

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Propriétés structurales et électroniques de nanoparticules d'alliages (bi et multi) métalliques sous contraintes

Référence : **MAS-DMAS-2023-09**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 01/10/2024

Date limite de candidature : 05/07/2024

Mots clés

Nanoparticules, alliage métallique, simulations à l'échelle atomique, propriétés mécaniques, propriétés électroniques

Profil et compétences recherchées

Formation : Physique du solide, physique des matériaux et nanomatériaux

Compétences recherchées : Physique du solide, physique des matériaux. Bonne connaissance de la physique de la matière condensée ainsi qu'un goût prononcé pour la simulation numérique (utilisation de codes, programmation pour le post-traitement des données). Les échanges scientifiques, en particulier dans le cadre de structures de collaborations auxquelles participe le LEM (différents GDRs, projets ANR), seront encouragés.

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Les nanoparticules métalliques (NPs) sont des objets fascinants aux spécificités uniques qui diffèrent considérablement de leurs homologues en volume en raison de leur rapport surface/volume élevé. Ainsi, de nombreux développements technologiques sont envisagés dans différents domaines tels que la catalyse, les applications médicales ou l'optique. Dans ce contexte, les nanoparticules d'alliages (bi- et multi-) métalliques constituent une classe de matériaux permettant d'accroître l'éventail des propriétés dès lors que différents métaux sont associés au sein d'une même NP. Toutefois, quel que soit leur domaine d'utilisation, les NPs peuvent être soumises à des contraintes mécaniques conduisant à des modifications structurales qui peuvent fortement altérer leur champ d'application. Il est donc crucial de comprendre comment les NPs d'alliages sont modifiées sous sollicitation mécanique. Le but de cette thèse est d'acquérir des connaissances théoriques suffisantes sur le lien entre la structure (taille, forme, composition, ordre/désordre chimique) et les mécanismes spécifiques de déformation des NPs d'alliages ainsi que l'influence des changements structuraux sur leurs propriétés catalytiques. L'idée est de pouvoir ainsi guider de façon pertinente l'ingénierie d'une nouvelle classe de nanomatériaux aux propriétés uniques.

Dans ce cadre, nous avons mis en œuvre une approche multi-échelle en couplant des modélisations à l'échelle atomique de type dynamique moléculaire avec une approche continue via des calculs d'éléments finis (EF) pour mieux cerner les modifications structurales induites par des NP pures (Au, Cu et Pt) sous contrainte [1]. Par ailleurs, nous avons également étudié l'impact de telles déformations (élastiques et plastiques) sur leurs propriétés catalytiques à partir de calculs de type liaisons fortes et abinitio effectués à l'échelle atomique.

L'idée est donc d'appliquer cette méthodologie à des nanoparticules bimétalliques voire multi-métalliques. Il s'agira tout d'abord de caractériser les propriétés structurales des systèmes considérés, grâce au développement de notre démarche multi-échelle impliquant le passage d'une description atomistique (simulations de dynamique moléculaire à partir de potentiels de type liaisons fortes) vers un cadre de type mécanique des milieux continus à partir de modèles d'EF qui permettent de considérer des systèmes très larges en des temps de calculs assez courts. Plus précisément, il s'agira de comparer les propriétés mécaniques de NP d'alliages ordonnées et désordonnées de systèmes à tendance à l'ordre tels que le CoPt, CuAu voire le ternaire CoNiPt. Enfin, les propriétés électroniques seront également traitées via un formalisme de type liaisons fortes couplé à des calculs abinitio pour étudier l'effet des modifications structurales des NPs sous déformation sur leurs réactivités de surface et plus généralement sur leurs propriétés catalytiques. Toutes ces étapes constituent un premier pas vers la caractérisation de NPs multi-métalliques récemment synthétisées à travers diverses collaborations du LEM.

Collaborations envisagées

MPQ (Univ. Paris Cité) / CINaM (CNRS-Aix Marseille Univ.) / ICMMO (CNRS-Univ. Paris Saclay) / CEMES (CNRS)

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : DMAS/LEM

Lieu (centre ONERA) : CC

Contact : GATTI Riccardo

Tél. : 01 46 73 45 62 Email : riccardo.gatti@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Riccardo GATTI

Laboratoire : LEM (ONERA-CNRS)

Tél. : 01 46 73 45 62

Email : riccardo.gatti@onera.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>