



# CHIMIE NOUVELLE

LA REVUE DE CONTACT DE LA **SOCIÉTÉ ROYALE DE CHIMIE**

35<sup>ème</sup> année - octobre 2017



CN 125

Chimie **théorique**

- Modélisation théorique de la conductivité thermique de réseau de semiconducteurs organiques** 1  
A. Vercouter, V. Lemaux, J. Ide, L. Muccioli, D. Beljonne, J. Cornil

Chimie et **espace**

- « UCL to MARS 2018 » : Des chercheurs et étudiants de l'UCL partent pour Mars !** 10  
M. Richald, F. Peyrusson, A. Sablon, S. Wuyckens, M. Sundic, B. Baix, M. Saint-Guillain, M. Roumain

**Rubrique de la SRC**

- Division des Jeunes Chimistes de la Société Royale de Chimie** 15  
R. Gerardy, S. Leloux, S. Van Den Wildenberg
- Echos de la Journée Scientifique SRC 2017** 19
- La chimie belge à l'honneur** 21

## Directeurs de rédaction

Bernard Mahieu  
UCL, Ecole de Chimie  
Place Pasteur, 1  
Boîte L4.01.07  
1348 Louvain-la-Neuve  
bernard.mahieu@uclouvain.be

Benoît Champagne  
UNamur,  
Département de Chimie  
Rue de Bruxelles, 61  
5000 Namur  
benoit.champagne@unamur.be

## Comité de rédaction

Kristin Bartik, ULB  
Gwilherm Evano, ULB  
Philippe Dubois, UMONS  
Sophie Laurent, UMONS  
Bernard Joris, ULG  
Raphaël Robiette, UCL  
Damien Debecker, UCL  
Johan Wouters, UNamur  
André Colas, Dow Corning

## Infographisme:

Emmanuel Bonaffini  
emmanuel.bonaffini@brutele.be

## Secrétariat

Violaine SIZAIRE  
ULB  
avenue Franklin Roosevelt 50, CP 160/07 1050 Bruxelles  
Tel : +32 2 650 52 08 Fax : +32 2 650 51 84 - email : src@ulb.ac.be  
Fortis : 210-0420804-70 Dexia : 088-0169820-65

## Comité directeur

## Conseil de gestion

Président	T. Randoux, Certech	Thierry.Randoux@certech.be
Vice-président	B. Champagne, UNamur	benoit.champagne@unamur.be
Présidente sortante	C. Buess, ULB	cbuess@ulb.ac.be
Secrétaire général	J.-C. Braekman, ULB	braekman@ulb.ac.be
Trésorier	P. Laurent, ULB	pl Laurent@ulb.ac.be
Délégué relations extérieures	P. Baekelmans, Solvay	paul.baekelmans@solvay.com
Délégué communication	A. Colas, Dow Corning	colas.andre@outlook.com

## Divisions

Chimie Médicinale	L. Provins, UCB	laurent.provins@ucb.com
Jeunes Chimistes	A. Richard, ULB	Audrey.Richard@ulb.ac.be
Histoire et Enseignement de la Chimie	B. Van Tiggelen	vantiggelen@memosciences.be
Délégué Essenscia Wallonie	C. Moucheron, ULB	cmouche@ulb.ac.be
	B. Broze, Essenscia	bbroze@essenscia.be

## Sections locales

Bruxelles	A. De Wit, ULB	adewit@ulb.ac.be
Louvain-la-Neuve	R. Robiette, UCL	raphael.robiette@uclouvain.be
Mons	S. Laurent, UMONS	sophie.laurent@umons.be
Liège	A. S. Duwez, ULG	asduwez@ulg.ac.be
Namur	S. Vincent, UNamur	stephane.vincent@unamur.be

## Membres protecteurs de la SRC

ALLNEX  
DOW CORNING  
EXXONMOBIL CHEMICAL  
ESSENSCIA  
LHOIST  
SOLVAY  
TOTAL PETROCHEMICALS RESEARCH FELUY  
UCB

## Parution : trimestrielle

Avec le soutien du Fonds National de la Recherche Scientifique. Les articles paraissant dans Chimie nouvelle sont repris dans CHEMICAL ABSTRACTS

Editeur responsable : Jean-Claude Braekman,  
ULB, CP 160/07,  
avenue Roosevelt 50, 1050 Bruxelles

Les articles sont publiés sous la responsabilité de leur(s) auteur(s).  
Les annonces publicitaires sont établies sous la responsabilité des firmes.

« CHIMIE NOUVELLE » est un titre déposé

ISBN 0771-730X

Alexandre VERCOUTER (1)\*, Vincent LEMAUR (1), Julien IDE (1), Luca MUCCIOLI (2),  
David BELJONNE (1) et Jérôme CORNIL (1)

(1) Service de Chimie des Matériaux Nouveaux (CMN),  
Université de Mons, 20 Place du Parc, 7000 Mons, Belgique,  
alexandre.VERCOUTER@student.umons.be

(2) Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari",  
Università di Bologna, Viale del Risorgimento 4, Bologna, Italie



# Modélisation théorique de la conductivité thermique de réseau de semiconducteurs organiques

## Theoretical characterization of the lattice thermal conductivity in organic semiconductors

### Résumé

La thermoélectricité traduit la capacité à convertir de la chaleur en électricité (ou l'inverse) et offre un grand potentiel pour des systèmes de production électrique et de revalorisation énergétique. A l'heure actuelle, les modules commerciaux sont composés de matériaux inorganiques toxiques et coûteux, ce qui a motivé récemment l'emploi de semiconducteurs organiques dopés. Si la description du transport de charges électriques au sein de ces composés a fait l'objet de nombreuses études ces dernières années, la conception de modules thermoélectriques à base de semiconducteurs organiques est freinée par le manque de données concernant le transport de la chaleur. Afin de pallier cette insuffisance, ce travail a été dédié à l'estimation théorique de la conductivité thermique de réseau dans des cristaux à base de semiconducteurs organiques utilisés au sein de nombreux dispositifs, à savoir le pentacène, le TIPS-pentacène et le 2,7-BTBT (Fig.2). Dans cette optique, des simulations de dynamique moléculaire de non-équilibre ont été réalisées afin de créer un gradient de température stable via transfert de flux de chaleur au sein de l'échantillon et d'ainsi en estimer la conductivité thermique de réseau.

### Abstract

Thermoelectricity reflects the ability to convert heat into electricity (or vice versa) and offers a great potential for power generation and energy recovery systems. Up to now, commercial modules are built with toxic and expensive inorganic materials; this has recently motivated the use of doped organic semiconductors. Whereas their charge transport properties have been widely studied in recent years, the design of thermoelectric modules based on organic semiconductors is still limited by the lack of data on thermal transport. In order to tackle this issue, this work has been dedicated to the theoretical characterization of the lattice thermal conductivity in single crystals of organic semiconductors widely used in devices, namely pentacene, TIPS-pentacene, and 2,7-BTBT. Non-equilibrium molecular dynamics simulations have been performed in order to generate stable temperature gradients via exchange of heat flux and estimate lattice thermal conductivity values.

### Mots-Clés

Semiconducteurs Organiques ;  
Thermoélectricité ; Conductivité Thermique ;  
Champ de Force ; Dynamique Moléculaire de  
Non-Equilibre  
Organic Semiconductors ; Thermoelectricity ;  
Force Field ; Non Equilibrium Molecular  
Dynamics

## 1. Introduction à la thermoélectricité

La thermoélectricité traduit la faculté d'un matériau à convertir une différence de température en différence de potentiel électrique ou à refroidir un volume via l'application d'une tension électrique. Ainsi, il existe deux types de modules thermoélectriques : le générateur et le refroidisseur. Ces deux dispositifs présentent une architecture extrêmement semblable (Fig. 1) [1].

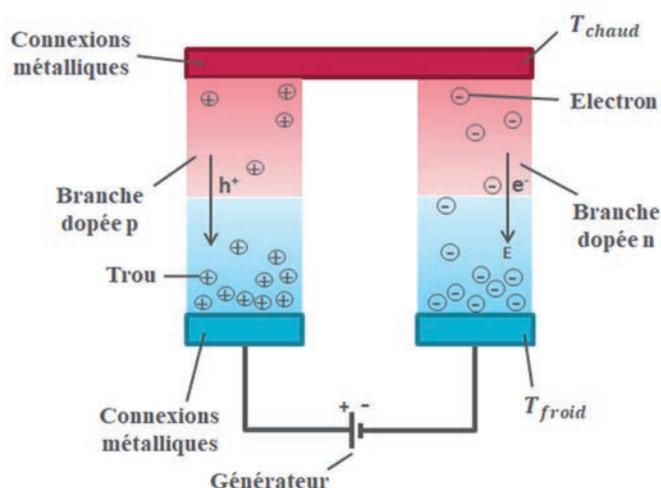


Figure 1 : Représentation schématique d'un générateur thermoélectrique adapté de la référence [1].

Un thermogénérateur électrique est typiquement construit en connectant en série un semiconducteur dopé de type *p* et un semiconducteur dopé de type *n*. Les extrémités de ce thermocouple sont alors mises en contact avec une zone chaude et une zone froide, donnant lieu à une différence de température  $\Delta T$ . Puisque les électrons et les trous sont des particules chargées occupant préférentiellement des états de plus basses énergies, cette mise en contact provoque un déplacement vers la zone froide des électrons dans le semiconducteur *n* et des trous dans le semiconducteur *p*. C'est ce phénomène qui permet de générer une différence de potentiel  $\Delta V$ .

