

Transmission Electron Microscopy studies of Multimetallc Alloys for Energy Conversion Applications

This PhD offer is open to all motivated students with a master degree in Chemistry, Physics and Material Engineering. The thesis will focus on the synthesis, and structural characterization by electron microscopy of **multi-metallic alloys** and **High Entropy Alloys** (HEAs). HEAs are interesting for application in energy conversion (*i.e.* hydrogen production), hydrogen storage, and for their mechanical properties.

The thesis will involve three main chapters, as described below:

- 1) **The synthesis**, via electrochemical methods, of nano-alloys with increasing complexity in composition, and in a second moment, with of a control on their shape. Shape control is important for catalytic application requiring specific crystalline facets that are more active than others.
During this phase, the candidate will get acquainted with conventional **electrodeposition** techniques for the synthesis of nanomaterials with controlled properties. Electrodeposition has been chosen because is a relatively sustainable, “green” and facile method to produce supported nanomaterials.
- 2) The in-depth characterization, mainly via **Transmission Electron Microscopy**, of the structure and composition of the alloys.
Transmission Electron Microscopy (TEM) is a powerful technique which permits to observe the structure of materials at the atomic level. During this phase, the candidate will get acquainted with relevant electron microscopy techniques, such as TEM and STEM imaging, high resolution imaging (crystalline planes and lattices), elemental mapping (EDX) and electron diffraction. Moreover, the candidate will participate to a broader project, involving the IPCMS, the synchrotron SOLEIL, and two other laboratories in Paris, the LCPMP and the LEM. In this project, the images of the nano-alloys obtained by TEM will be used for training a neuronal network for the discovery of new HEAs materials optimized for fuel cells applications.
- 3) The last chapter will re-group the topics of chapter 1 and 2. ***In situ* TEM** allows to observe the evolution of nanomaterials under reactive conditions with an electron microscope, and therefore with very high spatial and temporal resolution of few nanometres and milliseconds. In this chapter, *in situ* TEM will be used to follow in real-time how the HEAs forms by electrodeposition, and how they evolve in a “fuel cell.” This last chapter will permit to advance our fundamental knowledge on the formation and behaviour of multimetallic alloys and HEAs.

The PhD thesis will take place at the Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), in Strasbourg, France. Throughout the PhD thesis, the candidate will have the opportunity to participate to national and international conferences, and create his/her own scientific and professional network. Moreover, he/she will acquire advanced skills in transmission electron microscopy and data analysis, and good skills in nanomaterials synthesis, which will enable to successfully pursue their career in academy, but also re-orientation towards industry.

Contacts		
Ovidiu Ersen	Director	ovidiu.ersen@ipcms.unistra.fr
Maria Letizia De Marco	Supervisor	maria-letizia.demarco@ipcms.unistra.fr
Institut	University	Location
IPCMS	Université de Strasbourg	Strasbourg, France
Starting date		
01/10/2024		

Etude par Microscopie Électronique en Transmission des Alliages Multimétalliques pour des Applications de Conversion de l'Énergie

Cette offre de doctorat est ouverte à tous les étudiants et étudiantes titulaires d'un master en Chimie, Physique ou Ingénierie des Matériaux. La thèse portera sur la synthèse et la caractérisation structurale par microscopie électronique d'alliages multimétalliques et d'alliages à haute entropie (HEAs). Les HEAs sont intéressants pour les applications dans la conversion d'énergie (par exemple, la production d'hydrogène), pour le stockage d'hydrogène ainsi que pour leurs propriétés mécaniques. La thèse comprendra trois chapitres principaux, décrits ci-dessous :

- 1) La synthèse, *via* des méthodes électrochimiques, de nano-alliages avec une composition à complexité croissante, et dans un second temps, avec un contrôle de la forme. Le contrôle de la forme est important pour les applications catalytiques nécessitant des facettes cristallines spécifiques qui sont plus actives que d'autres. Au cours de cette phase, le candidat se familiarisera avec les techniques conventionnelles **d'électrodéposition** pour la synthèse de nanomatériaux aux propriétés contrôlées. L'électrodéposition a été choisie car c'est une méthode relativement durable, "verte" et facile pour produire des nanomatériaux supportés.
- 2) La caractérisation approfondie, principalement par **microscopie électronique en transmission**, de la structure et de la composition des alliages. La microscopie électronique en transmission (MET) est une technique puissante qui permet d'observer la structure des matériaux au niveau atomique. Au cours de cette phase, le candidat se familiarisera avec des techniques pertinentes de microscopie électronique, telles que l'imagerie TEM et STEM, l'imagerie à haute résolution (plans et réseaux cristallins), la cartographie élémentaire (EDX) et la diffraction électronique. De plus, le candidat participera à un projet plus vaste, impliquant l'IPCMS, le synchrotron SOLEIL et deux autres laboratoires à Paris, le LCPMP et le LEM. Dans ce projet, les images des nano-alliages obtenues par MET seront utilisées pour entraîner un réseau neuronal pour la découverte de nouveaux matériaux HEAs optimisés pour les applications de piles à combustible.
- 3) Le dernier chapitre regroupera les sujets des chapitres 1 et 2. Le **MET *in situ*** permet d'observer l'évolution des nanomatériaux dans des conditions réactives avec un microscope électronique, et donc avec une résolution spatiale et temporelle très élevée, allant jusqu'à quelque nanomètre. Dans ce chapitre, le MET *in situ* sera utilisée pour suivre en temps réel la formation des HEAs par électrodéposition, ainsi que leur évolution dans une "pile à combustible". Ce dernier chapitre permettra de faire avancer nos connaissances fondamentales sur la formation et le comportement des alliages multimétalliques et des HEAs.

La thèse de doctorat se déroulera à l'Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), à Strasbourg, en France. Tout au long de la thèse de doctorat, le candidat aura l'opportunité de participer à des conférences nationales et internationales, et de créer son propre réseau scientifique et professionnel. De plus, il/elle acquerra des compétences avancées en microscopie électronique en transmission et en analyse de données, ainsi que de bonnes compétences en synthèse de nanomatériaux, ce qui lui permettra de poursuivre avec succès sa carrière dans le milieu universitaire, mais aussi de se réorienter vers l'industrie.

Contacts		
Ovidiu Ersen	Directeur de Thèse	ovidiu.ersen@ipcms.unistra.fr
Maria Letizia De Marco	Encadrante	maria-letizia.demarco@ipcms.unistra.fr
Institut	Université	Location
IPCMS	Université de Strasbourg	Strasbourg, France
Date de debut		
01/10/2024		