

CONTRACTS DOCTORAUX 2021

Titre du projet de thèse : Éclaircir les propriétés de luminescence des éléments lanthanides et actinides par une double approche expérimentale et théorique.

Directeur de thèse : Florent Réal et Valérie Vallet

Co-directeur et co-encadrants (le cas échéant) : Nina Huitinnen, Norbert Jordan

Laboratoire(s) d'accueil : PhLAM/Institute of Resource Ecology (Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf)

(Co-)financement(s) envisagés & candidatures : PhLAM/Institute of Resource Ecology (Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf)

	Financier 1	Financier 2	Financier 3
Nom	I-SITE OVERSEE	HZDR	
%	50%	50%	
Acquis (O/N)	O	O	
Date de la demande			
Candidat-e-s			

Programme(s) éventuels de rattachement (CPER, Labex/Equipex, ANR, Europe, LAI, ...) : Labex CAPPA, projet pilote OVERSEE

Cotutelle (O/N) : O

Tout autre information utile :

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

L'un des défis majeurs de la gestion et du traitement des déchets nucléaires requiert une compréhension qualitative et quantitative des radioéléments, que ce soit pour leur séparation que pour leur stockage. La recherche ne peut progresser sans mieux appréhender les propriétés structurales, thermodynamiques et physico-chimiques de chaque complexe moléculaire. Parmi les approches expérimentales, seules les spectroscopies UV-visible et de luminescence résolue en temps sont suffisamment sensibles pour permettre des mesures fiables de ces éléments à l'état de trace. Cependant, la présence de plusieurs complexes dans une même solution complique fortement l'interprétation des spectres et l'extraction des grandeurs clés. Dans ce cadre, les calculs de modélisation moléculaire par les méthodes de chimie quantique permettent d'aider les analyses en corrélant la structure électronique aux propriétés mesurées.

Cette thèse en cotutelle abordera les propriétés de luminescence des complexes de lanthanide et actinide par une approche conjointe franco-allemande expérimentale et théorique. À l'institut de Resource Ecology de Dresde seront faites les synthèses et caractérisations expérimentales des systèmes pertinents, pour lesquelles les données sont inexistantes, ou incomplètes. Au laboratoire PhLAM, les structures, spectres et grandeurs thermodynamiques seront prédits par des calculs quantiques de structure électronique, au meilleur état de l'art.

Mots-clés : physico-chimie, modélisation moléculaire, luminescence, actinide, lanthanide, déchets nucléaires

PhD GRANTS 2021

PhD project title: *Unraveling luminescent properties of lanthanide and actinide elements by a dual experimental and theoretical approach*

PhD Supervisor: Florent Réal, Valérie Vallet

Co-supervisor(s) (if any): Nina Huittinen, Norbert Jordan

Laboratory/ies: PhLAM/Institute of Resource Ecology (Helmoltz Zentrum Dresden Rossendorf)

Financial support & identified possible candidates:

	Funder 1	Funder 2	Funder 3
Name	I-SITE OVERSEE	HZDR	
%	50%	50%	
Secured (Y/N)	Y	Y	
Application date			
Possible candidate(s)			

Research program(s) concerned (CPER, Labex Equipex, ANR, Europe, LAI ...): Labex CAPPA, projet pilote OVERSEE

Cotutelle (Y/N): Y

Any other relevant information:

PhD project summary (max. 20 lines):

One of the major challenges in the management and treatment of nuclear waste requires a qualitative and quantitative understanding of radioactive elements, both for their separation and for their storage. Research cannot progress without better understanding the structural, thermodynamic and physical and chemical properties of each molecular complex. Among the experimental approaches, only UV-visible and time-resolved luminescence spectroscopy are sensitive enough to allow reliable measurements of these trace elements. However, the presence of several complexes in the same solution greatly complicates the interpretation of spectra and the extraction of key quantities. In this context, molecular modeling calculations using quantum chemistry approach will help the analysis by correlating the electronic structure with the properties measured.

This co-supervised thesis will address the luminescence properties of the lanthanide and actinide complexes by a joint French-German experimental and theoretical approach. At the Resource Ecology Institute in Dresden will be synthesized and experimental characterization of the relevant systems, for which data are non-existent, or incomplete. At the PhLAM laboratory, the thermodynamic structures, spectra and quantities will be predicted by quantum electronic structure calculations, at the best state of the art.

Keywords: physical chemistry, molecular modeling, luminescence, actinides, lanthanides, nuclear waste