Les propriétés thermoélectriques sont actuellement exploitées au sein de thermogénérateurs mettant à profit la chaleur émise par désintégration de radioisotopes dans le domaine spatial ou au sein de refroidisseurs pour des composants électroniques ou pour des réfrigérateurs portables, parmi d'autres applications. L'utilisation de modules thermoé-

lectriques présente différents avantages : ils sont complètement silencieux, de très grande fiabilité et leur fonctionnement ne nécessite pas l'usage de gaz nocifs pour l'environnement. De plus, un développement de thermogénérateurs à plus grande échelle pourrait constituer une nouvelle source significative d'énergie en revalorisant les quantités colossales de chaleur générées au cours de nombreux processus industriels (à titre d'exemple, les centrales nucléaires relarguent près de 70% de leur énergie sous forme d'eau chaude) [2].

L'efficacité de fonctionnement d'un module thermoélectrique est définie par le facteur de mérite adimensionnel  $ZT$  défini comme :

$$ZT = \frac{\sigma \alpha^2 T}{\kappa} \quad (\text{Éq. 1})$$

Où  $\sigma$ ,  $\alpha$ ,  $\kappa$  et  $T$  désignent, respectivement, la conductivité électrique (exprimée en  $S/m$ ), le coefficient de Seebeck (en  $V/K$ ) qui représente le rapport entre la tension générée et la différence de température, la conductivité thermique (en  $W/m.K$ ) et la température moyenne entre la zone chaude et la zone froide (en  $K$ ). Plus le facteur de mérite est élevé et plus le thermogénérateur sera capable de convertir efficacement de la chaleur en électricité. De ce fait, l'optimisation des performances thermoélectriques d'un matériau implique une maximisation de son facteur de mérite, c'est-à-dire de maximiser la conductivité électrique tout en minimisant la conductivité thermique. A ce jour, les seuls matériaux réussissant à concilier ces deux propriétés *a priori* contradictoires sont les semiconducteurs.

C'est la raison pour laquelle la plupart des modules thermoélectriques actuellement commercialisés reposent sur l'emploi de semiconducteurs inorganiques (en particulier des dérivés de tellure de bismuth,  $Bi_2Te_3$ ) qui sont difficiles à mettre en œuvre, coûteux et toxiques. De plus, leur facteur de mérite ne dépasse guère l'unité à température ambiante. À titre de comparaison, une valeur de  $ZT$  d'au moins 3 unités serait nécessaire pour qu'un refroidisseur thermoélectrique puisse concurrencer un réfrigérateur « classique » à cycle détente/compression [1].

En conséquence, le fait que les modules thermoélectriques reposent sur l'utilisation de matériaux toxiques et que leur rendement insuffisant ne contrebalance pas un coût de production élevé limite leur utilisation à quelques niches technologiques. Par contre, l'utilisation de semiconducteurs organiques constitue une voie particulièrement prometteuse.

## 2. Utilisation des semiconducteurs organiques dans le domaine thermoélectrique

C'est dans le courant des années quatre-vingt qu'a été découvert le potentiel des composés organiques conjugués (moléculaires et polymères) en tant que matériaux semiconducteurs. À la différence de leur pendant inorganique, ces composés sont caractérisés par des propriétés mécaniques très attractives (flexibilité, légèreté), une mise en œuvre facile par voie liquide, un faible coût de production, et une toxicité limitée. Ces différents avantages font de ces matériaux des candidats naturels à la fabrication de dispositifs thermoélectriques, moyennant un processus de dopage chimique pour les rendre conducteurs de l'électricité. Une valeur de  $ZT=0.42$  a ainsi été mesurée récemment au sein d'un film de poly(3,4-éthylènedioxythiophène) et de polystyrène sulfonate (PEDOT-PSS) où le volume total de dopants a été minimisé. Il s'agit du plus grand facteur de mérite mesuré à ce jour pour un semiconducteur organique qui est à comparer aux valeurs de  $ZT$  de 0.8 - 1.1 obtenues pour des

alliages de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , qui sont les matériaux les plus répandus pour des applications à une température inférieure à  $200^\circ\text{C}$  [3,4].

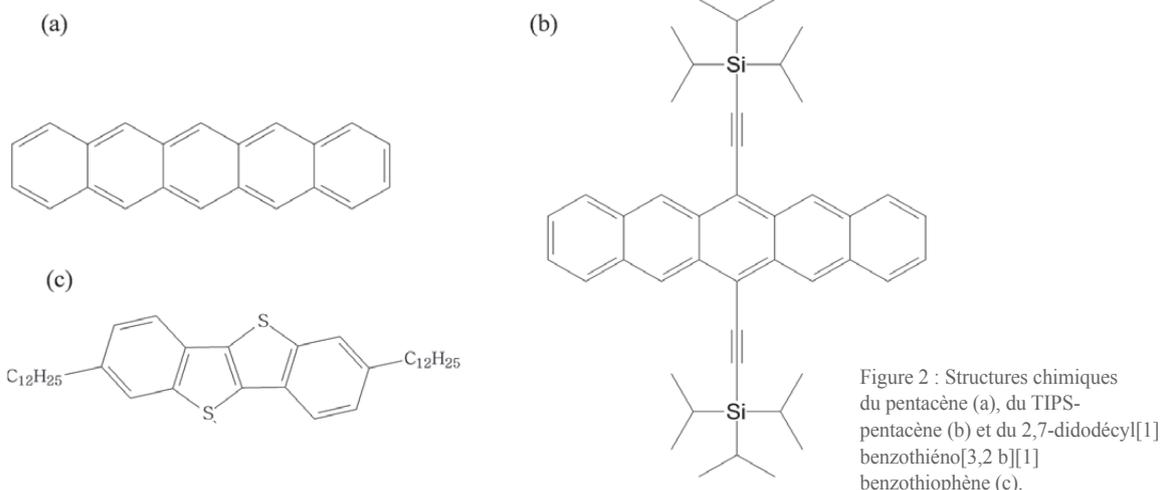
Parmi l'ensemble des paramètres définissant le transport thermoélectrique, la conductivité thermique est de loin celui qui a reçu le moins d'attention et ce, aussi bien d'un point de vue théorique qu'expérimental. Par ailleurs, les rares mesures de conductivité thermique qui ont été rapportées dans la littérature pour des systèmes moléculaires organiques font état de valeurs s'étalant de 0.1 à 0.7, ce qui est tout à fait encourageant dans le domaine thermoélectrique en comparaison du tellure de bismuth ( $\kappa_N = 1.2 \text{ W/m.K}$ ).

## 3. Description de la conductivité thermique de réseau de semiconducteurs organiques

D'un point de vue théorique, le transport de la chaleur est assuré par deux vecteurs différents (Éq. 2) : d'une part, les électrons ( $\kappa_e$ ) et d'autre part, les mouvements de vibration de réseau collectifs, appelés phonons ( $\kappa_N$ ).

$$\kappa = \kappa_e + \kappa_N \quad (\text{Éq. 2})$$

Pour les semiconducteurs faiblement dopés, c'est la contribution vibrationnelle qui gouverne généralement la conductivité thermique ( $\kappa_N \gg \kappa_e$ ) [5]. C'est le manque d'intérêt porté



à l'égard de ( $\kappa_N$ ) qui est à l'origine de ce travail. En effet, ce dernier est consacré à la modélisation théorique de la contribution vibrationnelle à la conductivité thermique au sein de cristaux moléculaires à base des trois semiconducteurs moléculaires organiques, à savoir le pentacène, un dérivé de pentacène (TIPS-pentacène) et un dérivé de benzothiénobenzothiophène (2,7-BTBT), voir Figure 2.

Dans le cadre de ce travail, leur conductivité thermique de réseau a été estimée selon chacune des directions de l'espace à partir de simulations classiques en champ de force (Dreiding) via l'algorithme de Müller-Plathe implémenté dans le programme LAMMPS. Etant donné qu'un matériau à bonnes performances thermoélectriques doit être caractérisé à la fois par une conductivité électrique élevée et une conductivité thermique faible, les résultats déduits par cette approche ont été confrontés à des valeurs de mobilité de porteurs de charge (qui est une quantité proportionnelle à la conductivité électrique). Celles-ci ont été obtenues au niveau de la Density Functional Theory (DFT) dans le programme Amsterdam Density Functional (ADF) via une méthodologie déjà décrite dans la littérature. De cette manière, il a été possible de comparer l'anisotropie du transport de chaleur avec celle du transport de charges et d'établir des relations structure-propriétés [6,7,8,9].

#### 4. Introduction à la modélisation moléculaire et à la dynamique moléculaire de non-équilibre

La modélisation moléculaire repose sur l'emploi d'un champ de force. L'expression utilisée pour le champ de force fait intervenir une somme de termes énergétiques qui décrit les atomes et leurs interactions comme des balles et des ressorts. Plus précisément, ces termes peuvent se distinguer en deux groupes (Fig. 3) : (i) ceux associés à la description d'interactions entre atomes liés (par exemple, les étirements de liaisons - « stretching » -, variations d'angles de liaison - « bending » -, et torsions) ; et (ii) ceux associés aux interactions entre atomes non liés (e.g. interactions électrostatiques et de van der Waals).

