

Intitulé du Sujet de Thèse : Étude des mécanismes d'adsorption et de transport des PFAS dans les matériaux poreux

Laboratoire : Aix Marseille Université, MADIREL

Directrice de thèse : Dr. Véronique Wernert

Co-encadrant : Dr. Nicolas Martin

email : veronique.wernert@univ-amu.fr et nicolas.martin@univ-amu.fr

Descriptif du projet

Les substances per- et polyfluoroalkylées (PFAS) sont des contaminants organofluorés persistants, largement utilisés dans de nombreuses applications industrielles et produits du quotidien. Leur forte stabilité chimique, liée à la liaison carbone-fluor, leur confère une résistance élevée à la dégradation et favorise leur dispersion dans l'ensemble des compartiments environnementaux, incluant l'air, les sols et les eaux. La détection de PFAS volatils et semi-volatils dans l'atmosphère met en évidence un compartiment de contamination encore insuffisamment caractérisé, malgré des enjeux sanitaires et environnementaux majeurs.

Dans ce contexte, l'adsorption sur matériaux poreux constitue une approche clé pour la capture et la rétention des PFAS. Les zéolithes et les silices fonctionnalisées sont particulièrement adaptées, grâce à la maîtrise de leur chimie de surface, de leur porosité et des interactions spécifiques avec les molécules cibles. L'optimisation de ces matériaux nécessite une compréhension approfondie des mécanismes d'adsorption, ainsi que de leur couplage avec les phénomènes de transport en milieu poreux, notamment dans des conditions proches de l'environnement réel.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'un projet ANR réunissant de nombreux partenaires, couvrant l'ensemble de la chaîne de recherche, depuis la simulation moléculaire et la modélisation jusqu'à la synthèse de matériaux poreux innovants, la catalyse pour la dégradation des PFAS et l'évaluation des matériaux dans des conditions représentatives des environnements réels. Ce contexte collaboratif offrira au doctorant un environnement scientifique multidisciplinaire et des interactions étroites avec des spécialistes de ces différents domaines.

Cette thèse vise à étudier les mécanismes d'adsorption et de transport des PFAS dans des matériaux poreux, en combinant des approches thermodynamiques (manométrie, calorimétrie) et dynamiques (courbes de percée), tout en prenant en compte l'effet de la mise en forme des solides (poudres et matériaux hiérarchisés) sur les performances de capture. L'objectif est de fournir une compréhension fondamentale des mécanismes gouvernant la capture des PFAS afin de contribuer au développement de solutions efficaces pour leur traitement dans des conditions d'utilisation réalistes.

Travaux de recherche

- **Adsorption et propriétés thermodynamiques :** étude de l'adsorption des PFAS sur zéolithes et silices fonctionnalisées par manométrie d'adsorption, afin de déterminer les isothermes, capacités de stockage et affinités de surface. Les interactions PFAS-surface seront également analysées par calorimétrie d'adsorption, permettant d'accéder aux enthalpies d'adsorption et à la nature des interactions mises en jeu.
- **Transport en milieu poreux :** étude des phénomènes de diffusion et de transport des PFAS sur matériaux mis en forme (billes, pellets) via des expériences de courbes de percée en phase dynamique, permettant de quantifier les temps de résidence, les effets de cinétique et les limitations de transfert de masse.
- **Analyse par TG-MS :** après adsorption, un thermo-gravimètre couplé à un spectromètre de masse permettra d'identifier les espèces désorbées et les interactions PFAS-surface. Cette approche donnera accès à la nature des sites d'adsorption, aux énergies de désorption, ainsi qu'aux paramètres cinétiques de libération et de diffusion des PFAS au sein des matériaux poreux. L'analyse des fragments gazeux caractéristiques permettra également de suivre la décomposition éventuelle des molécules adsorbées [1,2].

Profil recherché

Le/la candidat(e) devra posséder de solides bases en physico-chimie des matériaux et un fort goût pour le travail expérimental.

Début de la thèse : Octobre 2026.

