

Etude structurale par Microscopie Electronique en Transmission d'Alliages HEA pour le stockage d'hydrogène

Cadre général :

La transition énergétique vers des sources d'énergie plus durables et respectueuses de l'environnement est un enjeu majeur dans le paysage énergétique et environnemental actuel. Dans ce contexte, l'hydrogène apparaît comme une des solutions prometteuses : il est largement répandu sur Terre et a peu d'impact sur l'empreinte carbone. Toutefois l'utilisation de l'hydrogène à grande échelle nécessite de pouvoir le stocker de manière compacte, ce qui reste un des plus grands défis de la recherche actuelle. Une classe de matériaux prometteuse pour cette fonction est celle des Alliages à Haute Entropie (HEA pour High Entropy Alloys).

Sujet exact, moyens disponibles :

Les HEAs possèdent une structure Cubique Centrée (BCC = Body Centered Cubic) à 3.3 Å de paramètres de maille. Ils comportent 5 ou 6 éléments métalliques différents dans chaque site cristallographique, tous répartis de manière statistique, d'où le terme de haute entropie. Compte-tenu de ces caractéristiques structurales particulières, l'hydrogène peut alors être adsorbé à température ambiante avec un rapport hydrogène/métal égal à 2, ce qui rend ces matériaux pertinents pour des applications industrielles. La caractérisation structurale de ces matériaux consiste à étudier l'influence de la différence de taille des atomes métalliques sur l'ensemble de la structure en mettant en évidence d'éventuels défauts tels que des distorsions, des défauts d'insertion, voire des dislocations. La seconde étape, plus ambitieuse, consiste à localiser précisément les atomes d'hydrogène dans le matériau. Pour mettre en œuvre ce travail, l'outil principal de caractérisation sera la microscopie électronique en transmission (MET), technique particulièrement bien adaptée à l'études des matériaux jusqu'à l'échelle atomique. Le/la stagiaire utilisera le microscope de dernière génération de l'Institut Néel, pouvant combiner la diffraction électronique, l'imagerie à contraste chimique à la résolution atomique et l'analyse spectroscopique semi-quantitative. Il/elle participera à la définition et à la réalisation de protocoles des mesures innovants sur des échantillons particulièrement difficiles à caractériser du fait de leur grande réactivité à l'air et sous faisceau d'électrons. Il traitera les données obtenues au moyen de programmes spécifiques disponibles à l'Institut Néel.

Interactions et collaborations éventuelles :

Collaboration avec les chimistes qui synthétisent les HEAs afin de confronter les résultats obtenus en MET à ceux issus d'autres moyens de caractérisation (Diffraction des rayons X, Microscopie Electronique à Balayage) et avec les physiciens spécialistes du sujet pour les mesures relatives au stockage d'hydrogène.

Ce stage pourra se poursuivre par une thèse (ou ce sujet est limité à un stage M2...).

Oui, par une demande de financement à une école doctorale.

Formation / Compétences :

Une bonne formation en science des matériaux et physique/chimie de la matière condensée est requise. Des connaissances solides en cristallographie sont indispensables.

Période envisagée pour le début du stage : à partir de mars 2025

Contacts : Kodjikian Stéphanie et Lepoittevin Christophe - Institut Néel - CNRS :

04 76 88 74 25 stephanie.kodjikian@neel.cnrs.fr

04 56 38 71 92 christophe.lepoittevin@neel.cnrs.fr

Plus d'informations sur : <http://neel.cnrs.fr>