De manière générale, la dynamique moléculaire permet l'étude de l'évolution temporelle d'un système de particules sous l'effet d'une agitation thermique, typiquement obtenue en assignant aux atomes une vitesse en moyenne telle que  $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}kT$ . De façon plus rigoureuse, cette évolution est établie via les lois de la dynamique classique de Newton. Pour résoudre ces équations, la trajectoire des particules est subdivisée en une série d'états discrets (associés à un pas d'intégration  $\Delta t$ ) et la seconde loi de Newton permet d'obtenir diverses informations (positions et vitesses) à propos des « balles » sur lesquelles des forces sont exercées (Éq. 3).

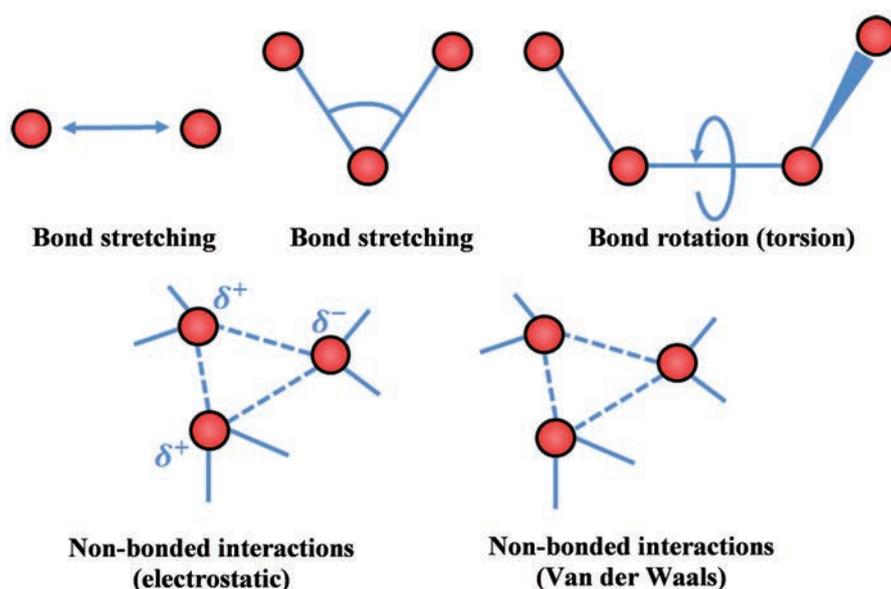


Figure 3 : Représentation schématique des termes énergétiques principaux d'un champ de force.

$$\begin{cases} \vec{F}_i = - \frac{dE(r_i \dots r_n)}{d\vec{r}_i(t)} \\ \vec{F}_i = m_i \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} \end{cases} \quad (\text{Éq.3})$$

La conductivité thermique de réseau qui doit être extraite des trajectoires est liée aux vibrations intermoléculaires, c'est-à-dire à la façon avec laquelle les molécules se déplacent les unes par rapport aux autres. Dans notre cas, la déduction de cette grandeur repose sur des simulations de dynamique moléculaire de non-équilibre. Le principe est le suivant : appliquer et alimenter un flux de chaleur  $J$  de manière à induire un gradient de température  $\nabla T$  qui sera mesuré lorsque le système aura atteint un état stationnaire. Ainsi, la conductivité thermique est extraite à l'aide de la loi de Fourier :

$$\kappa_N = - \frac{J}{\nabla T} \quad (\text{Éq. 4})$$

A cette fin, la boîte de simulation est préalablement subdivisée en  $N$  fines couches selon la direction parallèle à celle suivant laquelle s'effectuera le transport thermique. Puis, l'algorithme de Müller-Plathe crée un flux de chaleur  $J$  en échangeant les vitesses entre l'atome le plus « chaud » de la couche 0 (c'est-à-dire celui avec la plus grande énergie cinétique) et le plus « froid » de la couche  $N/2$  (avec la plus faible énergie cinétique), comme le montre la figure 4 [7].

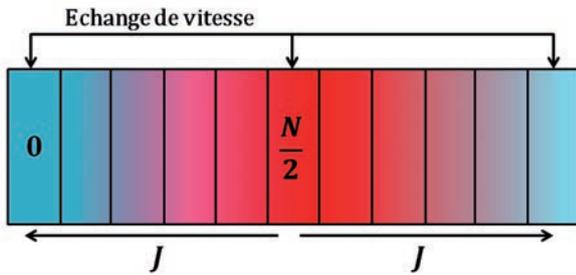


Figure 4 : Représentation schématique de l'algorithme de Müller-Plathe.

Le flux de chaleur généré est décrit par l'équation suivante :

$$J = \frac{1}{2At} \sum_{\text{transferts}} \left( \frac{1}{2}mv_{\text{chaud}}^2 - \frac{1}{2}mv_{\text{froid}}^2 \right) \quad (\text{Éq. 5})$$

Où  $A$  désigne la section efficace de la boîte (perpendiculaire au flux),  $t$  le temps de simulation et  $v$  la vitesse des particules. Puisque des conditions limites périodiques sont appliquées à la boîte de simulation, deux flux de chaleur s'écoulent depuis la couche centrale  $N/2$  et selon des sens opposés. C'est la raison pour laquelle un facteur 2 apparaît au dénominateur de l'équation 5. Finalement, le gradient de température  $\nabla T$  est établi à l'équilibre en mesurant la température moyenne de chacune des couches du système (Fig. 5). L'anisotropie du transport thermique peut être étudiée en appliquant cette méthodologie à chacune des directions de la boîte de simulation.

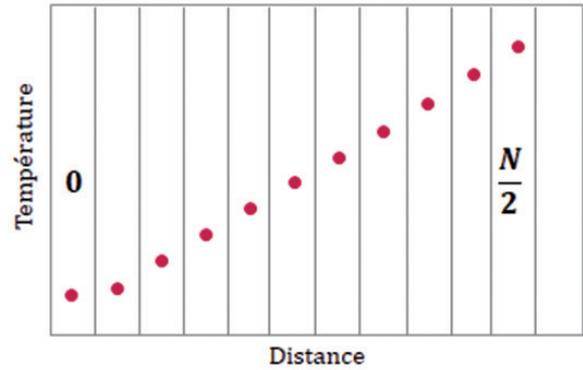


Figure 5 : Représentation schématique de la déduction du gradient de température  $\nabla T$

Il est à noter que la valeur de la conductivité thermique déduite via cette approche est fortement dépendante de la longueur  $L$  du système selon la direction de propagation de la chaleur. Or, les mesures expérimentales de la conductivité thermique s'effectuent au départ de films granulaires dont la dimension est largement supérieure au libre parcours moyen des phonons (de l'ordre de quelques centaines de nanomètres). Toutefois, il est possible de confronter les résultats des simulations aux mesures expérimentales (indépendantes de la dimension des grains) en faisant appel à une procédure d'extrapolation linéaire. Cette dernière consiste à calculer la conductivité thermique au sein d'une collection de boîtes de simulation de taille croissante selon la direction de propagation de la chaleur. Par la suite, une valeur de  $\kappa_N$  indépendante de la taille du système est déterminée en extrapolant linéairement la courbe schématique de la figure 6. Comme le montre cette figure, la conductivité thermique de réseau diminue avec

la taille du système ; ceci s'explique par le fait que nous introduisons de manière artificielle des processus de réflexion des phonons au niveau de la boîte de simulation, ce qui a pour effet de limiter le transport de chaleur et d'améliorer les performances thermoélectriques. Il est dès lors important d'extrapoler les résultats obtenus pour décrire une situation caractéristique du bulk des cristaux moléculaires.

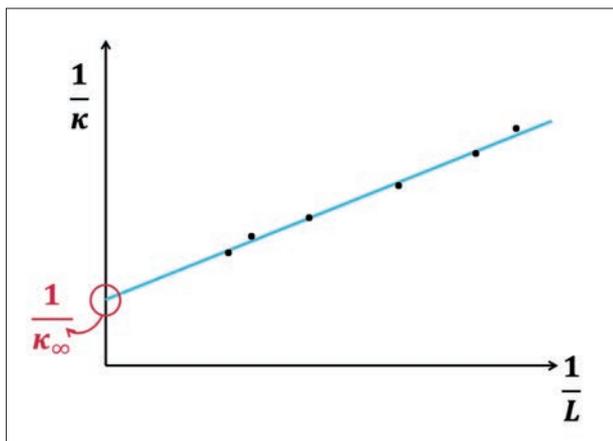


Figure 6 : Représentation schématique de la procédure d'extrapolation linéaire permettant de déterminer une conductivité thermique indépendante de la taille du système.

