



Journée Annuelle de la Chimie

4 février 2010



**Thermodynamique de l'adsorption
dans des matériaux nanoporeux**

Anne Boutin

DR2

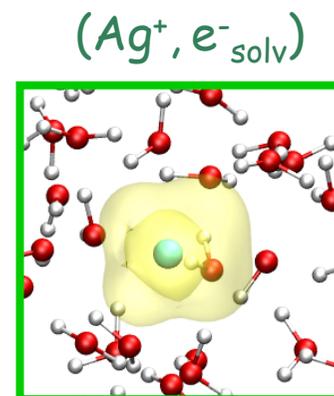
Laboratoire "PASTEUR", UMR8640

Pôle de Physico-Chimie Théorique

Trajectoire scientifique

■ *Thématiques*

- Fusion d'un cristal
- Agrégats moléculaires
- Equilibres de phases de mélanges complexes
- Actes chimiques élémentaires en phase condensée
- Adsorption dans les zéolithes et matériaux nanoporeux

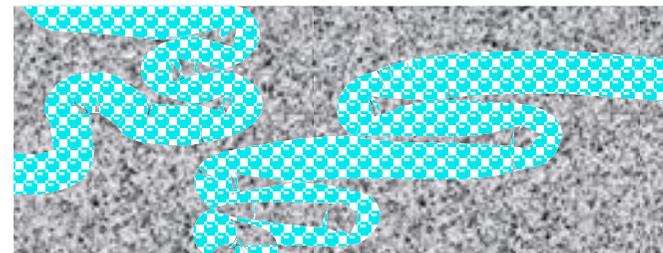


■ Confinement à l'échelle nanométrique

- Effet d'interface
- Effet de taille finie

■ Effets sur les propriétés du fluide

- Structure
- Dynamique
- Thermodynamique
- Propriétés électroniques
- Réactivité

