

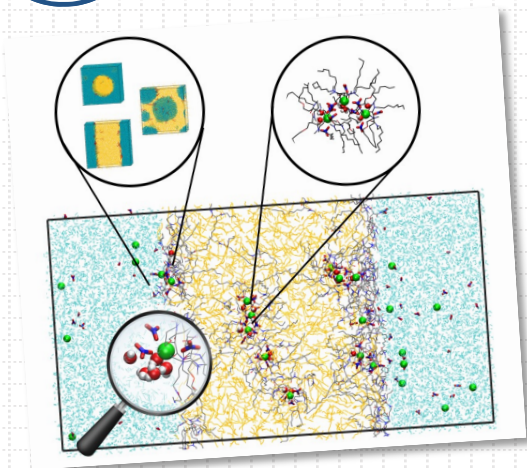


SOUTENANCE DE THÈSE

Lara ŽIBERNA

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

Simulation de l'équilibre et du transport des ions aux interfaces liquide-liquide



**Jeudi 20
novembre 2025**



14^h00



**Auditorium
ICSM**

Dans cette thèse, l'organisation structurale dans la phase organique « bulk », à l'interface, ainsi que le transport des ions dans des systèmes contenant les extractants DMDOHEMA, DMBTDMA et TODGA ont été étudiés par dynamique moléculaire classique. Tout d'abord, nous avons montré que l'approche de démixion, c'est-à-dire en partant de molécules distribuées aléatoirement, constituait la méthode optimale pour créer des interfaces. L'analyse a révélé différentes formes interfaciales en fonction du rapport entre les deux phases non miscibles, l'organisation des extractants influençant directement l'épaisseur de l'interface. Nous nous sommes ensuite concentrés sur les phases organiques « bulk » contenant des sels $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$ en présence des trois extractants. Pour caractériser les agrégats formés dans la phase organique, le code `CoordDynA_MD` a été développé. Tous les extractants forment des agrégats de type micelles inverses, dont la composition dépend de l'extractant utilisé. Nous avons montré qu'une augmentation de la concentration en $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$ accroît le nombre d'agrégats comportant plus d'un cation, sans modifier les stœchiométries moyennes des différents oligomères. Ces oligomères proviennent d'agrégats monomériques reliés par des liaisons hydrogène impliquant des molécules d'eau, des nitrates et les molécules extractantes, permettant ainsi la formation de ponts. Enfin, le transfert de $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$ de la phase organique vers la phase aqueuse a été étudié. Le mécanisme, gouverné par les liaisons hydrogène entre nitrates et molécules d'eau dans la phase aqueuse ainsi que par l'hydratation du cation, s'est révélé indépendant de l'extractant. En revanche, les coefficients de distribution et les temps de rétention varient, avec des temps de rétention plus courts pour les extractants capables de former de plus grands agrégats.

Mots-clés : Extraction liquide-liquide ; Interfaces ; Dynamique moléculaire ; Lanthanides



**NOUS VOUS
ATTENDONS
NOMBREUX !**



**UNIVERSITÉ DE
MONTPELLIER**

