



Contribution ID: 259

Type: **Orale**

Stabilité des fluorures de protactinium en solution acide : étude par Dynamique Moléculaire Quantique

Thursday, 11 July 2019 10:15 (15 minutes)

La recherche en radiochimie fondamentale est principalement axée sur l'interaction dans l'environnement des radionucléides avec les ligands présents. Ces travaux conduisent à étudier les interactions entre actinides et ligands, afin de déterminer des données thermodynamiques et structurales des complexes formés. L'aspect simulation numérique est indispensable pour la confrontation avec l'expérience. L'avantage de calculs en température sur les simulations moléculaires standard à 0K est la possibilité de laisser évoluer naturellement un système vers sa structure d'équilibre et d'avoir accès de manière ab initio à sa géométrie et à son hydratation par exemple. Situé entre le thorium et l'uranium, le protactinium présente un seul degré d'oxydation stable en solution : Pa⁵⁺. En milieu fluorhydrique acide (10⁻³ M à 6-8 M) le protactinium forme l'anion PaF₇²⁻ qui est l'espèce prédominante mais à de plus hautes concentrations PaF₈³⁻ peut être observé. A faibles concentrations un grand nombre d'ions fluoro ou oxo-fluoro et d'hydroxydes sont attendus avec des stabilités plus ou moins grandes: PaF₉⁴⁻, PaF₈³⁻, PaF₇²⁻, PaF₆, PaF₅, PaF₄⁺, PaOF₅²⁻, PaOF₄⁻, PaOF₃, PaOF₂⁺, PaO₂F, PaO₃F₂⁻, PaO₄F₄⁻, PaO₅F₆⁻. Des calculs réalisés à 0K à l'aide du code de structure électronique ABINIT ont permis de déterminer la géométrie de ces ions en phase gaz ainsi que leur enthalpie de dissociation ce qui a permis d'exclure PaF₉ et PaO₅F instables.

Choix de session parallèle

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

Primary authors: SIBERCHICOT, Bruno (CEA – DAM – Ile-de-France); AUIPAIS, Jean (CEA – DAM – Ile-de-France); LE NAOUR, C. (Université de Paris-Sud, Institut de Physique Nucléaire, F-391406 Orsay, France)

Presenter: SIBERCHICOT, Bruno (CEA – DAM – Ile-de-France)

Session Classification: Séance Parallèle