

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Ingénierie des propriétés électroniques et catalytiques de nanoparticules multimétalliques

Référence : **MAS-DMAS-2025-30**

(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 01/10/2025

Date limite de candidature : 05/07/2025

Mots clés

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

Profil et compétences recherchées

Physicien(ne) ayant une formation dans le domaine des matériaux, nanomatériaux ou plus généralement en sciences des matériaux. Bonne connaissance de de la physique du solide, de la matière condensée, de la mécanique quantique et de la physique statistique, ainsi qu'un goût prononcé pour la simulation numérique. Diverses collaborations sont également à prévoir, et donc les échanges scientifiques seront encouragés

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Les nanoparticules métalliques (NPs) sont des objets fascinants aux propriétés uniques qui diffèrent considérablement de leurs homologues massifs 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. 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 l'impact de telles déformations sur les propriétés électroniques des NPs dans le but de développer l'ingénierie de NPs pour des applications catalytiques.

Pour caractériser les modifications structurales de NPs sous contraintes, nous avons mis en œuvre une approche multi-échelle en couplant des simulations à l'échelle atomique de type dynamique moléculaire avec des modèles continus via des calculs d'éléments finis (EF) dans le cas de systèmes purs (Cu, Au, Pt) [1]. Le but de ce stage est d'appliquer cette méthodologie à des nanoparticules bimétalliques voire multimétalliques. Il s'agira tout d'abord de caractériser les propriétés structurales des systèmes considérés, grâce au développement de notre démarche multi-échelle. Plus précisément, il s'agira de comparer les propriétés mécaniques de NPs d'alliages ordonnées et désordonnées de systèmes à tendance à l'ordre tels que le CoPt, CuAu voire le ternaire CoNiPt. Cette étape est un premier pas vers la caractérisation de NPs multimétalliques appelées HEA (High-Entropy Alloys) qui constituent un domaine de recherche en pleine expansion depuis leurs premières synthèses par un groupe de recherche japonais en 2018 [2,3]. Enfin, les propriétés électroniques des NPs seront étudiées en couplant des calculs de type liaisons fortes et DFT permettant ainsi d'identifier les paramètres clés pour obtenir des NPs aux propriétés catalytiques spécifiques [4].

On peut noter que ce travail sera fait en collaboration avec les laboratoires MPQ (Université Paris Cité) et ICMMO (Université Paris Saclay) pour la partie expérimentale qui possèdent une expertise unique en France dans la synthèse et la caractérisation des NPs de type HEA.

[1] M. Erbi' *et al.*, Small (2023)

[2] C. Moreira Da Silva *et al.*, Nanoscale (2022)

[3] A. Barbero *et al.*, Faraday Discussions (2023)

[4] M. Erbi' *et al.*, (soumis)

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 : Matériaux et Structures

Lieu (centre ONERA) : CC

Contact : GATTI RiccardoTél. : 01 46 73 45 62 Email : riccardo.gatti@onera.fr**Directeur de thèse**

Nom : Riccardo GATTI

Laboratoire : LEM

Tél. : 01 46 73 45 62

Email : riccardo.gatti@onera.frPour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>