

Ecole doctorale : Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement

Laboratoire : Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman

Discipline : Chimie

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : SAY-LIANG-FAT Stéphanie

N° d'ordre : 40974

JURY :

Directeur de Thèse : Jean-Paul CORNARD

Rapporteurs : Majda RAHAL-SEKKAL, François GUILLAUME

Membres : Hervé VEZIN, Laurent JOUBERT, Gabriel BILLON

TITRE DE LA THESE :

Étude par spectroscopie électronique de Al(III), Pb(II) et Cu(II) par des molécules modèles des substances humiques

RESUME :

La complexation est le principal phénomène à l'origine de la rétention des métaux dans les sols. Il implique majoritairement les substances humiques (SH) dont les propriétés complexantes sont essentiellement dues à des groupes fonctionnels tels que les groupements phénoliques et carboxyliques. La compréhension des interactions métallo-humiques reste néanmoins limitée par la taille et la polyfonctionnalité des SH. L'utilisation de molécules modèles de faible poids moléculaire, présentant des sites de fixation similaires à ceux rencontrés dans les SH, permet de mieux appréhender le phénomène de complexation. Cette étude porte sur la complexation de trois cations métalliques, Al(III), Pb(II) et Cu(II), par des ligands présentant différents sites de fixation en compétition (catéchol, carboxylate, β -hydroxycétone).

Dans une première partie, l'étude réalisée avec des dérivés de l'acide cinnamique, présentant des caractéristiques des SH (noyau aromatique, chaîne aliphatique), a permis de juger de l'influence de paramètres structuraux sur le phénomène de complexation (délocalisation électronique, substitution). Les stoechiométries et constantes de stabilité des complexes formés ont pu être déterminées. Dans une seconde partie, l'utilisation conjointe de la spectroscopie électronique et des calculs de chimie quantique a permis de caractériser des complexes formés avec des dihydroxyanthraquinones (site préférentiel, mode de fixation, sphère de coordination).

Ce travail a permis de montrer l'utilité d'une telle approche couplant expériences et modélisation, et d'approfondir les connaissances disponibles sur les phénomènes de rétention des cations métalliques en milieu naturel.