

L'équipe



Amaël Obliger, porteur de la Chaire, est titulaire d'un doctorat sur le "Transport électrocinétique en milieu poreux chargé" obtenu en 2014 à l'Université Pierre et Marie Curie.

De 2014-2017, post-doctorat au MIT. Propriétés de transport de la matière organique dans les roches mères.

2017-2018, post-doctorat à UC, Berkeley. Diffusion ionique et dynamique des porteurs de charge dans les pérovskites semi-conductrices.



**Katarzyna Walczak, chercheuse postdoctorale
Doctorat en physique de l'Université de Montpellier (France)**

Elle utilise des simulations dynamiques de dynamique moléculaire hors équilibre (D-NEMD) pour étudier la cinétique de désorption / sorption de fluides dans des carbonnes microporeux flexibles afin de fournir des informations sur les écarts par rapport au régime Fickian habituel qui sont révélés par des expériences de désorption à partir d'échantillons de charbon.

Ces effets non fickiens peuvent avoir un impact qualitatif sur l'efficacité de la séquestration du dioxyde de carbone dans les couches géologiques. Des simulations moléculaires pourraient établir des relations entre les propriétés mécaniques de la phase microporeuse organique et la cinétique de sorption.



Kristina Ariskina, doctorante

Master de chimie théorique de l'Université fédérale de Kazan (Russie)

Son projet de thèse est consacré à la compréhension du transport et de la diffusion de fluides (par exemple, méthane, dioxyde de carbone) à l'échelle nanométrique dans la matière organique des réservoirs géologiques pouvant être utilisés pour la séquestration du carbone.

Cette matière organique à l'échelle nanométrique implique deux types de porosités, le réseau microporeux (taille des pores inférieure à 2 nm) qui est amorphe et où le transport est purement diffusif, et les mésopores (taille des pores entre 2 et 50 nm) où le transport est hydrodynamique mais dépend des inhomogénéités des fluides résultant de forts effets de confinement.

Elle développe une stratégie numérique multi-échelles basée sur des simulations moléculaires et sur la théorie fonctionnelle de la densité classique pour étudier les propriétés de transport des fluides en tenant compte à la fois du réseau microporeux et des mésopores.