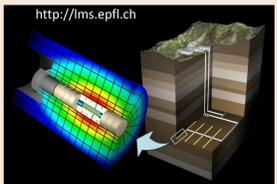


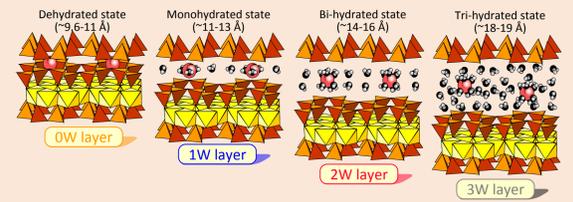
Stockage de déchets ménagers



Stockage de déchets radioactifs

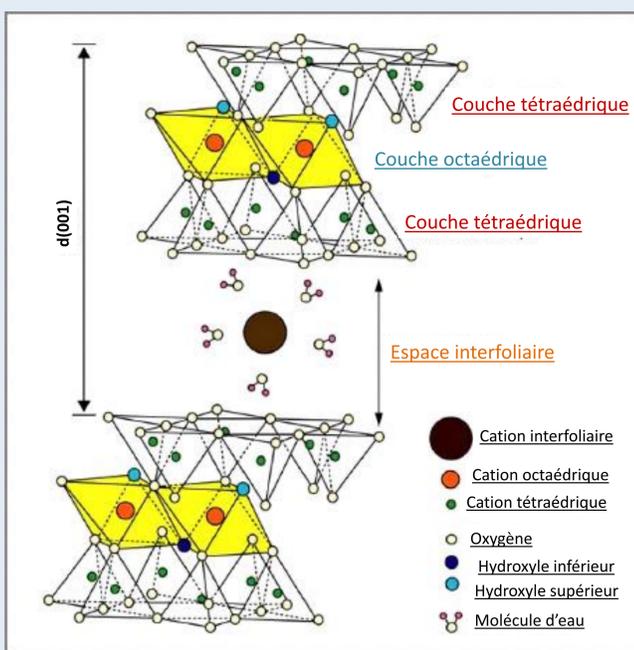
Pourquoi les smectites ?

Les argiles gonflantes (smectites) sont souvent utilisées comme barrière ouvragée pour le stockage des déchets ménagers, industriels ou radioactifs. En conditions non saturées en eau, ~80% de l'eau contenue dans une barrière argileuse est localisée dans les espaces interfoliaires de ces argiles. Cette eau interfoliaire va donc être un vecteur privilégié pour la diffusion des polluants au sein de la barrière ouvragée. Il est donc essentiel d'en déterminer la structure et la dynamique. Ce travail consiste donc à synthétiser des smectites offrant une large gamme de densité et de localisation de charge pour mieux comprendre et prédire les paramètres contrôlant l'hydratation de ces structures minérales et la dynamique de cette eau interfoliaire.



Les smectites c'est quoi ?

Formule structurale générale des smectites trioctaédriques :



Adapté d'après Grim (1962 – Appl. Clay Miner. McGraw-Hill, New York)

Méthode de synthèse

Les smectites sont synthétisées selon un protocole qui s'inspire de celui décrit par Hamilton & Henderson (1968) puis amélioré par Robert et al. (1993).

