

Titre du Projet de Thèse : Modélisation d'une photocathode pour la production de carburants solaires par photosynthèse artificielle.

École Doctorale : Sciences pour l'Ingénieur / UCA - Clermont Auvergne INP

Laboratoire : Institut Pascal (UMR 6602) – Campus universitaire des Cézéaux – Bât. Polytech - 2, avenue Blaise Pascal, – 63178 AUBIERE Cedex (Clermont-Ferrand, France).

Directeur de thèse : Jean-François Cornet, Axe GePEB, jean-francois.cornet@sigma-clermont.fr, www.tinyurl.com/y5vzce7q

Co-encadrement de thèse : Fabrice Gros, Jérémie Dauchet, Thomas Vourc'h, (axe GePEB) & Antoine Moreau (axe PHOTON)

Début prévu : 1^{er} septembre 2025.

Description du Sujet : La photosynthèse artificielle est l'un des deux procédés cibles qui pourrait permettre au XXI^{ème} siècle de produire, à partir d'énergie solaire renouvelable et avec des rendements élevés, des carburants chimiques (H_2 , syngas, CH_4 , CH_3OH) qui représentent aujourd'hui 90% de l'énergie primaire consommée dans le monde car ils permettent le stockage sur de longues durées. Pour ce faire, une des technologies les plus prometteuses recourt à une cellule photo-électrochimique (PEC) permettant, sous rayonnement, d'oxyder l'eau à l'anode et de réduire protons et/ou CO_2 à la cathode. Le sujet proposé s'intéresse en particulier à la modélisation d'une photocathode à diffusion de gaz pour la réduction du CO_2 , en partenariat avec des laboratoires de chimie et chimie physique qui synthétiseront et réaliseront des photocathodes afin de pouvoir faire des mesures expérimentales qui seront exploitées dans le cadre de cette thèse. L'établissement de modèles de connaissance génériques de tels objets complexes en structure et géométrie (matériaux photovoltaïque, conducteurs, semi-conducteurs, photo-catalyseurs de réduction,...) nécessite des compétences pluridisciplinaires (électromagnétisme, physique du solide / transport de charges, réactivité aux interfaces, photo-électro-catalyse, génie électrochimique, transfert de masse, etc.) et un goût marqué pour la confrontation aux résultats expérimentaux et la résolution numérique de systèmes d'équations couplées par des méthodes déterministes ou stochastiques. Une fois le modèle 3D élaboré, il pourra être utilisé pour l'optimisation de la conception de la photocathode par design inverse en utilisant des algorithmes adaptés.

Compétences requises par le candidat : Nous recherchons un candidat possédant un diplôme d'ingénieur ou Master 2 avec une formation et des compétences dans la modélisation de procédés physico-chimiques complexes (parmi physique appliquée, modélisation & mathématiques appliquées, génie des procédés, énergétique,...), avec une large ouverture d'esprit et prêt à se confronter aux résultats expérimentaux. La motivation et la capacité à travailler en équipe seront des critères clé de la sélection.

Cadre collaboratif : Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet ANR GASPER (qui finance la thèse) regroupant 6 laboratoires qui devront collaborer tout au long du projet avec des

compétences très variées (chimie, catalyse, physique et ingénierie). Plus encore, au sein de notre équipe de recherche, **le doctorant devra collaborer avec 2 autres doctorants** qui travaillent sur la modélisation de briques du modèle et leur résolution par formulation en intégrales de chemin et méthode de Monte Carlo, dans le cadre du consortium national EDStar (<http://www.edstar.cnrs.fr/prod/fr/>).

Le laboratoire d'accueil : L'Institut Pascal (UMR-CNRS 6602), seul laboratoire de recherche en sciences pour l'ingénieur du site clermontois (220 permanents, 400 chercheurs) est également un acteur majeur du challenge de recherche ITPS (Innovative Transportation and Production Systems) du projet I-SITE clermontois. Le doctorant intégrera l'axe GePEB (Génie des Procédés, Énergétique et Biosystèmes, 25 permanents) au sein duquel des recherches sur la modélisation et l'optimisation des photo-procédés solaires sont conduites depuis 30 ans, ce qui en fait un leader international du domaine. Les expérimentations en fin de thèse se dérouleront sur la plateforme PAVIN Solaire (voir ci-dessous), seule plateforme actuellement en Europe permettant de mettre en œuvre des technologies solaires pour la photosynthèse naturelle et artificielle à haute efficacité énergétique jusqu'à TRL 5.



Facilités disponibles sur la plateforme PAVIN Solaire pour le développement de procédés photo-réactifs produisant des carburants solaires par photosynthèse naturelle ou artificielle ; TRL 2-5.