

## Soutenance de thèse

Institut de Chimie Séparative de Marcoule / CEA Marcoule  
(UMR 5257, CEA, CNRS, Université Montpellier, ENSCM)

**JING WANG**

soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

### **Etude de l'interface liquide-liquide : Expérience et modélisation moléculaire**

Soutenance prévue le **mardi 2 mars 2021 à 9h00**

dans l'Auditorium de l'ICSM

La séparation des ions par extraction liquide-liquide (LL) ou extraction par solvant est un procédé clé utilisé dans diverses applications industrielles d'hydrométallurgie, en particulier dans le processus de retraitement du combustible nucléaire. Afin de mieux comprendre le transfert d'ions entre une phase aqueuse et une phase organique dans ce type de procédé il est important de comprendre i) les spéciations des différentes espèces ioniques et moléculaires respectivement dans chacune des deux phases en contact, qui définissent les différences de potentiel chimique entre les deux phases mais aussi ii) tous les phénomènes d'interactions moléculaires et supramoléculaires à l'interface qui sont à l'origine des barrières de potentiel pouvant influencer les cinétiques de transfert ionique. De nombreux résultats d'expériences sur les phases en volume existent et peuvent être maintenant interprétés structurellement à partir de simulations par dynamique moléculaire. Par contre cette même approche expérience/simulation corrélée au niveau de l'interface contenant des ligands et en équilibre avec les volumes adjacents n'a que très peu été explorée. Dans ce travail de thèse nous avons tout d'abord synthétisé un extractant de type diamide comportant un chromophore (MAD) afin de pouvoir exalter le signal d'optique non linéaire dans une expérience de génération de second harmonique qui s'avère être une technique pertinente pour sonder des interfaces fluides enfouies. Les différentes propriétés physicochimiques et extractants de cette molécule ont été étudiées ainsi que sa réponse en optique non linéaire. En parallèle, des boîtes de simulation par dynamique moléculaire ont été construites sur un diamide de référence mais aussi avec le nouveau ligand chromophore nous permettant de visualiser en fonction du temps les équilibres de répartitions des ligands entre la phase organique et l'interface LL. L'objectif qui était de comparer le signal SHG expérimental et simulé à partir des boîtes de simulation n'a pu être atteint car la réponse SHG de ce nouveau ligand s'est avéré plus complexe en révélant une réponse chirale dépendante de la concentration interfaciale du ligand. Néanmoins il est possible de suggérer que pour un extractant plus amphiphile et donc plus apte à s'organiser en surface et à s'agréger en solution, une couche de déplétion proche de l'interface pourrait générer une barrière de potentiel, source d'un transfert ionique plus cinétique que diffusif.

Mots clés : Extraction liquide-liquide ; Interface ; Modélisation Moléculaire ; Génération de Seconde Harmonique ; DMDOHEMA.

