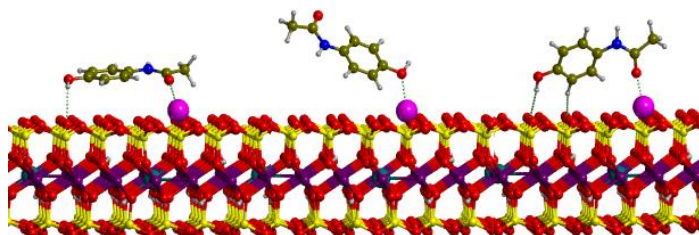


Modélisation de l'adsorption de micropolluants sur des surfaces d'argiles



Travail préliminaire d'exploration de différents modes d'adsorption du paracétamol sur une surface model de montmorillonite-Na⁺, interagissant par coordination avec Na⁺ et/ou liaison hydrogène et/ou dispersion entre le cycle aromatique et la surface. Structures optimisées en PBE+D.

Superviseur : Mignon Pierre

Contact : pierre.mignon@univ-lyon1.fr

Laboratoire : Institut Lumière Matière

Responsable du laboratoire : Philippe Dugourd

Equipe : Physico-chimie théorique

L'influence de résidus médicamenteux, antibiotiques et de pesti/herbi-cides sur les écosystèmes tels que le sol est très mal connue. Ces polluants émergents (tel que le glyphosate) sont introduits à de faibles concentrations mais de manière continue dans les sols et sur le long terme leur accumulation s'avère néfaste pour l'environnement et la santé humaine. Il s'agit ici d'étudier et de comprendre les mécanismes d'accumulation et de dégradation de ses substances dans les sols et en particulier dans l'argile. Les minéraux argileux, principaux responsables de la rétention de molécules dans les sols (en particulier les smectites) seront étudiés du fait i) de la réactivité importante de leurs phases microcristallines, ii) de leur capacité à incorporer la solution du sol dans leur structure et en particulier dans l'important espace interfoliaire hydraté existant dans ces minéraux et iii) des interactions fortes entre argiles et résidus médicamenteux qui ont été mises en évidence dans le milieu naturel.

L'approche consistera en l'analyse des interactions entre micropolluants et particules argileuses par une approche couplant modélisation *ab-initio* et mécanique moléculaire. On cherchera à décrire l'affinité des substances pour les particules d'argiles au niveau des interactions inter-moléculaires sur surfaces basales et bords des feuillettes afin d'expliquer les observations issues des isothermes d'adsorption et des données cristallographiques.