

Ecole Doctorale : SMRE

**Laboratoire : Unité de Catalyse
et de Chimie du Solide (UCCS)**

**Discipline : Molécules et
Matière Condensée**

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : FORLER Nina

N° d'ordre : 40485

JURY :

Directeur de Thèse : Lionel Montagne, Professeur, Université Lille 1 Sciences et Technologies

Co-Directeur : Laurent Delevoye, CR CNRS HDR, Université Lille 1 Sciences et Technologies

***Rapporteurs : Jean-Jacques Videau, DR CNRS, Université Bordeaux 1
Frédéric Angeli, Ingénieur CEA HDR, CEA Marcoule***

Membres : Gilles Silly, Professeur, Université Montpellier 2

TITRE DE LA THESE :

Etude Multinucléaire du Vieillissement des Verres de Phosphate Modèles sous Atmosphère Humide

RESUME :

Les travaux de cette thèse portent sur la compréhension du processus du vieillissement des verres de phosphate à la base des études de résonance magnétique nucléaire (RMN) des solides.

Vieillissement se traduit dans ce cas par l'attaque aqueuse du verre sous atmosphère humide. Ce processus est d'un intérêt particulier dans tous les domaines où une haute résistance des verres de phosphate contre cette attaque constitue une propriété essentielle. Notamment c'est le cas pour la vitrification des déchets nucléaires.

Dans le cadre de cette étude, des systèmes modèles ont été étudiés ($\text{Na}_2\text{O-P}_2\text{O}_5$ et $\text{Na}_2\text{O-Al}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$) pour obtenir une idée des changements structuraux qui ont lieu pendant l'attaque aqueuse.

La résonance magnétique multinucléaire des solides (^1H , ^{27}Al , ^{31}P et ^{17}O) étant l'outil principal, des expériences en 1D et en 2D permettent de caractériser l'environnement proche des noyaux ainsi que leur environnement intermédiaire (connectivité hétéro- et homonucléaire).

L'interprétation des données RMN du noyau oxygène-17 est accompagnée d'une approche complémentaire. Des paramètres RMN calculés de l'oxygène-17 (DFT / GIPAW) des hydrogénophosphates cristallines ont été vérifiés et validés expérimentalement.

Des corrélations entre les paramètres RMN de l'oxygène-17 (δ_{CS} , δ_{iso} , C_Q , η_Q) et son environnement structural ont été obtenues. Ces dernières permettent de caractériser les environnements du noyau oxygène-17 qui sont générés pendant le vieillissement d'un verre $\text{Na}_2\text{O-P}_2\text{O}_5$ (NaPO_3).

Soutenance le Mardi 25 Janvier 2011 à 10 heures 30

Bâtiment C7 ENSCL Amphithéâtre PETIT