

Développement d'une base de données structurales et thermodynamiques pour modéliser les interactions U(VI) / Ra – matières organiques – bactéries dans un continuum sol – eau.

Direction: Mirella DEL NERO, CRHC, directrice de thèse, et Lu LIU, CPJ, co-encadrante (Institut Pluridisciplinaire H. Curien, IPHC, UMR 7178, CNRS IN2P3 - Université Strasbourg).

Codirections de thèse: Virginie CHAPON, DR (Institut de Biosciences et biotechnologies d'Aix-Marseille, BIAM, UMR 7265, CNRS - Université Aix Marseille - CEA). Gilles MONTAVON, DR (Laboratoire physique SUBAtomique TECHNOlogies associées, SUBATECH, UMR 6457, IMT – CNRS IN2P3 – Université Nantes)

Les principales sources de radioactivité dans l'environnement sont les radionucléides naturels (RN), incluant les RN telluriques présents depuis la formation de la Terre, e.g., l'Uranium-238, et leur descendants radioactifs, e.g., le Radium-226 (Ra). Au cours des dernières décennies, de nombreuses activités anthropiques, par exemple, l'exploitation passée de mines d'uranium, ont mené à la production de sites dits à radioactivité naturelle renforcée ou sites dits « TENORM » (Technologically - Enhanced Naturally Occuring Radioactive Material), c'est-à-dire des biotopes terrestres et aquatiques perturbés par les activités humaines et où les cycles biogéochimiques des RN ont été modifiés. Dans ce cadre, du fait de l'écotoxicité des RN, il est essentiel de prévoir et modéliser **leurs transferts sol-eau-biosphère et leurs impacts** potentiels. C'est un défi sociétal majeur dont l'enjeu est la préservation de la santé des écosystèmes et de nos ressources en eau et sols. Modéliser ces transferts est aussi un défi scientifique du fait de la complexité des mécanismes biochimiques qui contrôlent les formes chimiques (la spéciation chimique) des RN dans l'environnement. En particulier, il est admis que les interactions entre l'uranium(VI), les matières organiques naturelles (MO), et les bactéries, -et la formation d'espèces (colloïdales) métallo-organiques qui en résulte-, régulent le comportement, la mobilité et la biodisponibilité de ce RN dans les continuum eau-sol-plantes.

La thèse se positionne sur la recherche amont autour de grands objectifs et questions liés au contexte « TENORM », par ex., développer et compléter les bases de données existantes pour *in fine* modéliser le comportement de l'U et du Ra dans un système eau-sol. Le / la doctorant.e rejoindra les expériences menées par l'équipe de Radiochimie de l'IPHC dans l'objectif d'acquérir **des données structurales et quantitatives** sur la spéciation chimique **de l'U et du Ra**, en présence de **ligands organiques modèles de la MO et de bactéries d'intérêt**.

Les axes envisagés sont : 1) la caractérisation moléculaire de la MO extraite d'un sol prélevé sur un TENORM et la sélection de ligands modèles pertinents; 2) l'identification des structures et la détermination des constantes de formation / dissociation des espèces formées dans des systèmes étudiés en laboratoire incluant : U / Ra, un ligand modèle de la MO, et un bioligand représentatif du compartiment bactérien (protéine ou métallophore, e.g., sidérophore); 3) la validation de ces données structurelles et thermodynamiques, via des tests de modélisation de résultats d'expériences menées au préalable sur des systèmes U/Ra – MO – bactéries.

Le ou la doctorant.e s'impliquera dans un travail de recherche **pluridisciplinaire et multi-échelle** incluant le prélèvement d'échantillons environnementaux, le montage d'expériences en laboratoire (cultures bactériennes, complexation métallo-organique, etc) et l'interprétation de résultats **d'analyses multivariées**, e.g., analyses chimiques de différentes matrices et analyses moléculaires par des techniques spectroscopiques / spectrométriques avancées. Il / elle s'intégrera dans un consortium d'équipes et de chercheurs à même de superviser les aspects pluridisciplinaires (spéciation chimique / microbiologie / expériences utilisant U ou Ra) de la thèse, et réalisera ses expériences sur différents sites / Instituts de recherche français.

