

- Nom de l'étudiant : El Batoul ZERIFI
- Titre de la thèse : Étude des propriétés d'adsorption du radon, du xénon et de leurs mélanges dans les matériaux microporeux, en combinant différentes techniques de simulation moléculaire et en étroite collaboration avec l'expérience.
- Directeur de thèse : Jean-Louis PAILLAUD
- Co-encadrants : Irena DÉROCHE, Taylan ORS
- Résumé : La recherche de la matière noire et de la double décroissance beta sans émission du neutrino constitue une thématique de recherche prioritaire en physique nucléaire. La mise en évidence de leur signature expérimentale nécessite des détecteurs ultrasensibles, avec une maîtrise totale des bruits de fond altérant les mesures. Les détecteurs sont basés sur des cibles formées des gaz monoatomiques (xénon) liquéfiés. Cependant le radon, un gaz radioactif présent à l'état de trace dans la cible constitue une source importante de bruit de fond. Il apparaît alors essentiel de purifier la cible, constituée du xénon de toute trace de radon. La réactivité de ces deux gaz monoatomiques est très limitée et en plus, leurs dimensions atomiques sont très proches. La purification de la cible du radon s'avère alors être un véritable challenge. Dans le domaine de la séparation des gaz, certains matériaux microporeux, tels que les zéolithes ont montré un fort potentiel. Par conséquent, l'objectif de la thèse, dans le cadre du projet ANR Innovative materials for Extreme radon capture est d'optimiser les paramètres des zéolithes afin qu'ils adsorbent sélectivement le radon dans un mélange avec le xénon. Une combinaison pertinente de différents outils de simulation moléculaire sera déployée dans ce but. Mots-clés: adsorption, simulation moléculaire, Monte Carlo, dynamique moléculaire, DFT, zéolithes, radon, xénon