

## **SUJET DE THESE AU LABORATOIRE PHENIX-UPMC-CNRS**

### **ETUDE DU ROLE DE L'INTERCONNECTIVITE DANS LA DIFFUSION MOLECULAIRE AU SEIN DE CATALYSEURS POREUX MULTI-EHELLES.**

Les matériaux poreux présentant plusieurs échelles d'organisation se rencontrent dans de nombreux domaines de l'industrie. Un exemple marquant est celui l'industrie pétrolière où cette situation se rencontre aussi bien au moment de l'extraction des huiles des gisements que lors du raffinage. Dans ce dernier domaine où la catalyse hétérogène est largement employée, un des problèmes à la fois fondamental et appliqué est le transport moléculaire vers les sites réactionnels permettant l'acte catalytique cible. Récemment se sont développées des stratégies de synthèse de matériaux poreux hiérarchisés, structurés à plusieurs échelles allant du nm au micromètre. Cependant ni la compréhension ni la caractérisation détaillée des mécanismes de diffusion/adsorption moléculaires au sein de ces matériaux ne sont atteintes.

C'est dans ce cadre que nous proposons une thèse au laboratoire PHENIX de l'UPMC-CNRS (Paris). La thèse sera dévolue à la caractérisation et au rôle de l'interconnectivité dans le transport moléculaire multi-échelle au sein des matériaux hiérarchisés. Cette recherche s'articulera autour de trois axes.

- 1) Etude du transport diffusif et de l'adsorption de molécules au sein des matériaux hiérarchisés. L'outil principal sera la Relaxométrie Résonance Magnétique Nucléaire (RMN);
- 2) Analyse géométrique des matériaux hiérarchisés à partir d'observations par tomographie électronique afin de mieux comprendre l'interconnectivité des réseaux de pores ;
- 3) Couplage de la géométrie 3D de ces milieux hiérarchisés et du transport diffusif par simulation numérique.

Le candidat recherché sera un physico-chimiste ayant un gout pour l'expérimentation et la simulation numérique et une bonne formation en spectroscopie RMN.

Les encadrants de cette thèse seront :

Anne-Laure Rollet (CR1) et Pierre Levitz (DR1) du laboratoire PHENIX.

[anne-laure.rollet@upmc.fr](mailto:anne-laure.rollet@upmc.fr); [pierre.levitz@upmc.fr](mailto:pierre.levitz@upmc.fr)