

# Proposition de Stage 2019-2020

## Chimie et morphologie de nanoalliages pour la la catalyse de croissance de nanotubes de carbone par CVD

### Laboratoires:

1) Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM), UMR104

Adresse: CNRS-ONERA, 29 avenue de la Division Leclerc, 92320 Chatillon

2) Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay (ICMMO), UMR 8182

Adresse: Université Paris-Sud 11, Bât 410/420/430, Rue du Doyen Georges Poitou 91400 Orsay

**Co-directrice de stage:** Armelle Girard et Annick Loiseau

**Téléphone:** 01 46 73 44 48 **e-mail:** [armelle.girard@onera.fr](mailto:armelle.girard@onera.fr) et [annick.loiseau@onera.fr](mailto:annick.loiseau@onera.fr)

**Co-directeurs de stage:** Jérôme Creuze et Fabienne Berthier

**Téléphone:** 01.69.15.48.18 / 01.69.15.50.77 **e-mail:** [jerome.creuze@u-psud.fr](mailto:jerome.creuze@u-psud.fr) et [fabienne.berthier@u-psud.fr](mailto:fabienne.berthier@u-psud.fr)



### Projet scientifique

Le sujet de stage proposé s'inscrit dans une volonté de développer et de comprendre la synthèse de nouveaux catalyseurs (nanoparticules métalliques ou bimétalliques) pour la croissance de nanotubes de carbone, ces nouveaux catalyseurs permettant le contrôle des propriétés électroniques des nanotubes de carbone dès l'étape de synthèse de ces derniers.

Depuis quelques temps, un certain nombre de catalyseurs bimétalliques à base de métaux de transition ont été synthétisés produisant, en règle générale, des nanoparticules de type cœur/coquille ou de type janus. Néanmoins, nos études précédentes ont montré qu'il était possible de synthétiser des particules bimétalliques sous forme de solution solide en combinant chimie de surface et chimie de coordination dans des conditions de température particulières. Les alliages ont la possibilité de se former à l'échelle nanométrique quand on arrive à mettre en place un processus de réduction rapide pour « piéger » les atomes des deux métaux dans un alliage en évitant ainsi une nucléation séparée.

Cependant, étudier le comportement thermodynamique de ces catalyseurs bimétalliques demande souvent la mise en œuvre de techniques expérimentales compliquées qui gagnent souvent à être couplées avec des approches théoriques, même si ces dernières sont encore loin de pouvoir atteindre un tel niveau de complexité tout en restant prédictives. En collaboration avec le groupe de simulations numériques à l'ICMMO, nous entamons donc une étude théorique afin de mieux caractériser le comportement de ces nanoparticules, à l'équilibre et sous ultra-vide tout d'abord. En effet, il est nécessaire de connaître la thermodynamique des nanoalliages en tant que systèmes isolés avant d'étudier l'influence de perturbations extérieures. Nous étudierons également les cinétiques de retour à l'équilibre afin de déterminer la stabilité et la durée de vie de configurations métastables qui auront été identifiées lors de la première étape de l'étude.

Le stage permettra ainsi d'identifier et de quantifier les grandeurs thermodynamiques clés impliquées dans la répartition des constituants au sein des nanoparticules bimétalliques et de comprendre comment les variables d'état influent sur la configuration d'équilibre à partir de ces grandeurs. Le candidat pourra confronter ses résultats avec les expériences lorsque ce sera possible.

Le stage s'inscrit au niveau local dans le cadre d'un axe fédérateur de recherche interne à l'ONERA sur les nanotubes ainsi qu'au niveau européen dans le cadre de l'IRN Nanoalloys

**Techniques utilisées :** Simulations Monte Carlo (équilibre et cinétique), modélisation thermodynamique

**Collaborations extérieures :** MPQ (U. Paris 7), LPA (ENS Cachan)

### PROFIL DU CANDIDAT

**Formation :** une formation en physico-chimie de la matière condensée ayant comporté un volet en nanosciences. Un goût affirmé pour le calcul numérique et la thermodynamique. Une appétence pour l'expérimentation et pour la technique.