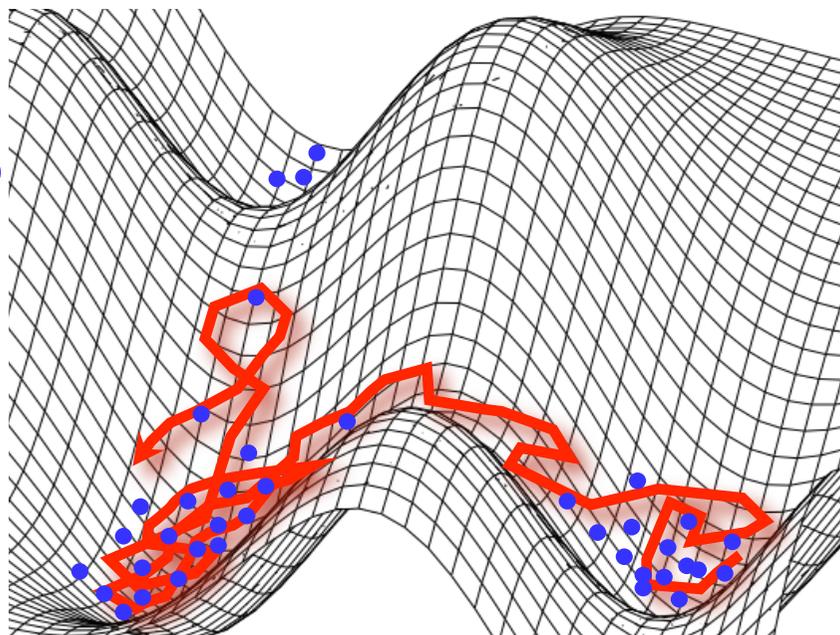


Thermodynamique moléculaire

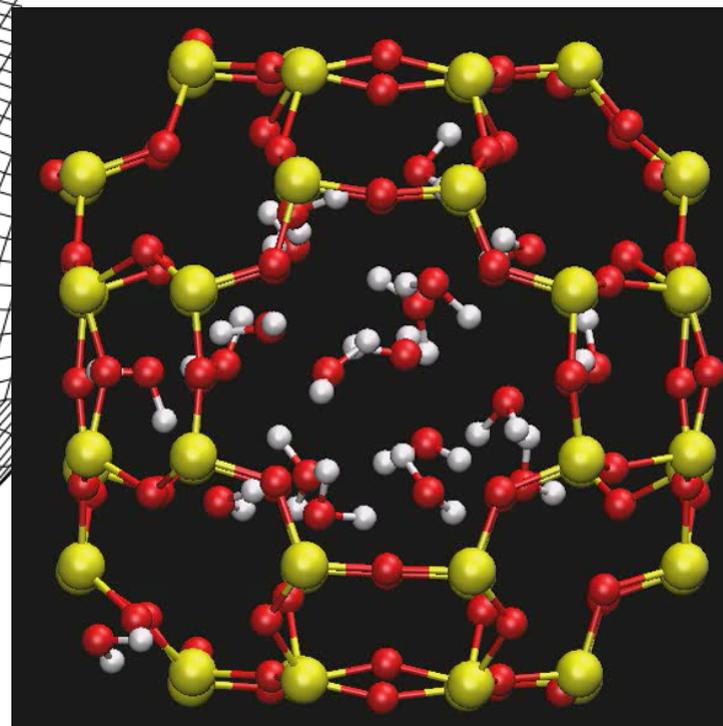
Monte-Carlo

Dynamique moléculaire

Théorie analytique



Simulation moléculaire



Thermodynamique Statistique Numérique

Moyenne sur les grandeurs
microscopiques



Observables
macroscopiques

Adsorption

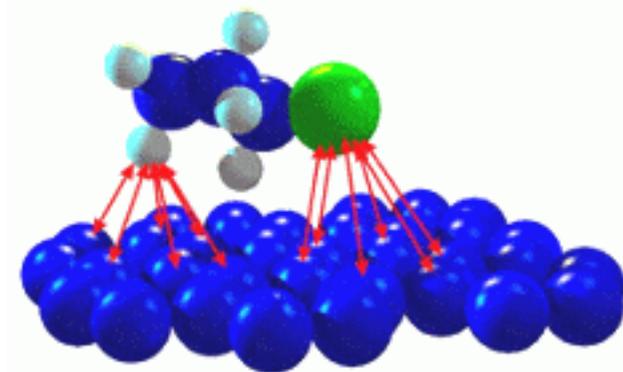


absorption



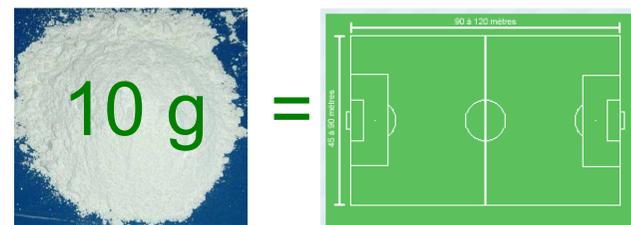
adsorption

physisorption

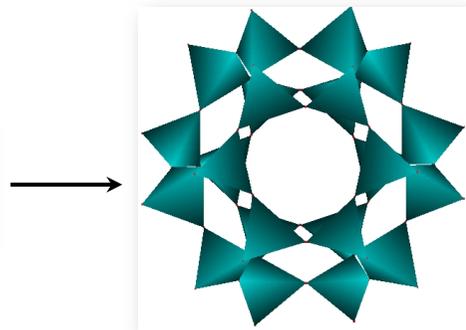
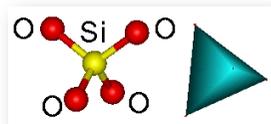


