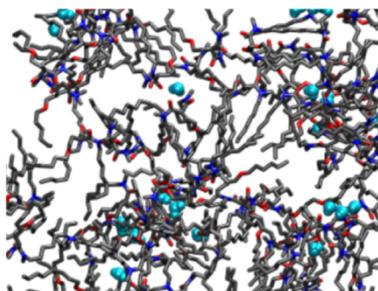


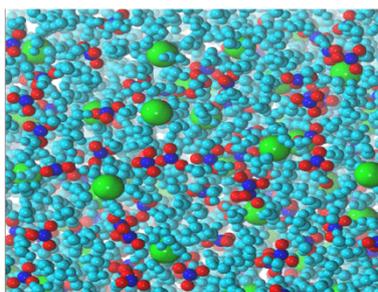
Thèse de doctorat à  
Institut de Chimie Séparative de Marcoule (ICSM), Bagnols-sur-Cèze, France  
Ecole doctorale 459 Sciences Chimiques Balard (Université de Montpellier)

## Prédiction moléculaire du transfert d'ions pour l'extraction

*Date de début : Octobre 2022*



Phase organique



Phase aqueuse

L'**extraction liquide/liquide** est la méthode expérimentale de choix pour le recyclage des éléments métalliques. La simulation moléculaire de cette technique reste un défi inédit en raison en particulier des différentes échelles et systèmes (aqueux et organiques) mis en jeux. Cette thèse a pour but de **prédire pour la première fois cette méthode** en calculant les **enthalpies libres de transfert d'ions** d'une phase à l'autre. Cette grandeur quantifie l'efficacité et la sélectivité du procédé.

Dans ce contexte on **simulera deux systèmes** l'un **aqueux** et l'autre **organique** avec différents solutés. Deux méthodes évoluées de simulations seront mises en œuvre :

- la première sera basée sur l'égalité de Jarzynski,
- la seconde utilisera une procédure de type « replica exchange ».

On pourra ainsi coupler thermodynamiquement les deux phases et **calculer la différence d'enthalpie libre** lors d'un transfert et donc prédire celui-ci. Le résultat sera directement relié aux coefficients de partage et de sélectivité mesurés expérimentalement. Les effets de concentration en extractant, qui est la molécule permettant le transfert seront explicitement prédits.

Le système étudié sera ici celui de l'extraction des terres rares par les diamides. Cette modélisation atomique a pour but de changer d'ère dans la modélisation moléculaire, puisque l'on simulera enfin directement le transfert de phase, le but à terme étant d'arriver à des codes prédictifs de l'extraction.

**Profil :** Nous recherchons un.e candidat.e motivé.e ayant de solides connaissances théoriques en chimie-physique. Vous êtes titulaire d'un Master de Physique ou Chimie, école d'ingénieur, ENS. Vous avez 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 :** 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 Pr. Jean-François Dufreche ([jean-francois.dufreche@icsm.fr](mailto:jean-francois.dufreche@icsm.fr)) et Dr. Magali Duvail ([magali.duvail@cea.fr](mailto:magali.duvail@cea.fr)).

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