

Adsorption et transport aux surfaces : Une approche par dynamique moléculaire

Jean-Marc Simon

*Equipe Adsorption sur Solides Poreux,
Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne
UMR 6303 CNRS-Université de Bourgogne, Dijon

La surface entre deux phases possède des propriétés dynamiques et thermodynamiques distinctes des phases qu'elle sépare. En particulier c'est le lieu où sont gérés les échanges de masse et d'énergie entre les deux phases que ce soit dans les conditions d'équilibre ou bien dans les conditions de rupture d'équilibre.

A travers certains exemples simples issus de simulations par dynamique moléculaire j'aborderai la notion d'interface d'un point de vue thermodynamique et dynamique. Je commencerai par une présentation d'un système simple l'hydrogène sur du graphite [1]. Dans une seconde partie, je justifierai en particulier l'utilisation de la thermodynamique des processus irréversibles dans la description des phénomènes d'évaporation - condensation. Plus particulièrement, je prendrai l'exemple des interfaces liquide - vapeur de systèmes atomiques et moléculaires [2] et la physisorption de n-alcanes sur des zéolithes [3], cf. Figure 1. L'étude de ces systèmes a permis de souligner les très forts couplages entre les transferts de masse et de chaleur aux interfaces qui peuvent limiter les cinétiques. Elle peut aussi constituer une piste d'évolution d'une meilleure description des effets des « frontières » dans des approches macroscopiques, de type milieu continu.

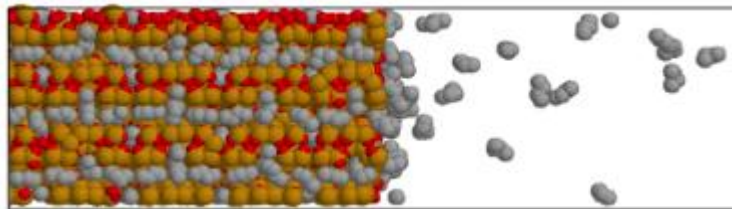


Figure 1: Configuration d'équilibre du système silicalite (rouge et jaune) et n-butane (gris). Les molécules de n-butane sont localisées dans la phase gazeuse et adsorbées sur la surface externe de la zéolithe et à l'intérieur des pores.

[1] *Adsorption and Desorption of H₂ on Graphite by Molecular Dynamics Simulations*, J.-M. Simon, O.-E. Haas, S. Kjelstrup, *J. Phys Chem C.* **114**, 10212 (2010)

[2] *Interface Film Resistivities for Heat and Mass Transfers/Integral Relations Verified by Non-equilibrium Molecular Dynamics*, J.M. Simon, D. Bedeaux, S. Kjelstrup, E. Johannessen, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, p. 18528 (2006)

[3] *Transport coefficients of n-butane into and through the surface of silicalite-1 from non-equilibrium molecular dynamics*. I. Inzoli, S. Kjelstrup, D. Bedeaux, J.M. Simon, *Microporous Mesoporous Materials* vol.125, p. 112 (2009).