
Étude théorique de la relaxivité de solutions aqueuses d'actinides

Cécile Danilo*, Valérie Vallet*, Jean-Pierre Flament*, & Ulf Wahlgren****

** Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, UMR CNRS 8523
Université des Sciences et Technologies de Lille 1
F-59655 Villeneuve d'Ascq, France*

*** Albanova University Center, Fysikum
Stockholm University,
SE-10691 Stockholm, Sweden*

cecile.danilo@phlam.univ-lille1.fr

**Sections de rattachement : 30
Secteur : Secondaire**

RÉSUMÉ L'objectif initial de ce travail est l'interprétation d'expériences de relaxation de Résonance Magnétique Nucléaire (Nuclear Magnetic Relaxation Dispersion) réalisées sur des solutions aqueuses d' U^{4+} , NpO_2^+ et PuO_2^{2+} tous de configuration électronique (f^2). Les solutions de Neptunyle(V) et de Plutonyle(VI) présentent, de façon étonnante, une relaxivité nettement supérieure à celle mesurée pour l'Uranium(IV). Il est envisageable que ce soit dû à des temps de relaxation électronique différents. Cette hypothèse a été examinée en comparant les spectres électroniques de ces trois composés calculés avec une méthode à 2 étapes SOCI (Spin-Orbit Configuration-Interaction) en phases gazeuse et aqueuse.

MOTS-CLÉS : méthodes ab initio, spectres électroniques, actinides, relaxation RMN, solvation.