

ICSM

INSTITUT DE CHIMIE SEPARATIVE DE MARCOULE



SUJETS DE STAGES 2025 – 2026

Mis à jour : 3 décembre 2025

PRESENTATION DE L'ICSM

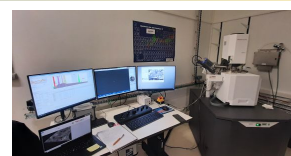
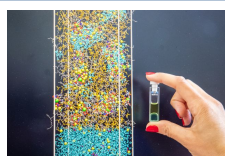
Créé en janvier 2007, l'Institut de Chimie Séparative de Marcoule (ICSM) est une Unité Mixte de Recherche (UMR 5257) entre le Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives ([CEA](#)), le Centre National de la Recherche Scientifique ([CNRS](#)), l'Université Montpellier ([UM](#)) et l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier ([ENSCM](#)). L'ICSM est composé de 3 axes de recherche regroupant les 8 équipes de recherche ou laboratoires travaillant en étroite collaboration :

- [Systèmes HYbrides pour la Séparation \(LHYS\)](#)
- [Ions aux Interfaces Actives \(L2IA\)](#)
- [Tri ionique par les Systèmes Moléculaires auto-assemblés \(LTSM\)](#)
- [Sonochimie dans les Fluides Complexes \(LSFC\)](#)
- [Nanomatériaux Adaptatifs pour l'énergie \(LNAR\)](#)
- [Interfaces de Matériaux en Evolution \(LIME\)](#)
- [Etude de la Matière en Mode Environnemental \(L2ME\)](#)
- [Modélisation Mésoscopique et Chimie Théorique \(LMCT\)](#)



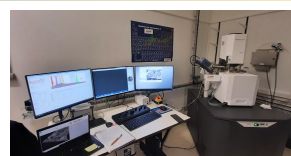
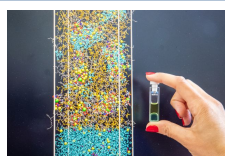
Il est également rattaché au [Pôle chimie Balard](#) réunissant les 4 instituts de chimie de Montpellier dont l'Institut Européen des Membranes (IEM), l'Institut Charles Gerhardt de Montpellier (ICGM) et l'Institut des Biomolécules Max Mousseron (IBMM).

Intégré au Pôle de Chimie MUSE ainsi qu'à l'Institut des Sciences et Technologies pour une Economie circulaire des énergies bas Carbone (ISEC) de la Direction des Energies du CEA (CEA/DES), l'ICSM vise à développer une recherche fondamentale dont l'objectif principal est de « proposer des choix » pour le développement des procédés de la chimie de séparation appliquée au domaine des énergies décarbonées, en intégrant les enjeux d'une énergie nucléaire durable et les défis de l'économie circulaire.



LISTE DES STAGES

<u>Solvants eutectiques pour la lixiviation de minerais d'uranium (LTSM)</u>	<u>3</u>
<u>Extraction éco-innovante des terres rares par point de trouble assistée par nano-ions (L2IA)</u>	<u>4</u>
<u>Etude comparative de l'extraction des lanthanides en milieux HNO_3, H_2SO_4 et HCl par les diglycolamides (LHYS)</u>	<u>5</u>
<u>Etude du comportement en phase organique de diglycolamides lors d'extractions liquide-liquide d'éléments d'intérêt (LHYS)</u>	<u>6</u>
<u>Recyclage des métaux critiques par le procédé d'extraction liquide-liquide (LHYS)</u>	<u>7</u>
<u>Etude de la cinétique de transfert de platinoïdes en extraction liquide-liquide (LHYS)</u>	<u>8</u>
<u>Etude de la précipitation sélective en milieu aqueux complexe (LHYS)</u>	<u>9</u>
<u>Synthèse et mise en forme de Metal-Organic Frameworks (MOF) pour la séparation de gaz rare en procédé colonne (LHYS)</u>	<u>10</u>
<u>Synthèse sonohydrothermale de matériaux (LSFC)</u>	<u>11</u>
<u>Exploration de la réactivité chimique et sonochimique des oxydes et solutions d'actinides en présence de H_2O_2 (LSFC)</u>	<u>12</u>
<u>Apport de la sonochimie à la dissolution de phases uranifères réfractaires dans les gisements (LSFC / LIME)</u>	<u>13</u>
<u>Etude du comportement des produits de fission au cours de la dissolution de composés modèles en conditions de stockage des combustibles (LIME)</u>	<u>14</u>
<u>Synthèse et dissolution en conditions de retraitement de composés simulant le MOx irradié (LIME)</u>	<u>15</u>
<u>Dissolution de concentré de chalcopirite : étude macroscopique de la cinétique et suivi <i>operando</i> par MEB environnemental (LIME / L2ME)</u>	<u>16</u>
<u>Modélisation moléculaire pour le recyclage des terres rares (LMCT)</u>	<u>17</u>



SOLVANTS EUTECTIQUES POUR LA LIXIVIATION DE MINERAIS D'URANIUM

Laboratoire de Tri-ionique des Systèmes Moléculaires auto-assemblés (LTSM)

Master1 / Master2 ; Durée 4 / 6 mois à partir de mars 2026

Contacts :

- Sandrine DOURDAIN – sandrine.dourdain@cea.fr
- Guilhem ARRACHART – guilhem.arrachart@cea.fr
- Aboubakar BAKAYOGO – aboubakar.bakayogo@cea.fr

Contexte

La lixiviation est l'étape fondamentale de la production de l'uranium, car elle permet la solubilisation du métal à partir du minerai. Aujourd'hui, cette étape repose principalement sur l'utilisation d'acides minéraux forts, notamment l'acide sulfurique. Ces derniers sont polluants, peu sélectifs et difficilement recyclables, ce qui pose des problèmes environnementaux et économiques. Dans un contexte de transition vers des procédés plus durables, la recherche de procédés de lixiviation plus propres et plus efficaces constitue donc une priorité.

Plusieurs alternatives sont étudiées, notamment les acides organiques faibles et des solvants complexants innovants. Parmi eux, les solvants eutectiques (DES), introduits par Abbott et al. [1], sont prometteurs en raison de leur grande stabilité et de leur faible impact environnemental. Leur efficacité pour la lixiviation de l'uranium a récemment été démontrée [2,3]. Cependant, des travaux d'optimisation restent nécessaires avant une application en hydrométallurgie.

Objectifs

L'objectif du stage est de développer et d'évaluer des solvants eutectiques hydrophobes ou hydrophiles capables de lixivier efficacement et sélectivement l'uranium tout en limitant l'usage d'acides corrosifs. Différents DES seront formulés à partir de molécules extractantes connues, puis caractérisés (viscosité, Température de fusion, stabilité thermique). L'efficacité de ces solvants sera ensuite évaluée sur une gamme de minerais d'uranium, et les performances de lixiviation seront quantifiées par ICP-OES. Les mécanismes d'interaction Uranium-DES seront étudiés à l'aide de techniques spectroscopiques (UV-Vis, IR, RMN) ou éventuellement par diffraction (SAXS, SANS) afin d'établir des relations structure-réactivité. Les résultats seront comparés à un système de référence (le procédé AMEX), afin d'estimer les gains en efficacité, sélectivité et durabilité.

Profil du candidat

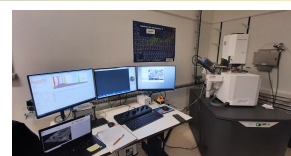
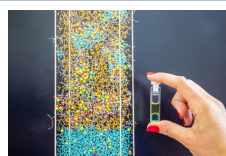
- Etudiant(e) de Master 1/Master 2 en chimie matériaux, physico-chimie
- Intérêt pour les procédés hydrométallurgiques, la physico-chimie et la compréhension de mécanisme

Apport pour le candidat

- Passage du PR1 (Formation d'une semaine) obligatoire en début de stage
- Expérience de recherche scientifique pour concevoir et réaliser des protocoles expérimentaux rigoureux avec des techniques d'analyse avancées.
- Compétences en analyse, interprétation de phénomènes scientifiques et raisonnement.

