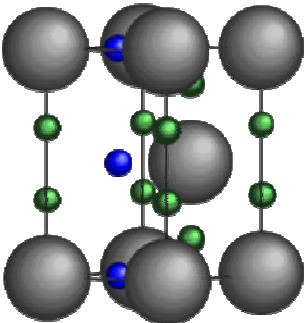
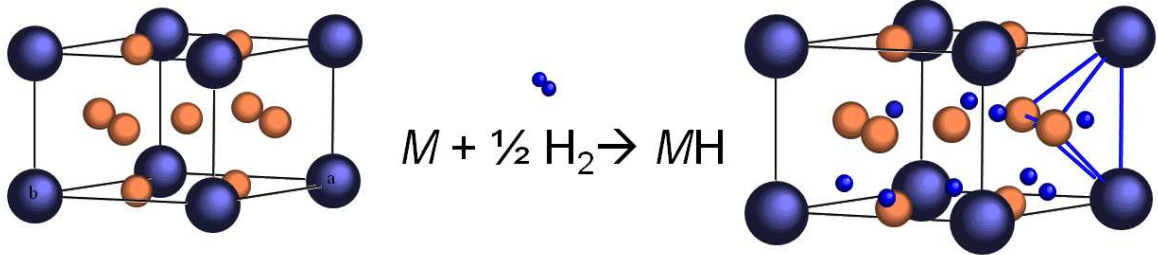


Durée : 5 mois

Laboratoire: Equipe Chimie Métallurgique des Terres Rares - Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) - CNRS Responsables du stage : Jean-Claude Crivello, Jean-Marc Joubert Email : crivello@icmpe.cnrs.fr	adresse : 2-8 rue H. Dunant – 94320 Thiais Tel : 01 49 78 11 74 Fax : 01 49 78 12 03
<p><u>Intitulé</u> : Modélisation de systèmes métal-hydrogène par calculs DFT et par la méthode Calphad</p> <p><u>Domaine d'étude</u> : Sciences des matériaux, calculs DFT, modélisation, diagrammes de phases</p> <p><u>Présentation</u> :</p> <p>Les systèmes métal-hydrogène sont des systèmes extrêmement intéressants pour le stockage de l'énergie. Le développement d'alliages complexes aptes à stocker l'hydrogène en grande quantité passe par la compréhension et la modélisation de ces systèmes. La méthode Calphad (CALculation of PHase Diagrams) est une technique très utilisée de modélisation semi-empirique des diagrammes d'équilibre. Le principe réside en la description des enthalpies libres des différentes phases par ajustement de paramètres permettant de décrire les données expérimentales.</p> <p>Le travail proposé consistera à choisir un système pour lequel suffisamment de données expérimentales sont disponibles (par exemple Ni-H, Fe-H, Mg-H...) et d'en faire la modélisation. Une étude approfondie de la bibliographie devra être menée. Des calculs <i>ab initio</i> par méthode DFT des enthalpies de formation des hydrures dans différentes structures cristallographiques seront effectués. Quelques expériences pourront être réalisées par l'étudiant de façon à le familiariser avec les techniques expérimentales. L'essentiel du travail consistera cependant à effectuer des calculs par DFT, et à modéliser ce système par la technique Calphad. Une attention particulière sera portée au choix des modèles de description. Puis, les paramètres des équations seront ajustés en vue d'obtenir une description correcte des données expérimentales.</p>  <p><u>Méthodes à mettre en œuvre</u> : Calcul DFT (code VASP). Modélisation des données expérimentales par la méthode Calphad (logiciel Thermocalc). Synthèse d'hydrures sur banc d'hydrogénation (méthode de Sieverts).</p> <p><u>Connaissances préalables</u> : Physique de l'état solide, cristallographie. Intérêt pour les diagrammes de phases, pour la théorie, la modélisation et/ou la thermodynamique.</p>	
Recherche théorique : OUI	Recherche expérimentale : POSSIBLE
Possibilité de prolongation en thèse : OUI	Bourse de l'école doctorale, Région IdF
Possibilité d'une rémunération : OUI	Montant : environ 400 €/mois

Metal-hydrogen system



- **Hydrides for :**

- electrode in Ni-MH batteries
- reversible hydrogen storage

Schlapbach Züttel,
Nature
414 (2001) 353



- **Fuel cell:**

400km = 4kg H₂ =

gas (200bar)	liq. (20K)	LaNi ₅ H ₆	Mg ₂ NiH ₄
110 l	57 l	33 l	26 l
		290 kg	109 kg