



POSTDOC REFERENCE : PDAN1802

Approche de matériau virtuel appliquée à une électrode poreuse



Contexte et objectifs de l'étude :

Le projet « MOMA : Modeling of porous electrodes for an Optimized MAterial design » consiste à utiliser une méthode de type “bottom-up” pour optimiser le design d'électrodes poreuses destinées à équiper des bio-systèmes. Les performances des électrodes sont intimement liées à l'architecture du matériau à l'échelle du pore. Pour les optimiser, un design rationnel de la microstructure est la pierre angulaire pour innover dans ces bio-systèmes. L'objectif est ici d'élucider la dépendance des caractéristiques de l'électrode vis-à-vis de sa microstructure, dépendance ensuite exploitée pour optimiser l'architecture porale. On propose pour cela une approche dite de « matériau virtuel », basée sur une caractérisation fine des éléments structuraux et morphologiques des électrodes, permettant ensuite de générer des domaines de calcul adéquats pour la simulation du transfert et des réactions électrochimiques.

Démarche :

- Acquisition d'images 2D et 3D des électrodes. Comme les dimensions caractéristiques à observer sont de l'ordre de 10 à 1000 nm, trois méthodes seront envisagées pour les images 3D : (i) la nanotomographie X, disponible aux grands instruments, (ii) la tomographie FIB-SEM, se rapprochant de la technique des coupes sériées, (iii) la tomographie sous TEM. Des informations structurales complémentaires seront obtenues par micrographie, pénétration au mercure, etc ...

- Production d'images 3D représentatives des milieux poreux étudiés. Diverses techniques de génération *a priori* d'empilements granulaires sont envisagées et seront mises en œuvre, d'autres seront utilisées pour la génération de maillages de calcul à partir d'images tomographique ou de synthèse.

- Calculs et optimisation. Les méthodes de calcul seront apportées par l'I2M, partenaire du projet MOMA. Dans cette partie on abordera l'optimisation de la structure du poreux vis-à-vis de ses performances grâce à ces calculs.

Profil requis :

Connaissances sur les méthodes d'acquisition d'images 3D ; traitement, analyse et synthèse d'images ; maillages et calculs.

Durée : 1 an. Post-doc financé par l'ANR.

Contact : Gérard Vignoles, Olivier Caty, Julien Danet, Guillaume Couégnat (LCTS)

vinhola@lcts.u-bordeaux.fr ; caty@lcts.u-bordeaux.fr ; danet@lcts.u-bordeaux.fr; couegnat@lcts.u-bordeaux.fr

Tel : 05 56 84 47 00