Références

[1] A. P. Abbott *et al.* **Chem. Commun** 1, 70 (2003) ; [2] J. Gamare *et al.* **Eur. J. Inorg. Chem.** 26, 35 (2023) ; [3] L. H. Reddy *et al.* **J. Radioanal. Nucl. Chem.** 334, 8427(2025).



EXTRACTION ECO-INNOVANTE DES TERRES RARES PAR POINT DE TROUBLE ASSISTEE PAR NANO-IONS

Laboratoire Ions aux Interfaces Actives (L2IA)

Master 2 ; Durée 6 mois à partir de février/mars 2026

Contacts :

- Maria BOLTOEVA – maria.boltoeva@cea.fr
- Pierre BAUDUIN – pierre.bauduin@cea.fr

Contexte

Les **terres rares** sont essentielles à la fabrication d'aimants permanents indispensables aux véhicules électriques et aux éoliennes. Cependant, leur séparation sélective reste complexe en raison de propriétés similaires. L'**extraction par point de trouble** (CPE, *Cloud Point Extraction*) est une alternative prometteuse à l'extraction traditionnelle par solvant. La CPE des espèces métalliques se réalise sans solvants organique toxique, à l'aide d'un **complexant** et d'un **tensioactif non ionique thermosensible**, permettant la séparation des phases (Figure 1) se produit sous des conditions spécifiques de concentrations et de température. Récemment, il a été démontré que certains **nano-ions**, comme les **polyoxométallates** (POM), possèdent des propriétés **super-chaotropes**, s'associant fortement à des espèces organiques hydratés, comme des micelles formées par des tensioactifs non ioniques.[1] La présence de ces nano-ions (anions) multichargés à la surface des micelles laisse présager une forte capacité d'adsorption des cations de terres rares, offrant ainsi une voie à une technique séparative plus **efficace, sélective et écologique**.

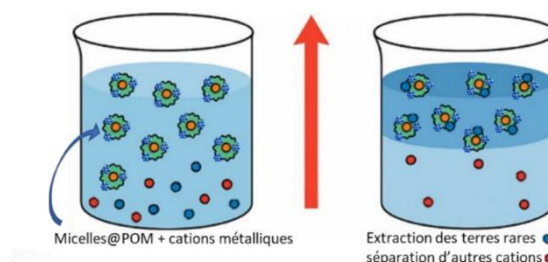


Fig. 1. Représentation schématique d'extraction par point de trouble.

Sujet

Ce stage de Master 2 a pour objectif **d'étudier l'extraction sélective des ions trivalents de terres rares par CPE**, en présence d'autres cations dans une solution aqueuse. L'extraction sera réalisée à l'aide de nano-ions superchaotropes et de tensioactifs non-ioniques peu toxiques et biodégradables. L'objectif est **d'identifier un système d'extraction performant, avec un point de trouble inférieur à 50°C**, afin de réduire l'énergie nécessaire à la séparation des phases. Ce sujet propose :

- Déterminer la température de trouble et le pourcentage d'extraction (ICP, Fluorescence X, SAXS) ;
- Varié la nature et la concentration des tensioactifs, POMs et cations métalliques en solution ;
- Mesurer les propriétés physico-chimiques des solutions (acidité, densité, activité d'eau) ;
- Déterminer la spéciation moléculaire des phases à l'aide de techniques spectroscopiques complémentaires (UV-vis, IR, RMN).

Profil du candidat

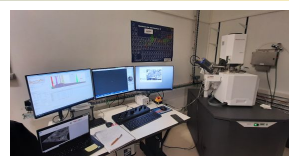
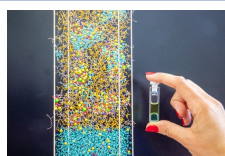
- Etudiant(e) de Master 2 en physico-chimie
- Intérêt pour la physico-chimie en solution, les systèmes colloïdaux et la spectroscopie

Apport pour le candidat

- Première expérience de recherche en physico-chimie
- Expérience en CPE, dosage analytiques, expériences de diffusion du rayonnement

Références

[1] M. Hohenschutz et al. **Angew. Chemie Internat. Ed.** 59, 8084 (2020).



ÉTUDE COMPARATIVE DE L'EXTRACTION DES LANTHANIDES EN MILIEUX HNO_3 , H_2SO_4 ET HCl PAR LES DIGLYCOLAMIDES

Laboratoire des Systèmes HYbrides pour la Séparation (LHyS)

Niveau M2 ; Durée 6 mois à partir de février 2026

Contacts :

- Marie SIMONNET – marie.simonnet@cea.fr
- Maria BOLTOEVA – maria.boltoeva@cea.fr

Contexte

Les lanthanides font partie des **terres rares**, éléments particulièrement prisés pour les nouvelles technologies (aimants, écrans, etc.). Toutefois, certaines applications exigent un grand degré de pureté, or les lanthanides ont un comportement chimique tellement similaire qu'ils sont très difficiles à séparer les uns des autres. Actuellement, la séparation se fait par **extraction liquide-liquide** à l'aide d'acides organiques. Les facteurs de séparation entre deux lanthanides adjacents sont cependant très faibles, nécessitant de nombreuses étapes d'extraction. De plus, le mécanisme d'extraction se fait par échange entre 3H^+ et Ln^{3+} , nécessitant de neutraliser la solution de lixiviation, ce qui consomme de grandes quantités de soude et donc génère des effluents sodiés à traiter par la suite. Récemment, de plus en plus d'études se focalisent sur le remplacement de ces acides organiques par des **extractants neutres** fonctionnant par **coordination des métaux**, ce qui permet de réaliser l'extraction directement en milieu acide. L'une des molécules bien connue de par son utilisation dans le recyclage des combustibles nucléaires est le TBP, déjà utilisé à la Rochelle par Solvay. Cependant, les facteurs de séparation restent faibles avec cet extractant, nécessitant de très nombreux étages d'extraction pour parvenir à une bonne purification. C'est pourquoi de nouvelles familles d'extractants sont étudiées en remplacement. Parmi les différentes familles étudiées, les **diglycolamides** semblent les plus prometteurs. Toutefois, les meilleurs résultats sont obtenus dans l'**acide nitrique**, bien moins intéressant économiquement que les **acides chlorhydrique ou sulfurique**.

Objectifs

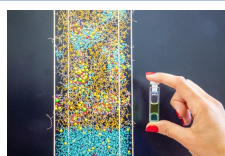
Ce stage a donc pour but de **comparer l'extraction des lanthanides** dans les milieux HCl , H_2SO_4 et HNO_3 par les **diglycolamides** dans **différents diluants** en termes d'efficacité mais aussi de **mécanismes d'extraction**. Pour ce faire, des **études d'extraction multiparamétriques** seront effectuées, couplées à des **études spectroscopiques** (UV, IR, RMN) pour la caractérisation des phases organiques.

Profil du candidat

Le/la candidat(e) est en M2 chimie, avec des connaissances en chimie de solution. Une bonne maîtrise de la chimie analytique serait un plus. La capacité à communiquer efficacement en français et/ou en anglais est nécessaire.

