

## **Etude des propriétés de transport des charges dans des bains cryolithiques par calculs de dynamique moléculaire basés sur une approche *ab initio* de potentiels d'interactions.**

La production d'aluminium est une branche très importante du parc industriel québécois. L'aluminium est produit d'abord en transformant la bauxite en alumine ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) via le procédé Bayer puis par électrolyse de l'alumine par le procédé Hall-Héroult. Ce procédé consiste à dissoudre de l'alumine dans un bain de cryolithe fondue complétée d'additifs ( $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ - $\text{AlF}_3$ - $\text{CaF}_2$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ - $\text{LiF}$ - $\text{KF}$ ) à  $1020^\circ\text{C}$  afin de produire de l'aluminium liquide selon la réaction :  $2\text{Al}_2\text{O}_3 + 3\text{C} \rightarrow 4\text{Al}_{\text{liquide}} + 3\text{CO}_{2(\text{gas})}$ . Le désavantage du procédé Hall-Héroult est qu'il est d'une part très énergivore mais aussi très polluant, environ 1 tonne de  $\text{CO}_2$  étant émise dans l'atmosphère terrestre pour chaque  $1^{1/2}$  d'aluminium produite. Pour palier à ces deux inconvénients, il s'agit en premier lieu d'améliorer le rendement énergétique de production qui est lié à l'efficacité du courant et à la conductivité électrique de l'électrolyte.

Le but du projet est de développer un modèle de conductivité électrique basé sur les mobilités ioniques et les nombres de transport des ions et calibré sur des données expérimentales et de dynamique moléculaire) Pour se faire les propriétés de transport de charges des ions contenus dans le système  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ - $\text{AlF}_3$ - $\text{CaF}_2$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ - $\text{LiF}$ - $\text{KF}$  doivent être connus avec une précision appréciable ( $\sim 10\%$ ).

L'objectif de cette thèse est double. Tout d'abord il s'agit de construire un modèle qui décrit les propriétés de transport des espèces chargées du bain cryolithique en fonction de la température et de la composition, cela afin d'aider nos partenaires industriels à optimiser la composition du bain pour maximiser l'efficacité du courant dans la cellule d'électrolyse. D'un point de vue plus fondamental, il s'agit de comprendre et d'analyser les phénomènes de transport de charges dans le bain cryolithique, sous gradient de potentiels électrique et chimiques, ainsi que leur corrélation avec la structure locale du liquide.

Les deux propriétés pertinentes pour totalement caractériser le transport de charges dans un milieu ionique fondu sont : (1) les nombres de transport et (2) les coefficients de mobilités

ioniques. Malheureusement il y a très peu ou pas du tout de données expérimentales, concernant ces deux propriétés, disponibles dans la littérature. Pour pallier à ce manque, des simulations de dynamique moléculaire devront être effectuées pour prédire ces propriétés de transport. La méthode de dynamique moléculaire qui sera utilisée est une méthode mixte atomistique et classique. La dynamique étant générée de manière classique, en résolvant les équations de Newton, et les potentiels d'interaction sont formulés à partir de simulations dites *ab initio*, qui utilisent uniquement les principes de la mécanique quantique.

Cette thèse s'effectuera sous la direction du Pr. Patrice Chartrand à Polytechnique Montréal et du Pr. Mathieu Salanne de l'Université Pierre et Marie Curie à Paris. Deux séjours de trois mois à Paris au sein de l'équipe du Pr. Mathieu Salanne sont prévus au cours de la thèse.

**Profil du candidat :**

Le candidat doit posséder une MASTER en physique, en chimie ou en sciences des matériaux. Il doit être familier avec le système d'exploitation Linux et savoir programmer en Python, Fortran ou C++. De plus, il est préférable (mais pas nécessairement obligatoire) que le candidat soit familier avec les concepts de la mécanique quantique et de la mécanique hamiltonienne.

**Type financement:** Bourse d'études doctorales de 3 ans (1600 \$/mois net) financée conjointement par le CRSNG (Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada) et un consortium de producteurs d'aluminium (Alcoa, Constellium, Hydro Aluminium et Rio-Tinto-Alcan). La prise en charge des frais des 2 séjours de 3 mois à l'Université Pierre et Marie Curie à Paris est prévu. Une bourse d'achat de \$1,000 pour un ordinateur portable est aussi prévue.

**Site travail:** Ecole Polytechnique de Montréal et l'Université Pierre et Marie Curie trois mois par an au cours des deux dernières années de thèse.

Les candidatures doivent être soumises à:

Directeur de thèse: Prof. Patrice Chartrand: [Patrice.chartrand@ploomtl.ca](mailto:Patrice.chartrand@ploomtl.ca)

Encadrant à Polytechnique Montréal : Dr. Aimen Gheribi : [aimen.gheribi@polymtl.ca](mailto:aimen.gheribi@polymtl.ca)

Encadrant à l'Université Pierre et Marie Curie : Dr. Mathieu Salanne [mathieu.salanne@upmc.fr](mailto:mathieu.salanne@upmc.fr)