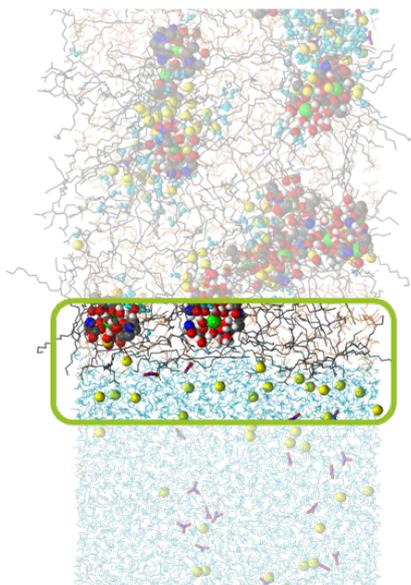


Thèse de doctorat à
Institut de Chimie Séparative de Marcoule (ICSM), Bagnols-sur-Cèze, France
Ecole doctorale 459 Sciences Chimiques Balard (Université de Montpellier)

**Simulation de l'équilibre et du transport des ions
aux interfaces liquide – liquide**

Date de début : Octobre 2022



Le sujet de thèse proposé a pour objectif de **décrire et comprendre les mécanismes d'extraction** se produisant aux **interfaces liquide – liquide** et plus particulièrement aux interfaces eau/huile telles que celles impliquées en chimie séparative. 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 grâce à la présence de molécules amphiphiles extractantes. 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.

Des **approches théoriques à l'échelle moléculaire** seront mises en œuvre, avec **un lien fort avec les expériences** menées ces dernières années à l'ICSM (tension de surface, réflectivité des neutrons et de rayons X, SHG, ...).

Deux approches numériques seront proposées au cours de la thèse :

1. Etude de l'**adsorption d'ions aux interfaces par des simulations de dynamique moléculaire** afin de comprendre comment l'interface est organisée et modifiée en fonction de la présence d'ions.
2. **Simulations de dynamique moléculaire biaisées** pour évaluer le paysage énergétique du transfert d'ions et comprendre les différences d'efficacité de diverses molécules extractantes.

Les méthodes théoriques et numériques développées au cours de la thèse pourront être adaptées et transférées à d'autres applications industrielles impliquant des interfaces liquide – liquide. Au cours de la thèse, le/la doctorant.e sera amené.e à diffuser ses résultats scientifiques par des publications dans des revues scientifiques et des communications dans des conférences nationales et internationales.

Profil : Nous recherchons un.e candidat.e motivé.e ayant de solides connaissances théoriques en chimie-physique. Vous êtes titulaire d'un master en chimie, chimie-physique, chimie théorique ou physique, ou équivalent. Vous avez un fort intérêt pour la programmation et l'informatique et vous avez idéalement 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.

Financement garanti : La thèse est financée par le CEA DES (Direction des Energies).

Informations complémentaires : Le/la candidat.e rejoindra le groupe LMCT de l'ICSM et sera inscrit.e à l'école doctorale ED459 Sciences Chimiques Balard de l'Université de Montpellier (France).

Contact : Pour postuler, veuillez envoyer une lettre de motivation, un CV détaillé et des références à Dr. Magali Duvail (magali.duvail@cea.fr) et Dr. Philippe Guilbaud (philippe.guilbaud@cea.fr) avant le 6 mai 2022.

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