

# ÉTUDE QUANTIQUE DES PROPRIÉTÉS STRUCTURELLES ET ÉLECTRONIQUES DES MXENES POUR LE STOCKAGE DE L'HYDROGÈNE

**LABORATORY :** Institut Lumière Matière  
**IN COOPERATION WITH :** Colin Bousige, Laboratoire des Multimatériaux et Interfaces

**LEVEL :** M1 / M2  
**TEAM(S) :** THEOCHEM

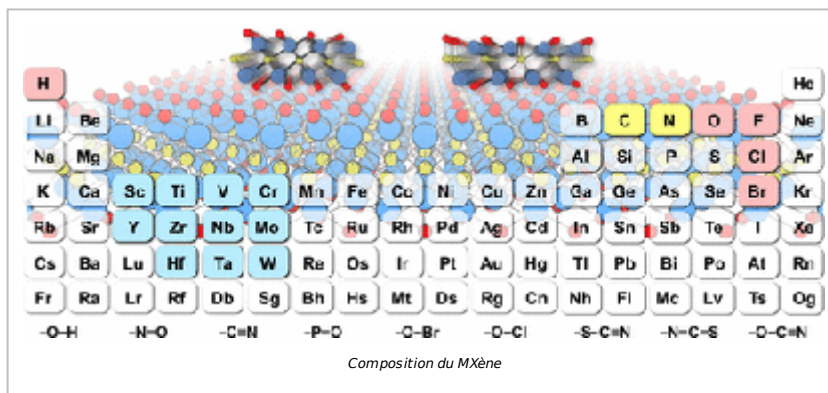
**CONTACT(S) :** ALLOUCHE Abdul rahman  
 MIGNON Pierre

**CONTACT(S) DETAILS:** abdul-rahman.allouche[at]univ-lyon1.fr / pierre.mignon[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472448314

**KEYWORD(S) :** MXenes / Quantiques / Stockage d'hydrogène

## SCIENTIFIC CONTEXT :

Les MXenes, une classe de nanomatériaux bidimensionnels constitués de carbures ou de nitrures de métaux de transition, suscitent un intérêt croissant en raison de leurs propriétés uniques. Leur grande surface spécifique, leur conductivité électrique et leur capacité à interagir avec divers ions et molécules en font des



candidats prometteurs pour diverses applications. Parmi celles-ci, le stockage et la production d'hydrogène, essentiels pour les énergies renouvelables, sont particulièrement prometteurs. Les MXenes peuvent faciliter la dissociation de l'eau et stocker l'hydrogène de manière efficace. Cependant, seules quelques structures de MXenes ont été étudiées, laissant un large champ pour explorer de nouvelles compositions et améliorer leurs performances, notamment pour les applications liées à l'hydrogène.[1]

Les MXenes sont composés de cinq ou sept couches disposées comme T-M-X-(M-X)-M-T, où M est un métal de transition parmi Sc, Y, Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo et W ; X est un N ou un C ; et T/T' sont des groupes fonctionnels. T peut être un élément de la liste {F, Cl, Br, O} ou un groupe de la liste {CN, NO, OH, OCl, OBr, OCN}, ce qui conduit à environ 23 000 phases MXene possibles.[2] Notre équipe se concentre sur le stockage d'hydrogène en utilisant les métaux Ti, V, Nb et Zr, qui ont une forte affinité avec cet élément. En s'intéressant aux phases structurales de MXenes facilement synthétisables où T=T', les possibilités sont réduites à 1 792 combinaisons.

## MISSIONS :

Après une étude bibliographique, l'étudiant(e) recherchera dans un premier temps les structures les plus stables des T-M-X-M-T, avec  $M = \{Ti, V, Nb \text{ et } Zr\}$ ,  $T = \{F, Cl, Br, O\}$ .

Des méthodes de modélisations atomistiques et quantiques (DFT) seront utilisées afin de décrire les propriétés électroniques et structurales et donc l'affinité de  $H_2$  pour différentes structures de MXenes.

Le processus de chimisorption, incluant l'interaction « faible » de Kubas ou la dissociation de  $H_2$  en hydrures, implique un échange d'électrons entre l'orbitale sigma de  $H_2$  et l'orbitale d du métal. Ce processus dépend des propriétés de réactivité du métal, pouvant être formalisées par des indices comme la dureté et les fonctions de Fukui. L'électrostatique et les potentiels de van der Waals seront aussi calculés pour évaluer l'interaction métal- $H_2$ , aboutissant à une première liste de matériaux efficaces pour l'adsorption d' $H_2$ .

Si le temps le permet, l'étudiant(e) s'intéressera à d'autres structures.

## **OUTLOOKS :**

Le projet pourra être poursuivi en thèse si une bourse de l'école doctorale est obtenue.

## **BIBLIOGRAPHY :**

[1] Lee et al., "Recent Progress Using Solid-State Materials for Hydrogen Storage: A Short Review", [Processes 10\(2022\)](#)

[2] Rajan et al., "Machine-Learning-Assisted Accurate Band Gap Predictions of Functionalized MXene", [Chemistry of Materials 30 \(2018\), 4031-4038](#)