

# Effets environnementaux sur la structure atomique des nanoalliages : une approche multi-échelle

Concours CNRS 2022 - section 15

Alexis Front

Réduire la dimensionnalité d'un système implique généralement l'émergence de nouveaux phénomènes physiques. Dans le cas des nanoparticules le fort ratio surface/volume et l'effet de taille finie leur confèrent des propriétés physico-chimiques différentes de celles des alliages massifs. Malgré la multiplicité d'études disponibles, l'élaboration de nanoparticules parfaitement définies reste un défi de taille pour l'application industrielle. Cela est d'autant plus vrai pour les nanoalliages puisque leur caractère multi-composants impose une grande sensibilité de la structure à l'environnement menant à un arrangement atomique parfois inattendu : ségrégation, contraintes, présence d'impuretés sur les sites interstitiels du coeur ou en surface. Le développement d'un modèle théorique prédisant l'influence des effets environnementaux sur la structure atomique serait une aide précieuse dans l'élaboration de nanoalliages contrôlés, et réciproquement puisque la robustesse d'un modèle dépend des données expérimentales.

Je propose d'éclairer les mécanismes fondamentaux régissant la structure atomique du couple nanoalliage/gaz, par l'intermédiaire de deux systèmes : Pt-Ag représentatif des alliages des métaux de transition (tendance à l'ordre et tendance à la démixtion) et In-Pd représentatif des alliages intermétalliques (phases complexes du côté riche en In). Ces deux systèmes seront mis en contact avec du dihydrogène et du dioxygène, gaz présents lors des conditions expérimentales. Dans un second temps, j'étudierai la cinétique des transformations de phase du couple nanoalliage/gaz, notamment d'un état initial hors équilibre à un état à l'équilibre thermodynamique. Dans ce projet, les deux systèmes seront traités par une approche multi-échelle alliant méthodes *ab initio* et modèle atomistique.