

Domaine de recherche : Chimie / Physique de l'Etat Condensé, Chimie et Nanosciences
Matière molle et fluides complexes / Physique de l'Etat Condensé,
Chimie et Nanosciences

Intitulé du sujet : Modélisation multi-échelle pour la chimie séparative : agrégats en phase organique

Résumé du sujet : Les procédés de séparation des éléments utilisés pour le recyclage des métaux lourds utilisent communément l'extraction liquide-liquide où l'on fait passer sélectivement des ions d'une phase aqueuse à une phase organique organisée. Si la description moléculaire de la phase aqueuse commence à être assez bien établie, il n'en est pas de même pour la phase organique pour laquelle aucune théorie microscopique n'existe. Cette thèse étudiera la physico-chimie de l'extraction liquide/liquide par une modélisation théorique aussi complète que possible. Le but est de comprendre comment les différents effets (solvatation, forces électrostatiques, forces de Van der Waals, entropie) régissent le transfert d'une phase aqueuse à une phase organique organisée, ainsi que l'effet des gouttes nanométriques extraites sur l'organisation de l'extractant. Une approche multi-échelle originale fondée sur la DFT classique sera mise en oeuvre afin d'obtenir toutes les propriétés thermodynamiques du système. Le support expérimental sera dans un premier temps l'étude de l'extraction de sels de nitrates par une phase organique constituée de DMDOHEMA, pour lequel de nombreuses valeurs d'énergie, de distances entre micelles ont été mesurées pour une large gamme d'ions et d'acides par les équipes de CEA/DEN. La modélisation moléculaire permettra de généraliser cette approche et de lui donner des paramètres pour les effets de solvatation. Le but à terme est d'arriver à des codes prédictifs de l'extraction.

Informations pratiques : Institut de Chimie Séparative de Marcoule

Modélisation mésoscopique et chimie théorique
Date souhaitée pour le début de la thèse : 01/10/2011
Centre : Marcoule

Personne à contacter : Jean-François DUFRECHE
ICSM / Laboratoire Modélisation Mésoscopique et Chimie
Théorique
Institut de Chimie Séparative de Marcoule

Site de Marcoule - Bât. 426

BP 17171

30207 Bagnols sur Cèze
Courriel : jean-francois.dufreche@univ-montp2.fr
Téléphone : 04 66 79 66 28

En savoir plus : <http://www.icsm.fr>

Université / Ecole Doctorale : Montpellier II



DEN

SL-DEN-12-0885



Sciences Chimiques - Montpellier II -

Directeur de Thèse :

Jean-François DUFRECHE

ICSM / Laboratoire Modélisation Mésoscopique et Chimie
Théorique

Institut de Chimie Séparative de Marcoule

Site de Marcoule - Bât. 426

BP 17171

30207 Bagnols sur Cèze
