IRAMIS : Institut Rayonnement Matlère de Saclay

Saclay

LLB/MMB

Dynamique de l’eau confinée dans des nanopores hydrophobes

Spécialité CHIMIE

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil LLB/MMB

Candidature avant le 28/02/2023

Durée 5 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact ALBA-SIMIONESCO Christiane
+33 1 69 08 32 54
christiane.alba-simionesco@cea.fr

Résumé

Les propriétés de l'eau liquide confinée ne diffèrent pas seulement de celles de l'eau libre, mais varient également beaucoup en fonction des caractéristiques du confinement. Cette diversité provient d'une part,du riche diagramme de phase de l'eau, qui est modifié selon l'échelle de longueur et de temps considérées, et d'autre part, de la grande diversité des conditions de confinement : taille et dimension de la matrice, rugosité de surface, nature et force des interactions... La liste des situations de confinement est large et inclut génériquement tous les cas où des molécules d'eau sont piégées dans un environnement donné, à condition que l'environnement et l'eau évoluent sur des échelles de temps très différentes.
AU cours du stage Nous nous intéresserons au comportement de l'eau confinée dans des matériaux solides et réguliers, dont la taille des pores permet une certaine mobilité autorisant des transitions de phase à partir de l'état liquide. L'avantage de la voie de synthèse retenue est la possibilité de régler l'hydrophobie de la surface de faiblement à très hydrophobe de manière bien contrôlée pour des diamètres de pores allant de 2,5 à 5 nm.

Sujet détaillé

De nombreuses expériences sur l'eau confinée ont déjà été réalisées et de nombreux résultats controversés peuvent être trouvés dans la littérature. Ici, nous aimerions nous focaliser sur les nouvelles caractéristiques observées du fait de l'utilisation d'une pression externe différente de celle des expériences standard, ce quimodifie la quantité d'eau piégée entre les parois. En particulier, les propriétés thermodynamiques locales, les températures des transitions de phase seront affectées d'une manière non triviale, donnant lieu à l'observation de nouvelles phases cristallines (réf. 1) dans les domaines T-P non expansés.

Plusieurs situations doivent alors être envisagées puisque la pénétration d'un liquide dans un matériau nanoporeux dépend non seulement de la dimension des pores mais aussi des interactions entre le liquide et les surfaces du matériau. Dans le cas des pores hydrophiles, le processus de remplissage est appelé imbibition, lorsque la pénétration commence dès que les matériaux sont en contact avec le liquide, ou, dans le cas hydrophobe, intrusion (Ref 1) lorsqu'une pression externe est nécessaire pour forcer le liquide à entrer, avec une valeur de pression obéissant à la loi de Laplace. Dans tous les cas, les cinétiques d'entrée et de sortie sont différentes et l'échelle de

temps de l'équilibrage très longue.

Mots clés

Sciences des matériaux

Compétences

Caractérisation des matériaux : Adsorption N2 Eau, SAXS, FTIR, TGA. Études des fluides confinés : WAXS, Diffusion des neutrons (élastique et quasi-élastique), calorimétrie.

Logiciels

Dynamics of water confined in hydrophobic materials

Summary

The properties of confined liquid water not only differ from those of bulk water but also greatly vary one from another depending on the confinement characteristics. The variety comes from the interplay between the rich water phase diagram and the length and time scales involved on one side and the wide diversity of confining conditions, size and dimension of the matrix, softness and roughness of its surface, nature of the interactions, etc., on the other. The list of confining situations is broad and generically includes all cases where water molecules are trapped in a given environment, provided the environment and the water evolve on widely different time scales. Here we focus on water confined in solid and regular materials, with pore sizes allowing mobility and phase transitions from the liquid state. The advantage of the synthesis route we have chosen is the possibility to tune the hydrophobicity of the surface from weakly to very hydrophobic in a well-controlled way for pore diameters ranging from 2.5 to 5nm.

Full description

A lot of experiments on confined water have already been performed and many controversial results can be found in the literature. Here we would like to focus on new features observed because of the use of an external pressure at variance to standard experiments which modify the amount of water trapped between the walls. In particular the local thermodynamic properties, the temperatures of the phase transitions will be affected in a non-trivial way, giving rise to the observation of new crystalline phases (ref 1) in unexpexted T-P domains. Several situations must then be considered since the ingress of a liquid into a nanoporous material depends not only on the dimension of the pores but also on the interactions between the liquid and the material surfaces. In the case hydrophilic pores, the filling process is called imbibition, when penetration started as soon as the materials are in contact with the liquid, or, in the hydrophobic case, intrusion(ref 1) when an external pressure is required to force the liquid to enter, with a pressure value obeying the Laplace law. In all cases the kinetics of in and out are different and the time scale of equilibration very long.

Keywords

Materials sciences

Skills

Materials characterization : Adsorption N2 Water, SAXS, FTIR, TGA. Confined fluid studies: WAXS, Neutron Scattering (elastic and quasielastic), calorimetry.

Softwares