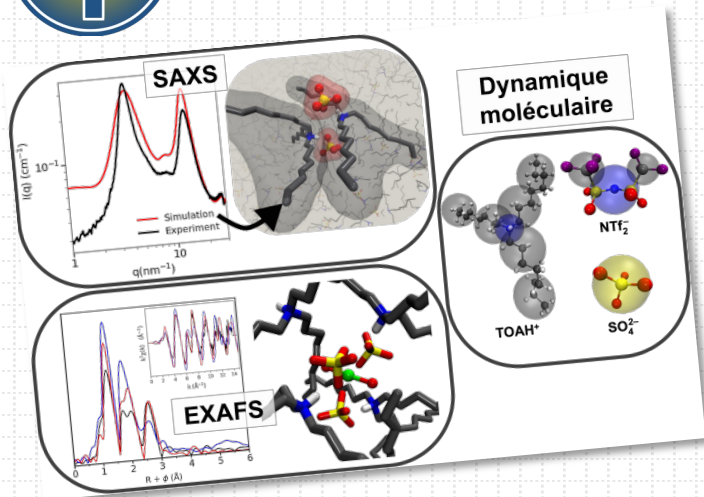




SOUTENANCE DE THÈSE



Jordan KLEIN

**Laboratoire Modélisation
mésoscopique et Chimie Théorique
(LMCT)**

Simulation des phénomènes synergiques des solutions ioniques rencontrées dans les procédés d'extraction de l'uranium



**Jeudi 22
octobre 2026**



9h00



**Auditorium
ICSM**

Cette thèse vise à comprendre les mécanismes gouvernant l'extraction de l'uranyle par des mélanges de liquides ioniques (TOAH^+ , NTf_2^- + $(\text{TOAH}^+)_2$, SO_4^{2-}), en reliant leur structure à leurs propriétés d'extraction, viscosité et sélectivité vis-à-vis du fer. Une approche combinant dynamique moléculaire atomistique et modélisation gros-grains a été développée et confrontée à des données SAXS et EXAFS. Avant contact avec le lixiviat, les simulations reproduisent fidèlement la structure du mélange et révèlent une organisation originale des anions en cage anionique, séparés par les chaînes alkyles des cations TOAH^+ . Après extraction, elles identifient l'espèce d'uranyle la plus stable comme un complexe trisulfate bidentate déshydraté, en accord avec l'EXAFS, et proposent un mécanisme expliquant la dépendance non linéaire de l'extraction à la composition du liquide ionique, lié à l'hydratation et à l'organisation des anions. Un modèle gros-grains a également été développé pour étudier les propriétés dynamiques de ces mélanges. Bien qu'il reproduise leur structure, il ne permet pas de prédire quantitativement leur viscosité. Les simulations révèlent néanmoins le rôle clé du réseau de liaisons hydrogène dans son augmentation non linéaire avec la teneur en SO_4^{2-} , les anions SO_4^{2-} formant des interactions plus fortes et plus nombreuses que les anions NTf_2^- . Enfin, une approche fondée sur le calcul des potentiels chimiques reproduit qualitativement l'évolution de la sélectivité de l'uranyle vis-à-vis du fer, tout en soulignant les limites des simulations classiques pour une prédiction quantitative.

Mots-clés : *Dynamique moléculaire ; Dynamique moléculaire gros-grains ; Dynamique moléculaire biaisée ; Extraction liquide-liquide ; Propriétés structurales ; Enthalpies libres de transfert*



**NOUS VOUS
ATTENDONS
NOMBREUX !**



**UNIVERSITÉ DE
MONTPELLIER**

