

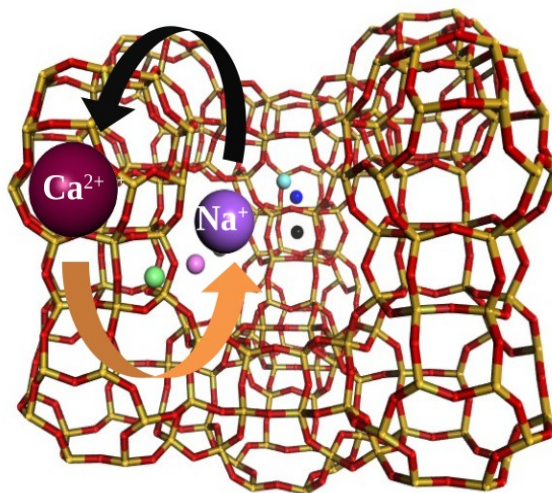
Stage master 2

Optimisation de l'adsorption de CO₂ dans des zéolithes bi-cationiques par simulation numérique

Parmi les nombreuses crises que nous subissons actuellement, le réchauffement climatique semble être l'une des plus préoccupantes et des plus difficiles à maîtriser. Si l'arrêt des activités humaines émettant du CO₂ n'est pas possible, la seule autre alternative est de capturer ce gaz et de le piéger, idéalement dès sa production. Parmi les solutions envisagées, le captage du CO₂ par des zéolithes est une solution prometteuse. En effet, ce matériau microporeux est connu pour ses propriétés d'adsorption remarquables induites par la combinaison de sa structure (topologie) et de sa composition chimique. Cette dernière peut être exprimée par la formule générale : $M^{n+}_{x/n}(Al_xSi_{1-x}O_2)_n$, M^{n+} étant un cation « compensateur de charge ». La nature et l'emplacement des cations déterminent les performances d'adsorption du CO₂ par les zéolithes.

Récemment, nos résultats de simulations ont prédit que la zéolithe Faujasite (FAU) qui contient à la fois les cations Na⁺ et Ca²⁺ est très efficace pour capturer le CO₂, à une pression comparable à celle dans les conditions atmosphériques. L'analyse des mécanismes microscopiques d'adsorption montrent que la présence des deux types de cations, à savoir un cation monovalent (alcalin), et un cation bivalent (alcalino-terreux), est nécessaire afin d'atteindre de telles performances.

Dans ce projet, nous proposons de poursuivre cette voie, afin d'en tirer une compréhension fine des mécanismes d'interaction, puis d'optimiser la composition chimique de la Faujasite bi-cationique pour maximiser ses propriétés d'adsorption du CO₂.



Profil du candidat: appétence pour la modélisation moléculaire. Etre étudiant dans le domaine des matériaux serait un atout.

Si vous avez des questions, n'hésitez pas à contacter Irena Deroche (irena.deroche@uha.fr) ou Marie-Christine Hanf (marie-christine.hanf@uha.fr)