

## Avis de Soutenance

Monsieur Pengyuan GAO

Sciences de l'Univers

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

*Études théoriques de l'interaction entre l'U(VI) et les surfaces minérales*

dirigés par Monsieur Christophe TOURNASSAT et Monsieur Zhijun GUO  
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

Cotutelle avec l'université "Lanzhou University" (CHINE)

Soutenance prévue le **vendredi 24 novembre 2023** à 9h00  
Lieu : No. 222, Tianshui South Road, 730000, Lanzhou, China.  
Salle : Room 1126, Science and Engineering Building

### Composition du jury proposé

M. Christophe TOURNASSAT	University of Orléans, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (ISTO)	Directeur de thèse
M. Zhijun GUO	School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University	Directeur de thèse
M. Zhi QIN	Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences	Rapporteur
M. Qiaohui FAN	Northwest Institute of Ecological Environment and Resources, Chinese Academy of Sciences	Rapporteur

**Mots-clés :** U(VI), Silice, Montmorillonite, Simulation de premiers principes, Structure de complexation de surface, Modélisation de la complexation de surface

### Résumé :

L'étude des caractéristiques d'adsorption des principaux radionucléides dans la roche d'accueil et les matériaux tampons/de remblayage des dépôts géologiques profonds pour les déchets de haute activité (DHA) est fondamentale pour la conception et l'évaluation de la sûreté. L'uranium est un radionucléide très intéressant en raison de son abondance relativement élevée dans la nature et de son rôle central dans le cycle du combustible nucléaire, tandis que l'U(VI) est l'état d'oxydation le plus pertinent dans la plupart des eaux de surface et des eaux souterraines oxygénées. L'adsorption de l'U(VI) sur les surfaces de divers minéraux a été largement étudiée par des expériences conventionnelles en batch et des techniques spectroscopiques. Des sites de complexation possibles et des espèces de surface ont été proposés, mais il est encore difficile d'obtenir des informations précises sur le plan mécanique au niveau microscopique. Les informations au niveau moléculaire sont essentielles pour comprendre les mécanismes physico-chimiques impliqués dans les expériences et pour développer des modèles prédictifs pour les environnements concernés. Les calculs théoriques se sont avérés être un outil efficace pour étudier les processus chimiques des radionucléides à l'interface minéral-eau. Dans cette thèse, les caractéristiques structurales et les mécanismes d'adsorption des espèces d'U(VI) sur les surfaces des principaux minéraux constitutifs du granite (orthoclase et quartz) et des matériaux tampons/remblais (montmorillonite) du dépôt géologique profond ont été calculés à l'aide de calculs de premiers principes. Les mécanismes de polymérisation des espèces d'U(VI) en solution aqueuse et sur les surfaces minérales ont été étudiés. En outre, l'effet des changements structurels locaux de la montmorillonite sur la nature de la réaction d'adsorption à la surface a également été étudié de manière systématique. Mots-clés : U(VI) ; Orthoclase ; Silice ; Montmorillonite ; Simulation de premiers principes ; Structure de complexation de surface ; Structures électroniques ; Energie libre ; Constante d'acidité ; Modélisation de la complexation de surface.