Matériaux nanoporeux

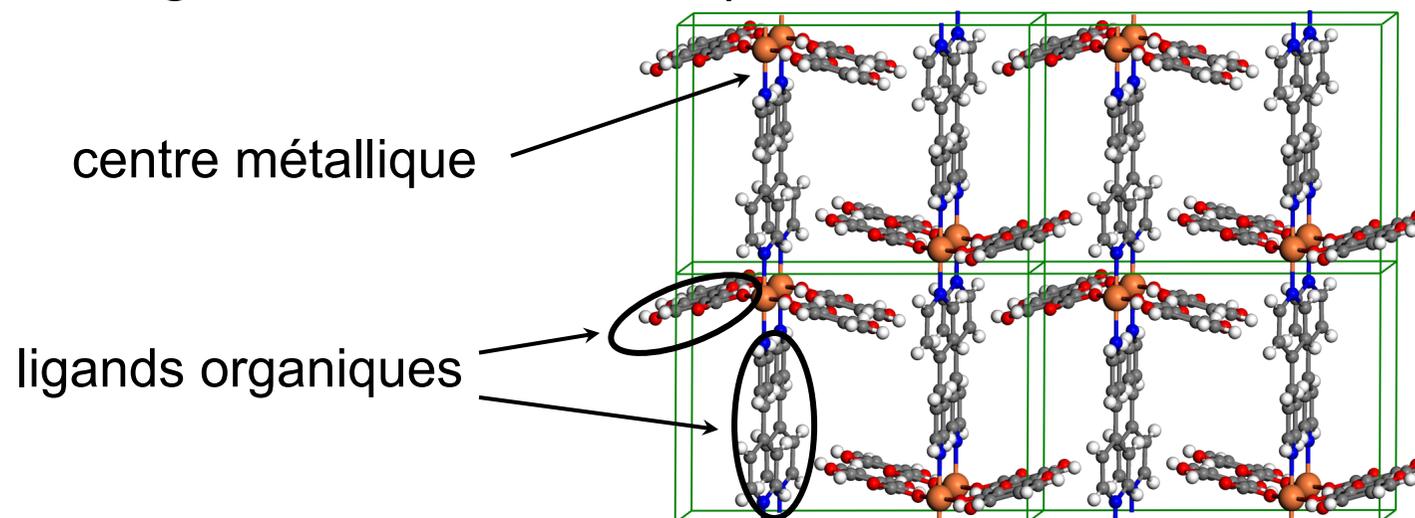
Matériaux de grandes surfaces spécifiques
(100-900 m²/g)



■ Zéolithes

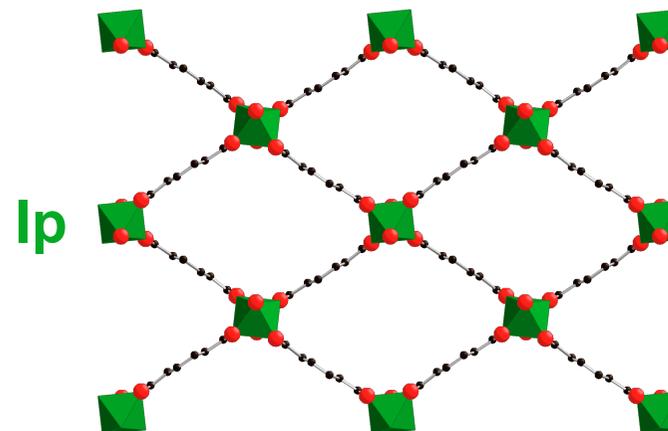
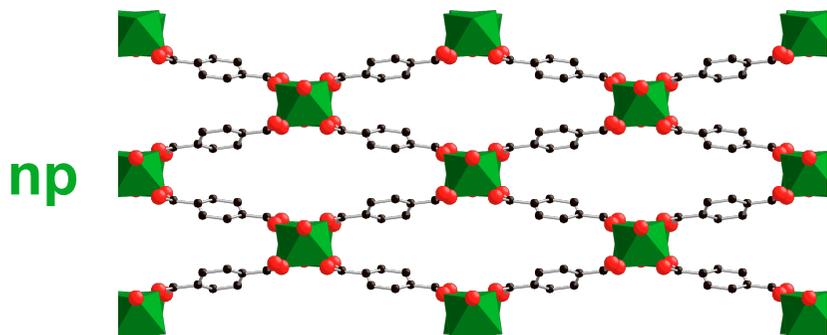


