

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **21 octobre 2025**

Nom de famille et prénom de l'auteur. e : **Madame Chloé SANZ**

Titre de la thèse : Développement d'un potentiel de réseau de neurones pour des particules d'argile. Une étude type avec la pyrophyllite

Résumé



Le devenir des micro-polluants organiques dans nos sols est fortement lié à leurs interactions avec les minéraux des sols, particulièrement les argiles car elles possèdent une grande surface spécifique et capacité d'échange ionique. Hors, ces interactions ne sont pas encore totalement comprises. En plus d'études expérimentales, les interactions entre molécules organiques et minéraux argileux sont étudiées par simulations atomistique. L'utilisation de ces techniques entraîne un dilemme entre méthode avec haute précision mais fort coût computationnel telle la théorie de la fonctionnel de la densité (DFT) ou méthodes moins coûteuses mais à précision variable telle la dynamique moléculaire classique. De nouvelles méthodes basées sur l'apprentissage automatique émergent approximant des surfaces d'énergie potentiel en entraînant des réseaux de neurones sur des données provenant de la DFT permettant des simulations haute échelle avec une précision approchant celle de la DFT. Lors de ce travail de thèse, un potentiel de réseau de neurones (NNP) pour des simulations de pyrophyllites, une argile dioctaédrique où les couches tiennent par interactions de van der Waals, a été créé avec la méthode de Behler-Parinello utilisant un réseau de neurones à haute dimension. La création de la base de données est cruciale pour la précision du NNP ; le processus itératif connu sous le nom « adaptive learning » a été mis en place pour obtenir une base de données représentative et diverse. Un NNP est purement mathématique, sa validation est donc cruciale. La validation s'est faite en comparaison avec la DFT (sur laquelle le NNP a appris), ClayFF un champ de forces classique développé pour les argiles, ainsi que des résultats expérimentaux, sur des propriétés structurales, l'énergie d'exfoliation, des propriétés élastiques, et des propriétés vibrationnelles. La « portabilité » de notre base de données, i.e. la précision de NNPs entraînés sur cette base avec des

descripteurs et modèles différents a été étudié, montrant l'importance d'avoir une base de donnée représentative.

Mots-clés : Potentiel de réseau de neurones, Minéraux argileux, Dynamique moléculaire