

Avis de Soutenance

Monsieur Armin MOZHDEHEI

Sciences de l'Univers

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Rôle Macroscopique des Interfaces Solide-Liquide et Liquide-Gaz sur l'Interaction Eau-Roche en Milieu Poreux

dirigés par Monsieur LIONEL MERCURY et Madame Aneta SLODCZYK

Ecole doctorale : Energie, Matériaux, Sciences de la Terre et de l'Univers - EMSTU

Unité de recherche : ISTO - Institut des Sciences de la Terre d'Orléans

Soutenance prévue le **vendredi 12 mai 2023** à 14h30

Lieu : Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, 1A Rue de la Ferrollerie Campus Géosciences, 45100 Orléans

Salle : E018 Amphi

URL salle virtuelle :

<https://cnrs.zoom.us/j/97511173942?pwd=WlIiVjN3Ikd0F0dmcxUnNGSHY3Z3JJZz09>

Composition du jury proposé

| | | |
|------------------------------|---|------------------------|
| M. LIONEL MERCURY | Institut des Sciences de la Terre d'Orléans - UMR 7327 Université d'Orléans, CNRS, BRGM | Directeur de thèse |
| Mme Sophie LE CAER | UMR 3685 NIMBE : Nanosciences et Innovation pour les Matériaux, la Biomédecine et l'Énergie | Rapporteuse |
| M. Johannes LÜTZENKIRCHEN | Karlsruhe Institute of Technology | Rapporteur |
| Mme Aneta SLODCZYK | Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, CEMHTI, UPR 3079 CNRS | Co-directrice de thèse |
| Mme Marialore SULPIZI | RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM | Examinatrice |
| M. Mohamed AZAROUAL | Institut des Sciences de la Terre d'Orléans - UMR 7327 Université d'Orléans, CNRS, BRGM | Examineur |
| M. Patrice CREUX | Université de Pau et des Pays de l'Adour | Examineur |

Mots-clés : Variation de réactivité, Thermodynamique, Spectroscopie vibrationnelle, Interface/Interphase, Pont capillaire,

Résumé :

Dans l'interaction eau-roche, l'aire de surface des interfaces est étudiée depuis longtemps par les géochimistes, mais la réactivité locale le long des interfaces joue également un rôle important. Il est considéré comme acquis que l'utilisation des propriétés volumiques des phases en interaction décrit bien les forces motrices macroscopiques et le transfert de masse résultants. Cependant, les observations directes sur le terrain de la transition de phase ont défié le classicisme, démontrant que la taille des pores, la distance à l'interface solide ou la présence d'une interface liquide-air incurvée peuvent entraîner les transitions de phase le long de voies réactionnelles inattendues. Deux types d'expériences (à l'échelle de l'interface, principalement centrée sur l'interface eau-solide, et à l'échelle du pore tournée vers l'influence de ponts capillaires sur la géochimie in-pore). Tout d'abord, des mesures de micro-spectroscopie infrarouge aux interfaces, utilisant un micro-faisceau (source laser et synchrotron) et un microscope confocal, ont été réalisées sur une cavité micrométrique fermée (inclusion fluide) pour explorer la variation de l'énergie vibratoire de l'eau en fonction de la distance à l'interface solide. Les données hyperspectrales ont affiché une signature dépendant de la distance pour l'eau sur une épaisseur de $1 \pm 0,5 \mu\text{m}$ en raison de l'état de surface du solide (effet hydrophobe) et des énergies de surface résultantes. La conversion de la signature spectrale près de l'interface du quartz en énergie libre de Gibbs correspond à 600 J/mol à température ambiante (22 °C) et à 1000 J/mol à haute température (155 °C). Par conséquent, ce potentiel chimique croissant modifie la réactivité le long d'une telle interface solide-liquide, et affecte une quantité importante d'eau. Il en ressort que les interactions eau-roche dans les pores, les canaux et les cavités doivent tenir compte de la chimie de surface des minéraux et pas seulement de leur composition, de leur forme ou de leur taille. Deuxièmement, la variation de réactivité dans un réseau de pores est étroitement liée à la présence (ou non) de ponts capillaires liquide-air et à leur intensité capillaire. Nous avons exploité des puces nanofluidiques pour établir la

capillarité de manière contrôlée en ajustant l'humidité relative, avec laquelle nous explorons les équilibres eau-roche-gaz à divers états capillaires conduisant à une transition de phase. Le phénomène de cavitation de l'eau et la cinétique de l'évaporation concernant la forme des pores montrent l'effet de l'humidité relative sur l'effet capillaire. Ces mesures remettent en question l'utilisation systématique des données volumiques sur les phases pour évaluer et prédire comment les interactions eau-roche se produisent et évoluent avec le temps dans les milieux poreux, en particulier dans les aquifères non saturés en eau.