



## Avis de Soutenance

**Madame Zineb EL OUFIR**

### Physique

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

**Adsorption de phénol en milieu aqueux sur carbone adsorbant nanoporeux : approche expérimentale et simulation numérique**

dirigés par Monsieur Hamidréza RAMEZANI

Ecole doctorale : Energie, Matériaux, Sciences de la Terre et de l'Univers - EMSTU

Unité de recherche : ICMN - Interfaces, Confinement, Matériaux et Nanostructures

Soutenance prévue le vendredi 30 octobre 2020 à 14h00

Lieu : ICMN - UMR 7374 CNRS - Université d'Orléans, 1b rue de la Férollerie, CS 40059, 45071 Orléans cedex, France

Salle : Amphithéâtre Charles Sadron

#### Composition du jury proposé

M. Hamidreza ADIB RAMEZANI	Université d'Orléans	Directeur de thèse
M. Alain CELZARD	Université de Lorraine	Rapporteur
M. Roland J.-M. PELLENO	CNRS-AMU-MIT	Rapporteur
Mme Encarnacion RAYMUNDO	CNRS Orléans	Examinatrice
M. Gérard L. VIGNOLES	Université de Bordeaux	Examinateur
Mme Nathalie MATHIEU	Université d'Orléans	Co-encadrante de thèse
M. Laurent DUCLAUX	Université de Savoie - LCME	Examinateur
Mme Sandrine DELPEUX	CNRS - Université d'Orléans	Invitée

Mots-clés : Adsorption,HRMC,SAXS/WAXS,mobilité électronique,MPI C++,carbone nanoporeux,

#### Résumé :

L'adsorption sur carbones nanoporeux désordonnés (carbones adsorbants) est l'une des techniques les plus performantes pour la dépollution des eaux. La complexité du processus d'adsorption en milieu aqueux est due aux nombreux paramètres qui gouvernent les interactions adsorbant-adsorbant et adsorbant-adsorbant. Une étude combinant l'approche expérimentale et numérique est proposée pour mettre en évidence le rôle de paramètres comme la structure du carbone, la mobilité électronique de surface, la morphologie et la topologie du réseau poreux, la présence des groupements de surface ainsi que la sélectivité en milieu aqueux. L'étude cible l'adsorption du phénol en solution aqueuse sur un tissu activé nanoporeux. Les propriétés adsorbantes du tissu vis-à-vis du phénol ont d'abord été étudiées expérimentalement en traçant les isothermes d'adsorption (spectroscopie UV) et en caractérisant la composition chimique (analyse CHONS et thermodesorption programmée), la structure atomique (diffraction des RX) et la texture microporeuse (adsorption N<sub>2</sub> et CO<sub>2</sub> et SAXS). Une étude comparative a été menée sur l'adsorption de la caféine, afin de mettre en évidence le rôle de la taille et des fonctions chimiques de l'adsorbant. L'approche numérique a d'abord consisté à générer différentes structures atomiques de l'adsorbant carboné à partir de la méthode HRMC en s'appuyant

sur les données expérimentales (analyse élémentaire, facteur de structure/fonction de corrélation de paires et texture poreuse). Deux champs de force ont été comparés : EDIP et Erhard-Albe. Les structures obtenues ont été caractérisées numériquement (surface spécifique, distribution en taille des pores, distribution du nombre d'atomes par cycle, facteur de structure, fonction de distribution radiale) et comparées avec les grandeurs expérimentales. La structure atomique a ensuite servi de réseau hôte pour simuler l'adsorption de la molécule de phénol par la méthode Grand Canonique Monte Carlo (GCMC). Afin de réduire les temps de calcul, un code parallèle a été développé et implémenté sous MPI C++. L'originalité de la méthode réside également dans l'étude de l'impact de la mobilité électronique du support carboné en s'appuyant sur la méthode CSM (Charge Simulation Method). Les résultats des simulations numériques sont discutés et comparés aux données expérimentales.