Apport pour le candidat

- Expériences de recherche en séparation, apprentissage de techniques analytiques
- Sujet valorisable à la fois pour poursuivre une carrière académique ou dans l'industrie hydrométallurgique



ÉTUDE DU COMPORTEMENT EN PHASE ORGANIQUE DE DIGLYCOLAMIDES LORS D'EXTRACTIONS LIQUIDE-LIQUIDE D'ÉLÉMENTS D'INTÉRÊT

Laboratoire des Systèmes HYbrides pour la Séparation (LHyS)

Niveau M2 ; Durée 6 mois à partir de février 2026

Contact :

- Marie SIMONNET – marie.simonnet@cea.fr

Contexte

Après utilisation dans les réacteurs, le combustible nucléaire usé contient principalement des actinides majeurs (U et Pu), des **actinides mineurs** (Np, Am, Cm) et des **produits de fission** (PFs = Sr, Zr, PGM, Ln). Actuellement, le **traitement** du combustible usé permet de **recycler les actinides majeurs**. Les PFs et actinides mineurs, quant à eux, sont vitrifiés. Cependant, la récupération des actinides mineurs, qui peuvent aussi servir de combustibles pour les réacteurs à neutrons rapides, permettrait de réduire la chaleur résiduelle des déchets ultimes, tout en valorisant la matière fissile. Cette séparation se fait par **procédés hydrométallurgiques**, notamment **l'extraction par solvant**, à l'aide d'extractants sélectifs. Parmi les différentes familles étudiées, les **diglycolamides** (DGAs) semblent les plus prometteurs [1]. De nombreuses études se sont penchées sur l'extraction des An(III) et Ln(III) [2], éléments d'intérêt directs, mais les **mécanismes d'extraction** de la majeure partie des PFs restent inconnus. Une étude a montré que l'extraction de Sr^{2+} peut être évitée en **réduisant la longueur de la chaîne alkyle** des substituants [3]. Les auteurs affirment que les chaînes plus courtes induisent **moins d'agrégats**, ce qui réduit l'extraction du Sr^{2+} , hypothèse confirmée par nos résultats. Il est donc possible que cette réduction de la longueur de la chaîne alkyle limite la co-extraction d'autres PFs.

Objectifs

L'objectif principal sera donc d'étudier les **mécanismes d'extraction d'éléments d'intérêt** par les DGAs. Pour ce faire, différentes séries **d'extraction** seront effectuées en variant plusieurs paramètres puis analysées par **ICP-OES**. Ces analyses seront couplées à des études de spectroscopie **SAXS** pour étudier le **comportement supra-moléculaire en phase organique**. Ces propriétés **d'agrégation** sont essentielles à la compréhension des **mécanismes d'extraction**. Une attention toute particulière sera portée à la formation de **3^{ème} phase** qui se produit lorsque le diluant ne parvient plus à solubiliser les complexes, scindant la phase organique en une phase légère (diluant + faible concentration d'extractant/complexes) et une phase lourde (extractant + complexes + faible concentration de diluant).

Profil du candidat

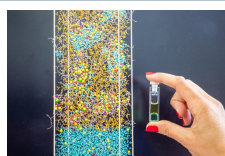
Le/la candidat(e) est en Master 2 de chimie, avec des connaissances en chimie séparative et en chimie des solutions. Une bonne maîtrise de la chimie analytique et de la chimie nucléaire serait un plus. La capacité à communiquer efficacement en français et/ou en anglais est nécessaire.

Apport pour le candidat

- Expériences de recherche en séparation, apprentissage de techniques analytiques (ICP-OES, SAXS)
- Sujet valorisable à la fois pour poursuivre une carrière académique ou dans l'industrie hydrométallurgique

Références

- [1] M. Simonnet *et al.* **Radiochim. Acta** 111, 597 (2023) ; [2] E. Archer *et al.* **Solvent Extr. Ion Exch.** 41, 697 (2023) ; [3] Y. Xu *et al.* **Solvent Extr. Ion Exch.** 35, 507 (2017).



RECYCLAGE DES METAUX CRITIQUES PAR LE PROCÉDE D'EXTRACTION LIQUIDE-LIQUIDE

Laboratoire des Systèmes HYbrides pour la Séparation (LHys)

Niveau M2 ; Durée 6 mois à partir de février 2026

Contacts :

- Marie SIMONNET – marie.simonnet@cea.fr
- Cyril MICHEAU – micheau.cyril@jaea.go.jp

Contexte

La **demande croissante en électricité** et le **développement des technologies avancées** entraînent un **besoin urgent de réduire l'impact environnemental**. Ces technologies utilisent des **ressources métalliques critiques**, comme les **platinoïdes** (PGM) et les **éléments de terres rares** (REE). Leur approvisionnement limité et leur importance stratégique nécessitent l'exploration de nouvelles sources, tandis que le **recyclage et les mines urbaines** deviennent des sources majeures grâce aux déchets d'équipements électriques et électroniques (DEEE). Pour répondre à ce besoin, l'industrie hydrométallurgique développe des **procédés efficaces de séparation des métaux**, notamment l'**extraction liquide-liquide** (LLE), qui transfère les ions métalliques ciblés d'une phase aqueuse vers une phase organique contenant un extractant. Les approches classiques ignorent souvent les **interactions de sphères externes**, comme les **effets de solvant**, mais l'utilisation des techniques de diffusion a montré la formation d'**agrégats supramoléculaires**, pouvant expliquer certains **effets de sélectivité inattendus**. En combinant diffusion et réflectivité neutronique (NR), nous avons mis en évidence un **effet de reconnaissance de taille des agrégats sur la sélectivité**, et un **effet d'organisation interfaciale** sur la vitesse d'extraction. Grâce à la **diffusion de neutrons aux petits angles** (SANS), il est possible d'**ajuster finement la taille des agrégats** pour contrôler la sélectivité. Par exemple, lors de la séparation du palladium (Pd) et du néodyme (Nd) avec des malonamides, des **déclencheurs internes** (permittivité de la phase organique, force ionique de la phase aqueuse) permettent de **régler efficacement la taille des agrégats**. Un déclencheur externe, la température, a été étudié, mais sans corrélation directe avec la sélectivité.

Objectifs

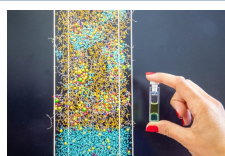
Le premier objectif de ce stage est de **déterminer les facteurs de sélectivité** (SF) pour la **séparation du Pd et du Nd** en utilisant un **malonamide** spécifique (DMDBDMA) dans l'heptane et le toluène à **différentes températures** d'extraction. Le deuxième objectif, si le premier objectif montre des SF suffisamment élevés, est de **démontrer la faisabilité d'une co-extraction du Pd et du Nd à basse température**, suivie d'une **déextraction sélective du Nd à haute température**, en utilisant soit le système toluène, soit le système heptane. Enfin, et en parallèle, une **étude cinétique de l'extraction**, notamment à 10°C, pourra être menée ; la spéciation dans la phase organique sera suivie par des **méthodes spectroscopiques** telles que IR, UV-Vis et RMN. Une attention particulière devra être portée à la formation potentielle d'une **troisième phase**. Ces expériences devraient aboutir à un **schéma complet de séparation du Pd et du Nd** utilisant un système extractant unique, et confirmer le fort impact de l'agrégation de l'extractant sur l'efficacité du processus LLE.

Profil du candidat

Le/la candidat(e) est en M2 chimie, avec des connaissances en chimie des solutions et physico-chimie. Une bonne maîtrise de la chimie analytique serait un plus. La capacité à communiquer efficacement en français et/ou en anglais est nécessaire.

