

---

# Modèle physicochimique de la dégradation d'amines lors de l'extraction de l'uranium

Thomas Guillon<sup>\*1</sup>, Aurélien Moncomble<sup>†1</sup>, Alexandre Chagnes<sup>‡2</sup>, and Gérard Cote<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR) – CNRS : UMR8516, Université Lille I - Sciences et technologies – Bâtiment C5 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

<sup>2</sup>Institut de Recherche de Chimie Paris (IRCP - UMR 8247) (IRCP) – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – ENSCP 11, rue Pierre et Marie Curie 75005 PARIS, France

## Résumé

De nombreuses études furent menées sur les procédés d'extraction de l'uranium et la dégradation chimique des solvants d'extraction mis en jeu. Dans le cadre particulier de l'extraction de l'uranium (VI) en milieu sulfate par une amine telle la tri-n-octylamine (TOA), des mécanismes expliquant la dégradation de cet extractant, en di-n-octylamine (DOA), furent identifiés et étudiés, notamment en présence de vanadium (V).[1,2] Pour mieux comprendre ces mécanismes de dégradation des molécules extractantes de type amine, particulièrement celui impliquant une attaque radicalaire et des ruptures de liaisons, nous proposons un modèle simple basé sur les calculs d'enthalpie libre de formation des radicaux et d'enthalpie libre de dissociation pour chaque liaison possible, à l'aide des méthodes DFT. Ce modèle permet de comparer la fragilité de ces extractants de type amine, et de l'évaluer pour de potentiels nouveaux extractants.

S. Collet, A. Chagnes, B. Courtaud, J. Thiry, G. Cote, *Journal of Chemical Technology & Biotechnology* 2009, 84(9),1331.

A. Chagnes, B. Courtaud, J. Thiry, J. Bayardon, S. Juge, G. Cote, *Solvent Extraction and Ion Exchange* 2012, 30(1), 67.

**Mots-Clés:** dégradation chimique d'extractants, amines, DFT, enthalpies libres

---

\*Intervenant

†Auteur correspondant: aurelien.moncomble@univ-lille1.fr

‡Auteur correspondant: alexandre.chagnes@chimie-paristech.fr