

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **06 février 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur COURTNEY Célian**

Titre de la thèse : : « *Etude de la relation entre la structure et les propriétés de matériaux fonctionnalisés à l'argent pour l'adsorption des gaz nobles* »



Résumé

Dans le cadre du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires (TICE), le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) développe et met en œuvre des systèmes de détection d'essais nucléaires au sein du Système de Surveillance International (SSI), dont le Système de Prélèvement d'Air en Ligne avec Analyse des radioXénon Nouvelle Génération (SPALAX NG). Ce système requiert l'utilisation de matériaux adsorbants afin de capter et concentrer les radioxénon, marqueurs de l'activité nucléaire présents dans l'air à l'état de traces. Actuellement, les zéolithes fonctionnalisées à l'argent sont reconnues comme matériaux les plus efficaces pour l'adsorption du xénon à basse pression et sont utilisées dans les stations du SSI. Toutefois, l'origine des écarts de performances entre les zéolithes, et plus particulièrement l'influence de la structure du matériau, n'a pas été identifiée et constitue un des verrous dans l'optimisation du SPALAX NG.

Dans ces travaux de thèse, les phénomènes régissant l'adsorption du xénon au sein de zéolithes fonctionnalisées à l'argent ont été étudiés. La combinaison de la mesure de la capacité d'adsorption en xénon de plusieurs zéolithes (MFI, BEA, MOR) avec de nombreuses techniques de caractérisation structurale a permis d'approfondir les connaissances sur la relation entre la structure de la zéolithe et ses propriétés d'adsorption du xénon. Ces travaux ont mis en évidence une relation entre certains paramètres structuraux de la zéolithe et la spéciation de l'argent, conduisant aux différences de performance observées. Ceux-ci ont été complétés par des simulations DFT qui avaient à la fois pour but de mieux comprendre la liaison entre l'argent et les gaz nobles sur le plan fondamental et d'étudier l'influence de la zéolithe sur la phase active durant l'adsorption. Il ressort de l'étude que certains défauts présents au sein des zéolithes ont un rôle majeur dans la spéciation de l'argent après fonctionnalisation et par conséquent sur les performances de ces dernières. Les espèces chargées au sein des pores de la zéolithe semblent constituer les sites forts de l'adsorption du xénon à basse pression.