Pour candidater, merci d'envoyer un CV, une lettre de motivation, les relevés de notes masters 1 et 2, ainsi que deux contacts externes (pour recommandation)

Références Bibliographiques

[1] Y. Zerega, L. Tortet, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180127 (2025)

[2] Y. Zerega, L. Tortet, A. Simon-Masseron, S.B. Gambo, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180142 (2025)

PhD research topic: Investigation of adsorption and transport mechanisms of PFAS in porous materials

Laboratory: Aix Marseille Université, MADIREL

Thesis supervisor: Dr. Véronique Wernert

Co-supervisor: Dr. Nicolas Martin

email : veronique.wernert@univ-amu.fr et nicolas.martin@univ-amu.fr

Project Description

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) are persistent organofluorine contaminants widely used in numerous industrial applications and everyday consumer products. Their exceptional chemical stability, resulting from the strength of the carbon–fluorine bond, makes them highly resistant to degradation and promotes their widespread distribution across all environmental compartments, including air, soil, and water. The detection of volatile and semi-volatile PFAS in the atmosphere highlights an environmental contamination pathway that remains insufficiently characterized despite its significant environmental and public health implications.

In this context, adsorption on porous materials represents a promising strategy for the capture and retention of PFAS. Zeolites and functionalized silicas are particularly attractive adsorbents owing to the tunability of their surface chemistry, pore structure, and specific interactions with target molecules. Optimizing these materials requires a thorough understanding of adsorption mechanisms and their coupling with mass transport phenomena in porous media, particularly under conditions representative of real environmental systems.

This PhD project is part of a collaborative ANR (French National Research Agency) project involving numerous partners. The consortium covers the entire research chain, from molecular simulation and modeling to the synthesis of innovative porous materials, catalytic PFAS degradation, and the evaluation of materials under realistic environmental conditions. The successful candidate will benefit from a highly interdisciplinary research environment and close interactions with experts in these complementary fields.

The objective of this PhD is to investigate the adsorption and transport mechanisms of PFAS in porous materials by combining thermodynamic approaches (adsorption manometry and adsorption calorimetry) with dynamic techniques (breakthrough curve experiments). Particular attention will be paid to the influence of material shaping (powders and hierarchical structured materials) on PFAS capture performance. The goal is to provide a fundamental understanding of the mechanisms governing PFAS adsorption, thereby contributing to the development of efficient technologies for PFAS removal under realistic operating conditions.

Research Activities

- **Adsorption and thermodynamic properties:** Investigation of PFAS adsorption on zeolites and functionalized silicas using adsorption manometry to determine adsorption isotherms, storage capacities, and adsorption affinities. PFAS–surface interactions will also be characterized by adsorption calorimetry to determine adsorption enthalpies and identify the nature of the underlying interaction mechanisms.
- **Transport in porous media:** Investigation of PFAS diffusion and transport in shaped porous materials (beads and pellets) through dynamic breakthrough experiments. These measurements will provide quantitative information on residence times, adsorption kinetics, and mass transfer limitations.
- **TG-MS analysis:** Following adsorption, thermogravimetric analysis coupled with mass spectrometry (TG-MS) will be used to identify desorbed species and characterize PFAS–surface interactions. This approach will provide insights into the nature of adsorption sites, desorption energies, and the kinetic parameters governing PFAS release and diffusion within porous materials. Analysis of characteristic gaseous fragments will also enable the monitoring of any thermal decomposition of the adsorbed PFAS molecules [1,2].

Candidate Profile

The candidate should have a strong background in the physical chemistry of materials and an interest in experimental research.

Starting date: October 2026.

Application procedure: Applicants should submit a CV, a cover letter, Master's transcripts (M1 and M2 or equivalent), and the contact details of two external referees for recommendation letters.

References

- [1] Y. Zerega, L. Tortet, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180127 (2025)
 [2] Y. Zerega, L. Tortet, A. Simon-Masseron, S.B. Gambo, V. Wernert, *Thermochim. Acta* **753**, 180142 (2025)