■ MOFs (Metal-Organic Frameworks)



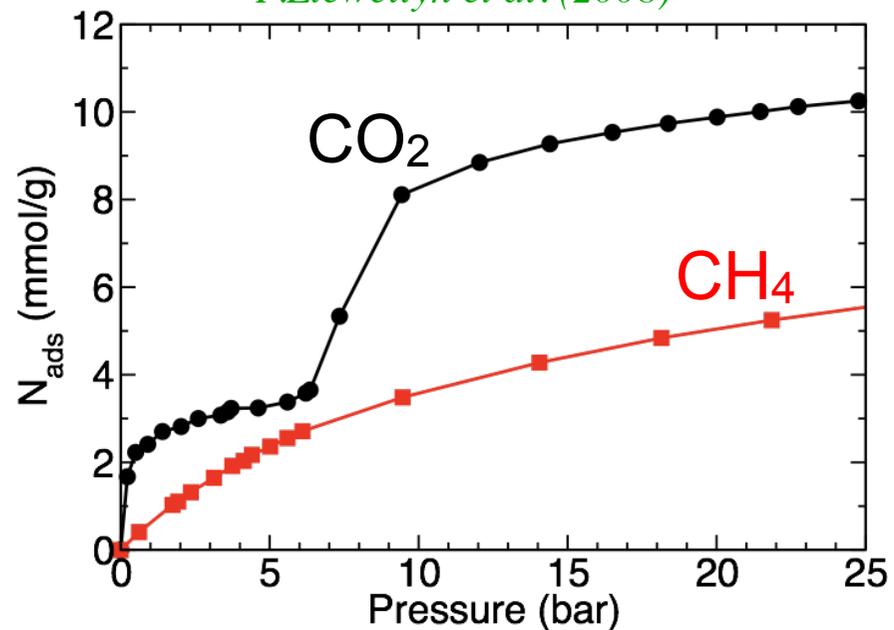
Matériaux flexibles

“Respiration” de la MIL-53 (Cr)

