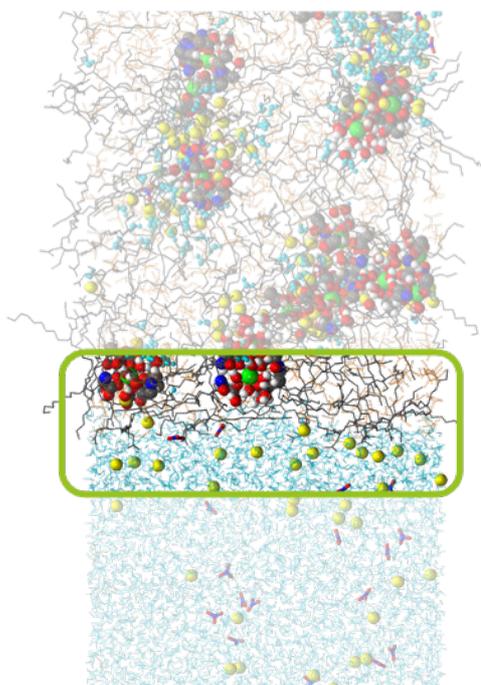




Proposition de stage M2 2021-2022 Institut de Chimie Séparative de Marcoule (ICSM), Bagnols-sur-Cèze, France

Simulation de l'adsorption d'ions aux interfaces liquide/liquide

Ce projet pourra être suivi d'une thèse de 3 ans



Le stage proposé vise à **décrire et comprendre les mécanismes d'extraction** se produisant aux **interfaces liquide/liquide** et plus particulièrement aux interfaces eau/huile telles que celles impliquées dans la chimie de séparation. Le recyclage des métaux se fait couramment par **extraction liquide-liquide** où divers composés métalliques ioniques sont transférés sélectivement d'une phase aqueuse à une phase organique. Ces dernières années ont vu le développement de nouvelles méthodes de modélisation moléculaire qui permettent de décrire plus précisément ces systèmes complexes^{1,2}. La spéciation dans la phase aqueuse et l'organisation supra-moléculaire dans les phases organiques ont été particulièrement caractérisées. La simulation de l'adsorption et du transfert d'ions aux interfaces, ainsi que la cinétique correspondante, restent une tâche difficile en raison de la complexité et de l'échelle de temps à laquelle le processus se déroule³. Le but de ce projet est de **modéliser ces propriétés de transfert** en utilisant une approche théorique basée sur des **simulations de dynamique moléculaire** afin de comprendre les mécanismes de transfert et de prédire les propriétés de transfert des ions.

Au cours de ce stage, nous nous intéresserons à étudier par simulations de dynamique moléculaire **l'adsorption des ions aux interfaces**. Nous pourrions ainsi vérifier si cette méthode de simulation permet d'observer spontanément l'adsorption et le transfert des ions, et de comprendre comment l'interface s'organise et est modifiée en fonction de la présence des ions. Différentes molécules de surfactant (monoamides, diamides, etc.) pourront être utilisées pour observer l'influence de la nature de la molécule sur ces propriétés. Nous pourrions également observer comment la présence d'ions dans la phase aqueuse (lanthanides et/ou uranyle) modifie ces propriétés. Ces approches théoriques à **l'échelle moléculaire** seront mise en œuvre, tout en gardant un **lien avec les expériences** réalisées ces dernières années à l'ICSM pour caractériser les interfaces (tension de surface, réflectivité de neutrons et rayons X, SHG...).

Ce projet d'importance fondamentale et utilisant des méthodes innovantes pourra donner lieu à des publications dans des revues scientifiques internationales.

Profil : Vous êtes un.e étudiant.e en troisième année d'école d'ingénieur ou en master 2, vous êtes rigoureux.se et avez de solides connaissances théoriques en chimie-physique. Vous avez un fort intérêt pour la programmation et l'informatique, et idéalement vous avez déjà une connaissance de base du code (langages Python, Fortran, ..., environnement Linux, scripts Shell ...). Vous avez également de bonnes capacités de communication écrite et orale. Vous avez la capacité de travailler en équipe tout en ayant l'autonomie nécessaire pour mener à bien votre propre sujet de recherche.

Informations complémentaires : Le/la candidat.e rejoindra le laboratoire LMCT de l'ICSM.

Contacts : Pour postuler, veuillez envoyer une lettre de motivation, un CV détaillé et des références à Dr. Magali Duvail (magali.duvail@cea.fr) and Dr. Philippe Guilbaud (philippe.guilbaud@cea.fr).

Laboratoire de Modélisation Mésoscopique
et Chimie Théorique (LMCT)
ICSM UMR 5257
Site de Marcoule – BP 17171
F-30207 Bagnols sur Cèze
<http://www.icsm.fr/icsm/lmct.html>

¹ M. Duvail et al., Soft Matter 13, 5518–5526 (2017). DOI : [10.1039/C7SM00733G](https://doi.org/10.1039/C7SM00733G)

² M. Vatin et al., J. Phys. Chem. B 125, 3409–3418 (2021). DOI : [10.1021/acs.jpcc.0c10865](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c10865)

³ M. F. Ruiz-Lopez et al., Nature Reviews Chemistry 4, 459–475 (2020). DOI : [10.1038/s41570-020-0203-2](https://doi.org/10.1038/s41570-020-0203-2)