Apport pour le candidat

- Expériences de recherche en séparation, apprentissage de techniques analytiques
- Sujet valorisable à la fois pour poursuivre une carrière académique ou dans l'industrie hydrométallurgique



ÉTUDE DE LA CINÉTIQUE DE TRANSFERT DE PLATINOÏDES EN EXTRACTION LIQUIDE-LIQUIDE

Laboratoire des Systèmes Hybrides pour la Séparation (LHys)

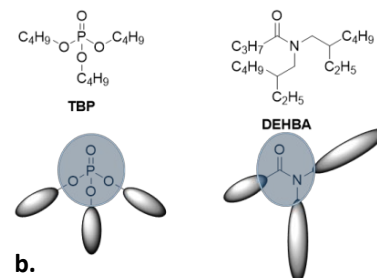
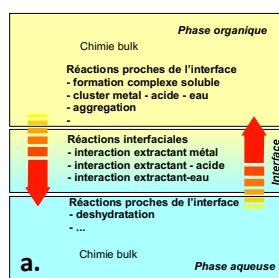
Niveau Master (M1 ou M2) ; Durée 4 à 6 mois à partir de février 2026

Contact :

- Damien BOURGEOIS – damien.bourgeois@cnrs.fr

Contexte

Le développement d'un procédé d'extraction liquide-liquide nécessite l'étude des performances thermodynamiques, hydrodynamiques mais également cinétiques du système extractant mis en œuvre. Au cours de l'extraction, de nombreux phénomènes régissent le transfert de matière, les plus connus correspondant à la diffusion moléculaire et la réaction chimique (Fig. a).



a). Dans le domaine du retraitement du combustible nucléaire usé, l'extraction des actinides (majeurs et mineurs) ainsi que des lanthanides dépend principalement de la diffusion moléculaire. Cependant, certains produits de fission, en particulier le palladium (Pd) et le ruthénium (Ru), ont un comportement principalement régi par la cinétique chimique. De façon à définir au mieux les conditions opératoires d'un procédé de séparation optimisé, la connaissance fine des phénomènes comme des paramètres permettant le transfert de ces ions métalliques est essentielle.

Sujet

L'objectif de ce stage est de faire le lien entre i) les **cinétiques de transfert du Pd et du Ru** observées pour quelques systèmes extractants donnés (Fig. b.), et ii) les **phénomènes moléculaires** intervenant dans le transfert des ions dans les phases mises en jeu (chimie de coordination des métaux). Le travail consistera à mieux caractériser en extraction L/L un système type TBP ou DEHBA, d'abord sur une petite échelle au laboratoire, puis à l'aide d'outils bien définis permettant de faire le distinguo entre transfert chimique et transfert diffusionnel. L'impact de la **chimie de coordination du métal** (échange de ligands) sera alors abordé par diverses techniques expérimentales (Raman, IR, UV-vis...) dans le but d'évaluer au mieux l'impact de la spéciation de l'ion métallique sur le transfert.

Profil du candidat

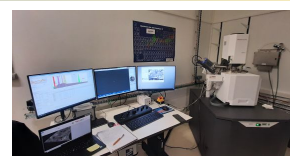
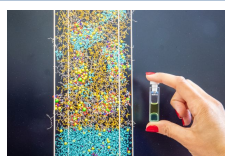
- Etudiant(e) de niveau Master en chimie moléculaire ou équivalent
- Intérêt pour un sujet à l'interface entre chimie moléculaire (chimie de coordination) et génie chimique (cinétique), et impliquant à la fois des connaissances fondamentales et appliquées

Apport pour le candidat

- Première expérience de recherche en hydrométallurgie, chimie des platinoïdes

Références

V. Lacanau *et al.* **Hydrometallurgy** 191, 105241 (2020) ; S.A. Moussaoui *et al.* **Sep. Purif. Technol.** 119293 (2021).



ÉTUDE DE LA PRÉCIPITATION SELECTIVE EN MILIEU AQUEUX COMPLEXE

Laboratoire des Systèmes Hybrides pour la Séparation (LHys)

Niveau M2 ; Durée 6 mois (dépendant du master)

Contacts :

- Michael Carboni – michael.carboni@cea.fr
- Mathéo Henry – matheo.henry@cea.fr

Contexte

Le retraitement de l'oxyde d'uranium (UO_x) dans le cycle du combustible nucléaire français repose actuellement sur deux procédés successifs : **PUREX** (Plutonium Uranium Reduction Extraction) et MIMAS (Micronized MASTer blend). Bien que ces procédés assurent une **haute pureté** et de bons rendements, ils présentent **plusieurs limitations**, notamment un grand nombre d'étapes, une gestion complexe des effluents, des risques de prolifération liés au plutonium, ainsi que l'utilisation de réactifs toxiques tels que l'hydrazine. Dans cette optique, de **nouvelles approches** de retraitement sont aujourd'hui explorées.

Sujet

Le sujet proposé s'inscrit dans une démarche innovante, en **rupture avec les procédés conventionnels**, et vise à étudier la précipitation simultanée des éléments présents dans une solution simulant un jus de dissolution en amont du procédé PUREX. Un ensemble **d'éléments simulants** (U, Th, Zr, Sr, Ce, Nd) sera précipité par ajout d'un ligand organique complexant, la 2,5-dihydroxy-1,4-benzoquinone (DHBQ), conduisant à la formation de polymères de coordination. L'objectif est de **séparer sélectivement les actinides** d'intérêt des autres éléments en contrôlant les conditions de précipitation.

La première partie de l'étude portera sur **l'influence des principaux paramètres expérimentaux** – acidité de la phase aqueuse, rapport molaire ligand/métal, temps et température de précipitation – afin d'évaluer la sélectivité et la cinétique de formation des précipités. Les surnageants seront dosés par ICP-OES afin de déterminer les rendements de précipitation. La seconde partie sera consacrée à la **conversion thermique des matériaux hybrides** obtenus, dans le but d'élaborer des oxydes mixtes. Les produits intermédiaires et finaux seront caractérisés par différentes techniques analytiques : diffraction des rayons X (DRX), microscopie électronique à balayage couplée à l'analyse EDX (MEB-EDX), spectroscopie infrarouge (FTIR) et analyse thermogravimétrique (ATG).

Profil du candidat

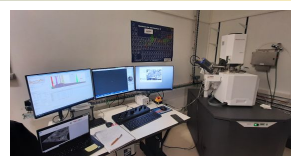
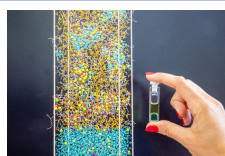
- Etudiant(e) de niveau M2 en chimie des matériaux
- Intérêt pour la synthèse de matériaux, la caractérisation (manipulation en laboratoire) et l'extraction

Apport pour le candidat

- Première expérience de recherche en synthèse de chimie des matériaux poreux
- Acquisition de compétences dans l'analyse des matériaux (Diffraction sur poudre, BET, ATG, MEB ...)
- Séparation de métaux par précipitation

Références

M. Henry *et al.* **Dalton Trans.** 53, 17110 (2024).



SYNTHESE ET MISE EN FORME DE METAL-ORGANIC FRAMEWORKS (MOF) POUR LA SEPARATION DE GAZ RARE EN PROCEDE COLONNE

Laboratoire des Systèmes Hybrides pour la Séparation (LHyS)

Niveau M1 ; Durée 4 mois (dépendant du master)

Contacts :

- Michael Carboni – michael.carboni@cea.fr
- Gabriella Lucena – gabriella.lucena@cea.fr

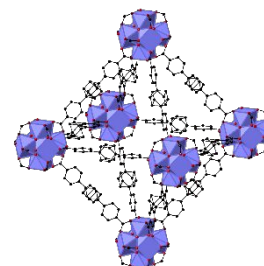
Contexte

L'industrie nucléaire produit différents gaz de fission, tels que notamment le Xe et le Kr, qu'il faut pouvoir capter et séparer en sortie de réacteur. Pour cela, des procédés par **adsorption sur support solide** dans des colonnes à lit fixe sont envisagés, mais nécessitent le développement de matériaux très sélectifs et à haute capacité de sorption. Ce procédé sépare les gaz par affinité différentielle dans un solide poreux. En effet, ces matériaux doivent offrir une **très haute sélectivité** pour distinguer les gaz nobles des autres composants gazeux et permettre la séparation du Kr et du Xe entre eux de taille très proche.

