



Contribution ID: 36

Type: **Orale**

Modélisation réaliste de la spectroscopie électronique du Pa(IV) en solution aqueuse

Thursday, 11 July 2019 09:30 (15 minutes)

La spéciation des ions lanthanides (Ln) et actinides (An) dans les systèmes aqueux est de la plus haute importance pour la conception et le développement d'agents extractant sélectifs pour la séparation.

Parmi les techniques de spectroscopie, l'absorption UV-vis et la spectroscopie de fluorescence peuvent également être utilisées pour mieux caractériser la sphère de coordination Ln/An.

Cependant, pour ces éléments, en particulier pour les actinides, leurs propriétés dépendent en grande partie de leurs interactions avec leur environnement. En tant que tel, une modélisation pertinente devra explicitement prendre en compte les effets du milieu (interaction avec les ligands les plus proches et au-delà, effets de la température,...).

Notre groupe développe et utilise des outils automatisés et des modèles quantiques ou classiques appelés "ab initio" pour mieux comprendre et mieux caractériser les propriétés dynamiques et les propriétés liées à la structure électronique de systèmes moléculaires contenant des radioéléments en milieu liquide.

Dans le cadre de cette conférence, nous parlerons spécifiquement du développement de champs de force classiques associés à des calculs de pointe * ab initio *, afin de sonder les propriétés dynamiques et spectroscopiques de Pa (IV) en milieu aqueux.

Choix de session parallèle

5.2 La radio-chimie théorique aux interfaces physique/chimie et théorie/expérience

Primary author: RÉAL, Florent (Univ de Lille, Lab PhLAM)

Co-authors: Dr ACHER, Eléonor (CEA); Dr MASELLA, Michel (CEA); VALLET, Valérie (CNRS)

Presenter: RÉAL, Florent (Univ de Lille, Lab PhLAM)

Session Classification: Séance Parallèle