

ORGANISATION ET DYNAMIQUE AUX INTERFACES ARGILES-FLUIDES

Baptiste Dazas^{1,*}

¹ Department of Civil and Environmental Engineering and Princeton Environmental Institute, Princeton University, E-208 E-Quad, Princeton, New Jersey 08544, United States

*baptiste.dazas@princeton.edu

Les minéraux argileux gonflants (smectite, vermiculite) sont omniprésents en conditions de surface et subsurface : sols, sédiments et roches sédimentaires. Dans ces contextes, ces minéraux exercent une influence sur les flux de matières en raison de leur surface spécifique élevée et leur affinité pour l'eau ainsi que de nombreux contaminants. Ces propriétés sont particulièrement intéressantes lorsque des milieux riches en smectites sont utilisés comme barrières géologiques naturelles ou artificielles, dans le cadre de l'isolement de déchets dangereux. Dans ces barrières, l'eau interfoliaire peut constituer plus de 80% de l'eau interstitielle. Par conséquent, le comportement de l'eau et des solutés dans les nanopores argileux peut fournir des informations importantes sur la compréhension du transport et donc sur le devenir des polluants. Dans ce cadre général, le but de ce séminaire est de présenter, au travers de mes recherches, mon implication dans l'étude des minéraux argileux en interaction avec différents fluides. La première partie de la présentation décrira des résultats de simulations de diffraction des rayons X (DRX) et de simulations atomistiques (Monte-Carlo) sur l'organisation de l'eau au contact des argiles et la dépendance aux paramètres structuraux de ces dernières (quantité et emplacement du déficit de charge, hydrophobicité ou hydrophilie de surface résultants de la présence de groupes structuraux F ou OH). La deuxième partie de la présentation portera sur un examen de la dynamique de l'eau dans ces nanopores argileux à l'aide de la spectroscopie diélectrique à large bande (BDS) couplée aux modélisations de dynamique moléculaire. En effet, ces méthodes sont idéalement adaptées à la compréhension de la dynamique des espèces ioniques sur les échelles de temps relatives à leurs mobilités sur les surfaces argileuses (10ps à 10ms). Sur la base des études que j'ai effectuées, nous verrons comment ces techniques peuvent apporter des informations fondamentales nécessaires à la compréhension de la réactivité des minéraux argileux dans les milieux naturels (sols, roches).