Sujet

Récemment, des matériaux de type **Metal-Organic Framework (MOF)** ont ainsi été décrits dans la littérature et ont démontré des performances de piégeage et de sélectivité importantes, notamment du fait de leur grande surface spécifique (porosité) ainsi que de la possibilité d'adapter la taille des cages poreuses à la taille du gaz [1]. Ces matériaux hybrides organiques-inorganiques poreux se synthétisent par voie solvo-thermale en mélangeant les différents précurseurs (métaux et ligands). Or, ce type de matériaux est généralement synthétisé sous forme de fines poudres, ce qui n'est pas compatible avec une utilisation dans des procédés d'adsorption à lit fixe [2].

Ce stage vise ainsi dans un premier temps à identifier dans la **littérature les MOFs les plus prometteurs** en termes de capacité de capture et de sélectivité, ainsi qu'à reproduire leur **synthèse en laboratoire**. Les MOF synthétisés seront **mises en forme** en vue de former des grains pouvant être utilisés dans un procédé de séparation de gaz utilisant des colonnes garnies.



Profil du candidat

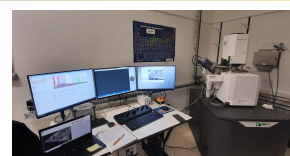
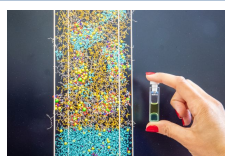
- Etudiant(e) de niveau M1 en chimie des matériaux
- Intérêt pour la synthèse de matériaux et la caractérisation (manipulation en laboratoire)

Apport pour le candidat

- Première expérience de recherche en synthèse de chimie des matériaux poreux
- Acquisition de compétences dans l'analyse des matériaux (Diffraction sur poudre, BET, ATG, MEB ...)
- Analyses d'adsorption de gaz

Références

[1] Banerjee *et al.* **Chem.** 4, 466 (2018) ; [2] Riley *et al.* **ACS Applied Materials & Interfaces** 12, 45342 (2020).



SYNTHESE SONOHYDROTHERMALE DE MATERIAUX

Laboratoire de Sonochimie dans les Fluides Complexes (LSFC)

Niveau M1 ; Durée 4 mois à partir d'avril 2026

Contact :

- Tony CHAVE – tony.chave@cea.fr

Contexte

La conception et la mise en œuvre de nouvelles **voies de synthèse plus efficaces et économes** sont des défis actuels en science des matériaux qui s'inscrivent dans une approche globale de **chimie durable et d'économie circulaire**. L'utilisation des **ultrasons** de puissance pour la **synthèse de matériaux** constitue une discipline en plein essor qui a le potentiel de répondre à ces exigences notamment pour les synthèses hydrothermales réputées chronophages et énergivores mais qui restent incontournables même à l'échelle industrielle. Le **couplage des ultrasons et des conditions hydrothermales** constitue une technique particulièrement innovante que nous développons au LSFC pour la synthèse de matériaux catalytiques depuis plusieurs années. Ce couplage sonohydrothermal permet en effet une **économie d'énergie** et des conditions de synthèse ayant un **impact minimal sur l'environnement**.

Sujet

Des études récentes menées au sein du LSFC ont permis de mettre en évidence que la **synthèse de zéolites** de type LTA était **accélérée d'un ordre de grandeur** par rapport aux synthèses classiques en conditions hydrothermales silencieuses. Au cours de ce stage, nous proposons d'étendre nos travaux à la synthèse d'autres types de nanomatériaux et notamment **d'aluminosilicates** et de **métallosilicates** purement **microporeux ou à porosité hiérarchisée**. L'objectif de cette étude est d'étudier **l'influence des ultrasons** lors de la synthèse de ces matériaux, sur leurs **propriétés structurales**, ainsi que sur leurs **cinétiques de formation** au cours du traitement sonohydrothermal. Des **analyses par DRX, BET, MEB, MET HR et IR** devront être réalisées pour caractériser finement les matériaux synthétisés et nourrir ainsi la **compréhension fine des mécanismes de croissance et de structuration** des matériaux sous conditions sonohydrothermales.

Profil du candidat

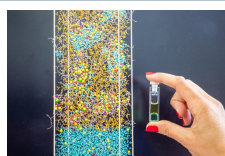
- Etudiant(e) de niveau Master M1 en chimie
- Intérêt pour la synthèse de matériaux inorganiques par voie non usuelle

Apport pour le candidat

- Première expérience de recherche en sonochimie et en synthèse innovante de nanomatériaux
- Découverte de différentes techniques de caractérisation physicochimique des matériaux

Références

C. Cau *et al.* **J. Phys. Chem. C** 117, 22827 (2013) ; S. I. Nikitenko *et al.* **ACS Catal.** 5, 4790 (2015) ; W. Nzodom Djozing *et al.* **Dalton Trans.** 53, 16407 (2024).



EXPLORATION DE LA REACTIVITE CHIMIQUE ET SONOCHIMIQUE DES OXYDES ET SOLUTIONS D'ACTINIDES EN PRESENCE DE H_2O_2

Laboratoire de Sonochimie dans les Fluides Complexes (LSFC)

Niveau M1 (12-16 semaines) ou M2 (20-24 semaines) à partir de mi-février 2026

Contact :

- Matthieu VIROT – matthieu.virot@cea.fr

Contexte

Les réactions induites par les ultrasons de puissance reposent sur le phénomène de cavitation acoustique, générant des températures et des pressions localement extrêmes, tout en maintenant le milieu réactionnel à température ambiante. Ce phénomène conduit à la formation d'espèces excitées et radicalaires, favorisant par exemple l'accumulation de H_2O_2 en solution aqueuse. Ces effets chimiques s'accompagnent de phénomènes physiques tels que l'érosion ou la fragmentation des phases solides, la réduction des couches de diffusion et l'accélération du transfert de masse.[1] L'ensemble de ces processus crée ainsi des voies de réaction originales pour la transformation de matériaux réfractaires, notamment les oxydes d'actinides.

Sujet

Nous avons observé que la sonolyse d'oxydes d'actinides en milieu aqueux, dans des conditions favorisant l'accumulation de H_2O_2 , induit des comportements originaux allant de la dissolution partielle des oxydes à leur conversion en peroxydes d'actinides. Par exemple, nous avons observé que la sonolyse de UO_2 dans l'eau pure ou en milieu sulfurique dilué conduit à la précipitation de peroxydes d'uranyle $[(UO_2(O_2)(H_2O)_2) \cdot xH_2O]$ avec $x = 2$ ou 4 . [2] Les cinétiques de transformation et les propriétés des phases solides ainsi précipitées se révèlent fortement dépendantes des conditions expérimentales (pH, atmosphère gazeuse, nature du milieu, etc.). Ces résultats ouvrent la voie à une utilisation de la sonochimie non seulement comme outil de dissolution contrôlée, mais aussi comme voie de synthèse de phases solides aux propriétés maîtrisées ou présentant parfois des structures cristallines inédites. [2,3] Plus récemment, l'étude d'oxydes mixtes $(U_xTh_{1-x})O_2$ a mis en évidence des comportements tout aussi intéressants, qui méritent d'être confirmés et approfondis. Le travail proposé dans le cadre de ce stage s'inscrit dans la continuité de ces études, avec une approche exploratoire visant à (i) confirmer et compléter les résultats précédents obtenus sur les systèmes $(U_xTh_{1-x})O_2$ et (ii) élargir le champ d'étude à la réactivité chimique et sonochimique des oxydes et solutions d'actinides en milieu aqueux.

