en démontrant le fonctionnement d'une pile à combustible à oxyde solide dans le microscope électronique en transmission environnemental. Dans un second temps, l'intérêt de l'analyse des structures fines spectrales à résolution atomique est mis en évidence, au-delà de la cartographie élémentaire, à l'interface d'une hétérostructure métal-oxyde et à l'échelle des plans atomiques d'un cuprate supraconducteur. L'interprétation détaillée des structures fines proches du seuil nécessite souvent leur simulation, via des calculs de structure électronique, montrée ici dans le cas d'un oxyde ferroélectrique, BaTiO_3 , et d'un minéral, ZrSiO_4 . Enfin, le contraste obtenu dans des cartes de structures fines nécessite en plus de prendre en compte la propagation du faisceau d'électrons incidents, ce qui ouvre la porte à l'analyse de la distribution spatiale d'états inoccupés.