



## Exploration de la réactivité de catalyseurs à base de TiO<sub>2</sub> par radiolyse

**Spécialité** CHIMIE

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [NIMBE/LEDNA](#)

**Candidature avant le** 22/03/2024

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [HERLIN Nathalie](#)

+33 1 69 08 36 84

[nathalie.herlin@cea.fr](mailto:nathalie.herlin@cea.fr)

### Résumé

L'objectif du stage est de contribuer à l'exploration du potentiel de la radiolyse comme méthodes de criblage de couples réactifs/catalyseurs, en vue du développement d'une chimie économe en énergie et à plus faible impact carbone.

### Sujet détaillé

Dans le contexte de la recherche de procédés moins polluants et plus économes en énergie que les procédés actuels, il est intéressant de produire des molécules à fort enjeu telles que CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.... En effet, la fabrication d'éthylène, qui est un produit de base de l'industrie des polymères, nécessite l'emploi de hautes pressions et/ou de hautes température. Les procédés tels que la photocatalyse qui reposent sur l'utilisation de l'énergie lumineuse paraissent alors séduisants. Cela étant, leur efficacité est parfois faible et il peut être long d'identifier les meilleurs catalyseurs pour une réaction donnée.

Le service NIMBE (CEA/Saclay) est spécialiste de la synthèse de différents types de nanostructures pour répondre aux défis sociétaux des secteurs de l'énergie et de l'environnement, notamment. Dans le cadre de ses activités de recherche, il élabore des nanoparticules de TiO<sub>2</sub> pures ou modifiées en surface par des métaux pour la photocatalyse. L'efficacité de ces nanoparticules a été testée en photocatalyse pour la production d'éthylène. Les résultats dépendent de la nature du métal employé, de sa dispersion, de la taille des nanoparticules... Dans le but de déterminer si la radiolyse, qui repose sur l'utilisation du rayonnement ionisant pour créer des espèces excitées, peut être une méthode efficace de criblage de catalyseurs, des premières expériences ont déjà été réalisées sur des couples réactifs/catalyseurs préalablement étudiés en photocatalyse. Les premiers résultats obtenus sont encourageants. Le but de ce stage consistera à approfondir ce travail en préparant des mélanges réactifs/catalyseurs en ampoules scellées puis à les irradier et à mesurer les gaz produits par micro-chromatographie en phase gazeuse, en se concentrant en particulier sur l'éthylène.

Ainsi, le stagiaire aura pour mission la mesure des différents gaz produits par irradiation des couples réactifs/catalyseurs et la comparaison avec les résultats obtenus en photocatalyse. Il pourra également être force de

---

proposition pour étendre l'étude à d'autres catalyseurs ou réactifs, pour mesurer d'autres espèces d'intérêt et pour comprendre en détails les processus en jeu.

Le stage se déroulera au CEA-Saclay dans le service NIMBE (Nanosciences et Innovation, les Matériaux, la Biomédecine et l'Energie).

Profil : Master 1, Master 2 Matériaux, chimie physique

Rigueur, curiosité, goût pour l'expérimentation, sens critique.

Durée : 4-6 mois (à définir avec l'institut d'enseignement du stagiaire)

Début de stage souhaité : à partir de février 2024, à définir avec l'institut d'enseignement du stagiaire

Lieu : CEA Saclay, Saclay

Contacts : Nathalie Herlin-Boime : [nathalie.herlin@cea.fr](mailto:nathalie.herlin@cea.fr) et Sophie Le Caër : [sophie.le-caer@cea.fr](mailto:sophie.le-caer@cea.fr)

### **Mots clés**

Radiolyse, matériaux, chimie physique

### **Compétences**

Radiolyse, GC-MS

### **Logiciels**

---

## Exploring the reactivity of TiO<sub>2</sub>-based catalysts by radiolysis

### Summary

The aim of the internship is to explore the potential of radiolysis as a screening method for reagent/catalyst couples, with a view to developing an energy-efficient chemistry with a lower carbon footprint.

### Full description

In the context of the search for less polluting and more energy-efficient processes than current ones, it is interesting to produce high-stake molecules such as CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.... The manufacture of ethylene, a basic product of the polymer industry, requires the use of high pressures and/or high temperatures. Processes such as photocatalysis, which are based on the use of light energy, are therefore attractive. However, their efficiency is sometimes low, and it can take a long time to identify the best catalysts for a given reaction.

The NIMBE unit (CEA/Saclay) specializes in the synthesis of different types of nanostructures to meet societal challenges particularly in the energy and environment sectors. As part of its research activities, it is developing pure TiO<sub>2</sub> nanoparticles or nanoparticles surface-modified with metals for photocatalysis. The efficiency of these nanoparticles has been tested in photocatalysis for ethylene production. The results depend on the nature of the metal used, its dispersion, the size of the nanoparticles, etc. In order to determine whether radiolysis, which relies on the use of ionizing radiation to create excited species, can be an effective method of screening catalysts, initial experiments have already been carried out on reagent/catalyst couples previously studied in photocatalysis. The first results are encouraging. The aim of this internship is to extend this work by preparing reagent/catalyst mixtures in sealed ampoules, then irradiating them and measuring the gases produced by gas-phase micro-chromatography, focusing specifically on ethylene.

The trainee's task will be to measure the various gases produced by irradiation of the reagent/catalyst pairs and compare them with the results obtained in photocatalysis. He/she will also be able to make proposals to extend the study to other catalysts or reagents, to measure other species of interest and to gain a detailed understanding of the processes involved.

The internship will take place at CEA-Saclay in the CEA-CNRS NIMBE Unit (Nanosciences and Innovation, Materials, Biomedicine and Energy).

Profile: Master 1, Master 2 Materials, physical chemistry

Rigor, curiosity, taste for experimentation, critical thinking.

Duration: 4-6 months (to be defined with the trainee's teaching institute)

Starting date: from February 2024, to be defined with the trainee's teaching institute.

Location: CEA Saclay, Saclay

Contacts: Nathalie Herlin-Boime : [nathalie.herlin@cea.fr](mailto:nathalie.herlin@cea.fr) and Sophie Le Caër : [sophie.le-caer@cea.fr](mailto:sophie.le-caer@cea.fr)

### Keywords

### Skills

Radiolysis, GC-MS

### Softwares