

PhD Position Available

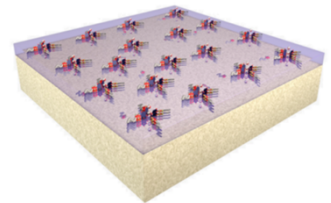
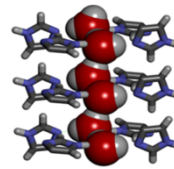
Institut de Physique de Rennes (IPR)/Institut Charles Gerhardt (ICG)

Available Oct. 2023

Simulation Moléculaire de Membranes Biomimétiques pour le Désalinisation de l'Eau de Mer

L'eau est omniprésente, que ce soit pour la consommation humaine, l'agriculture, la production d'énergie ou la fabrication industrielle. Étant donné que les sources d'eau conventionnelles sont de plus en plus rares, le développement de nouvelles technologies pour l'approvisionnement en eau est crucial pour répondre aux besoins en eau du monde au XXI^e siècle. La désalinisation est, à bien des égards, l'approche la plus prometteuse à long terme pour l'approvisionnement en eau, car elle offre potentiellement une source illimitée d'eau douce. La désalinisation de l'eau de mer à l'aide de membranes d'osmose inverse (RO) est devenue au cours de la dernière décennie une approche standard pour produire de l'eau douce. Bien que cette technologie se soit avérée efficace, elle reste relativement coûteuse en termes de consommation d'énergie en raison de l'utilisation de pompes haute pression résultant d'une faible perméation de l'eau à travers les membranes RO polymériques. Récemment, des canaux d'eau incorporés dans des membranes lipidiques et polymériques ont permis l'obtention de membranes possédant des performances de désalinisation accrues.

Les canaux d'eau artificiels biomimétiques (AWC) deviennent des systèmes très attractifs pour réaliser un transport sélectif de l'eau. Les premiers AWC développés, formés à partir d'imidazoles (I-quartet) intégrés dans des membranes lipidiques, ont présenté une sélectivité ionique supérieure à celle des aquaporines, mais associée à une performance de flux d'eau inférieure. Nous avons récemment réalisé un travail pionnier dans ce domaine en fabriquant la première membrane composite AWC@Polyamide (PA) avec une performance de désalinisation exceptionnelle. Cependant, le mécanisme de désalinisation microscopique mise en jeu est encore inconnu. Ce projet, vise à acquérir une compréhension fondamentale de la nano-structuration des membranes AWC@PA ainsi que des mécanismes microscopiques à l'origine du transport rapide de d'eau et de rejet des ions. L'objectif principal sera de comprendre les facteurs clés qui contrôlent l'organisation spatiale des AWC dans la membrane PA. A moyens termes, l'objectif sera de déterminer la manière d'ajuster les caractéristiques structurales et chimiques de l'AWC et de la PA afin de concevoir des membranes AWC@PA plus performantes.



Des modèles atomistiques de composites AWC@PA seront construits afin de mettre en œuvre des simulations de type dynamique moléculaire de champ de force que nous avons récemment validées sur des systèmes similaires. Ces simulations seront validées par une combinaison d'outils de caractérisation expérimentale avancés déployés sur un premier ensemble de systèmes AWC@PA. Cette méthode sera ensuite systématiquement appliquée à une grande variété d'AWC et de PA avec différentes caractéristiques chimiques et structurales pour élucider les interactions interfaciales dans les membranes AWC@PA et leur nano-structuration résultante.

Candidats. Les candidats doivent avoir un master en physique, en chimie ou en science des matériaux avec une bonne expérience en simulations moléculaires et de bonnes compétences en programmation.

Aspects pratiques. Le poste est disponible à partir d'octobre 2023 et dure 36 mois. Le salaire net est d'environ ~1500 euros/mois. Les candidats doivent fournir un CV, une lettre de motivation et les noms et adresses e-mail de 2 ou 3 références à : Aziz Ghoufi, aziz.ghoufi@univ-rennes.fr, Guillaume Maurin, guillaume.maurin1@umontpellier.fr.