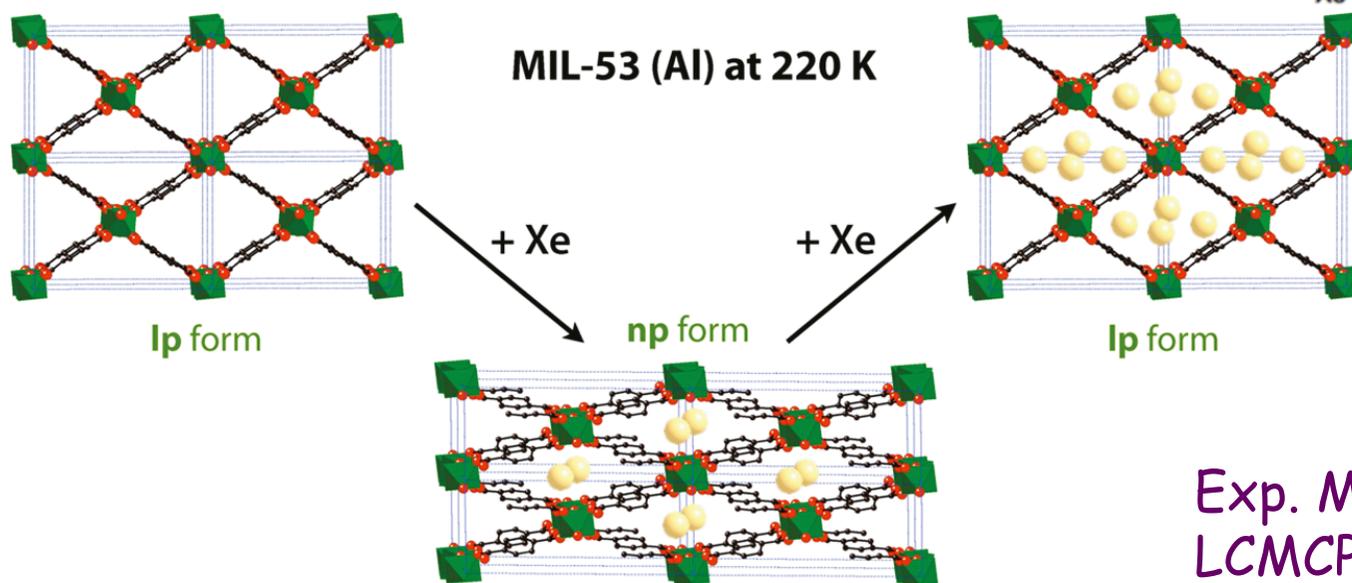
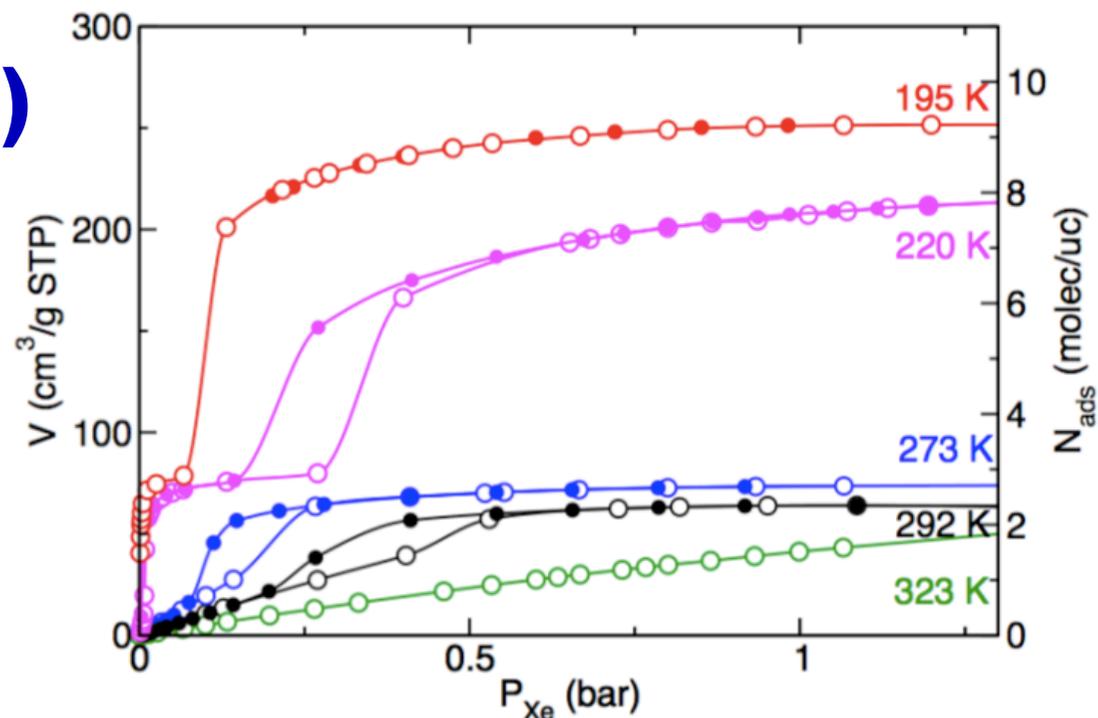


MIL-53(Cr) @300K

P.Llewellyn et al. (2008)

