

PROPOSITION DE STAGE EN COURS D'ETUDES

Référence : **DMAS-2025-31**
(à rappeler dans toute correspondance)

Lieu : Châtillon

Département/Dir./Serv. : DMAS/LEM

Tél. : 0146734562

Responsable(s) du stage : Hakim Amara
Jaysen Nelayah

Email : hakim.amara@onera.fr
jaysen.nelayah@u-paris.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 : Des nanoparticules à haute entropie pour stocker l'hydrogène

Les alliages à haute entropie (HEA) ont fait l'objet de recherches intenses ces deux dernières décennies dans le domaine de la science des matériaux, entre autres, pour leur composition chimique hautement ajustable leur conférant des propriétés physiques et chimiques remarquables. Ces alliages, composés de cinq éléments ou plus, ont tendance à former des microstructures en solution solide, en partie en raison de leur entropie configurationnelle qui augmente avec le nombre d'éléments.

Dans le contexte environnemental actuel, le développement de l'énergie hydrogène décarboné est l'une des voies envisagées pour une énergie propre. Cependant, la question d'un stockage sûr et efficace se pose. Le stockage en solution solide est une méthode envisagée et les HEA à l'état massif sont un matériau prometteur en raison, entre autres, de leur densité volumétrique élevée pour le stockage d'hydrogène. Néanmoins, des problèmes critiques subsistent pour cette application, tels que des thermodynamiques et cinétiques de l'hydrogène-sorption défavorables. Très récemment, des HEA sous forme de nanoparticules (NPs) ont été synthétisées et ont montré des propriétés catalytiques exceptionnelles. Plus précisément, le nano dimensionnement des HEA avec des compositions chimiques contrôlables a permis d'améliorer la cinétique et la thermodynamique de l'hydrogène-sorption. Toutefois, les mécanismes à l'origine d'un tel phénomène restent incompris limitant leur utilisation à l'heure actuelle.

L'objectif de ce stage est d'acquérir des connaissances fondamentales à l'échelle atomique sur les relations entre la structure de surface et la réactivité des NPs-HEA en couplant des approches expérimentales et théoriques. Le but est de mieux comprendre et rationaliser l'influence de la structure des nanoparticules (taille, forme, composition et ordre/désordre chimique) sur les propriétés de stockage de l'hydrogène. Sur un plan théorique, nous chercherons à mettre en place des modèles thermodynamiques et cinétiques, déjà développés pour des alliages binaires, permettant de caractériser les compositions chimiques des NPs en fonction de leur taille. Cette approche nécessite des paramètres d'entrée qui seront issus de simulations à l'échelle atomique reposant sur un formalisme de type liaisons fortes. Sur un plan expérimental, les NPs seront synthétisées par méthode laser puis analysées par microscopie électronique en transmission (MET) de dernière génération au laboratoire MPQ (Université Paris Cité) permettant d'imager les NPs à l'échelle atomique avec une résolution chimique inégalée. Par la suite, nous envisageons d'étudier par MET in-situ la stabilité structurale et la réactivité des nanoalliages HEA en présence d'hydrogène.

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, avec le LEM, constituent un consortium unique en France dans la synthèse et la caractérisation des NPs de type HEA [1-3].

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

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

[3] S. Krouna *et al.*, Advanced Materials (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 checked="" 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

Connaissances et niveau requis :

Physicien(ne) ayant une formation dans le domaine des matériaux, nanomatériaux ou plus généralement en sciences des matériaux. Bonne connaissance de la physique de la matière condensée (thermodynamique, interaction électron-matière, mécanique quantique, ...) ainsi qu'un goût prononcé pour mener à la fois des expériences et des simulations numériques. Diverses collaborations sont également à prévoir, et donc les échanges scientifiques seront encouragés.

Ecoles ou établissements souhaités :

Universités M2 ou Ecoles d'ingénieurs