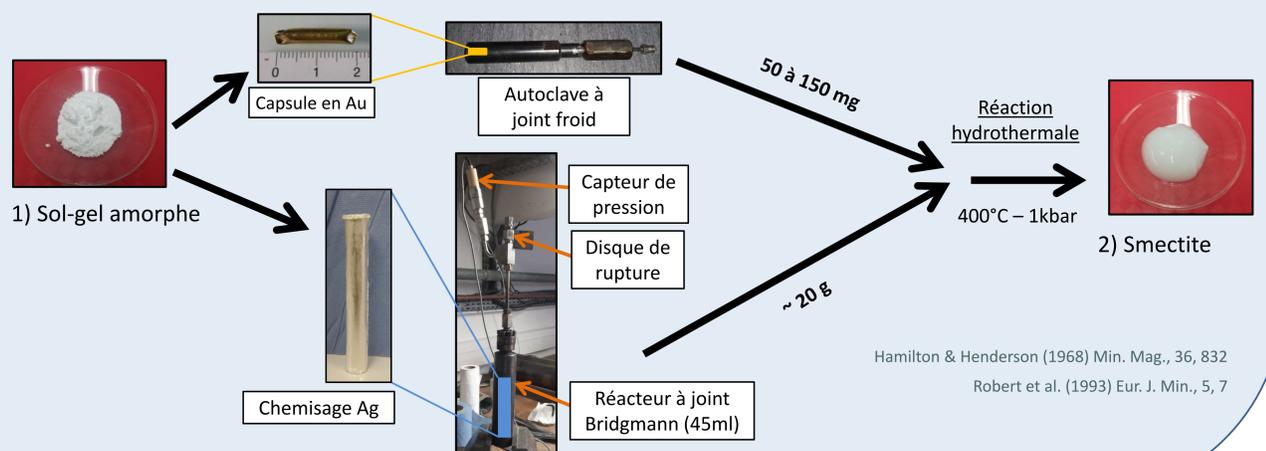
La préparation s'effectue en deux étapes :

1) La première étape consiste à **co-précipiter un sol-gel (amorphe) silicaté** en milieu basique. Les composés précurseurs sont introduits sous différentes formes et dans l'ordre suivant :

- Be^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+} , Fe^{3+} = solutions aqueuses de nitrates concentrées
- les éléments alcalins (Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+) et alcalino-terreux autre que Be et Mg (Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+}) = sels de carbonates
- TEOS (TetraEthylOrthoSilicate) = source de silice
- NH_4OH → réaction d'hydrolyse

- Les **quantités stoechiométriques** de réactifs utilisées pour la synthèse sont calculées en fonction de la **quantité de charge** (x+y) et sa **localisation** (valeurs respectives de x et/ou y)

2) La seconde étape consiste à **crystalliser ce gel par réaction hydrothermale** à 400°C et 1kbar de pression (conditions supercritiques).



Des smectites synthétiques pour faire quoi ?

Modéliser la structure et la dynamique de l'eau interfoliaire pour prédire la mobilité des contaminants

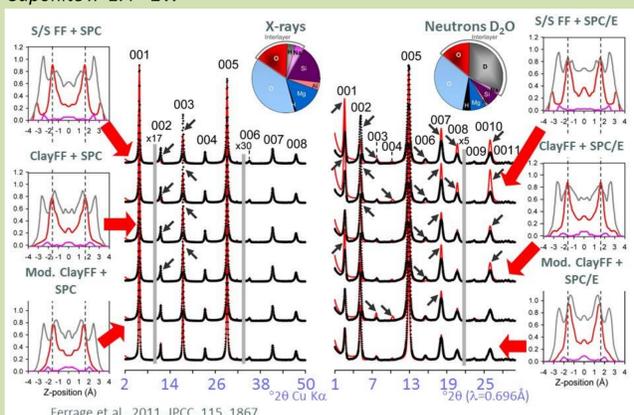
1- Synthétiser des **composés purs et homogènes** avec des **quantités** et des **localisations de charge** (x+y) qui varient.

→ Optimisation des paramètres d'interactions **Lennard-Jones** par la modélisation des structures

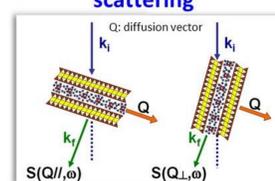
2- « Comment l'eau bouge dans l'espace interfoliaire ? »

Les paramètres d'interactions **Lennard-Jones** optimisés permettent de **prédire** les mesures de QENS sans autre paramètre ajustable

Saponite x=1.4 - 2W



Quasi-elastic neutron scattering



Inter-atomic potentials validated both for structure and dynamics of interlayer H₂O (multiple constraints in both cases)

Enhanced predictive ability

Michot et al., 2012, J Phys Chem, C116, 16619
Jiménez-Ruiz et al., 2012, J Phys Chem, C116, 2379

