

L'Ecole doctorale : Interfaces : approches interdisciplinaires, fondements, applications
et innovation

et le Laboratoire de recherche NIMBE - Nanosciences et Innovation pour les
Matériaux la Biomédecine et l'Énergie

présentent

l'AVIS DE SOUTENANCE de Monsieur Erwan CHESNEAU

Autorisé à présenter ses travaux en vue de l'obtention du Doctorat de l'Université Paris-Saclay, préparé à
l'université de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines en :

Physique

**« Développement d'une nouvelle approche pour la modélisation structurale
de verres boratés: combiner Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) et
Dynamique Moléculaire »**

le JEUDI 26 SEPTEMBRE 2019 à 14h00

à

Amphi Bloch

CEA Paris-Saclay L'Orme des Merisiers Saint-Aubin 91191 GIF-sur-YVETTE CEDEX

Membres du jury :

M. THIBAUT CHARPENTIER, CEA-E6, CEA Paris-Saclay, FRANCE - Directeur de these

M. Franck FAYON, Directeur de Recherche, CEMHTI-CNRS UPR3079, FRANCE - Rapporteur

Mme Simona ISPAS, Maître de Conférences, Laboratoire Charles Coulomb (L2C) - Université de Montpellier,
FRANCE - Rapporteur

Mme Charlotte MARTINEAU-CORCOS, Maître de Conférences, Institut Lavoisier de Versailles (ILV) - UMR
8180 (CNRS/UVSQ), FRANCE - Examineur

M. Laurent CORMIER, Directeur de Recherche, Institut de minéralogie, de physique des matériaux et de
cosmochimie UMR 7590 - Sorbonne Université/CNRS/MNHN/IRD, FRANCE - Examineur

M. Jean-Marc DELAYE, Ingénieur de Recherche, CEA Marcoule, FRANCE - Examineur

« Développement d'une nouvelle approche pour la modélisation structurale de verres boratés: combiner Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) et Dynamique Moléculaire »

présenté par Monsieur Erwan CHESNEAU

Résumé :

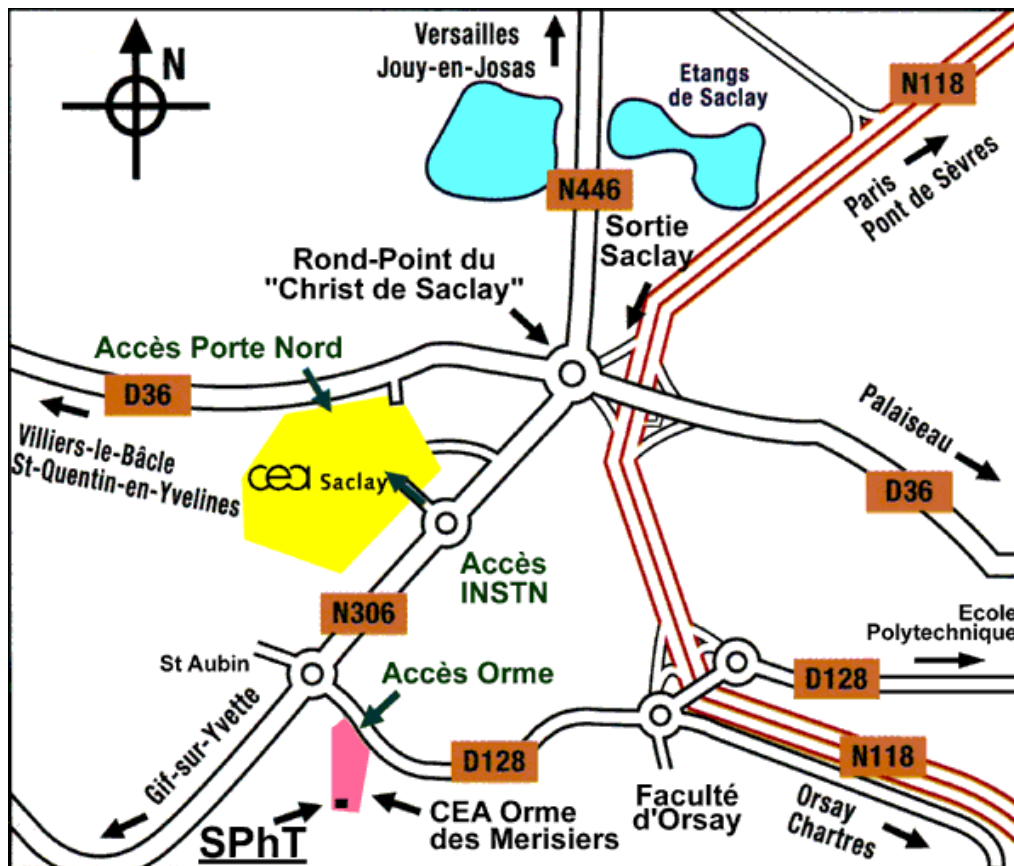
Les verres sont des matériaux utilisés dans de très nombreux domaines. Cependant leur structure reste à ce jour peu connue du fait de l'absence d'ordre à longue distance rendant difficile la résolution de la structure à l'échelle atomique. Il est admis que les verres sont constitués d'un enchaînement désordonné d'unités élémentaires par exemple des triangles et tétraèdres de bore dans le cas des verres de borates. La résonance magnétique nucléaire (RMN) a démontré être une technique de choix pour l'étude des verres, permettant de mesurer la proportion de chaque unités. Toutefois, la résolution structurale du verre reste aujourd'hui un enjeu scientifique majeur afin de mieux comprendre les relations propriétés-composition. Cette thèse a pour objectif de développer des méthodes combinant des expériences de RMN 1D et 2D avec des calculs DFT de paramètres RMN effectués sur des modèles numériques afin de caractériser la signature spectrale de l'ordre à moyenne distance. Sur une première série de verres de borates de sodium, il a été mis en évidence que seul la dynamique moléculaire (DM) ab-initio permet de reproduire des unités superstructurale telle que des anneaux, qui ont pu être caractérisées expérimentalement notamment grâce à la prise en compte fine des effets de distributions des paramètres RMN. La deuxième série sont des verres d'aluminoborate de lanthane pour laquelle les simulations par DM ne permettent pas un accord satisfaisant avec l'expérience. De ce fait, nous avons exploré une méthode par Reverse Monte Carlo contraintes par les données expérimentales. Cette méthode permet d'améliorer significativement l'accord des modèles avec l'expérience et reste donc à poursuivre.

