

Etudes de molécules extractantes en solution: aspects structuraux et mécanistiques des effets de synergie.

Marc BAADEN, 3^{ème} année de thèse
Laboratoire MSM, 4, rue Blaise Pascal, 67000 Strasbourg, France

Saviez vous qu'une grande partie des déchets nucléaires est inoffensive ?
Une petite quantité est plus ou moins radioactive. Comment les trier ?

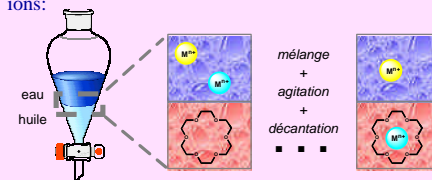
2. Que peut apporter la modélisation moléculaire ?

Les simulations aident à **comprendre** et parfois même **prédire** l'expérience. Ainsi on peut **améliorer** les procédés existants et **concevoir** de nouvelles molécules extractantes. On peut alors réduire le nombre d'expériences nécessaires, car:

- elles sont souvent **dangereuses** pour les chimistes ...
- ... et elles sont souvent **coûteuses**
- d'autres expériences ne peuvent pas être réalisées

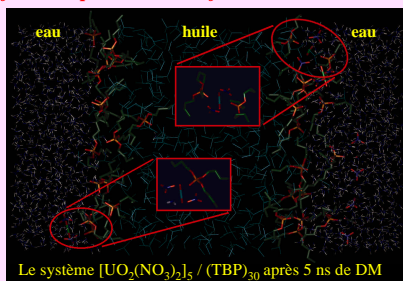
1. Comment ça marche ?

Les déchets solides sont solubilisés dans un acide fort. La solution résultante est soumise à l'**extraction liquide-liquide** pour séparer (trier) des ions radioactifs à vie longue (> 30 ans) d'autres ions:



4. Que montrent les simulations ?

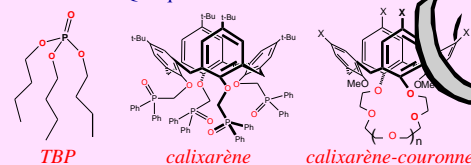
L'expérience nous dit que les molécules citées permettent de séparer des ions M^{n+} d'autres ions, pour ensuite pouvoir les traiter séparément et plus efficacement. L'extraction des ions a lieu, mais on ignore le mécanisme au niveau moléculaire. Les simulations peuvent aider à **expliquer comment se font la capture et le transfert des ions**.



Elles fournissent des **vues microscopiques** du système étudié.

3. Qu'est-ce qui a été simulé ?

Plusieurs systèmes d'extraction liquide-liquide connus expérimentalement ont été étudiés par **dynamique moléculaire**. Quelques molécules extractantes:



Ces ionophores sont utilisés pour capturer des ions tels que UO_2^{2+} (uranyle), Eu^{3+} (lanthanides), Cs^+ (alcalins).

5. Quels sont les premiers résultats ?

- l'**interface** eau / "huile" est importante
 - (i) c'est le lieu de rencontre des différentes espèces
 - (ii) les ionophores y restent (cf. surfactants)
- $(TBP)_{30}$ et $(TBP)_{60}$ ont été simulés à l'interface, des effets de **synergie** sont attendus
- l'**acidité** et la **force ionique** du milieu ont été étudiés
- la **structure** de plusieurs complexes ligand/cation a été prédite et analysée

Remerciements

Ce travail n'aurait pas pu être réalisé sans le soutien des Prof. G. Wipff et M. Burgard. Il a été supporté par CNRS-IDRIS et le MNERT.

Références