Profil du candidat

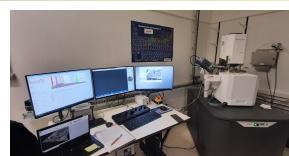
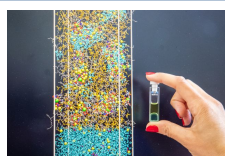
- Etudiant(e) de Master en chimie des matériaux, chimie inorganique ou physico-chimie
- Intérêt pour la recherche expérimentale et la compréhension des mécanismes de transformation en solution aqueuse. Des connaissances en caractérisation structurale et en chimie des oxydes métalliques seraient appréciées.

Apport pour le candidat

- Expérience en laboratoire de recherche et manipulation d'éléments radioactifs
- Acquisition de compétences sur le parc analytique de l'ICSM

Références

- [1] S. Nikitenko *et al.* **Radiochim. Acta** 110, 453 (2022) ; [2] J. Margate *et al.* **J. Hazard. Mater.** 459, 132059 (2023) ; [3] L. Bonato *et al.* **Ultrason. Sonochem.** 69, 105235 (2020).



APPORT DE LA SONOCHIMIE A LA DISSOLUTION DE PHASES URANIFERES REFRACTAIRES DANS LES GISEMENTS

Laboratoire de Sonochimie dans les Fluides Complexes (LSFC) & Laboratoire des Interfaces de Matériaux en Evolution (LIME)

Niveau M2 (20–24 semaines) à partir de mi-février 2026

Contacts :

- Matthieu VIROT – matthieu.virot@cea.fr
- Stéphanie SZENKNECT – stephanie.szenknect@cea.fr

Contexte

La brannérite (de formule idéale UTi_2O_6) est considérée comme la troisième ressource naturelle d'uranium (IV) dans les gisements après l'uraninite et la coffinite.[1] Cependant, la brannérite est une phase minérale réfractaire à la dissolution et l'extraction de l'uranium contenu au sein de cette phase nécessite des conditions plus agressives que celles utilisées pour la lixiviation de minerais uranifères conventionnels. L'application d'ultrasons de puissance est considérée comme une méthode d'activation prometteuse en raison des conditions de réaction douces et efficaces qu'elle crée. Dans ce contexte, l'objectif du stage proposé est de tester l'influence des ondes ultrasonores sur la cinétique de dissolution de la phase brannérite en milieu acide sulfurique dilué (typiquement $\leq 0,5 \text{ mol L}^{-1}$). Les résultats pourront être comparés aux vitesses de dissolution déjà mesurées sous agitation mécanique.[2]

Sujet

Le travail de stage s'articulera autour de 3 phases :

- La synthèse d'échantillons de brannérite selon un protocole déjà établi au laboratoire [3] ;
- L'étude multiparamétrique des effets des ultrasons sur le milieu de dissolution et notamment sur la production d'espèces oxydantes ;
- L'étude de la cinétique de dissolution des échantillons synthétiques en présence d'ultrasons.

Compte tenu des spécificités du sujet, ce travail se déroulera au sein des 2 laboratoires de l'ICSM impliqués : le laboratoire d'étude des interfaces en évolution (LIME) et le laboratoire de sonochimie dans les fluides complexes (LSFC) et bénéficiera d'un double encadrement.

Profil du candidat

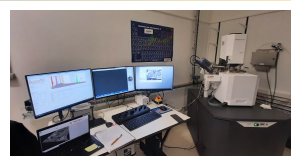
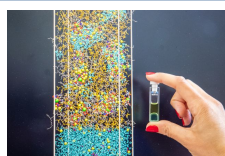
- Etudiant(e) de Master 2 en chimie des matériaux, chimie des procédés ou physico-chimie
- Intérêt pour la chimie des matériaux, la sonochimie et chimie des solutions appliquées au cycle du combustible nucléaire

Apport pour le candidat

- Passage du PR1 (formation d'une semaine) obligatoire en début de stage
- Expériences de recherche interdisciplinaire au sein de deux laboratoires (LIME et LSFC) avec un double encadrement
- Stage pouvant se poursuivre en thèse (bourse ministérielle Univ Montpellier)

Références

[1] M. Turuani *et al.* **Mineral. Mag.** 84, 313 (2020) ; [2] H. Lin *et al.* **npj Mater. Degrad.** 5, 30 (2021) ; [3] A. Mesbah *et al.*, **J. Nucl. Mater.** 515, 401 (2019).



ÉTUDE DU COMPORTEMENT DES PRODUITS DE FISSION AU COURS DE LA DISSOLUTION DE COMPOSÉS MODÈLES EN CONDITIONS DE STOCKAGE DES COMBUSTIBLES

Laboratoire des Interfaces de Matériaux en Evolution (LIME)

Niveau M2 ; Durée 6 mois, à partir de mars 2026

Contact :

- Stéphanie SZENKNECT – stephanie.szenknect@cea.fr

Contexte

Dans le cadre du projet Européen EURAD 2, le Laboratoire LIME à l'ICSM est chargé d'étudier l'altération de matériaux simulant le combustible UOx irradié dans des conditions représentatives du stockage des combustibles en formation géologique profonde. Pour atteindre cet objectif, des expériences d'altération de composés simulants seront menées en conditions de dissolution oxydante, telles que celles imposées à proximité des combustibles irradiés par la radiolyse alpha de l'eau d'environnement.

Sujet

Certains des composés modèles à base de dioxyde d'uranium auront été préparés et caractérisés au préalable. Ce panel de composés devra être complété au cours du stage. La préparation de matériaux sera réalisée suivant un protocole bien établi de synthèse en voie humide permettant de co-précipiter l'uranium et les isotopes stables des produits de fission sélectionnés. Après conversion en oxyde et frittage, les pastilles obtenues seront caractérisées par divers techniques visant à localiser les produits de fission introduits, évaluer la composition globale du matériau et observer sa microstructure. Les matériaux modèles incorporent simultanément des éléments solubilisés dans la matrice UO₂ (Nd, La, Ce, Pr) et des éléments formant des précipités métalliques (Ru, Rh, Pd, Mo et Re, comme substituant du Tc-99).

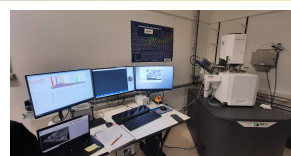
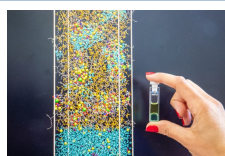
En parallèle, des expériences d'altération en eau carbonatée et en présence ou non de peroxyde d'hydrogène (H₂O₂), considéré comme principal produit de la radiolyse de l'eau, seront réalisées. Les relâchements élémentaires seront évalués au sein de la solution d'altération en suivant l'évolution des concentrations par ICP-AES ou MS. Enfin, l'évolution de la microstructure des composés modèles sera suivie par MEB en mode environnemental et microscopie numérique afin notamment, d'identifier les zones de dissolution préférentielle (en particulier les joints de grains), le comportement des phases métalliques et la présence de phases néoformées. Des caractérisations complémentaires par spectroscopie Raman seront conduites afin d'identifier la nature de ces phases et le degré d'oxydation de la surface du matériau grâce à des cartographies.

Profil du candidat

- Etudiant(e) de Master 2 en chimie des matériaux, chimie des procédés ou physico-chimie
- Intérêt pour la chimie des matériaux et chimie des solutions appliquées au cycle du combustible nucléaire

Apport pour le candidat

- Passage du PR1 (formation d'une semaine) obligatoire en début de stage
- Expériences de recherche scientifiques pour concevoir et réaliser des protocoles expérimentaux rigoureux avec des techniques d'analyse avancées.
- Expériences de recherche scientifiques pour interpréter les phénomènes étudiés et développer des compétences en analyse de données et raisonnement scientifique.



