

PROPOSITION DE STAGE EN COURS D'ETUDES

Référence : **DMAS-2025-30**
(à rappeler dans toute correspondance)

Lieu : Châtillon

Département/Dir./Serv. : DMAS/LEM

Tél. : 0146734562

Responsable(s) du stage : Riccardo Gatti et
Hakim Amara

Email : riccardo.gatti@onera.fr
hakim.amara@onera.fr

DESCRIPTION DU STAGE

Thématique(s) Matériaux de basse dimension

Type de stage : Fin d'études bac+5 Master 2 Bac+2 à bac+4 Autres

Intitulé : Ingénierie des propriétés électroniques et catalytiques de nanoparticules multi-métalliques

Sujet : 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 multi-métalliques. 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 multi-métalliques 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)

Est-il possible d'envisager un travail en binôme ? Oui

Méthodes à mettre en oeuvre :

- | | |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> Recherche théorique | <input checked="" type="checkbox"/> Travail de synthèse |
| <input type="checkbox"/> Recherche appliquée | <input checked="" type="checkbox"/> Travail de documentation |
| <input type="checkbox"/> Recherche expérimentale | <input checked="" type="checkbox"/> Participation à une réalisation |

Possibilité de prolongation en thèse : Oui

Durée du stage : Minimum : 3 mois Maximum : 6 mois

Période souhaitée : à partir de mars 2025

PROFIL DU STAGIAIRE

<p>Connaissances et niveau requis :</p> <p>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.</p>	<p>Ecoles ou établissements souhaités :</p> <p>Universités M2 ou Écoles d'ingénieurs</p>
---	--