#### 4. Comparaison du transport thermoélectrique entre différents semiconducteurs organiques

Les oligoacènes, benzothiénobenzothiophènes ainsi que leurs dérivés sont des composés particulièrement prometteurs dans le domaine thermoélectrique puisqu'ils sont caractérisés par de hautes valeurs de mobilité des porteurs de charges ( $\mu = 1.7 \times 10^2 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  pour le 2,7didodécyl[1]-benzothiéno[3,2-b][1]benzothiophène,  $\mu = 5.5 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  pour le pentacène et  $\mu \sim 1 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  pour le TIPS-pentacène). De plus, le pentacène et le TIPS-pentacène se distinguent par des valeurs de coefficient de Seebeck particulièrement honorables ( $3 \times 10^{-4}$  et  $10^{-3} \text{ V/K}$ , respectivement) en comparaison à celle du tellure de bismuth ( $2.4 \times 10^{-4} \text{ V/K}$ ) [9,10,11,12,13].

##### 4.1. Pentacène

Le pentacène est un hydrocarbure aromatique polycyclique qui est composé de cinq cycles benzéniques fusionnés formant une structure planaire. Ce composé cristallise selon plusieurs formes

polymorphiques. Celle qui est la plus attractive pour des applications électroniques (comme des transistors à effet de champ) et qui a été considérée dans ce travail correspond à une cellule unitaire triclinique contenant deux molécules disposées en une conformation « herringbone » dans le plan  $ab$  et qui s'empilent en couches selon l'axe  $c$  (Fig.7). Les valeurs de conductivité thermique extrapolées à l'infini selon les directions  $a$ ,  $b$  et  $c$  ainsi que les mobilités de porteurs de charges  $\mu_h$  correspondantes sont renseignées dans le tableau 1 [14].

	Transport électrique	Transport thermique
	$\mu_h$ [ $\text{cm}^2/\text{V.s}$ ]	$\kappa_N$ [ $\text{W}/\text{m.K}$ ]
$a$	8.64	0.15
$b$	6.18	0.11
$c$	0.35	0.15

Tableau 1 : Comparaison des performances électriques et thermiques au sein d'un cristal de pentacène selon les trois directions de l'espace.

La conductivité thermique de réseau est exprimée en  $\text{W}/\text{m.K}$  et les mobilités des porteurs de charges  $\mu_h$  en  $\text{cm}^2/\text{V.s}$ .

En ce qui concerne la diffusion thermique, ces résultats sont cohérents avec les données expérimentales rapportées dans la littérature qui font état de valeurs de l'ordre de  $10^{-1} \text{ W}/\text{m.K}$ . A l'échelle moléculaire, c'est l'intensité du couplage électronique entre les orbitales HOMO des molécules voisines qui définit la mobilité  $\mu_h$  selon la direction envisagée. Généralement, la communication électronique est plus faible selon la direction d'empilement des couches qu'au sein du plan  $ab$ . Ainsi, il s'avère que le transport de la chaleur au sein de cristaux de pentacène est nettement moins anisotrope (3D) que le transport de charges (2D) étant donné que les valeurs de conductivité thermique extrapolées à l'infini selon les directions  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont du même ordre de grandeur [15].

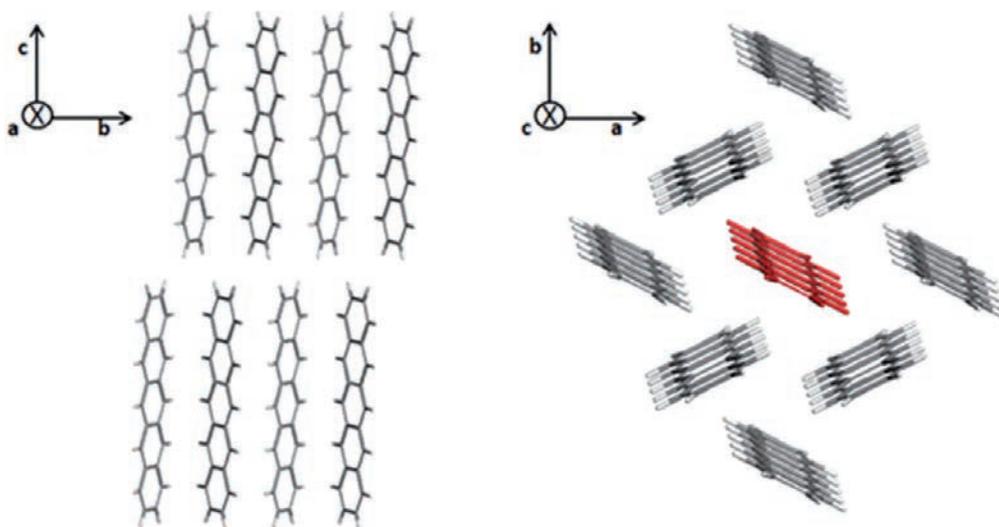


Figure 7 : Vues de côté et du dessus de l'empilement herringbone d'un cristal à base de molécules de pentacène

## 4.2. TIPS-pentacène

La solubilité du pentacène dans des solvants organiques peut être améliorée en le substituant par un groupement triisopropylsilyléthynyle de part et d'autre du cycle central. Le composé obtenu correspond au TIPS-pentacène. L'encombrement stérique généré par ces groupements modifie l'orientation des plans conjugués, se présentant de manière quasi-parallèle les uns par rapport aux autres. *A priori*, l'introduction de ces groupements TIPS devrait induire des modifications importantes du transport thermoélectrique en comparaison à ce qui est observé pour le pentacène [16].

Une analyse des résultats rapportés dans le tableau 2 indique en effet que la présence de groupements triisopropylsilyléthynyles rend

	Transport électrique	Transport thermique
	$\mu_h$ [ $cm^2/V.s$ ]	$\kappa_N$ [ $W/m.K$ ]
<i>a</i>	1.31	0.120
<i>b</i>	0.05	0.086
<i>c</i>	0.0003	0.099

Tableau 2 : Comparaison des performances électriques et thermiques au sein d'un cristal de TIPS-pentacène selon les trois directions de l'espace. La conductivité thermique de réseau  $\kappa_N$  est exprimée en W/m.K et les mobilités des porteurs de charge  $\mu_h$  en  $cm^2/V.s$ .

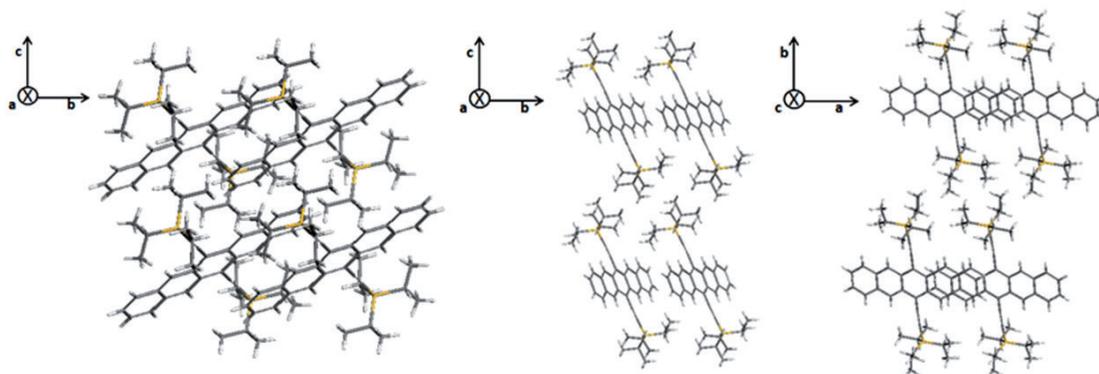


Figure 8 : Vues depuis différents plans d'un système à base de TIPS-pentacène.

complètement défavorable le transport de charges électriques le long des directions  $b$  et  $c$  et mais conduit à nouveau à des valeurs de conductivité thermique similaires selon les trois directions.

#### 4.3. 2,7-BTBT

Le dérivé du benzothiéno benzothiophène étudié dans le cadre de ce travail possède une structure cristalline en tout point comparable à celle du pentacène, à ceci près qu'il se présente sous la forme d'une cellule unitaire quasi-orthorhombique. Les dérivés de BTBT se distinguent par la présence de longues chaînes alkyles attachées aux extrémités du cœur conjugué.

	Transport électrique	Transport thermique
	$\mu_h$ [cm <sup>2</sup> /V.s]	$\kappa_N$ [W/m.K]
$a$	3.31	0.078
$b$	0.90	0.075
$c$	Pas disponible	0.18

Tableau 3 : Comparaison des performances électriques et thermiques au sein d'un cristal de 2,7-BTBT selon les trois directions de l'espace. La conductivité thermique de réseau  $\kappa_N$  est exprimée en W/m.K et les mobilités des porteurs de charge  $\mu_h$  en cm<sup>2</sup>/V.s.

Il est à noter que le transport de charges électriques selon la direction  $c$  n'a pas été repris au

sein du tableau 3 puisque la présence de longues chaînes alkyles limite de façon considérable le transport de charges. A nouveau, l'examen des valeurs de conductivité thermique extrapolées à l'infini dans le plan  $ab$  font état d'un transport de la chaleur moins anisotrope ( $\kappa_N^a / \kappa_N^b \sim 1.04$  que celui des charges électriques ( $\mu_h^a / \mu_h^b \sim 3.67$ ).