SYNTHESE ET DISSOLUTION EN CONDITIONS DE RETRAITEMENT DE COMPOSES SIMULANT LE MOX IRRADIE

Laboratoire des Interfaces de Matériaux en Evolution (LIME)

Niveau M2 ; Durée 6 mois, à partir de février 2026

Contacts :

- Nicolas DACHEUX – nicolas.dacheux@umontpellier.fr
- Mathias FULCHIRON – mathias.fulchiron@cea.fr

Contexte

Les réactions de fission de l'U-235 et du Pu-239 au sein du combustible nucléaire placé en réacteur à eau pressurisée (REP) produisent une quantité non négligeable d'éléments platinoïdes, ou PGM (Ru, Rh, Pd). Ces métaux, dits critiques, présentent des propriétés remarquables et sont utilisés dans de nombreux secteurs économiques (aérospatial, défense, électronique, automobile, énergies renouvelables...). Toutefois leur approvisionnement est difficile et soumis à des aléas géopolitiques pouvant entraîner des impacts industriels ou économiques négatifs. Par conséquent, le combustible nucléaire irradié, et en particulier le MOx (oxyde mixte (U, Pu)O₂), pourrait devenir une source secondaire potentielle d'éléments platinoïdes. La récupération de ces éléments nécessite en premier lieu la dissolution du MOx irradié. Lors de la mise en solution du combustible, en milieu acide nitrique à chaud, les PGM suivent, pour partie, un flux liquide (solution de dissolution clarifiée), et pour partie, un flux solide correspondant aux fines de dissolution.

Objectifs

Dans ce contexte, les objectifs de ce stage sont :

- de synthétiser et de caractériser des échantillons simulant certaines propriétés du MOx irradié ;
- de déterminer la répartition de chaque élément d'intérêt au sein des différents flux (solide et liquide) ;
- d'évaluer l'influence de la composition et de la microstructure du MOx sur cette répartition ;
- d'identifier la spéciation des éléments au sein des résidus solides.

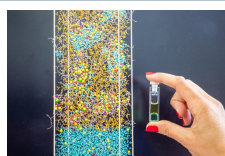
Pour atteindre ces différents objectifs, le stagiaire s'appuiera sur des synthèses préalables d'échantillons simulant certaines propriétés du MOx irradié étudiées indépendamment dans le but de recréer au mieux des échantillons représentatifs. L'hétérogénéité en distribution cationique de U et Th (comme substituant du Pu) retrouvée au sein du MOx sera simulée, de même pour la présence de produits de fissions (PF) dissous dans la matrice d'oxydes (Nd, La, Ce, Pr) et formant des précipités métalliques (Ru, Rh, Pd, Mo et Re, comme substituant du Tc-99). Par la suite, des expériences de dissolution de ces composés seront menées en conditions de retraitement (HNO₃ 4 M, 80 °C). Les flux élémentaires seront évalués au sein de la solution de dissolution en suivant l'évolution des concentrations par ICP-AES ou MS. Les résidus de dissolution seront caractérisés par un panel de techniques disponibles à l'ICSM (DRX, MEB-EDX, spectroscopie IR et Raman) afin d'évaluer leur teneur en produits de fission et la nature des phases porteuses. Enfin, l'évolution de la microstructure des composés modèles pourra être suivie par MEB en mode environnemental et microscopie numérique afin notamment, d'identifier d'éventuelles zones de dissolution préférentielle et le comportement des phases métalliques.

Profil du candidat

- Etudiant(e) de Master 2 en physico-chimie
- Intérêt pour la physico-chimie dans le solide, aux interfaces et en solution

Apport pour le candidat

- Passage du PR1 (formation d'une semaine) obligatoire en début de stage



DISSOLUTION DE CONCENTRE DE CHALCOPYRITE : ETUDE MACROSCOPIQUE DE LA CINETIQUE ET SUIVI *OPERANDO* PAR MEB ENVIRONNEMENTAL

Laboratoire des Interfaces de Matériaux en Evolution (LIME) & Laboratoire d'étude de la matière en mode environnemental (L2ME)

Niveau M2 ; Durée 6 mois, à partir de mars 2026

Contacts :

- Stéphanie SZENKNECT – stephanie.szenknect@cea.fr
- Renaud PODOR – renaud.podor@cea.fr

Contexte

Dans le cadre du projet Innovtech du PEPR Sous-sols, le LIME est chargé d'acquérir des données expérimentales à l'échelle microscopique afin d'étudier les mécanismes de dissolution et de précipitation intervenant dans les processus de lixiviation de minéraux sulfurés. La plupart du temps ces minéraux sont réfractaires à la dissolution à pression atmosphérique et à température modérée. Toutefois, la nature des espèces et même les mécanismes physico-chimiques responsables de cette passivation restent controversés. La chalcoppyrite, CuFeS_2 est l'une des phases emblématiques de cette famille de minéraux, elle est actuellement la principale source de Cu exploitée à l'échelle mondiale et son importance économique est cruciale. Afin de progresser dans la compréhension des processus bloquant la dissolution de cette phase minérale et l'extraction des métaux qu'elle contient, des expériences de dissolution dans des milieux conventionnels de concentré de chalcoppyrite, CuFeS_2 seront réalisées à la fois à l'échelle macroscopique du réacteur de dissolution et à l'échelle d'enrobés polis observés par MEB Environnemental en cours de dissolution.

Sujet

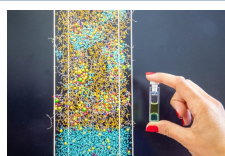
Dans un premier temps, les enrobés polis de concentré de chalcoppyrite seront préparés et caractérisés par DRX et MEB/EDS afin d'identifier les phases présentes à la surface de l'échantillon. Des micrographies et des cartes élémentaires d'une ou plusieurs régions d'intérêt à la surface de l'échantillon seront enregistrées afin de localiser le Cu et le Fe. Parallèlement, une étude de la cinétique de dissolution du concentré pulvérulent dans différents milieux modérément acides (pH 1 – 3, milieu nitrique et sulfurique) sera entreprise afin d'aider au dimensionnement des expériences de suivi *operando* de la dissolution dans le MEB. Pour ce faire, les solutions de lixiviation seront analysées par ICP-AES et les vitesses de dissolution seront déterminées. Enfin, la compilation des micrographies MEB et des cartographies élémentaires obtenues dans différentes conditions sélectionnées permettra de mettre en évidence les différentes étapes de dissolution de la chalcoppyrite et d'identifier la formation et la nature de phases passivantes. Cette analyse sera confrontée au comportement macroscopique du concentré dissous afin d'établir un mécanisme. Ce stage d'un encadrement partagé entre le LIME et le laboratoire d'étude de la matière en mode environnemental (L2ME) à l'ICSM.