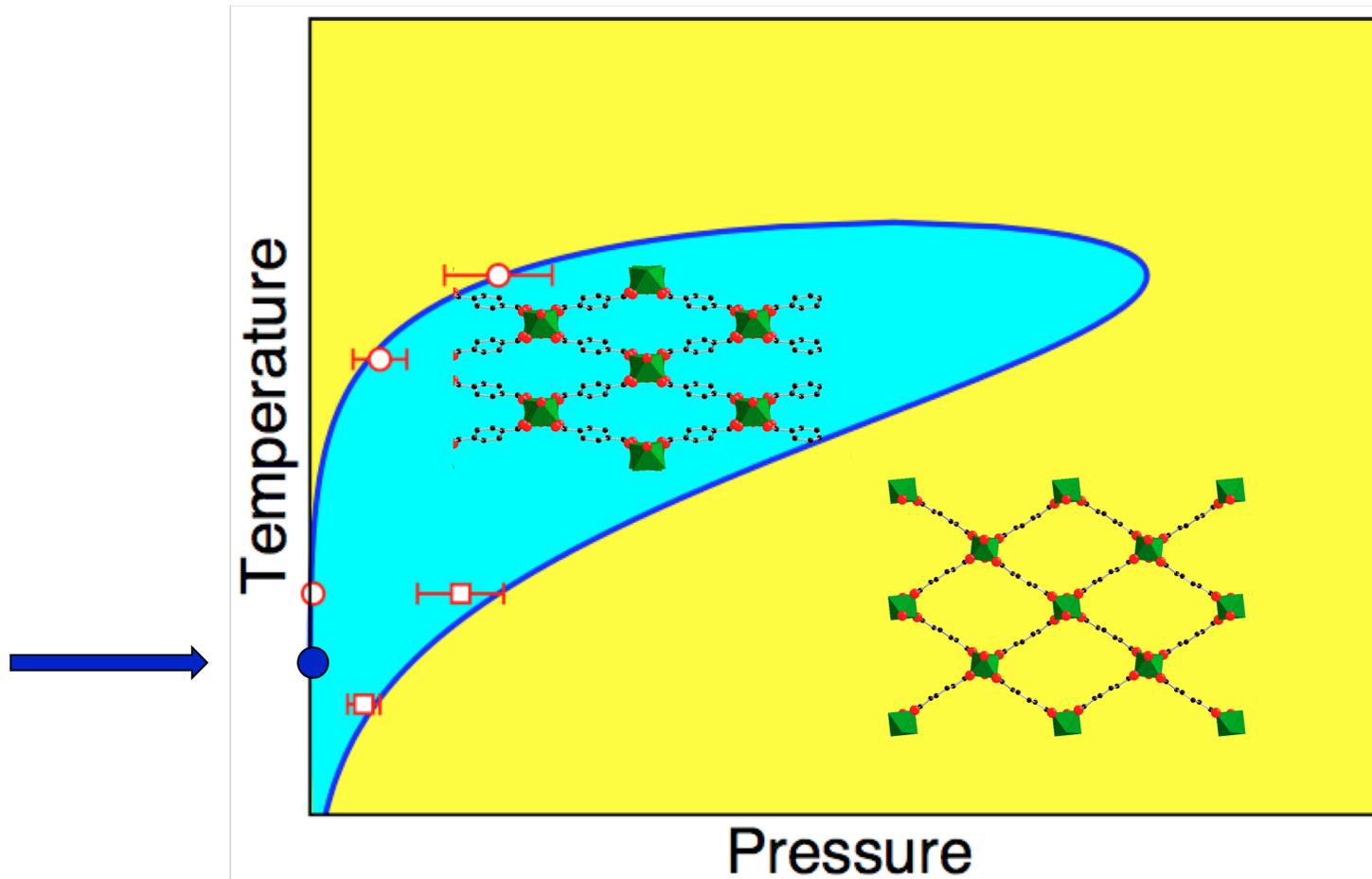


Xe @ MIL-53(AI)



