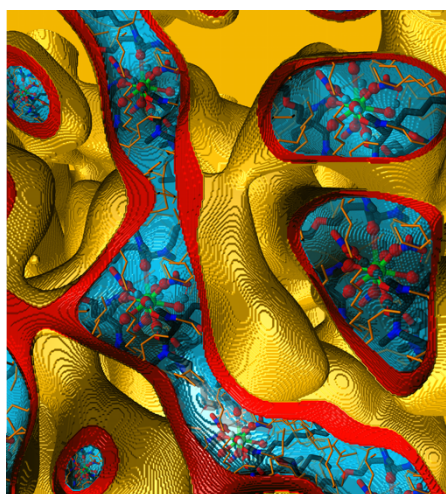




Postdoctorat à
Institut de Chimie Séparative de Marcoule (ICSM), Bagnols-sur-Cèze, France

Modélisation de l'extraction liquide-liquide
par un modèle de microémulsion

Poste de 12 mois (renouvelable) – Date de début : Avril 2023



Crédit: M. Duvail / CEA

Dans le cadre du recyclage des métaux stratégiques, et en particulier des terres rares, l'**extraction liquide-liquide** reste la méthode de séparation incontournable. La **modélisation de ce procédé** est d'une importance capitale car c'est le seul moyen de comprendre quantitativement les différents effets et mécanismes impliqués¹. Dans ce contexte, plusieurs techniques sont envisageables. Les travaux à l'échelle moléculaire ont montré comment la complexation et l'organisation ont lieu, mais les systèmes formés sont de grande taille avec une organisation similaire à celle des **microémulsions**, ce qui rend nécessaire la **modélisation à des échelles plus grandes**, et en particulier à l'**échelle mésoscopique**.

L'approche computationnelle consistera à **simuler la formation d'agrégats** composés de sels de lanthanides en présence de molécules extractantes dans un solvant organique. L'idée est de **développer un code prédisant la thermodynamique** de ces processus à partir d'un modèle de microémulsion adapté à l'extraction liquide-liquide².

Ce travail sera basé sur des simulations de dynamique moléculaire³ et des mesures expérimentales pour paramétrer le modèle. Une attention particulière sera accordée aux **effets de courbure** qui contrôlent la taille des espèces formées en solution, au **rôle des anions co-extraits** dans la modification de la sélectivité, ainsi qu'aux différentes façons de modéliser le rôle de la **complexation**.

Les objectifs de ce projet permettront de mieux **comprendre l'extraction par solvant** qui est l'une des méthodes de recyclage des métaux les plus répandues. L'originalité consiste à **coupler des concepts de chimie moléculaire** pour les effets à courte portée à **la théorie de la matière molle** (microémulsion) afin de proposer une description auto-consistante de l'extraction par solvant. L'application pratique de cette méthode au recyclage des métaux d'intérêt vise à améliorer et proposer des procédés plus efficaces et économes en ressources.

Profil : Les candidats admissibles doivent avoir une bonne connaissance de la chimie physique ou de la physique chimique. Une bonne connaissance de la programmation est également importante en raison de l'aspect modélisation du projet. De bonnes capacités de communication orale et écrite et de travail en équipe sont également essentielles, car le candidat devra collaborer avec une équipe de chercheurs expérimentaux.

Financement : Le postdoc est financé par l'Université de Montpellier dans le cadre du projet ANR MULTI-SEPAR. La durée du contrat est de 18 mois

Salaire net : ~ 2000 € / mois

Informations complémentaires : Le/la candidat.e rejoindra le groupe LMCT de l'ICSM. Un poste de maître de conférence est prévu l'année prochaine dans le laboratoire sur cette thématique.

Contact : Pour postuler, veuillez envoyer une lettre de motivation, un CV détaillé et des références à Pr. Jean-François Dufrêche (jean-francois.dufreche@icsm.fr) et Dr. Magali Duvail (magali.duvail@cea.fr).

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. Spadina *et al.*, **ACS Nano** 13, 3745 (2019). DOI: 10.1021/acsnano.9b07605

² S. Gourdin-Bertin *et al.*, **Solv. Extr. Ion Exch.** 40, 28 (2022). DOI: 10.1080/07366299.2021.1953259

³ S. Stemplinger *et al.*, **J. Mol. Liq.** 348, 118035 (2022). DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118035