Profil du candidat

- Etudiant(e) de Master 2 en chimie des matériaux, géochimie, géosciences
- Intérêt pour la caractérisation des matériaux et phases minérales, les procédés d'extraction des métaux

Apport pour le candidat

- Passage du PR1 (formation d'une semaine) obligatoire en début de stage
- Expériences de recherche interdisciplinaire au sein de deux laboratoires (LIME et L2ME) avec un double encadrement



MODELISATION MOLECULAIRE POUR LE RECYCLAGE DES TERRES RARES

Laboratoire de Modélisation Mésoscopique et Chimie Théorique (LMCT)

Master 2 ; Durée 6 mois à partir de février/mars 2026

Contacts :

- Kateryna GOLOVIZNINA – kateryna.goloviznina@cea.fr
- Jean-François DUFRECHE – jean-francois.dufreche@icsm.fr
- Bertrand SIBOULET – bertrand.siboulet@cea.fr

Contexte

Les terres rares sont des métaux stratégiques, importants pour l'électronique, technologies avancées, et les énergies renouvelables. En considérant les ressources limitées et le monopole exercé par certains pays, **le recyclage de ses métaux** est devenu crucial pour garantir un approvisionnement durable. De plus, un des problèmes principaux est les propriétés similaires entre ces métaux, rendant leur **séparation** particulièrement difficile. Récemment, un nouveau système a émergé comme candidat prometteur : **les liquides poreux**. [1] Ce sont des fluides contenant des cavités capables d'héberger des molécules de soluté. Ils sont à base de **nanosphères de silice creuses** avec une couronne organique greffée, dont la surface interne est **fonctionnalisée avec des groupes sélectifs** des cations d'intérêt, tels que **l'EDTA** pour les lanthanides. Les simulations de **dynamique moléculaire** (DM) constituent un outil idéal pour étudier le phénomène de complexation et révéler les tendances de sélectivité dans les liquides poreux, comme déjà été démontré sur des systèmes plus simples. [2]

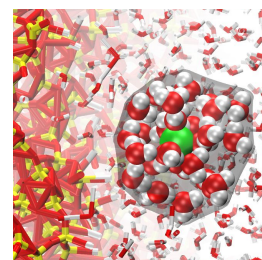


Figure 2. Interface entre SiO_2 et une solution $\text{M}^+/\text{H}_2\text{O}$ simulée par DM.

Sujet

Il s'agira de modéliser **l'interface entre la silice SiO_2 et une solution aqueuse contenant des terres rares sous forme métallique** (Nd^{3+} , Pr^{3+} , Dy^{3+}) au niveau atomique par dynamique moléculaire classique. Le travail consistera donc à **développer un modèle** pour l'EDTA, à l'intégrer avec les modèles existants des autres composants ; puis à **réaliser des simulations tout atome** pour **comprendre** et **prédire** les propriétés liées à la **structure** de ces systèmes et à leurs **propriétés complexantes**. Notamment, il s'agira de calculer les énergies libres et d'évaluer la spécificité d'adsorption des ions par des groupes fonctionnels vis-à-vis des sites de la surface de SiO_2 . L'effet de pH sur l'efficacité du processus sera également examiné. Les résultats des calculs seront comparés aux données expérimentales. Ce travail sera réalisé dans l'équipe LMCT de l'ICSM qui aidera à développer les méthodologies de modélisation nécessaires à la réussite du projet.

Profil du candidat

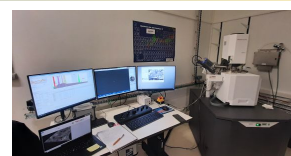
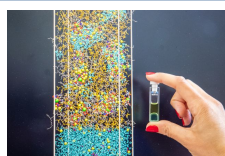
- Etudiant(e) de Master 2, école d'ingénieurs ou équivalent spécialisé(e) en chimie, physique et/ou chimie physique
- Intérêt pour la chimie physique, la modélisation, les calculs numériques

Apport pour le candidat

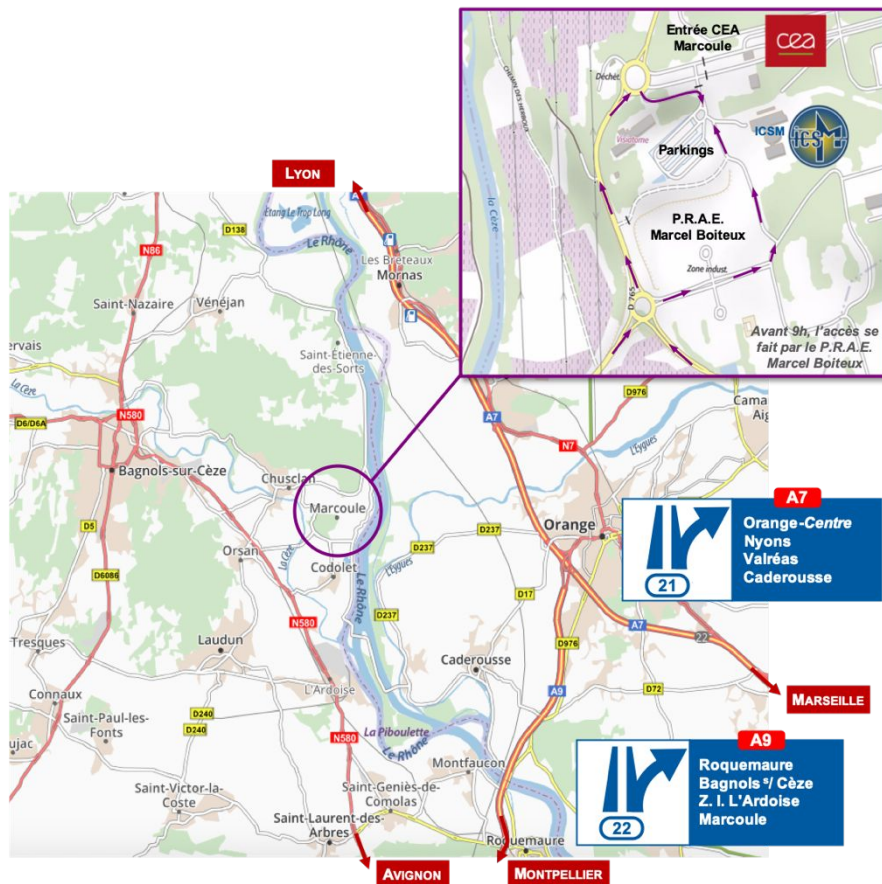
- Expérience de recherche en modélisation moléculaire pour les interfaces solide-liquide et développement de modèles.
- Expérience de recherche sur des centres de calcul haute performance, renforçant ainsi vos compétences en modélisation numérique
- Possibilité de financement de thèse sur un sujet connexe (Univ. Montpellier)

Références

[1] L. Ginot *et al.* **Adv. Sci.** *11*, 2305906 (2024) ; [2] K. Wang *et al.* **J. Phys. Chem. C** *125*, 20551 (2021).



VENIR A L'ICSM



Depuis MONTPELLIER : Rejoindre l'A9 direction NÎMES/ORANGE. Prendre la sortie 22 ROQUEMAURE et continuer sur la N580 direction BAGNOLS ^s/ CEZE / MARCOULE. Au rond-point, prendre la D765A direction MARCOULE (puis voir loupe)

Depuis MARSEILLE : Rejoindre l'A7 direction AVIGNON/ORANGE, puis prendre la sortie 21 ORANGE CENTRE. Continuer direction CADEROUSSE sur la D17. Continuer sur la D237 direction BAGNOLS ^s/ CEZE / MARCOULE. Tourner à gauche sur la D238 direction BAGNOLS ^s/ CEZE / MARCOULE. Continuer sur la D138A, puis au rond-point prendre à gauche sur la D138B direction MARCOULE. Continuer sur la D765 (puis voir loupe)

Depuis LYON : Rejoindre l'A7 direction ORANGE/AVIGNON, puis prendre la sortie 21 ORANGE CENTRE/CADEROUSSE. Continuer direction CADEROUSSE sur la D17 (puis voir indication depuis MARSEILLE)

Depuis la gare TGV d'AVIGNON : Prendre la direction A9/NÎMES. Rejoindre la N100 en direction de REMOULINS/NÎMES. Au rond-point, continuer sur la D6580 direction A9 (ORANGE)/BAGNOLS. Continuer sur la N580 direction BAGNOLS ^s/ CEZE / MARCOULE (puis voir indication depuis MONTPELLIER)

[Télécharger le plan](#)

Coordonnées GPS : N 44° 8' 25.9", E 4° 41' 49.3"