



Contribution ID: 135

Type: **Orale**

## Etude structurale en phase gazeuse de complexes anioniques de nitrate d'uranyle

*Thursday, 11 July 2019 09:45 (15 minutes)*

La structure et la réactivité des complexes de nitrate d'actinides fait l'objet de recherches approfondies car elles dictent l'élimination finale de ces métaux dans les processus industriels et l'environnement. En solution, l'étude de complexes de l'uranyle par des ions nitrates est difficile à réaliser de par la présence d'autres espèces et des effets de solvant. L'étude en phase gaz permet de s'affranchir de ces obstacles. De plus, des espèces chimiques exotiques non accessibles en solution peuvent aussi être obtenues, ce qui est intéressant d'un point de vue fondamental. Une avancée majeure dans la compréhension de la complexation de l'uranyle est venue des études spectroscopiques dans lesquelles un laser à électrons libres est utilisé pour obtenir les spectres vibrationnels de complexes d'uranyle; les complexes d'uranyle étant produits par ESI et piégés dans un FTICR/MS. Nous verrons que l'alliance de la méthode expérimentale de spectroscopie d'action (IRMPD) et des calculs théoriques est une méthode efficace pour l'étude de complexes provenant de la fragmentation de l'espèce  $[(UO_2)(NO_3)_3]^-$ . Les spectres IRMPD obtenus, sont systématiquement comparés aux spectres calculés par des méthodes de chimie quantique, pour les différents isomères possibles. Cette confrontation entre les spectres expérimentaux et ceux calculés a permis l'interprétation des bandes ainsi que la caractérisation des structures de plus basse énergie pour différents fragments obtenus.

### Choix de session parallèle

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

**Primary authors:** RENAULT, Eric (UAI0440984F); Dr MAURICE, Rémi (CNRS); Dr JIAN, Jiwen (Chemical Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, USA); VAN STIPDONK, Michael J. (Department of Chemistry and Biochemistry, Duquesne University, USA); TATOSIAN, Irena (Department of Chemistry and Biochemistry, Duquesne University, USA); BUBAS, Amanda (Department of Chemistry and Biochemistry, Duquesne University, USA); MARTENS, Jonathan (Chemical Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, USA); BERDEN, Giel (FELIX Laboratory, Radboud University, Netherlands); OOMENS, Jos (FELIX Laboratory, Radboud University, Netherlands); GIBSON, John K. (Chemical Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, USA)

**Presenter:** RENAULT, Eric (UAI0440984F)

**Session Classification:** Séance Parallèle