

Intitulé du Sujet de Thèse : Adsorption et transport des composés organochlorés dans des zéolithes à morphologie et cations contrôlés

Laboratoire : MADIREL

Directeur de thèse HDR (100%) : Dr. Véronique Wernert

Co-encadrant non HDR (0%) : Dr. Nicolas Martin

email : veronique.wernert@univ-amu.fr et nicolas.martin@univ-amu.fr

Descriptif du projet

Les composés organochlorés sont des polluants toxiques et cancérogènes, issus d'usages industriels ou de procédés thermiques. Leur forte persistance dans l'environnement nécessite le développement de matériaux capables de les capter efficacement. L'adsorption sur matériaux poreux est une solution privilégiée, aussi bien pour la dépollution que pour la détection. La compréhension conjointe des propriétés thermodynamiques d'adsorption et des mécanismes de transport et de diffusion en milieu poreux est essentielle pour optimiser ces matériaux. Le laboratoire MADIREL est spécialisé dans la synthèse, la mise en forme et la caractérisation de matériaux poreux à chimie de surface contrôlée, ainsi que dans l'étude de leurs propriétés adsorbantes. Cette thèse vise à développer des zéolithes performantes pour l'adsorption et le transport d'organochlorés, y compris en présence d'eau. L'étude portera sur des zéolithes de type FAU, sous différentes morphologies (poudres, billes), la Fau-NaX ayant déjà montré d'excellentes performances [1]. L'influence de différents cations de compensation sera étudiée afin d'optimiser l'affinité, la sélectivité et les propriétés de diffusion. La sélection des cations les plus prometteurs sera réalisée en amont par des calculs DFT, dans le cadre d'une collaboration avec le L2CM (Nancy). Les matériaux retenus seront ensuite synthétisés, mis en forme et évalués expérimentalement.

Travaux de recherche

- **Synthèse et caractérisation des zéolithes :** synthèse hydrothermale à partir d'argiles naturelles, dans une démarche de chimie verte, et caractérisation structurale et texturale (DRX, MEB/MET, adsorption N₂, ATG, etc.).
- **Adsorption et transport en conditions dynamiques :** étude de l'adsorption en phase gazeuse par courbes de percée à l'aide d'un dispositif expérimental couplé à un spectromètre de masse en ligne.
- **Analyse par TG-MS :** après adsorption, un thermo-gravimètre couplé à un spectromètre de masse permettra d'identifier les sites d'adsorption, de déterminer les énergies de désorption et d'accéder aux paramètres cinétiques de diffusion des organochlorés au sein des zéolithes [2,3].

Profil recherché

Le/la candidat(e) devra posséder de solides bases en physico-chimie des matériaux et un fort goût pour le travail expérimental. Un excellent dossier académique est attendu (mention bien minimum souhaitée). Offre de thèse soumise au concours 2026 de l'Ecole Doctorale Sciences chimiques / ED 250. Oral prévu les 21 et 22 mai 2026 à Marseille. Date limite de candidature 10 avril 2026.

Début de la thèse : Octobre 2026.

Pour candidater, merci d'envoyer un CV, une lettre de motivation, les relevés de notes masters 1 et 2, ainsi que deux contacts externes (pour recommandation) à Dr. Véronique Wernert : veronique.wernert@univ-amu.fr et Dr. Nicolas Martin : nicolas.martin@univ-amu.fr.

Références Bibliographiques

- [1] A. Simon-Masseron, L. Tortet, V. Wernert, A. Janulyte and Y. Zerega, *Mic. Mes. Mat.* **370** (2024).
 [2] Y. Zerega, L. Tortet, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180127 (2025)
 [3] Y. Zerega, L. Tortet, A. Simon-Masseron, S.B. Gambo, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180142 (2025)

Title: Adsorption and Transport of Organochlorine Compounds in Zeolites with Controlled Morphology and Cation Composition

Laboratory: MADIREL, Aix Marseille University

Supervisor: Dr. Véronique Wernert

Co-supervisor: Dr. Nicolas Martin

email: veronique.wernert@univ-amu.fr et nicolas.martin@univ-amu.fr

Project

Organochlorine compounds are toxic and carcinogenic pollutants originating from industrial uses or thermal processes. Their high persistence and dispersion in the environment call for the development of efficient materials for their capture. Adsorption on porous materials is a key strategy for pollution control as well as for separation and sensing devices. A detailed understanding of both thermodynamic adsorption properties and transport and diffusion mechanisms in porous media is essential to optimize such materials. The MADIREL laboratory specializes in the synthesis, shaping, and characterization of porous materials with controlled surface chemistry, and in the study of their adsorption properties.

The aim of this PhD project is to develop zeolite-based materials with enhanced performance for the adsorption and transport of organochlorine compounds, including in the presence of competing species such as water. The study will focus on FAU-type zeolites with different morphologies (powders, beads), for which the NaX form has already demonstrated excellent adsorption performance [1].

To further optimize affinity, selectivity, and diffusion properties, the influence of different charge-compensating cations will be investigated. The most promising cations will be selected in advance through DFT calculations, within a collaboration with L2CM (Nancy). The selected materials will then be synthesized, shaped, and experimentally evaluated.

Research Work

- **Synthesis and characterization of zeolites:** hydrothermal synthesis from natural clays, following a green chemistry approach. Structural and textural properties will be characterized using standard techniques (XRD, SEM/TEM, N₂ adsorption, TGA, etc.).
- **Adsorption and transport studies:** gas-phase adsorption will be investigated using breakthrough curve experiments with an original experimental setup coupled to an online mass spectrometer.
- **Analysis by TG–MS:** after adsorption, a thermogravimetric analyzer coupled with a mass spectrometer (TG–MS) will be used to identify adsorption sites, determine desorption energies, and extract kinetic parameters related to the diffusion of organochlorine compounds within the zeolite framework [2,3].

Candidate Profile

The candidate should have a strong background in materials physical chemistry and a pronounced interest in experimental research. An excellent academic record is expected.

PhD Thesis offer submitted to the Doctoral School of Chemical Sciences / ED 250. Oral is scheduled for May 21th and 22nd, 2026 in Marseille. Deadline for application April 10th, 2026.

PhD Thesis will start early October 2026.

To apply, please send a CV, a cover letter, Masters 1 and 2 transcripts, as well as two external contacts (for recommendation) to Dr. Véronique Wernert : veronique.wernert@univ-amu.fr and Dr. Nicolas Martin : nicolas.martin@univ-amu.fr

References

- [1] A. Simon-Masseron, L. Tortet, V. Wernert, A. Janulyte and Y. Zerega, *Mic. Mes. Mat.* **370** (2024).
 [2] Y. Zerega, L. Tortet, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180127 (2025)
 [3] Y. Zerega, L. Tortet, A. Simon-Masseron, S.B. Gambo, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180142 (2025)