



## Exploration numérique d'une contrainte mécanique sur les performances d'adsorption de gaz dans des matériaux poreux de type MOFs

Institut de Physique de Rennes

[www.ipr.univ-rennes1.fr](http://www.ipr.univ-rennes1.fr)

Bâtiment 11A, Université de Rennes 1  
263 av. Général Leclerc  
35042 Rennes cedex France

T. +33 2 23 23 52 92

F. +33 2 23 23 67 17

UMR 6251

Les matériaux de type Metal-Organic Frameworks (MOFs) sont des matériaux poreux flexibles présentant la capacité de subir des transitions structurales sous stimuli externes. Cette propriété unique par rapport aux matériaux poreux usuels tels que les zéolithes ou les charbons actifs permet la modulation de la taille et de la forme des pores (breathing effect, ligand flip, pore gating, ... ) permettant d'envisager de nouvelles approches pour les technologies basées sur l'adsorption de gaz. Ce projet de thèse vise à étudier la capacité d'utiliser des stimuli mécaniques afin de moduler les propriétés d'adsorption de gaz. Ce travail se fera dans le cadre d'un projet ANR (Agence Nationale pour la Recherche) basé sur un consortium d'expérimentateurs et de théoriciens. Le sujet de thèse vise donc à prédire, à comprendre et à « designer » les propriétés d'adsorption de gaz dans une série de MOFs flexibles sous stimuli mécaniques **via des outils numériques tel que la simulation moléculaire**. Un des challenges sera de combiner les simulations de dynamique moléculaire et de Monte Carlo dans une approche mixte HOMC (Hybrid Osmotic Monte Carlo). Cette méthode permettra de tenir compte de la flexibilité du matériau, d'induire des stimuli externes et de rendre compte de l'ensemble grand canonique. Afin de valider le champ de force, ces simulations moléculaires seront systématiquement comparées aux résultats expérimentaux (isotherme d'adsorption, enthalpie et diffraction X) obtenus par le consortium ANR. La simulation moléculaire (troisième voie scientifique après la théorie et l'expérience) permettra, *in fine*, de comprendre et de rationaliser les propriétés d'adsorption/désorption à l'échelle moléculaire.

Ce projet financé par l'ANR rassemble quatre groupes travaillant sur la synthèse et la caractérisation de MOF (Institut des Matériaux Poreux de Paris-IMAP-C. Serre, Paris), sur les mesures d'isothermes d'adsorption (MADIREL-P.L. Llewellyn, Marseille) et sur la simulation moléculaire (ICGM, G. Maurin and IPR, A. Ghoufi).

Cette thèse se déroulera au département Matériaux-Nanoscience de l'Institut de Physique de Rennes (IPR) et nécessitera de bonnes connaissances en physique statistique, physique des fluides, adsorption ainsi qu'en programmation. Cette thèse se déroulera en collaboration avec C. Serre et P.L. Llewellyn qui auront en charge le volet expérimental de la thèse tandis que la partie simulation sera co-encadrée par G. Maurin & A. Ghoufi. Une participation à la campagne d'expériences pourra être envisagée.

Un CV, un relevé de notes (M2) et une (ou deux) lettre de recommandation sont à adressés à A. Ghoufi ([aziz.ghoufi@univ-rennes1.fr](mailto:aziz.ghoufi@univ-rennes1.fr), +3323236993) et à G. Maurin (Guillaume MAURIN ([Guillaume.Maurin@univ-montp2.fr](mailto:Guillaume.Maurin@univ-montp2.fr), +33467143307)).

Sous la co-tutelle de



GHOUFFI AZIZ

Tel : +33(0)2 23 23 69 93

Fax : +33(0)2 23 23 67 17

E-mail : [aziz.ghoufi@univ-rennes1.fr](mailto:aziz.ghoufi@univ-rennes1.fr)