

Sujet Master 2 – 2025/2026

Intitulé du sujet proposé :

Étude théorique de BaTaO₂N pour la photoélectrolyse de l'eau

Encadrement : département INTERFACES

Céline Dupont

celine.dupont@u-bourgogne.fr

Projet scientifique :

Un des grands défis sociétaux actuels est le développement de sources d'énergie propre. Dans ce contexte, l'utilisation de l'énergie solaire est l'une des voies les plus prometteuses en raison de sa grande disponibilité. Néanmoins, le stockage à grande échelle de cette énergie pose un problème majeur. Une possibilité pourrait être d'exploiter la photoélectrolyse de l'eau. C'est une réaction photochimique qui produit de l'hydrogène, facilement stockable en grande quantité, directement à partir d'eau et de lumière. Cependant pour être efficace, la photoélectrolyse nécessite l'utilisation d'un catalyseur vérifiant de nombreuses contraintes : stabilité face à la corrosion, largeur et positionnement du gap spécifiques, non toxicité, ... Dans ce contexte, un grand nombre de familles de matériaux a été étudié. Dans ce projet, nous nous intéresserons à BaTaO₂N, un oxynitride qui possède de nombreuses applications possibles.

L'enjeu de ce stage est d'utiliser des calculs quantiques pour étudier la structure et les principaux paramètres de ce système, et particulièrement l'agencement relatif des anions O²⁻ et N³⁻ dans le solide. Dans un deuxième temps, les différentes surfaces seront considérées. Si le temps le permet, le but final sera d'analyser l'interaction de ces surfaces avec l'eau. L'ensemble de ces études se fera dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) avec le logiciel VASP. Différents types de calculs seront menés. D'une part, la détermination des structures les plus stables, mais aussi des analyses de la densité électronique pour en extraire un sens chimique.

Ce stage « pratique » pourra être précédé d'un stage bibliographique. L'enjeu de ce pré-stage bibliographique permettra à la fois une préparation bibliographique rigoureuse du stage et une familiarisation avec les outils numériques.

Ce projet est en collaboration avec le CEA Saclay. Une demande de temps de faisceau a été déposée pour étudier expérimentalement ces systèmes au Synchrotron SOLEIL. Selon le retour de cette demande, l'étudiant pourra participer aux expériences à SOLEIL.