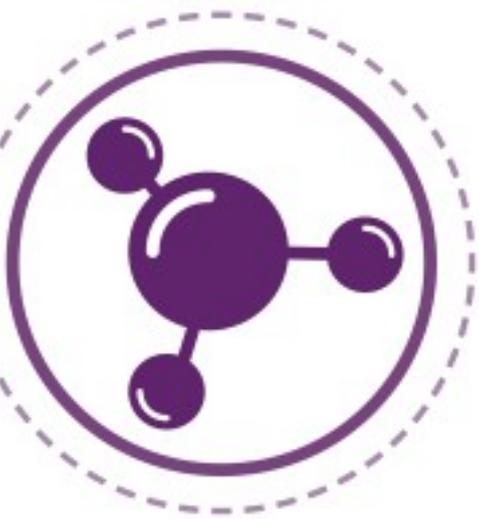


# Chaire MolecularSimulation

*Simulations atomistiques et multi-échelles du transport couplé des fluides confinés dans des milieux nanoporeux*



La chaire d'Amaël Obliger "Simulations atomistiques et multi-échelles du transport couplé des fluides confinés dans des milieux nanoporeux" vise à fournir une compréhension fondamentale et des stratégies réalistes de simulation multi-échelles des processus de transport de fluides confinés (CO<sub>2</sub>, mélanges d'hydrocarbures, contaminants) dans des matériaux poreux qui sont d'un grand intérêt pour des applications impliquant des ressources géologiques ou des membranes artificielles (carbones microporeux, hydrates de gaz, ciment).

Les solutions pour l'énergie et l'environnement (séquestration du CO<sub>2</sub>, récupération assistée du pétrole, gestion des déchets radioactifs) impliquent de plus en plus des fluides extrêmement confinés. Dans ces cas où les interactions solide/fluide prévalent, je propose de développer des simulations moléculaires pour étudier les propriétés de transport ainsi que leurs liens avec les propriétés mécaniques et structurelles des solides et de les relier aux modèles de l'ingénieur avec des méthodes discrètes.



***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.