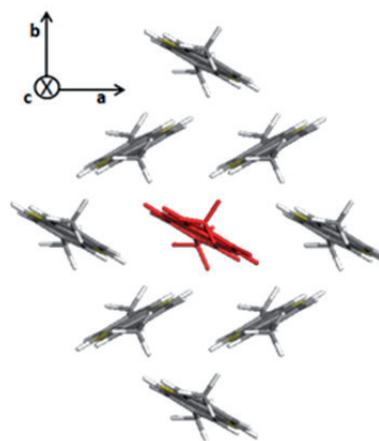


Figure 9 : Vues du dessus de l'empilement herringbone d'un système à base de 2,7-BTBT.

## 5. Conclusions

Dans cette étude, la conductivité thermique de réseau  $\kappa_N$  de cristaux à base de pentacène, de TIPS-pentacène et de 2,7-BTBT a été estimée par le biais de dynamique moléculaire de non-équilibre (algorithme de Müller-Plathe). L'ensemble des valeurs de  $\kappa_N$  extrapolées à l'infini selon les trois axes cristallographiques des cristaux sont reprises dans le tableau 4. Ces dernières sont cohérentes avec les mesures expérimentales déjà rapportées dans la litté-

	$\kappa_N^a$ [W/m.K]	$\kappa_N^b$ [W/m.K]	$\kappa_N^c$ [W/m.K]
Pentacène	0.15	0.11	0.15
TIPS-pentacène	0.120	0.086	0.099
2,7-BTBT	0.078	0.075	0.18

Tableau 4 : Comparaison des performances thermiques au sein d'un cristal de pentacène, de TIPS-pentacène et de 2,7-BTBT selon les trois directions de l'espace. La conductivité thermique de réseau est exprimée en W/m.K.

ture. Dans le cas du 2,7-BTBT, il apparaît que la présence d'un groupement volumineux substituant les cœurs conjugués tend à diminuer leur amplitude de vibrations et, par conséquent, la diffusion thermique dans le plan « herringbone ». Ainsi, le cristal de 2,7-BTBT est caractérisé : (i) par un transport thermique favorable selon la direction des chaînes alkyles ; et (ii) par un transfert de charges électriques efficaces dans le plan *ab*. De ce fait, ce caractère orthogonal pourrait être mis à profit au sein de dispositifs thermoélectriques où la chaleur serait évacuée le long de la direction perpendiculaire au déplacement des porteurs de charge.

## 6. Méthodologie

L'ensemble des simulations décrites dans ce travail ont été réalisées au départ du champ de force Dreiding pour lequel les termes entre atomes liés ont été reparamétrés sur base de calculs de chimie quantique [17]. Tout d'abord, les boîtes de simulation ont subi une optimisation de géométrie à volume constant, suivie d'une dynamique d'équilibration NVT ( $T = 298\text{ K}$ ) de  $1\text{ ns}$  avec un pas de temps  $\Delta t = 0.2\text{ fs}$ . Cette étape est suivie d'une première dynamique de mise hors-équilibre NVE ( $1\text{ ns}$ ) au cours de laquelle l'atome le plus froid de la couche centrale ( $N/2$ ) et l'atome le plus chaud de la couche externe ( $0$ ) sont échangés à l'aide de l'algorithme de Müller-Plathe implémenté dans le programme LAMMPS [6,7,8]. Finalement, la conductivité thermique de réseau est extraite d'une plus longue trajectoire de dynamique NVE ( $4\text{ ns}$ ). Le système a été subdivisé en 20 couches où les vitesses entre atomes sont échangées toutes les  $250\text{ fs}$ . Au cours de ces simulations, la température du système est contrôlée tous les  $500$  pas de temps. Cette procédure a été par la suite appliquée à une série de boîtes de simulation de dimension croissante selon la direction d'intérêt afin d'y déduire la conductivité thermique de réseau via une procédure d'extrapolation linéaire.

## Remerciements

Les ressources informatiques utilisées dans ce travail ont été fournies par le Consortium des Equipements de Calcul Intensif (CECI) financé par le FRS-FNRS (Grant 2.5020.11). A.V., D. B., et J. C. sont chercheurs du FNRS. A.V. remercie la Société Royale de Chimie pour l'octroi du prix SRC.

