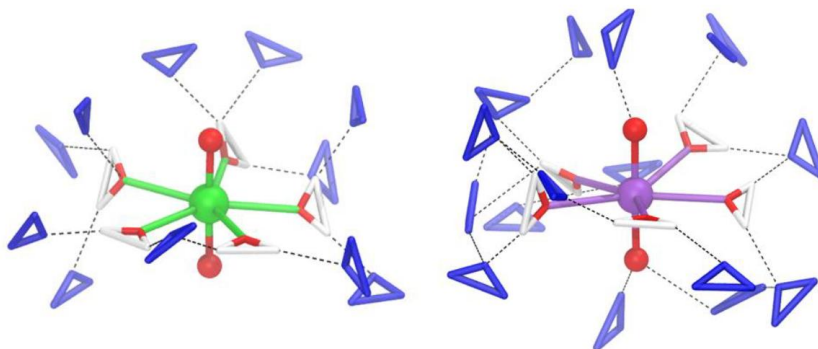


# Développement de champs de force pour les cations actinyles avec le modèle 12-6-4

Diego MORENO MARTINEZ, Dominique GUILLAUMONT, et Philippe GUILBAUD [1]

[1] CEA, DES, ISEC, DMRC, LILA, Université de Montpellier, 30207 Bagnols-sur-Cèze, France  
diego.morenomartinez@cea.fr

Les actinides aux degrés d'oxydation V et VI jouent un rôle crucial dans le cycle du combustible nucléaire et leur migration dans l'environnement. Depuis les années 90, des paramètres de champ de force ont été développés pour simuler le comportement du cation uranyle(VI) en solution. Cependant, peu d'études ont été consacrées au développement de modèles pour les autres cations actinyles. Dans cette étude, un ensemble de paramètres a été développé pour les cations moléculaires actinyles, allant de l'uranium au plutonium.<sup>1</sup> Ces nouveaux modèles intègrent la polarisation des molécules environnantes par le cation, améliorant ainsi la description de la solvation d'un point de vue structural et thermodynamique. Contrairement aux modèles précédents dans la littérature,<sup>2</sup> ces nouveaux champs de force intègrent un terme de dipôle induit ( $C_4$ ),<sup>3</sup> ce qui améliore leur performance tout en restant peu coûteux en termes de ressources computationnelles. La transférabilité des modèles a été vérifiée par des simulations de complexes carbonate en solution, démontrant un accord satisfaisant avec les données expérimentales, notamment les spectres EXAFS. Ces avancées ouvrent de nouvelles perspectives pour l'étude de la chimie des actinides en solution par dynamique moléculaire, permettant des simulations sur des systèmes de plus grande taille et sur des durées plus longues.



**Figure 1.** Vues instantanées de simulations de Dynamique Moléculaire de deux cations actinyles hydratées en utilisant les Champs de Force 12-6-4. A gauche : le cation hydraté  $U(VI)O_2^{2+}$ . A droite : Le cation hydraté  $Np(V)O_2^+$ . Pour plus de clarté, seules les molécules d'eau en première sphère et quelques molécules de deuxième sphère (en bleu) sont montrées

- 1) Moreno Martinez *et al.* J. Chem. Inf. Model. 2022, 62, 10, 2432–2445.
- 2) Pomogaev *et al.* J. Phys. Chem. Chem. Phys. 2013, 15 (38), 15954.
- 3) Li *et al.* J. Chem. Theory Comput. 2021, 17 (4), 2342–2354.