Offre de thèse à IFP Energies nouvelles (IFPEN)

Exploring gaseous hydrogen uptake in pipeline steel using a combined experimental-theoretical approach: the importance of surface state

Dans la lutte contre le changement climatique, l'hydrogène peut jouer un rôle clé en tant que vecteur énergétique pour réduire les émissions de CO_2 s'il est produit à partir de ressources renouvelables. Pour son stockage, une option viable consiste à stocker l'hydrogène sous sa forme moléculaire (H_2) dans des réservoirs à haute pression et à haute résistance. Toutefois, le stockage de l'hydrogène gazeux dans des récipients sous pression et son transport dans des pipelines en acier présentent un risque de fragilisation par l'hydrogène et de défaillances dangereuses. La physico-chimie des processus de pénétration de l'hydrogène dans les aciers ferritiques - les premières étapes avant de permettre à l'hydrogène atomique "produit à l'extérieur" d'occuper des positions particulières dans la matrice – peut être modifiée en fonction de l'état de la surface. Les aciers de canalisation à faible teneur en carbone se recouvrent spontanément d'oxydes de fer, dont le rôle dans la pénétration de l'hydrogène est mal connu, bien qu'il soit généralement considéré comme protecteur. En effet cette hypothèse reste discutable au regard de la sureté de ces gazoducs remplis d'hydrogène à haute pression pour les décennies à venir. Il est donc essentiel d'explorer plus en détail les mécanismes réactionnels pour décrire comment l'hydrogène interagit, s'adsorbe à la surface de l'oxyde de fer et ensuite diffuse dans la sous-couche de surface.

Dans cette étude, des oxydes et/ou des hydroxydes de fer seront élaborés sur des surfaces de fer ou d'acier ferritique (mono- et/ou polycristallines) et étudiés à l'aide de la spectroscopie de photoélectrons induits par rayons X (XPS) et de la spectroscopie de masse d'ions secondaires à temps de vol (TOF-SIMS) pour déterminer les compositions chimiques, épaisseurs et stratification de ces oxydes. La réactivité de ces oxydes vis-à-vis de l'hydrogène sera testée via l'utilisation de marqueurs isotopiques (D_2) combinée à des analyses ToF-SIMS permettant de caractériser les modifications chimiques des oxydes générés par l'hydrogène mais aussi d'évaluer le rôle protecteur de ces couches sur la pénétration de l'hydrogène dans l'oxyde et dans la matrice. Cette approche originale permettra d'établir les cinétiques d'adsorption et/ou de diffusion de l'hydrogène sur/ dans le matériau. En outre, d'autres types de surface et/ou l'impact de contaminants pourraient être explorés. En fonction de l'avancement, il est envisagé de complémenter le programme expérimental avec la modélisation moléculaire (théorie de la fonctionnelle de la densité). Ces études computationnelles viseront à approfondir le(s) mécanismes réactionnels de l'adsorption et diffusion de l'hydrogène dans la matrice d'oxyde de fer.

Le/la doctorant(e) IFP Energies Nouvelles sera intégré(e) au sein du laboratoire du Groupe de Physico-Chimie des Surfaces, Institut de Recherche de Chimie Paris (IRCP) à l'Université de Recherche PSL, CNRS - ChimieParisTech (75005) Paris, France. Ce projet s'inscrit également dans un cadre plus large - le PEPR *hyperstock* - un programme de recherche national (2022-2026) composé de projets de doctorats et de post-doctorats orientés sur les interactions entre l'hydrogène à haute pression et l'acier ferritique pour le stockage de l'hydrogène hyperbarique, et qui constituera un forum d'échange précieux.

Pour postuler, merci d'envoyer votre lettre de motivation et votre CV aux Dr D. MERCIER et G. JOSHI

Directeur	***Dr. Dimitri MERCIER:*** ***dimitri.mercier@chimieparistech.psl.eu***
Ecole Doctorale	ED 388, Chimie Physique et Chimie Analytique de Paris-Centre, https://ed388.sorbonne-universite.fr/led-388
Promoteurs IFPEN	***Dr. Gaurav JOSHI:*** ***gaurav.joshi@ifpen.fr*** Dr. Theodorus DE BRUIN: theodorus.de-bruin@ifpen.fr
Lieu	Paris, Chimie ParisTech, IRCP Equipe PCS (Responsable : P.Marcus)
Durée et début	3 ans, à partir d'Octobre 2023
Employeur	IFP Energies Nouvelles
Niveau d'éducation	Master en physique, chimie, science des matériaux, ingénierie. Expérience souhaitée en science des surfaces ou des interfaces. Une expérience préalable avec XPS, le travail avec des équipements UHV ou la chimie computationnelle serait également appréciée.
Langue	Anglais courant
Compétences/qualités	- Familiarité avec le matériel de laboratoire, manipulation d'échantillons, travail minutieux. - Analyse de données expérimentales. - Haut niveau de motivation personnelle, de persévérance, d'honnêteté et de patience. - Excellente communication orale et écrite. - Esprit d'équipe, prêt à collaborer avec les autres membres de l'équipe et les partenaires du projet (par exemple, prendre la parole devant des groupes lors de réunions et de conférences).