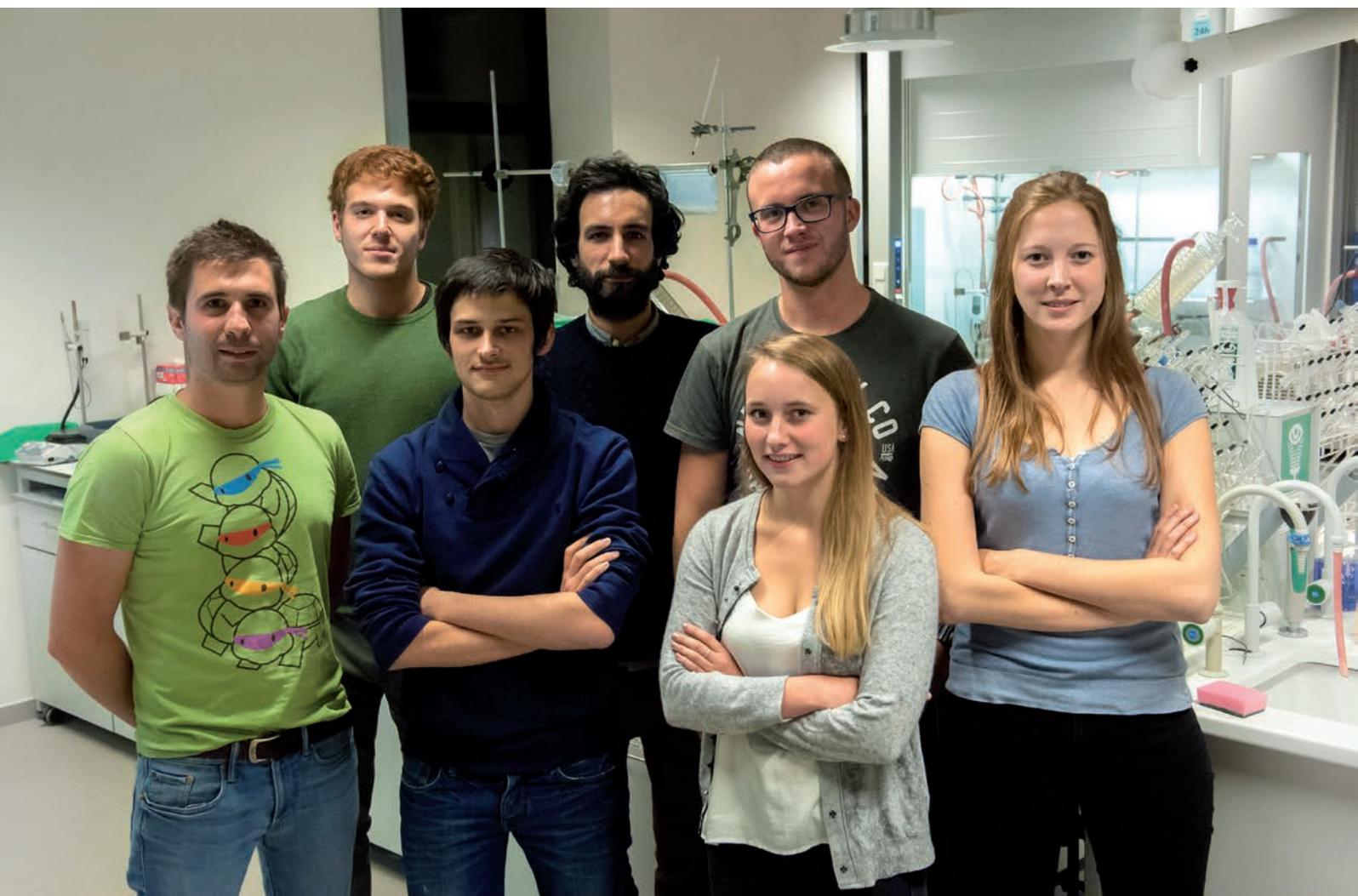
## Références

- [1] C. Godart, « Matériaux à effets thermoélectriques », *Techniques de l'ingénieur*, **2015**, n1500.
- [2] J-L Bobin, E. Huffer et al., « L'énergie de demain : Techniques, environnement, économie », édition EDP sciences, 2005.
- [3] G-H. Kim et al., "Engineered doping of organic semiconductors for enhanced thermoelectric efficiency", *Nat. Mater.* **12**, 7119, **2013**.
- [4] H. J. Goldsmid et al., "Recent Trends in Thermoelectric Materials, Semiconductors and Semimetals", Vol 69, Ch. 1 (Academic **2000**).
- [5] J. Perron, « Matériaux thermoélectriques polymères », *Techniques de l'ingénieur*, **2014**, k721.
- [6] S.L. Mayo et al., "DREIDING: A Generic Force Field for Molecular Simulations", *J. Phys. Chem.*, **94**, 1990.
- [7] F. Müller-Plathe et F. Reith, "Cause and effect reversed in non-equilibrium molecular dynamics: an easy route to transport coefficients", *Comput. Theor. Polym. Sci.*, **9**, 203, **1999**.
- [8] <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>
- [9] Y. Tsutsui, G. Schweicher, et al., "Unraveling Unprecedented Charge Carrier Mobility through Structure Property Relationship of Four Isomers of Didodecyl [1] benzothieno[3,2-b][1]benzothiophene", *Adv. Mater.*, **28**, **2016**.
- [10] H. Klauk, M. Halik et al., "High-mobility polymer gate dielectric pentacene thin film transistors", *J. Appl. Phys.* **92**, 5259, **2002**.
- [11] S.K. Park et T. N. Jackson, "High mobility solution processed 6,13 bis(triisopropylsilyl)ethynyl pentacene organic thin film transistors", *Appl. Phys. Lett.* **91**, 063514, **2007**.
- [12] K. P. Pernstich et al., "Field-effect-modulated Seebeck coefficient in organic semiconductors", *Nat. Mater.*, **7**, 28 (**2008**).
- [13] T. Inohara et al., "Large Thermoelectric Power Factor at Low Temperatures in OneDimensional Telluride  $\text{Ta}_2\text{SiTe}_4$ ", *Appl. Phys. Lett.* **110**, 183901, **2017**. [14] S. Schiefer et al., "Determination of the Crystal Structure of Substrate-Induced Pentacene Polymorphs in Fiber Structured Thin Films", *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, **2007**.
- [15] N. Kim, "Thermal transport properties of thin films of small molecule organic semiconductors", *Appl. Phys. Lett.* **87**, 241908, **2005**.
- [16] Z. Stewart, "Organic Thin-Film Transistors and TIPS-Pentacene", [uknowledge.uky.edu](http://uknowledge.uky.edu), **2013**.
- [17] Y. Tsutsui, G. Schweicher, et al., "Unraveling Unprecedented Charge Carrier Mobility through Structure Property Relationship of Four Isomers of Didodecyl [1] benzothieno[3,2-b][1]benzothiophene", *Adv. Mater.*, **28**, **2016**.



Maximilien RICHALD\*, Frédéric PEYRUSSON, Ariane SABLON, Sophie WUYCKENS, Mario SUNDIC, Bastien BAIX, Michaël SAINT-GUILLAIN, Martin ROUMAIN  
 Université catholique de Louvain, Place de l'Université 1,  
 1348 Louvain-la-Neuve, [maximilien.richald@uclouvain.be](mailto:maximilien.richald@uclouvain.be),  
[contact@ucltomars.org](mailto:contact@ucltomars.org)

## « UCL to MARS 2018 » : Des chercheurs et étudiants de l'UCL partent pour Mars !



### Résumé

Lorsqu'on pense aujourd'hui aux avancées dans le domaine spatial qui seront réalisées au cours du 21<sup>e</sup> siècle, la planète Mars occupe tous les esprits. Sa proximité et sa ressemblance avec la Terre font d'elle une candidate de premier plan

pour des études comparatives, des recherches sur la présence de vie et une éventuelle colonisation.

Depuis 2008, des équipes composées de docteurs, de masters et de bacheliers de l'université de Louvain participent au programme de

*simulation de la vie sur Mars, basé à la Mars Desert Research Station (MDRS) dans le désert de l'Utah. Cette année, un pas supplémentaire a été franchi, car une équipe, composée de 4 étudiants et 4 chercheurs de l'UCL, issus des domaines des sciences et sciences appliquées, a été sélectionnée pour aller vivre pendant 15 jours dans la station.*

*Cette station offre une infrastructure scientifique respectant les contraintes de la vie sur Mars : espace d'habitation confiné, expéditions en combinaisons spatiales et nourriture lyophilisée. Nous y mènerons des expériences scientifiques permettant une préparation optimale d'un futur vol habité vers Mars.*

*Ce programme de recherche, soutenu par la NASA, est développé par la Mars Society, une association américaine dont l'objectif est de promouvoir l'exploration et la colonisation martienne auprès du grand public et des institutions gouvernementales.*

#### *Outline*

*Since 2008, crews composed by PhD, Masters and Bachelor students from the "Université catholique de Louvain" have participated in the program of Mars-life simulation based at the Mars Desert Research Station. The station offers a scientific infrastructure following the specific-set of restrictions found in a Martian environment: confined spaces, space suits expeditions, small labs, limited resources, freeze-dried food... This year, the crew is composed of 8 people coming from different faculties of engineering and sciences. They have planned to perform experiments in view to prepare a future Mars expedition. This research program, supported by NASA, is developed by the Mars Society, an American association which aims to promote Mars exploration and colonization by governmental institutions and the general public.*

#### *Mots-clés*

*Mars, Space, Simulation, Exploration*

Comme chaque année depuis 2012, une équipe de l'UCL, composée de quatre chercheurs et quatre étudiants, prépare une expédition

scientifique hors norme qui les amènera dans un monde encore trop peu exploré, la planète Mars ! De quoi s'agit-il plus exactement ? Cette expédition scientifique nommée « UCL to Mars 2018 » a pour but de simuler une mission d'exploration de la planète Mars en reproduisant au maximum toutes les conditions qui seront rencontrées sur la planète rouge. Pour ce faire, les huit scientifiques embarqueront pour Mars le 10 mars 2018 et passeront deux semaines à bord afin de mener différentes expériences d'intérêt pour l'exploration spatiale.

### 1. La station plus en détails

La station de simulation nommée « Mars Desert Research Station » est située dans le désert de l'Utah (USA) à environ 400 Km au sud de la ville de Salt Lake City. Elle accueille chaque année de nombreux scientifiques, tous animés par le même désir d'un jour coloniser la planète Mars et de contribuer à son exploration. Mais pourquoi travailler dans un endroit tellement isolé ? Les conditions particulières d'isolement de ce lieu permettent l'analyse rigoureuse des études de terrain en tenant compte des paramètres expérimentaux mais également des nombreux facteurs humains qui influencent de manière certaine une mission de ce type.

Construite et mise en œuvre en 2001 par la Mars Society, cette station est composée de plusieurs modules permettant la réalisation d'expériences diverses et variées mais également la vie d'un équipage pendant toute la durée de la simulation. L'« Habitat », module central de la station, est constitué d'un cylindre de 8 mètres de diamètre et comprend une salle de séjour, des couchettes et des sanitaires. Elle comprend également un laboratoire et une salle de préparation aux sorties sur le terrain à l'étage du bas, tandis que l'étage supérieur contient le matériel nécessaire aux expériences.



Figure 1 : Vue générale de la station MDRS

Un module d'observation est également présent et dispose de deux télescopes : un télescope « 14" Celestron Schmidt-Cassegrain » ainsi qu'un « CGE pro équatorial ». Ces instruments permettent tous deux l'utilisation de caméras pour réaliser des prises d'images et sont montés dans un dôme autonome qui peut être contrôlé sur le site ou bien depuis le module central d'habitat.

D'autre part, la présence d'une serre disposant d'un système aquaponic classique et d'un système de contrôle de la température permet l'étude de la croissance de plantes dans un milieu hostile tel que Mars. En effet, les conditions rencontrées sur cette planète d'un point de vue des températures, atmosphère, radiations mais également la présence d'eau sont extrêmement différentes des conditions rencontrées sur terre. Par exemple, cette planète ne possédant pas de champ magnétique et d'atmosphère épaisse, la surface de la planète est fortement soumise aux rayons cosmiques qui peuvent provoquer la dégradation de matériel vivant à sa surface.

Enfin, depuis le mois de novembre 2017, la MDRS (Mars Desert Research Station) comprend un tout nouveau module RAMM (Repair And Maintenance Module) fabriqué à partir du corps d'un ancien hélicoptère « chinook » et permet d'assurer la maintenance des véhicules et du matériel scientifique encombrant.

## 2. Quelles expériences seront réalisées durant la simulation

Différents projets allant de l'analyse chimique du terrain jusqu'à la cartographie du site via un drone en passant par des expériences sur du matériel vivant seront réalisés. L'équipe s'efforce non seulement de réaliser des recherches d'intérêt pour l'exploration spatiale mais aussi des expériences qui s'articulent entre elles, faisant des profils variés de l'équipe un réel avantage.

Du côté de la physique, une technique de muographie sera notamment utilisée afin d'étu-



Figure 2 : T el scope

dier   distance le relief, tels que les collines et autres massifs environnants de la station. Cette technique a d ej  d emontr e son succ es lors des r ecentes d ecouvertes de nouvelles salles dans les pyramides  gyptiennes et permettra cette fois-ci de d eterminer s'il y a int er et ou non d'envoyer une  quipe se rendre physiquement sur les lieux. Cette  tude permet de compl eter la cartographie qui sera obtenue gr ace   l'usage d'un drone et ce en impl ementant directement les donn ees sur la carte.

Du point de vue de la chimie, les concentrations de l'azote total [1, 2], phosphate [3] et bore [4] contenues dans le sol « martien » seront mesur ees par spectrophotom etrie UV-vis et permettront d'impl ementer les donn ees ainsi cr e es sur la carte fabriqu ee   l'aide d'un drone. De plus, cette m eme technique sera d'ailleurs utilis ee par un autre membre d' equipe, Martin Roumain, pour  tudier la d egradation de principes actifs au sein d'une station soumise   des conditions de temp erature, radiation etc., diff erentes de la

normale terrienne [5, 6]. De plus, d'autres param etres tels que la salinit e et le pH du sol seront  galement  tudi es [7].

