

## PROPOSITION DE SUJET DE THÈSE

### **Titre de la thèse :**

**Application de la nano-thermodynamique à l'adsorption**

### **Département / Équipe :**

**INTERFACE / Adsorption sur Solides Poreux (ASP)**

### **Direction et co-direction éventuelle de la thèse :** **Jean-Marc Simon**

E-mail : jmsimon@ube.fr

### **Contexte - Description du sujet – Objectifs (1 page max)**

L'objectif du projet est de simuler les propriétés de piégeage de petites molécules ( $H_2$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ) à partir de mélanges gazeux et liquides sur différents types de zéolithes (MFI, FAU, LTA), d'hydrates de clathrate, de structures métal-organiques (MOF) et de matériaux à base de carbone à l'aide de simulations de dynamique moléculaire. Le candidat utilisera des codes de dynamique moléculaire et de Monte-Carlo et devra être capable de les modifier et de développer les outils d'analyse nécessaires. À partir des simulations, les propriétés d'équilibre telles que l'isotherme d'adsorption, la chaleur d'adsorption et les propriétés de transport (par exemple, la diffusion) seront calculées à l'intérieur des pores et à la surface externe. L'étude de la surface externe est importante pour mieux comprendre la cinétique de l'adsorption ou l'échange entre différents types de molécules (co-adsorption). En parallèle, des expériences seront menées afin de comparer les résultats avec les simulations. Des modèles thermodynamiques et cinétiques seront proposés pour modéliser les phénomènes d'adsorption. L'accent sera mis sur l'extension de la nanothermodynamique à l'adsorption.

**Mots-clés :** adsorption, matériaux poreux, thermodynamique statistique, simulation de dynamique moléculaire, modèles cinétiques, modèles d'adsorptions.

**Profil recherché :** Master en physique, chimie physique ou dans un domaine connexe. Bonnes connaissances en thermodynamique. Notions de base en mécanique statistique. Une expérience en programmation et/ou en simulations numériques est un atout. Grande motivation pour la recherche scientifique et bonnes compétences rédactionnelles en anglais.