

Domaine

Chimie

Sujets de thèse

Interactions dihydrogène ($H^+ \cdots H^-$) entre NH_3 et BH_4^- : stabilité, réactivité et développement d'un vecteur énergétique hybride à haute densité en hydrogène

Contrat

Thèse

Description de l'offre

Dans le contexte de la transition énergétique et du développement de solutions bas carbone, l'hydrogène apparaît comme un vecteur clé pour la décarbonation des systèmes énergétiques. Son déploiement à grande échelle reste toutefois conditionné au développement de solutions de stockage sûres, compactes et compatibles avec des conditions d'usage réalistes. Le stockage chimique de l'hydrogène constitue à ce titre une voie prometteuse, en particulier pour des applications mobiles ou en environnements contraints.

Le CEA recrute un(e) doctorant(e) pour une thèse consacrée à l'étude du système hybride ammoniac-borohydrure de sodium (NH_3-NaBH_4) comme vecteur énergétique à forte densité en hydrogène. Le projet repose sur une approche originale consistant à associer deux vecteurs hydrogénés complémentaires afin de dépasser certaines de leurs limitations respectives : contraintes de stockage et de toxicité pour l'ammoniac, état solide et verrous procédés pour le borohydrure de sodium.

L'objectif scientifique est d'identifier et de comprendre les mécanismes physico-chimiques gouvernant ce système hybride, en particulier le rôle des interactions dihydrogène entre les liaisons N-H (NH_3) et B-H (BH_4^-), et leur influence sur la stabilité, la pression de vapeur de l'ammoniac, la formation de phases liquides ou visqueuses, ainsi que les différentes voies de mise à disposition de l'hydrogène.

Le travail s'inscrit à l'interface entre chimie des matériaux M-B-N-H et analyse des performances énergétiques, avec une double dimension fondamentale et appliquée (stockage, transport et libération contrôlée de H_2).

La thèse se déroulera au CEA Grenoble, avec un directeur de thèse à l'IEM (CNRS et Université de Montpellier) et un co-encadrement CEA et Naval Group. Elle bénéficiera d'un environnement pluridisciplinaire combinant expertise académique en chimie des systèmes M-B-N-H, compétences en stockage chimique et catalyse, et vision applicative industrielle, dans le cadre des thématiques « carburants alternatifs » et filière hydrogène.

Université / école doctorale

Université de Montpellier – ED459 (Science Chimique Balard)

Localisation du sujet de thèse / Site

Grenoble

Critères candidat / Formation recommandée

- Diplôme : Master 2 ou école d'ingénieur avec spécialisation en chimie, chimie des matériaux, physico-chimie
- Compétences souhaitées :
 - Chimie inorganique ou matériaux hydrogénés ;
 - Techniques de caractérisation (spectroscopie, analyse thermique, diffraction) ;

- Intérêt pour les systèmes énergétiques et les problématiques de stockage de l'hydrogène.
- Rigueur expérimentale, autonomie, capacité d'analyse et rédaction scientifique.
- Goût pour le travail à l'interface recherche fondamentale / applications.