



ID de Contribution: 339

Type: Contribution orale

Théorie de la fonctionnelle de la densité classique couplée aux équations intégrales : application au CO₂ supercritique.

mardi 4 juillet 2023 10:15 (15 minutes)

Les enjeux liés au réchauffement climatique poussent les industriels à se tourner vers des solvants plus respectueux de la nature afin de s'affranchir des solvants conventionnels, les composés organiques. Depuis leurs découvertes, les fluides supercritiques constituent des bons candidats pour développer une «chimie verte».[1] L'intérêt autour cet état thermodynamique repose sur ses propriétés de solvations intéressantes. Le plus couramment utilisé est le CO₂ supercritique (scCO₂) car il est possible d'atteindre facilement son point critique ($T_c = 304$ K et $P_c = 73$ atm) mais aussi parce qu'il est non-toxique, non-inflammable et abondant. On le retrouve dans de nombreux domaines industriels: pharmaceutique, pétrole, cosmétique et dans l'agro-alimentaire.[2]

Néanmoins, son pouvoir solvatant reste limité particulièrement lorsqu'il s'agit de solubiliser les solutés polaires. D'où, la nécessité d'ajouter un cosolvant (par exemple, un solvant polaire), d'augmenter la concentration du soluté ou modifier les paramètres thermodynamiques afin de maximiser sa solubilité.[3] Un des défis autour scCO₂ est de pouvoir déterminer efficacement et rapidement sa solubilité. Plusieurs méthodes sont utilisées pour déterminer la solubilité du scCO₂, les équations états paramétrisées qui nécessitent des données expérimentales et les simulations de dynamique moléculaires (DM). Ces méthodes ont permis d'avoir accès à la solubilité pour quelques solutés et conditions thermodynamiques mais elles restent coûteuses (en données ou temps de calcul), ce qui limite leurs utilisations pour une prédiction.

Cette étude cherche à développer une méthode rapide et efficace pour déterminer la solubilité pour divers solutés et plusieurs conditions thermodynamiques . Nous utilisons une nouvelle approche, les équations intégrales couplées à la théorie de la fonctionnelle de la densité classique (similaire à la DFT électronique mais ici c'est la densité moléculaire que l'on cherche à minimiser), qui a démontré son efficacité sur des études sur la molécule d'eau.[4] Ainsi, nous pouvons déterminer la structure et l'énergie libre 10000 fois plus rapide que la dynamique moléculaire. Nous allons présenter les premiers résultats pour divers solutés et plusieurs conditions thermodynamiques.

Mots-clés:Fluide supercritique, Solubilité, Dynamique moléculaire, Théorie de la fonctionnelle de la densité classique.

1. P.T. Anastas et J. C. Warner, Oxford University Press (2000).
2. G. Sodeifian, L. Nasri, F. Razmimanesh et al, The Journal of Chemical Thermodynamics 182 (2023).
3. C. A. Eckert, B. L. Knutson, et P.G. Debenedetti, Nature 383 (1996) .
4. D. Borgis, S. Luukkonen, L.Belloni et al, The Journal of Chemical Physics 155 (2021).

Affiliation de l'auteur principal

LPCT, Université de Lorraine, CNRS

Auteur principal: M. HOUSSEIN MOHAMED, Mohamed (LPCT, Université de Lorraine, CNRS)

Co-auteurs: CAROF, Antoine (LPCT, Université de Lorraine, CNRS); INGROSSO, Francesca (LPCT, Université de Lorraine, CNRS)

Orateur: M. HOUSSEIN MOHAMED, Mohamed (LPCT, Université de Lorraine, CNRS)

Classification de Session: Mini-colloques: MC13 Effets d'environnement et de solvation sur les processus moléculaires

Classification de thématique: MC13 Effets d'environnement et de solvation sur les processus moléculaires