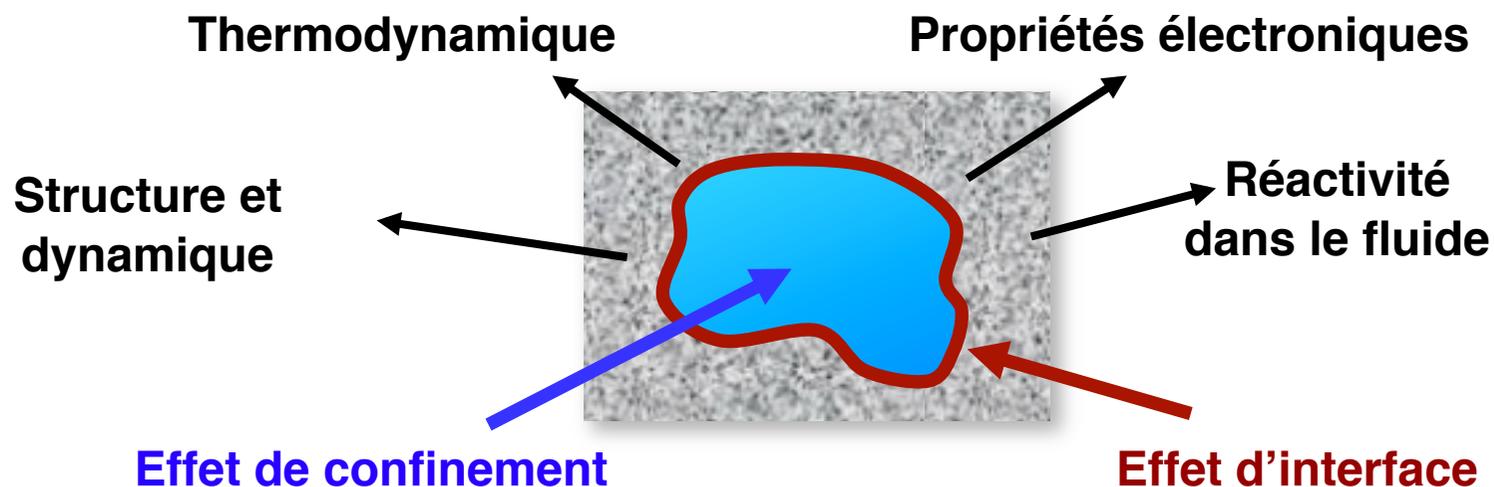
Exp. M.-A. Springuel-Huet,
LCMCP, UPMC

Diagramme de phase Xe@MIL-53(AI)



Exp. M.-A. Springuel-Huet, LCMCP, UPMC

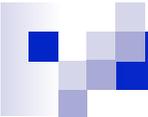
Conclusion



Thématiques : Physico-chimie en milieu confiné

Méthodes : Thermodynamique moléculaire numérique

- J. Am. Chem. Soc 130 (2008) 14294–14302.
- J. Am. Chem. Soc 131 (2009) 2442-2443.
- J. Am. Chem. Soc 131 (2009) 11329-11331.
- Angew. Chem. Int. Ed. 48 (2009) 8314-8317.
- J. Phys. Chem. Lett. 1 (2010) 445-449.



Réseau de collaborations

■ Expérimentateurs :

- M.-A. Springuel-Huet, LCMCP, UPMC
- J.-P Bellat, Dijon
- J. Patarin, Mulhouse
- C. Lecomte, F. Porcher, Nancy
- J. Denayer, G. Baron, VU Bruxelles
- Equipe radiolyse d'Orsay, LCP
- Département thermodynamique, IFP
- Y. Katsumura, Japon
- A.K. Cheetham, Cambridge, UK

■ Simulation et théorie :

- C. Mellot-Draznieks, UCL, UK
- A. Neimark, Rutgers, USA
- A. Mackie, Tarragona, SP
- P. Malfreyt, Clermont-Ferrand
- F. Di Renzo, G. Maurin, B. Coasne, Montpellier
- C. Nieto, IFP
- I. Demachy, Orsay
- F.-X. Coudert, C. Adamo, A. Fuchs, ENSCP
- D. Borgis, R. Vuilleumier, ENS

■ Etudiants :

- Marie Jeffroy, Nicolas Ferrando