



Contribution ID: 37

Type: **Orale**

Modélisation moléculaire pour les radioéléments de la phase gazeuse à la phase solvatée

Thursday, 11 July 2019 08:30 (30 minutes)

Les approches de la modélisation moléculaire apportent des modèles virtuels aux échelles microscopique et nanoscopique des propriétés dynamiques, structurales, électroniques et magnétiques de complexes soit isolés en phase gazeuse soit dans un environnement complexe (solvant, solide, interface,...). Le développement et l'utilisation de ces approches dans un "laboratoire virtuel" sont d'autant plus pertinents lorsque l'on s'intéresse aux radioéléments, qui de par leur radio toxicité ne peuvent être étudiés que sous des formes peu concentrées d'"ultra-traces" et uniquement dans des laboratoires expérimentaux sécurisés.

Nous illustrerons les apports de la modélisation moléculaire s'appuyant sur la chimie quantique et la dynamique moléculaire pour la compréhension des propriétés de produits de fission, de lanthanides et d'actinides. Nous montrerons l'utilité des calculs de chimie quantique pour la caractérisation et à quantification des espèces volatiles de produits de fission.

La modélisation moléculaire permet aussi l'identification et la détermination des stoechiométries et géométries des espèces chimiques, en complément d'expériences d'EXAFS (« Extended X-ray Absorption Fine Structure »), mais aussi de prédire "in silico" leurs propriétés thermodynamiques. Nous présenterons le calcul de propriétés spectroscopiques de valence et d'ionisation d'halogénures (incluant la radioélément astate), qui sont le reflet de la structure électronique et des interactions locales.

Choix de session parallèle

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

Primary author: VALLET, Valérie (CNRS - Laboratoire PhLAM - Université Lille1)

Co-authors: RÉAL, Florent (Univ de Lille, Lab PhLAM); Dr SEVERO PEREIRA GOMES, André (CNRS)

Presenter: VALLET, Valérie (CNRS - Laboratoire PhLAM - Université Lille1)

Session Classification: Séance Parallèle