



Soutenance de thèse

Institut de Chimie Séparative de Marcoule / CEA Marcoule
(UMR 5257, CEA, CNRS, Université Montpellier, ENSCM)

KUNYU WANG

soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Simulation de l'adsorption de cations divalents sur les interfaces de silice : Association ionique et spéciation de surface

Soutenance prévue le **mardi 13 décembre 2022 à 13h30**

En Salle INSTN A1.08

L'adsorption des ions aux interfaces solide-liquide présente un intérêt à long terme pour diverses applications industrielles. En particulier, les interfaces silice-électrolytes chargées, qui possèdent des sites d'adsorption ponctuels localisés, présentent un fort potentiel pour la décontamination des eaux. Les surfaces chargées sont principalement décrites par le modèle de la double couche électrique (EDL) dans le cadre du formalisme Stern-Gouy-Chapman (SGC). Bien que les méthodes expérimentales puissent sonder de nombreuses propriétés macroscopiques, les descriptions atomiques précises ne sont données que par des modèles théoriques ou des simulations numériques. Les simulations moléculaires sont irremplaçables pour rapprocher les descriptions microscopiques et macroscopiques. Cette thèse a exploré l'adsorption spécifique d'ions dans les EDL pilotée par la formation de paires dans le cas des chlorures de métaux alcalino-terreux (MCl_2). Nous décrivons le mécanisme d'adsorption dans la couche de Stern par une série de simulations de dynamique moléculaire (MD), qui sont analysées dans le cadre de McMillan-Mayer. Les résultats montrent que l'adsorption est collective, ce qui conduit à une spéciation complexe.

Mots-clés : Silice ; Adsorption ; Ions ; Simulation

