

## **Adsorption de Molécules d'Intérêt Industriel dans les Matériaux Hybrides « MOFs » par Modélisation et Simulations Moléculaires**

*Responsables : Dr. Naseem A. RAMSAHYE, Pr. Philippe TRENS*

L'adsorption, séparation et stockage efficace de gaz, de vapeurs et de liquides est actuellement un des enjeux importants de la société tant sur le plan environnemental que sur le plan économique. Des exemples de domaines où ces tâches sont importantes sont la séparation d'alcanes et d'alcènes (dans l'industrie pétrochimique), le stockage de gaz à effet de serre, la purification d'hydrogène pour les piles à combustibles et la préparation de biodiesel à partir de l'estérification des huiles végétales. Actuellement ces tâches sont effectuées en utilisant des zéolithes ou charbons activés. Pourtant ces matériaux sont difficiles et chers à régénérer. Une nouvelle famille de solides nanoporeux de type MOFs (Metal-Organic-Frameworks) se révèle très prometteuse pour ces tâches d'adsorption et même comme catalyseurs, un domaine lié à l'adsorption. Ces composés de faible densité contiennent à la fois des entités organiques et minérales et présentent des tailles de pores variables allant du domaine nano- au domaine méso-poreux et des surfaces spécifiques parfois très élevées (jusqu'à 6000 m<sup>2</sup>.g<sup>-1</sup>).

Dans le domaine de l'adsorption dans les matériaux nanoporeux, les outils de modélisation et de simulation moléculaire sont cruciaux pour corroborer et expliquer les travaux expérimentaux, et puis prédire et proposer des nouveaux composés adaptés pour une tâche ou des nouvelles expériences à effectuer.

Durant ce projet, une stratégie simulation-expérience sera appliquée à l'exploration des propriétés de l'adsorption et de diffusion de différentes molécules comme des alcanes, des alcènes et des aromatiques (phases pures et mélanges) dans des nouveaux MOFs. Les paramètres du MOF qui seront modifiés sont l'identité des centres métalliques, les groupes fonctionnels présents dans la partie inorganique (F, OH...) et la composition des ligands organiques, qui auront tous des effets sur la chimie (par exemple l'acidité) du réseau et sur la taille des pores. Les buts du projet sont les suivants:

- de mieux comprendre les paramètres importants, tel que l'effet de la composition chimique du matériau, pour le processus d'adsorption de phases pures et des mélanges d'alcanes (linéaires et branchés) et d'alcènes, dans le but de développer un matériau optimisé.
- de comprendre les interactions mises en jeu au sein des pores, afin d'expliquer les résultats expérimentaux (obtenus par nous-mêmes et par nos collaborateurs) et le comportement du matériau à l'échelle moléculaire au cours de l'adsorption des sondes.
- d'étudier et comprendre l'effet du confinement des adsorbants.
- d'évaluer les propriétés des MOFs susceptibles d'être utilisés comme catalyseurs.

Ce projet se fera en combinant des techniques de simulation quantiques (DFT, ab initio...) et classiques (développement des champs de force, optimisation de géométries, Monte Carlo, dynamique moléculaire...), avec des techniques expérimentales, notamment manométrie, gravimétrie et chromatographie. Le candidat sera formé principalement en techniques de modélisation/simulation mais passera jusqu'à environ 20% de son temps à manipuler.

Une expérience accrue des techniques de modélisation n'est pas nécessaire (mais de l'avoir serait avantageux). Le candidat doit avoir une formation en physicochimie avec une bonne base de chimie quantique, et doit être intéressé par la modélisation et la simulation moléculaire.

Nous travaillerons en collaboration étroite avec plusieurs autres groupes en France (à l'ICGM, Marseille, Caen et Versailles) qui nous fourniront des données expérimentales. Ce travail se fera dans le cadre d'un projet européen FP7 « MACADEMIA », impliquant plusieurs groupes européens ainsi que des entreprises privés (notamment Total SA).