La chimie des sols est une composante cl e dans l' tude des plan etes et leur capacit e   abriter la vie. Aussi, les r esultats de l'analyse des sols seront directement exploit es et viendront impl ementer les exp eriences d'adaptabilit e des bact eries terrestres   l'environnement martien, r ealis ees par Fr ed eric Peyrusson.

De plus, les nombreuses restrictions li ees   cette simulation ont directement conditionn e le choix des techniques et des proc edures exp erimentales. En effet, l'isolement au sein de la station implique la n ecessit e d' eviter l'emploi de produits toxiques, facilement inflammables ou encore de flammes ! D'autre part, sortir de la station implique le fait de devoir s' equiper : combinaisons, casques, bottes, appareils respiratoires, etc. ; ainsi que des proc edures de sortie complexes, notamment l'obligation de pas-

ser par un sas de décompression et l'obligation de respecter un certain délai maximum sur le terrain. Bref, autant de paramètres qui compliquent la mise au point d'expériences mais qui ne font que rendre la simulation encore plus réelle. Vu la complexité de la simulation et dans le but de mettre au point un horaire optimal tenant compte d'un maximum de contraintes, l'équipe se basera sur de l'analyse mathématique opérationnelle permettant de se placer sur un des optimum en prenant en compte toutes les contraintes et incertitudes rencontrées par les membres de l'équipage au cours de la mission. Cette simulation est donc un modèle complet et proche des futures explorations spatiales, puisqu'elle permettra à l'équipage, en plus de résultats d'intérêt pour la conquête spatiale, de tester des méthodologies compatibles avec les contraintes de l'exploration et leur optimisation.

### 3. Comment ce projet est-il financé et comment l'équipe s'est-elle formée ?

En tant que doctorants ou étudiants au sein de l'UCL, les membres de la mission ont postulé et ont été sélectionnés par la Mars Society, l'organisme gestionnaire et propriétaire de la base et entretenant des relations étroites avec la NASA. Elle compte d'ailleurs en son sein des membres connus tels que Buzz Aldrin qui a été le deuxième homme à marcher sur la lune ou encore Elon Musk le fondateur et CEO de « SpaceX ». Ce dernier a notamment financé une partie des équipements de la station. Suite à la sélection de l'équipe, le projet a alors pu démarrer et les membres ont commencé une recherche de fonds afin de financer ce projet scientifique novateur. De nombreux sponsors ont d'ailleurs déjà accordé leur confiance à l'équipage en le soutenant d'un point de vue financier et matériel. Néanmoins, l'équipage est toujours à la recherche d'autres mécènes afin de boucler son budget et de soutenir une jeune équipe de scientifiques qualifiés.

Ce projet, qui existe maintenant depuis de nombreuses années, prend de l'ampleur puisque dans les jours à venir il va bénéficier de sa

propre ASBL et ainsi assurer la création de projets scientifiques s'étalant sur plusieurs simulations. Il est clair que cette expédition, de même que toutes celles l'ayant précédée, est un petit pas dans l'accumulation de données pour la préparation du voyage martien.

Pour en savoir plus, rendez-vous sur [www.ucltomars.org](http://www.ucltomars.org) ou encore sur Facebook, LinkedIn ou Twitter pour suivre l'évolution et le développement de ce projet audacieux !

## Références

- [1] P. Nagaraj, N. Gopalakrishna Bhat, KG. Chandrashekar ; *Int. J. Chem. Stud.* 2016, 4(3), 101-105
- [2] Metrohm, *Application bulletin*, 2013, 132/2, determination of ammonium with the ion-selective electrode
- [3] B. Shyla, Mahadevaiah, G. Nagendrappa ; *Spectrochim. Acta.* 2011, 78, 497-502
- [4] Watson, M. E. 1988. Recommended soil boron test. p. 23-25. In W. C. Dahnke; *Agric. Expt. Stn. Bull.* No. 499.
- [5] B. Du, V.R. Daniels, Z. Vaksman, J.L. Boyd, C. Crady, L. Putcha ; *AAPS Journal* 2011, 13(2), 299-308.
- [6] V.E. Wotring ; *AAPS Journal* 2016, 18(1), 210-2016.
- [7] Recommended Chemical Soil Test Procedures; North Central Regional Research Publication N°221, (1998 Revised, PDF corrected 2011).

**Romarc GERARDY**

Liège Université, r.gerardy@uliege.be

**Sébastien LELOUX**

Université Catholique de Louvain, sebastien.leloux@uclouvain.be

**Stephan van den WILDENBERG**

Liège Université, svdwildenberg@uliege.be

# Division des Jeunes Chimistes de la Société Royale de Chimie

## 1. Présentation

La « division des jeunes chimistes » est une sous-section de la SRC qui nourrit les mêmes ambitions que son aînée, à savoir la promotion de la chimie en communauté française de Belgique. Par le biais de diverses activités, elle favorise la rencontre et l'échange entre jeunes acteurs de la chimie, tels que mémorants, doctorants et chercheurs postdoctoraux des universités de la Fédération Wallonie-Bruxelles. Elle constitue également un tremplin vers le monde de l'emploi, en permettant à ces derniers la création d'un réseau de contacts, qu'ils se destinent à une carrière dans le secteur privé ou

académique. Au-delà de l'aspect professionnel, elle permet aussi tout simplement la création de liens sociaux entre des jeunes chimistes partageant une passion commune.

## 2. L'équipe

L'équipe est constituée de 9 bénévoles poursuivant une thèse de doctorat en parallèle au sein des diverses institutions académiques de la Fédération Wallonie-Bruxelles : ULB (4 représentants), UCL (1 représentant), UNamur (2 représentants) et ULiège (2 représentants).



L'équipe 2017-2018 de la division des jeunes chimistes de la SRC. De gauche à droite : Christophe Frédéric (UNamur), Alexia Papageorgiou (ULB, secrétaire), Stephan van den Wildenberg (ULiège, président), Pierre Thilmann (ULB), Sébastien Leloux (UCL, vice-président), Nicolas Maira (ULB, trésorier), Antoine Aerts (ULB), Romarc Gérardy (ULiège, secrétaire), Julien Delbrouck (UNamur).

### 3. Les activités

#### 3.1. La Journée-Rencontre des Jeunes Chimistes de la SRC

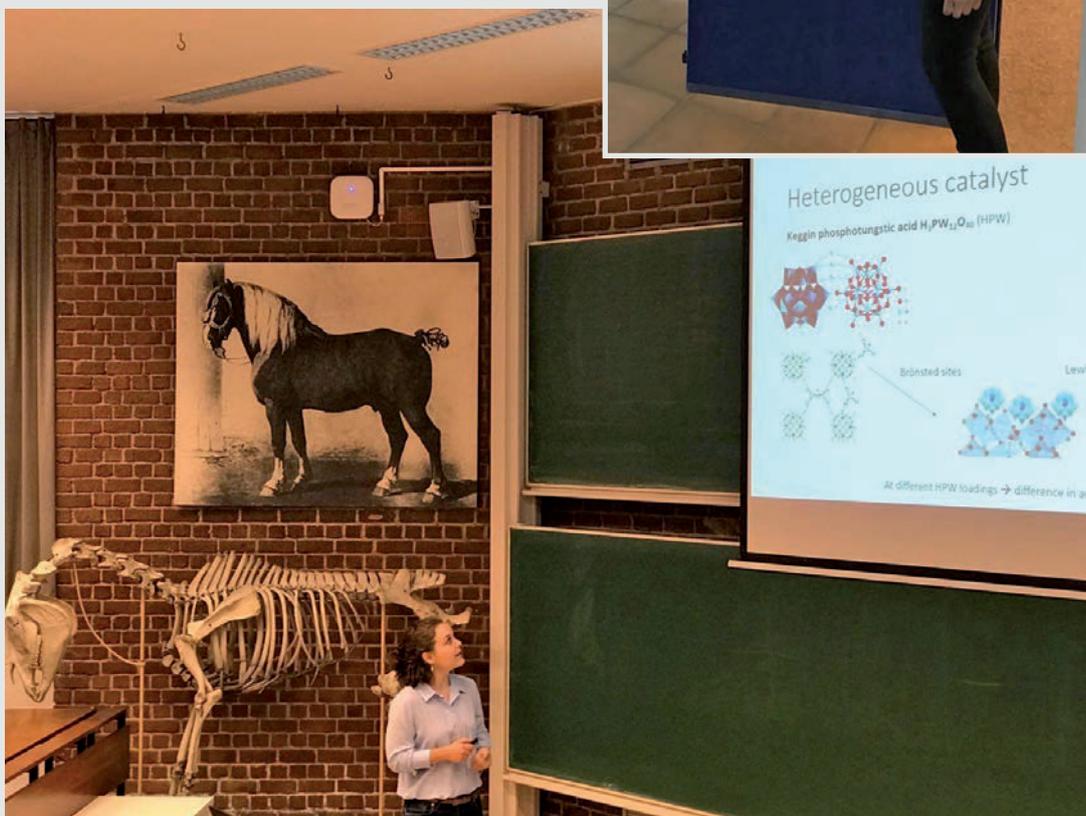
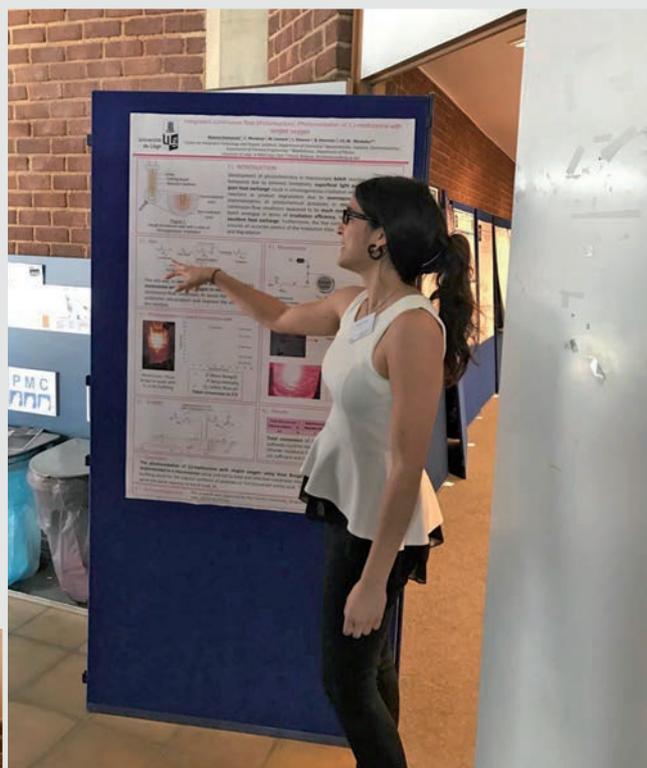
La Journée-Rencontre des Jeunes Chimistes de la SRC est une journée de conférences organisée annuellement par le comité. Elle se différencie des congrès « classiques » par le fait que seuls les mémorants, doctorants et post-doctorants sont conviés à cet événement multidisciplinaire. Ces derniers ont donc l'opportunité de partager leurs résultats de recherche avec leurs pairs, mais dans un cadre moins formel et intimidant que celui des congrès internationaux. La réalisation d'une communication est obligatoire pour participer à l'événement, et peut se faire sous forme d'un poster ou d'une présentation orale, en anglais. La journée constitue donc un cadre idéal pour s'exercer à la communication scientifique et à la vulgarisation. Cette activité peut être, de plus, valorisée en crédits ECTS pour la formation doctorale des participants. Des prix récompensant le meilleur poster et la meilleure présentation orale sont remis à la fin de la journée autour du traditionnel verre de l'amitié, après l'élection des heureux gagnants par l'ensemble des participants.

