

Mme Pinar CITLI

Département SUBATECH - Laboratoire SUBATECH

Soutiendra publiquement ses travaux en vue de l'obtention du grade de

Docteur d'IMT Atlantique

Dans le cadre de la co-accréditation de thèse d'IMT Atlantique au sein de l'école doctorale 3MG

Le lundi 26/02/2024 à 10h00 à Campus de Nantes - Amphi BESSE

Modélisation moléculaire de l'adsorption de l'hydrogène gazeux dans les environnements argileux hydratés dans le contexte de stockage géologique des déchets radioactifs

Résumé : Les formations riches en argile sont considérées comme des roches hôtes optimales pour les installations de stockage géologique en profondeur des déchets radioactifs de haute activité. Des gaz, notamment le H₂, peuvent se former au cours du stockage à long terme par des mécanismes tels que la corrosion anoxique et la radiolyse de l'eau, pouvant potentiellement entraîner une accumulation de pression de gaz et des fractures dans la roche hôte environnante. Une compréhension à l'échelle moléculaire du comportement du H₂ dans l'argile est essentielle pour un stockage géologique sûr et efficace, ainsi que pour le développement de stratégies efficaces. Dans cette thèse, la montmorillonite, largement présente dans les compositions de roches hôtes et utilisée comme barrière technique, est choisie comme modèle d'argile. Des simulations atomistiques de l'adsorption de H₂ dans les intercalaires des montmorillonites hydratées de Na, Ca et Cs sont réalisées à 25, 50 et 90°C, jusqu'à 120 bar, en utilisant des méthodes de Monte Carlo et hybrides. À cette fin, l'impact de plusieurs autres facteurs, y compris la présence d'eau et la taille des pores, est étudié, dans le but d'améliorer la compréhension fondamentale des processus physiques et chimiques régissant les interactions entre H₂, les solutions aqueuses et l'argile. De plus, l'adsorption d'hydrogène dans des conditions extrêmes est explorée pour déterminer le point de saturation dans les argiles.

Mots-clés : Simulations moléculaires, adsorption, argiles, montmorillonite, hydrogène

Le jury est composé de :

M. Andrey KALINICHEV	- Directeur de recherche	- IMT Atlantique
M. Abdesselam ABDELOUAS	- Professeur	- IMT Atlantique
Mme Pascaline PRE	- Professeur	- IMT Atlantique
M. Ozgur YAZAYDIN	- Professeur	- University College London
M. Ali ZAOUÏ	- Professeur	- Polytech'Lille
Mme Virginie MARRY	- Professeur	- Sorbonne Université