

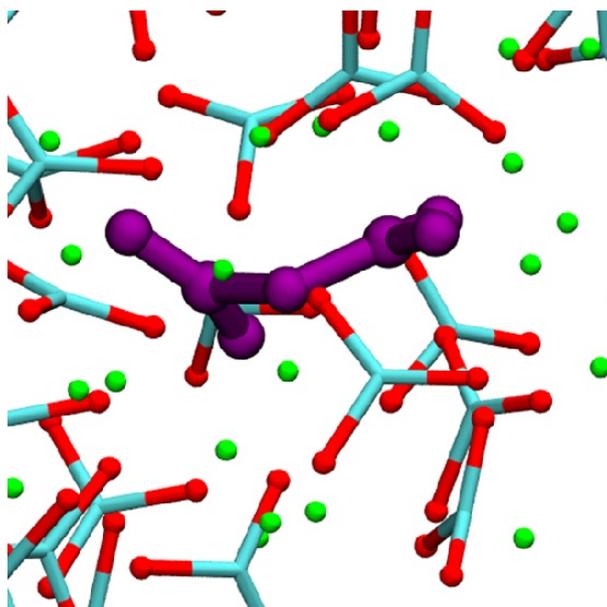


Information Presse

Paris, le 3 mars 2016

Un étonnant mécanisme de diffusion de CO₂ dans les carbonates fondus !

Bien que le carbone ne soit présent dans le manteau terrestre qu'en très faibles quantités, les fluides formés lorsque la fusion de la roche débute sont très riches en carbone et s'apparentent à des carbonates fondus. Ces liquides jouent alors un rôle très important dans le cycle du carbone et en particulier du dioxyde de carbone dans le manteau terrestre. Une particularité des carbonates est qu'ils peuvent dissoudre facilement le dioxyde de carbone, avec une solubilité deux cents fois plus grande que pour d'autres sels fondus. Ceci ouvre par exemple **la voie à la valorisation ou au stockage du CO₂** dans ces milieux. Cependant le mécanisme à l'origine de ce phénomène n'est pas bien compris. Des travaux récents du Pôle de Physico-Chimie Théorique (UMR 8640 – PASTEUR) du Département de Chimie de l'ENS en collaboration avec l'Institut de Recherche de Chimie Paris, publiés dans Nature Chemistry, lèvent le voile sur ce mystère.



Par des simulations de dynamique moléculaire, les auteurs expliquent cette solubilité par un équilibre chimique entre le CO₂ moléculaire et une nouvelle espèce, l'ion pyrocarbonate C₂O₅²⁻. Mais plus étonnant encore, ces simulations numériques prédisent que la diffusion du CO₂ dans les carbonates fondus est rendue très rapide par un mécanisme en tout point analogue au transport de proton dans l'eau, par un mécanisme dit de Grötthuis. Dans les carbonates fondus, le transport de CO₂ semble avoir lieu par transferts successifs d'anions O²⁻, ayant pour intermédiaire l'ion

pyrocarbonate. Ceci ressemble à course de relais avec passage de témoin mais ici tous les ions carbonates portent un témoin tandis que le CO₂ n'en dispose pas. Le CO₂ peut cependant récupérer un témoin de son voisin, qui sera alors déficitaire et récupérera alors à son tour un témoin d'un autre ion carbonate, et ainsi de suite.

Le mécanisme de Grötthuss semble alors beaucoup plus général que ce qui était jusqu'alors envisagé. Du point de vue du CO₂, cela change notre description du transport dans les systèmes contenant des carbonates, comme par exemple à travers les membranes mixtes oxyde-ion carbonate-ion utilisées pour la séparation électrochimique du CO₂. Plus généralement, cela suggère que des mécanismes similaires peuvent avoir lieu dans d'autres sels fondus, comme des sels fluorés par exemple.

Source :**Carbon dioxide transport in molten calcium carbonate occurs through an oxo-Grotthuss mechanism via a pyrocarbonate anion**

Dario Corradini^{1, 2, 3}, François-Xavier Coudert⁴, and Rodolphe Vuilleumier^{1, 2, 3}

¹Department of Chemistry, Ecole Normale Supérieure - PSL Research University, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

²Sorbonne Universités, UPMC Univ. Paris 06, PASTEUR, 75005 Paris, France

³CNRS, UMR 8640 PASTEUR, 75005 Paris, France

⁴PSL Research University, Chimie ParisTech - CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, 75005 Paris, France

Nature Chemistry, 2016, Feb.

doi:10.1038/nchem.2450

Contact Chercheur :

Rodolphe VUILLEUMIER, Professeur ENS
UMR 8640 PASTEUR (ENS/PSL/CNRS/UPMC)
rodolphe.vuilleumier@ens.fr

François-Xavier COUDERT, CR CNRS
Institut de Recherche de Chimie Paris (PSL/Chimie ParisTech/CNRS)
fx.coudert@chimie-paristech.fr

Contact Communication Chimie :

Nicolas LEVY, Responsable Communication Chimie,
Département Chimie ENS (www.chimie.ens.fr)
nicolas.levy@ens.fr