

Séminaire Physico-chimie & Biologie

Mercredi, 10 Décembre 2014

11 :00

Bât. 563 - salle 15

Adsorption et Transport de Fluides Simples et de Liquides Ioniques dans des Matériaux Poreux Hiérarchisés

Benoit Coasne^{1,2}

¹ MultiScale Materials Science for Energy and Environment, CNRS and Massachusetts Institute of Technology, UMI-CNRS 3466, Cambridge, MA, USA.

² Department of Civil and Environmental Engineering, Massachusetts Institute of Technology, UMI-CNRS 3466, Cambridge, MA, USA.

coasne@mit.edu

Abstract:

Alors que les matériaux microporeux (taille de pore inférieure à 2 nm) tels que les zéolithes ou les MOF (Metal Organic Framework) possèdent des propriétés d'adsorption et de catalyse très avantageuses, leur utilisation est souvent limitée par des problèmes de diffusion des adsorbats au sein de leur porosité. Ainsi, de nombreux efforts ont été déployés pour améliorer la diffusion des molécules au sein des cristaux de zéolithes en concevant et synthétisant des matériaux poreux hiérarchisés combinant des échelles de porosité allant de la microporosité (< 2 nm), à la mésoporosité (2-50 nm) et la macroporosité (< 50 nm). Ces solides combinent les avantages suivants : (1) une large surface de "sites actifs" pour une application donnée dans la plus petite échelle de porosité et (2) un accès amélioré à ces sites grâce au transport efficace dans les plus grandes échelles de porosité. Dans cet exposé, je présenterai une étude par simulation moléculaire sur le comportement de liquides confinés dans des solides poreux hiérarchisés. Après avoir considéré le cas de liquides simples, je présenterai une étude plus spécifique sur les liquides ioniques confinés.

B. Coasne, L. Viau, A. Vioux, *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, 1150 (2011).

G. Ori, F. Villemot, L. Viau, A. Vioux, B. Coasne, *Mol. Phys.* **112**, 1350 (2014).

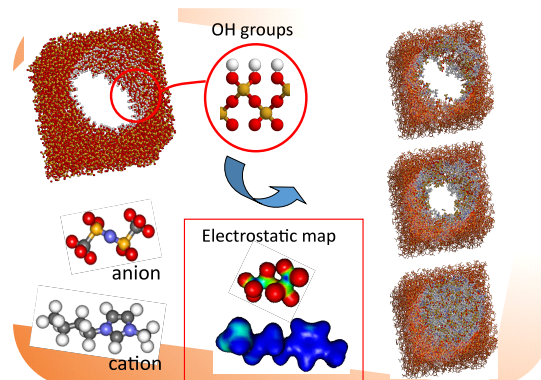


Fig. 1. Ionic liquid confined in porous silica ($D = 4.8$ nm). Orange and red spheres are silicon and oxygen atoms. White spheres are hydrogen atoms of the OH groups at the pore surface. For both ions, an electrostatic potential mapped onto the isodensity surface is shown.