

**MASTER DE CHIMIE DE PARIS CENTRE - M2S2**

**Proposition de stage 2021-2022**

**Internship Proposal 2021-2022**

**Parcours type(s) / Specialty(ies) :**

Chimie Analytique, Physique et Théorique / *Analytical, Physical and Theoretical Chemistry* :

Chimie Moléculaire / *Molecular Chemistry* :

Chimie et Sciences Du Vivant / *Chemistry and Life Sciences* :

Chimie des Matériaux / *Materials Chemistry*:

Ingénierie Chimique / *Chemical Engineering*:

**Laboratoire d'accueil / Host Institution**

Intitulés / *Name* : PHENIX

Adresse / *Address* : 4 place Jussieu, Paris V<sup>ème</sup>

Directeur / *Director (legal representative)* : L. Michot

Tél / *Tel* :

E-mail :

**Equipe d'accueil / Hosting Team** : Electrochimie et Liquides Ioniques

Adresse / *Address* : 4 Place Jussieu, Paris V<sup>ème</sup>

Responsable équipe / *Team leader* : A.-L. Rollet & M. Salanne

Site Web / *Web site* : <https://phenix.cnrs.fr/>

Responsable du stage (encadrant) / *Direct Supervisor* : A.-L. Rollet & A. Ducroix

Fonction / *Position* : Chercheur

Tél / *Tel* :

E-mail : [anne-laure.rollet@sorbonne-universite.fr](mailto:anne-laure.rollet@sorbonne-universite.fr) ; [alice.ducroix@sorbonne-universite.fr](mailto:alice.ducroix@sorbonne-universite.fr)

Période de stage / *Internship period* \* : février – juillet 2022

**Titre / Title**

Transport multi-échelle de l'eau dans des dispersions de boehmite

**Projet scientifique (1 page maximum) / Scientific Project (maximum 1 page):**

**1. Description du projet / Description of the project**

L'alumine ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), matériau réfractaire utilisé comme isolant thermique pour les applications haute température, est également le support de catalyseur incontournable utilisé en catalyse hétérogène dans le domaine du raffinage. L'alumine utilisée dans cette application présente une porosité hiérarchique multi-échelle qui s'étend du nanomètre au micromètre. Elle est obtenue par calcination de pâtes de boehmite ( $\gamma\text{-AlOOH}$ ). Cette transformation est topotactique, c'est-à-dire, que la structure est conservée. La structure poreuse de l'alumine est donc largement héritée de la structure des agrégats de nano-cristaux de boehmite en phase aqueuse [1], [2]. Le contrôle de la structure multi-échelle de ces agrégats est crucial pour la modulation des propriétés finales de l'alumine que ce soit en tant que catalyseur ou qu'isolant. Un des enjeux importants concernant la boehmite, précurseur de l'alumine méso et macro-poreux, est de mieux comprendre les relations entre texturation porale et trafic moléculaire. Il a déjà été montré que la nature du solvant (eau, alcool, toluène) et notamment son interaction avec les surfaces solides est un

\* min. 5 mois à partir du 31 janv 2022 / *min. 5 months not earlier than January, 31st 2022.*

Fin de stage au plus tard le 15/07/2022 ou le 30/09/2022 (dates de validation de diplôme). / *End of internship at the latest July 15, 2022 or Sept. 30, 2022 (dates of graduation).*

élément déterminant dans la texturation des phases colloïdales [1]. En parallèle, les propriétés dynamiques de ce solvant dans les suspensions colloïdales sont en direct relation avec le confinement qu'impose le réseau méso et macro-poreux et ses interfaces.

L'objectif principal de ce stage est la compréhension du transport du solvant et plus particulièrement l'étude de l'impact de la structuration de la boehmite sur la dynamique du solvant. Pour ce faire, plusieurs structurations initiales de la boehmite seront préparées allant de suspensions colloïdales aux gels. Cette étude sera menée en utilisant la relaxométrie RMN (résonance magnétique nucléaire). La RMN présente les avantages d'être non invasive et sélective vis-à-vis de l'isotope. On peut ainsi tirer parti de l'échange isotopique pour mettre en lumière différentes propriétés du système. De plus, la relaxométrie RMN à champ variable est particulièrement pertinente pour comprendre la dynamique multi-échelle dans des milieux interfaciaux. En effet, les processus de relaxation de l'aimantation RMN sont induits par les fluctuations de champ magnétique ressenties par le noyau. Ces fluctuations sont issues de la dynamique du noyau relative à son environnement et dépendent donc du temps d'observation. En enregistrant les vitesses de relaxation pour différents temps, i.e. à différentes fréquences de Larmor, il est alors possible de remonter à cette dynamique par l'intermédiaire de l'expression des densités spectrales. Le temps caractéristique d'observation est inversement proportionnel à la fréquence de résonance du noyau ; ainsi, à haut champ, on explore des mouvements rapides (rotation de molécules, déplacement sur quelques Å). A bas champ, on explore des déplacements sur de plus longues distances durant lesquelles le noyau peut rencontrer des interfaces, y résider, s'y déplacer ou au contraire en être repoussé ; la réponse sur le profil de relaxation sera différente pour chacun de ces cas. Au cours de ce stage, la dynamique de l'eau dans les dispersions de boehmite sera étudiée de 10 kHz à 120 MHz (fréquence  $^1\text{H}$ ), soit sur 4 ordres de grandeurs temporelles.

## 2. Techniques ou méthodes utilisées / *Specific techniques or methods*

- méthode de préparation des suspensions et des gels par stress osmotique
- relaxométrie RMN :  $T_1$  et  $T_2$  à champ variable,  $T_1$  à champ cyclé
- programmation python (niveau basique)

## 3. Références / *References*

- [1] C. Morin, "Préparation d'alumine à porosité contrôlée : étude de l'interaction de la boehmite dans des solvants et des propriétés fonctionnelles des matériaux résultants" UPMC / IFP, 2014.
- [2] C. Gallois, "Etude des propriétés physico-chimiques de suspensions de boehmite. Application aux supports catalytiques."