

Ecole doctorale : SMRE
Laboratoire : EA CMF
Discipline : Chimie

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : Laurianne MOITY

N° d'ordre : 41182

JURY :

Directeur de Thèse : Pr. Jean-Marie AUBRY

Rapporteurs : Pr. Marc LEMAIRE
Pr. Werner KUNZ

Membres : Pr. Farid CHEMAT
Dr. Philippe MARION
Dr. Valérie MOLINIER

TITRE DE LA THESE :

Conception, Modélisation et Caractérisation de Solvants Agro-sourcés

RESUME :

Le bouleversement du monde des solvants classiques, résultant de la récente prise de conscience des risques environnementaux et sanitaires liés à leur utilisation, a conduit au développement de nouveaux solvants présentant un meilleur profil HSE et dérivés de la biomasse végétale : les agro-solvants. Ces solvants alternatifs ont été recensés, modélisés et comparés aux solvants organiques classiques dans un panorama purement théorique établi grâce à l'approche COSMO-RS. Cet outil permet non seulement d'aider à la substitution de solvants indésirables mais aussi de souligner les besoins de nouvelles structures. Une démarche *in silico* de conception raisonnée d'agro-solvants, *via* le développement d'un logiciel de synthèse automatique, GRASS, a ainsi été mise en place et permet de générer virtuellement des produits de commodités à partir d'agro-synthons abondants (glycérol, acide itaconique, isosorbide, *etc.*) et de transformations chimiques pertinentes industriellement. Les structures générées sont ensuite triées *via* des modèles de prédiction de propriétés physico-chimiques afin de sélectionner les mieux adaptés pour une application donnée. Des agro-solvants dérivés du glycérol et de l'isosorbide (éthers, esters, acétals) ont été sélectionnés, synthétisés puis évalués expérimentalement en considérant leurs propriétés physico-chimiques (T_{fus} , $T_{\text{éb}}$, d , ρ , stabilité à l'hydrolyse et à l'oxydation), leurs capacités de solubilisation de deux pesticides cibles et leurs propriétés hydrotropes. Ces mesures expérimentales ont ensuite été confrontées à différents modèles de prédiction.

Soutenance le 14 Octobre 2013 à 10 Heures
Lieu CERLA