

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**N° d'ordre :42536****NOM/PRENOM DU CANDIDAT : FALANTIN CECILIA**

Ecole doctorale : Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement (ED SMRE - 104)

Laboratoire : Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR - UMR CNRS 8516)

Discipline : Optique, Lasers, Physico-Chimie, Atmosphère

Si cotutelle, établissement partenaire :

JURY :

- Directeur(s) de thèse : CORNARD Jean-Paul ; Co-encadrante : LE PERSON Annaïg
- Rapporteurs : MERDY Patricia et CARTERET Cédric
- Examineurs : BATONNEAU Yann et OUDDANE Baghdad

SOUTENANCE : 06 décembre 2017, à 14H00, Amphi B17 (SH3)**TITRE DE LA THESE :**

Influence du soufre sur la complexation de cations métalliques par la matière organique dissoute : du milieu naturel au modèle.

RESUME :

La matière organique (MO) des systèmes aquatiques est constituée d'un mélange complexe de macromolécules qui a une grande capacité d'interaction avec les métaux modifiant ainsi leur biodisponibilité. Il existe une grande variété de sites complexants susceptibles de fixer les ions métalliques. L'objectif de ce travail est de mieux appréhender le processus de complexation de certains cations par différents sites chélatants oxygénés et soufrés de la MO. Pour atteindre cet objectif, trois catégories de MO ont été étudiées : la MO dissoute (MOD) issue de masse d'eau, la MOD fractionnée et des molécules modèles de la MO. Dans chacune de ces classes, des échantillons soufrés et oxygénés ont été comparés pour permettre d'évaluer l'influence de la présence de sites soufrés sur les propriétés complexantes des métaux par la MO. Les études ont été menées au moyen de méthodes de chimométrie et de chimie quantique combinées à des techniques de spectroscopie électronique. Les résultats obtenus ont montré que la MOD, caractérisée dans un premier temps, voit ses capacités complexantes augmenter avec la concentration en soufre. Le soufre semble avoir un effet sur le pouvoir complexant, mais aucune information spectrale n'a pu prouver la présence de complexes obtenus à partir de sites soufrés. L'utilisation de molécules modèles a quant à elle mis en évidence, pour un grand nombre de cations et pour deux types de fonctions, le pouvoir complexant supérieur des sites soufrés par rapport aux sites oxygénés. Il a également été montré qu'une fonction dithiol a un pouvoir de fixation des métaux plus important qu'une fonction hydroxy-thiocétone.

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**N° order : 42536****NAME/SURNAME OF THE CANDIDATE: FALANTIN CECILIA**

Doctoral School : Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement (ED SMRE – 104)

Laboratory : Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR – UMR CNRS 8516)

Discipline : Optique, Lasers, Physico-Chimie, Atmosphère

In case of co-tutorial thesis, provide the partner institution:

THESIS COMMITTEE :

- Thesis supervisor(s): CORNARD Jean-Paul; Co-supervisor: LE PERSON Annaïg
- Referees: MERDY Patricia and CARTERET Cédric
- Examiners: BATONNEAU Yann and OUDDANE Baghdad

DEFENSE: December 6th 2017, 2.00 p.m, Amphi B17 SH3**TITLE OF THE THESIS :**

The influence of sulfur on the complexation of metal cations with dissolved organic matter: From natural environment to model compounds.

ABSTRACT :

Organic matter (OM) of aquatic systems is a complex mixture of macromolecules which has a high capacity for interaction with metals and thus modifies their bioavailability. There is a wide variety of complexing sites available to bind metal ions. The objective of this work is to have a better understanding of the process of complexation of certain cations by different oxygenated and sulfur-containing chelating sites of OM. To achieve this objective, three categories of OM were studied: dissolved OM (DOM) from fresh water, fractionated DOM and model compounds of OM. In each of these classes, sulfur and oxygen samples were compared to evaluate the influence of the presence of sulfur-containing sites on the complexing properties of metals by OM. The studies were conducted using chemometric and quantum chemistry methods combined with electronic spectroscopy techniques. The results obtained showed that the DOM, characterized initially, sees its complexing capacities increase with the concentration of sulfur. Sulfur appears to have an effect on the complexing power, but no spectral information has been able to prove the presence of complexes obtained from sulfur-containing sites. The use of model molecules has shown the higher complexing power of the sulfur-containing sites compared to the oxygenated one for numerous cations and for two types of functions. It has also been shown that a dithiol function has a greater binding power of metals than a hydroxy-thioketone function.