Des séjours dans les laboratoires partenaires sont prévus.

PROFIL DU / DE LA CANDIDAT(E) : Le (la) candidat(e) doit avoir un master ou équivalent en chimie, géochimie ou chimie-physique comprenant une formation initiale solide en chimie des solutions. Une expérience sur la chimie en environnement sera un plus.



Development of a structural and thermodynamic database to model U(VI)/Ra - organic matter - bacteria interactions in a soil-water continuum.

Direction: Mirella DEL NERO, CRHC, thesis supervisor, and Lu LIU, CPJ, co-supervisor (Institut Pluridisciplinaire H. Curien, IPHC, UMR 7178, CNRS IN2P3 - Université Strasbourg).

Thesis co-directors: Virginie CHAPON, DR (Institut de Biosciences et biotechnologies d'Aix-Marseille, BIAM, UMR 7265, CNRS - Université Aix Marseille - CEA). Gilles MONTAVON, DR (Laboratoire physique SUBAtomique TECHNOLOGIES associées, SUBATECH, UMR 6457, IMT – CNRS IN2P3 – Université Nantes)

The main sources of radioactivity in the environment are naturally occurring radionuclides (RN), including telluric RN present since the formation of the Earth, e.g. Uranium-238, and their radioactive descendants, e.g. Radium-226 (Ra). In recent decades, numerous anthropogenic activities, such as past uranium mining operations, have led to the production of sites with enhanced natural radioactivity or so-called "TENORM" sites (Technologically - Enhanced Naturally Occurring Radioactive Material), i.e. terrestrial and aquatic biotopes disturbed by human activities and where the biogeochemical cycles of RN have been modified. In this context, given the ecotoxicity of RN, it is essential to predict and model their soil-water-biosphere transfers and their potential impacts. This is a major societal challenge, with the aim of preserving the health of ecosystems and our water and soil resources. Modeling these transfers is also a scientific challenge, given the complexity of the biochemical mechanisms that control the chemical forms (chemical speciation) of RN in the environment. In particular, interactions between uranium(VI), natural organic matter (OM) and bacteria - and the resulting formation of metal-organic (colloidal) species - are known to regulate the behavior, mobility and bioavailability of this RN in the water-soil-plant continuum.

The thesis will focus on fundamental research around major objectives and questions linked to the "TENORM" context, e.g. developing and completing existing databases to ultimately model the behavior of U and Ra in a water-soil system. The PhD student will join the experiments carried out by the IPHC Radiochemistry team, with the aim of acquiring structural and quantitative data on the chemical speciation of U and Ra, in the presence of model organic ligands of OM and bacteria of interest.

The main lines of research are: 1) molecular characterization of OM extracted from soil sampled on a TENORM and selection of relevant model ligands; 2) identification of structures and determination of formation/dissociation constants of species formed in laboratory systems including : U / Ra, an OM model ligand, and a bioligand representative of the bacterial compartment (protein or metallophore, e.g., siderophore); 3) validation of these structural and thermodynamic data, via modeling tests of results acquired from experiments previously carried out on U/Ra - OM - bacteria systems.

The PhD student will be involved in multi-disciplinary and multi-scale research work, including the collection of environmental samples, the set-up of laboratory experiments (bacterial cultures, metal-organic complexation, etc.) and the interpretation of multivariate analysis results, e.g., chemical analyses of different matrices and molecular analyses using advanced spectroscopic/spectrometric techniques. He/she will be part of a consortium of teams and researchers able to supervise the multidisciplinary aspects (chemical speciation / microbiology / experiments using U or Ra) of the thesis, and will carry out his/her experiments at various French sites / research institutes. Missions and visits to collaboration partners' laboratories are planned.

CANDIDATE'S PROFILE: The candidate must have a Master's degree or equivalent in chemistry, geochemistry or physical chemistry, including a solid initial training in solution chemistry. Experience in environmental chemistry would be a plus.