Abstract :

Glasses are materials used in many fields. However, their structures still not well known because of the lack of long range order, making it difficult to extract the structural information of these materials. It is accepted that the glassy network is made of many elementary unit chains, being boron triangles and tetrahedron in the case of borate glasses. Nuclear magnetic resonance (NMR) has proven to be a vital characterization technique for the glasses study. It allows the measurement of proportion of each unit. The determination of the structural resolution of glasses remains a major scientific challenge for understanding of the relationship between the glass properties and its elemental compositions. This thesis aims to develop new NMR approach combining 1D, 2D and oxygen-17 NMR with DFT-GIPAW calculations on numerical models in order to characterize the intermediate range order NMR fingerprint. The first study is on sodium borate glasses. It highlighted that only ab-initio molecular dynamics (MD) can reproduce the boron rings, which have been confirmed by the NMR data, taking into account of the fine NMR parameters distributions effects. The second study is on aluminoborate glasses. Unlike the previous, the computed MD structures are not in agreement with NMR data. Thereby, a different structural simulation is applied. Refined models have been determined by Reverse Monte Carlo by constraining few experimental NMR data. This method allows to significantly improve the agreement between simulated models and the experiment.

Rejoindre l'amphithéâtre Claude BLOCH à l'Orme des Merisiers :

L'amphi Claude Bloch (bât 773) se trouve sur le site de l'Orme des Merisiers, qui est une annexe du CEA, sur la route D128 à 100 m du rond-point de Saint Aubin avec la N306, rond-point qui dessert également le synchrotron Soleil (voir plan ci-dessous).



Pour vous rendre à l'Orme des Merisiers par les transports en commun :

Depuis Paris ou les aéroports, empruntez le RER B direction Saint-Rémy-lès-Chevreuse.

Soit :

- Descendez à la station Le Guichet : prenez le bus ligne 9 à la gare routière (Départs à 13h20 ou 13h35 pour des arrivées à 13h28 ou 13h43).
- Descendez à la station Massy-Palaiseau : prenez le 91.06 qui mène à l'Orme des Merisiers en 27 min (Départs à 13h05 ou 13h20 pour des arrivées à 13h32 ou 13h47)

Descendez du bus, rebroussez chemin de quelques pas, traversez la route : l'entrée de l'Orme des Merisiers se trouve sur votre gauche. Entrez et suivez la route pendant 8 minutes environ. L'amphi C. Bloch se trouve dans le bât 773 « SPHT » qui est tout au fond à droite (Bâtiment en brique).

Pour vous rendre à l'Orme des Merisiers par la route :

De l'ouest (Pont de Sèvres), empruntez la nationale N118 en direction de Bordeaux (sur environ 14 km) et sortez en suivant la direction Saclay pour atteindre immédiatement le rond-point Le Christ de Saclay (en travaux).

Du sud (Porte d'Orléans ou Porte d'Italie), prenez l'autoroute A6 (sur environ 10 km), continuez par l'A10 en direction de Palaiseau (sur environ 7 km). Quittez l'autoroute par la voie de gauche, en suivant la direction Centre Universitaire-Saclay pour prendre la D36 jusqu'au rond-point Le Christ de Saclay (à environ 7 km).

Une fois arrivé au rond-point Le Christ de Saclay, prenez la N306 en direction de Gif-sur-Yvette. A 2 km (au premier carrefour d'importance), prenez à gauche la direction CEA Orme des Merisiers par la D128. L'entrée principale est 200 m plus loin sur la droite.

A l'entrée du CEA Orme des Merisiers, roulez tout droit sur environ 600 m, puis tournez à droite et gardez-vous sur le parking, vous êtes devant l'entrée de l'IPhT et de l'amphi C. Bloch – bât 772.

