

# Méthodes de relaxométrie et de diffusométrie RMN appliquées à l'étude du comportement de fluides confinés dans des milieux poreux

Directeur de thèse: Sabine Bouguet-Bonnet (Sabine.Bonnet@univ-lorraine.fr)  
Laboratoire CRM2 - Equipe Méthodologie RMN

L'objectif de ce projet est le développement de méthodes dans les domaines de la relaxométrie RMN et de la diffusométrie RMN pour l'étude de fluides dans des milieux présentant un réseau poreux. La RMN (Résonance Magnétique Nucléaire) est une technique particulièrement adaptée à ce type de caractérisation, elle est non invasive et rapide, et permet une caractérisation locale de la dynamique des molécules confinées. Les techniques de relaxométrie consistent à mesurer les paramètres de relaxation de spin en fonction du champ magnétique statique  $B_0$  et permettent de caractériser la mobilité moléculaire du fluide, celle-ci étant liée à la géométrie du milieu étudié (taille des pores ou des cavités) et aux propriétés de surface du matériau (relaxivité, mouillabilité). L'évolution de la vitesse de relaxation longitudinale  $R_1$  (inverse du temps de relaxation longitudinale  $T_1$ , qui gouverne le retour à l'équilibre de l'aimantation selon l'axe de  $B_0$ ) en fonction de la fréquence de mesure est alors représentée sous forme de courbes de dispersion. Dans le cas de mouvements lents comme ceux de fluides confinés, ces courbes de dispersion doivent être enregistrées à bas champ magnétique et nécessitent le développement de modèles appropriés. Le lien entre dynamique des molécules et relaxation de spin en RMN est bien connu dans le cas de mouvements rapides et à haut champ magnétique, mais une recherche fondamentale est encore nécessaire dans le cas de mouvements plus lents (ou de mouvements corrélés pour les systèmes complexes) et à bas champ magnétique, ceci constituera ainsi une partie du travail de thèse. Un autre objectif sera d'évaluer la complémentarité obtenue par des mesures de diffusométrie: ceci consiste à mesurer (à haut champ magnétique) le coefficient d'auto-diffusion translationnelle du fluide confiné par des méthodes à gradient de champ pulsé (PFG Pulsed-Field Gradient) et permet de sonder la dynamique de connexion inter-pores.

Ces développements méthodologiques seront effectués sur les fluides contenus dans deux types principaux de matériaux : d'une part des matériaux silicatés organisés présentant une porosité hiérarchisée (silices macro-mésoporeuses), et d'autre part des réseaux supramoléculaires formant des gels (organo- ou hydro-gels) à partir de dérivés d'acides aminés. En collaboration avec les spécialistes en synthèse de ces milieux, les objectifs seront ainsi de mettre en évidence les potentialités de la relaxométrie RMN bas champ couplée à la diffusométrie pour l'optimisation de la synthèse des matériaux, les milieux poreux étant très largement utilisés comme supports de catalyse d'une part, et les gels comme support d'encapsulation de molécules bio-actives d'autre part.