

Soutenance de thèse

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

MICHAEL BLEY

soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Simulation d'équilibres osmotiques par dynamique moléculaire : Des interfaces vapeur-liquide aux propriétés thermodynamiques des solutions concentrées

Soutenance prévue le **mercredi 21 novembre 2018 à 14h00**

dans l'Auditorium de l'ICSM

L'objectif de cette thèse de doctorat est le développement d'une nouvelle méthode théorique basée sur la simulation des équilibres liquide-gaz par simulations de dynamique moléculaire. Cette nouvelle méthode prédit les propriétés thermodynamiques telles que l'activité des solvants et les coefficients d'activité des solutés en phase aqueuse et organique impliquées dans les systèmes d'extraction liquide-liquide. Ces propriétés thermodynamiques sont nécessaires pour les approches de modélisation thermodynamique mésoscopique permettant d'estimer l'efficacité et la sélectivité d'un système d'extraction par solvant jusqu'à une échelle industrielle. Les propriétés thermodynamiques et structurales des solutions électrolytiques aqueuses et des phases organiques, y compris les agrégats résultant des molécules extractantes amphiphiles, sont en bon accord avec les données expérimentales et théoriques disponibles. L'approche de dynamique moléculaire de l'équilibre osmotique fournit un nouvel outil puissant permettant d'accéder aux données thermodynamiques.

Mots clés : Dynamique moléculaire ; solutions aqueuses des électrolytes ; coefficients d'activité ; agrégats en phase organique ; chimie séparative.