Lors de la 10<sup>e</sup> édition de la journée, organisée à l'UCL le 31 mars 2017, 34 étudiants représentant 4 universités francophones de Belgique (UCL, ULB, ULiège et UNamur) se sont retrouvés. Cet événement convivial a été le théâtre de 11 communications orales et de 21 présentations posters. Le prix de la meilleure présentation orale a été remis à Chiara Pezzota (UCL) pour «Role of Lewis and Brønsted acid sites in the resorcinol tert-butylation catalyzed by heteropolyacid-based catalysts». Noémie Emmanuel (ULiège) a reçu quant à elle le prix du meilleur poster, qui était intitulé «Integrated continuous flow photo-reactors: Photooxidation of (L)-methionine with singlet oxygen».



Photos de groupe, prise lors de la 10<sup>e</sup> édition de la Journée-Rencontre des Jeunes Chimistes de la SRC.

Noémie Emmanuel (en haut) et Chiara Pezzota (en bas), lauréates du prix du meilleur poster et de la meilleure présentation orale, respectivement, lors la 10<sup>e</sup> Journée-Rencontre des Jeunes Chimistes de la SRC.



### 3.2. Le Tournoi de Badminton Interuniversitaire

Le tournoi de badminton organisé annuellement par le comité des jeunes chimistes permet de rassembler des participants de tous les horizons, qu'ils soient étudiants ou professeurs, voire même non-chimistes, lors d'un après-midi centré autour du sport, mais à vocation conviviale avant tout. L'édition 2017 s'est déroulée le 2 juin au complexe

Blocry à l'UCL, et a rassemblé 14 équipes de 2 joueurs qui se sont disputées la première place du tournoi. L'équipe « Greenbad », formée par Gilles Spronck (ULiège) et Nicolas Eshraghi (ULiège) a été sacrée gagnante après avoir affronté ses adversaires au cours des nombreux matchs disputés. Le tournoi a finalement été clôturé autour d'un drink rassemblant les différents participants, afin de débattre des exploits de la journée.



Photos de groupe, prise lors de l'édition 2017 du tournoi de badminton des jeunes chimistes de la SRC.

### 3.3. Les visites d'entreprises

Chaque année, des visites d'entreprises sont organisées par la division des jeunes chimistes. Chaque visite est une occasion unique pour les étudiants qui peuvent se renseigner sur l'activité de l'entreprise, par le biais d'un tour guidé organisé par un responsable. Ces visites permettent, de plus, de nouer des contacts avec de futurs employeurs potentiels. Différentes sociétés basées en Belgique ont ainsi aimablement ouvert leurs portes aux jeunes chimistes telles qu'AGC-Glass (2017), Certech (2016), Dow Corning (2015), Pfizer (2010), Lhoist (2010), Prayon (2010), Luyten (2010), Arpadis (2010), Nanocyl (2009) et Total (2009).

### 4. Contact

Si vous désirez des informations complémentaires sur la division des jeunes chimistes de la SRC, ou si vous désirez vous aussi rejoindre ce comité dynamique constitué de jeunes doctorants, n'hésitez pas à nous contacter à [jeuneschimistessrc@gmail.com](mailto:jeuneschimistessrc@gmail.com) ou à consulter notre site internet <http://jc-src.ulb.be/>. Vous pouvez également consulter vos représentants locaux au sein de votre université pour de plus amples informations :

Julien Delbrouck	(UNamur)	<a href="mailto:julien.delbrouck@unamur.be">julien.delbrouck@unamur.be</a>
Christophe Frederic	(UNamur)	<a href="mailto:christophe.frederic@unamur.be">christophe.frederic@unamur.be</a>
Romaric Gérardy	(ULiège)	<a href="mailto:r.gerardy@uliege.be">r.gerardy@uliege.be</a>
Sébastien Leloux	(UCL)	<a href="mailto:sebastien.leloux@uclouvain.be">sebastien.leloux@uclouvain.be</a>
Alexia Papageorgiou	(ULB)	<a href="mailto:apapageo@ulb.ac.be">apapageo@ulb.ac.be</a>
Stephan van den Wildenberg	(ULiège)	<a href="mailto:svdwildenberg@uliege.be">svdwildenberg@uliege.be</a>
Nicolas Maira	(ULB)	<a href="mailto:nmaira@ulb.ac.be">nmaira@ulb.ac.be</a>
Pierre Thilmany	(ULB)	<a href="mailto:pthilman@ulb.ac.be">pthilman@ulb.ac.be</a>
Antoine Aerts	(ULB)	<a href="mailto:antoaert@ulb.ac.be">antoaert@ulb.ac.be</a>

# Echos de la Journée Scientifique SRC 2017

Comme de coutume, les participants étaient nombreux à la Journée Scientifique qui s'est tenue le 12 octobre à Louvain-la-Neuve. En témoignent ces quelques photos de la salle de conférence et de la salle des posters, aux auditoires des Sciences de l'UCL.





Les lauréats du prix de la SRC et des prix Solvay ont été félicités par le président de la SRC, Thierry Randoux.



Figure 3 : De gauche à droite, Thierry Randoux, Alexandre Vercouter, Antoine Aerts, Pierre Stienet, Thimoty Steenhaut et Laurie Bodart

# La chimie belge à l'honneur

Le 9 novembre 2017, lors d'une cérémonie qui s'est déroulée à Bruxelles, le professeur Léon GHOSEZ a reçu les insignes de Chevalier de la Légion d'Honneur des mains de Madame Claude-France ARNOULD, Ambassadrice de France en Belgique. De nombreuses personnalités, collègues et amis étaient présents pour partager avec lui ce moment de fierté et d'émotion.



---

**Pour vous faire membre de la SRC et accéder gratuitement à la revue Chimie Nouvelle :**

---

il vous suffit de verser au compte 210-0420804-70 la somme indiquée dans le tableau ci-dessous :

**Membres résidant en Belgique et au Luxembourg**

Membres effectifs : **50 euros**

- participation gratuite ou à prix réduit à toutes les activités de la SRC
- abonnement gratuit à la revue "Chimie Nouvelle"
- accès gratuit à la bibliothèque de la SRC.

Membres associés : **25 euros**

- réservé, avec les mêmes avantages que les membres effectifs, aux jeunes diplômés du deuxième cycle pendant deux ans, aux professeurs de l'enseignement secondaire et aux retraités.

Membres Juniors : Gratuit

- réservé aux étudiants de dernière année du 2<sup>e</sup> cycle universitaire (2<sup>e</sup> master), des Ecoles d'Ingénieurs industriels et des graduats en Chimie et Biochimie avec les mêmes avantages que les membres effectifs.

Demandeurs d'emploi : **15 euros**

- mêmes avantages que les membres effectifs + insertion gratuite dans Chimie Nouvelle d'une annonce de demande d'emploi.

**Membres résidant à l'étranger**

Membres effectifs : **60 euros**

Membres associés : **35 euros**