

Domaine de recherche :

/

Intitulé du sujet :

Forces d'hydratation et spécificité ionique dans les milieux complexes

Résumé du sujet :

Nous proposons d'étudier par la modélisation l'origine des forces d'hydratation entre surfaces dans les milieux complexes, et leur lien avec l'adsorption spécifique des ions. Il s'agit d'un travail théorique mettant en oeuvre une approche multi-échelle. L'idée est de comprendre l'origine des phénomènes de surfaces qui couplent forces électrostatiques et hydratation. Ce travail est d'autant plus important que ceux-ci contrôlent les nombreuses applications des silices, utilisées par exemple en chimie séparative sous la forme de matériaux nanoporeux.

Plus précisément, un modèle atomique de silice dépendant du pH et des ions présents en solution sera élaboré. Des simulations de dynamique moléculaire et de Monte-Carlo permettront d'en déduire un modèle à gros grains qui sera résolu par fonctionnelle de la densité,

En lien avec des expériences dynamiques (phénomènes électrocinétique) et d'équilibre (échange ionique) réalisées à l'ICSM, on déterminera comment les différents ions modifient l'état de surface et contrôlent son comportement, et celui du solvant. A terme, il devra ainsi être possible de proposer une théorie quantitativement en accord avec les expériences, et tenant compte des effets moléculaires.

Informations pratiques :

Institut de Chimie Séparative de Marcoule

Institut de Chimie Séparative de Marcoule

Date souhaitée pour le début de la thèse : 01/09/2013

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

Sciences Chimiques Balard - Montpellier II -



DSM

SL-DSM-13-0768



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