

**Ecole doctorale :** SMRE  
**Laboratoire :** EA 4478 CMF  
**Discipline :** Molécules et  
Matière Condensée (Chimie)

**NOM/PRENOM DU CANDIDAT :** BENAZZOZ Adrien

**N° d'ordre :** 41534

**JURY :**

**Directeur de Thèse :** Pr. Jean Marie Aubry (*Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille*)

**Rapporteurs :** Pr. Andreas Klamt (*University of Regensburg*)  
Pr. Michelle Sergent (*Université d'Aix-Marseille*)

**Membres :** Pr. Pierre Gareil (*Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris*)  
DR Vincent Gerbaud (*CNRS, Université de Toulouse*)  
Dr. Jean-Pierre Lallier (*Novance*)  
Dr. Valérie Molinier (*Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille*)

**TITRE DE LA THESE :**

**Approches comparées des paramètres de Hansen et du modèle COSMO-RS  
pour l'étude des phénomènes de solubilisation**

*Application à la caractérisation et à la valorisation des agro-solvants*

**RESUME :**

L'évolution du cadre réglementaire et la prise de conscience générale des enjeux environnementaux et de santé publique sont à l'origine d'une profonde modification du paysage des solvants. L'avènement de solvants alternatifs, comme les agro-solvants, nécessite le recours à des outils physico-chimiques systématiques de caractérisation de leurs propriétés solubilisantes. L'approche des paramètres de Hansen, issue de la théorie de Hildebrand, propose une représentation des principales interactions moléculaires en solution. Ses performances applicatives ont été éprouvées pour la caractérisation des agro-solvants émergents et l'étude de la solubilisation de solutés moléculaires et macromoléculaires. Alternativement, le modèle COSMO-RS combine chimie quantique et thermodynamique statistique pour la prédiction des propriétés moléculaires à l'état liquide. Les performances de ce modèle ont été évaluées et exploitées pour rendre compte des phénomènes de solubilisation de solutés complexes tels que la nitrocellulose et le C<sub>60</sub>-fullerène. Permettant de traduire les deux mécanismes principaux de solubilisation (similarité et complémentarité), les descripteurs issus de COSMO-RS ont été mis à profit pour forger de nouveaux paramètres de solubilité aussi simples que ceux de Hansen mais plus rigoureux scientifiquement. Cette jouvence des paramètres de solubilité s'appuie sur la prise en compte des interactions acide-base de Lewis et le concept nouveau de COSMOmorphe permettant le calcul des interactions dispersives. Les connaissances ainsi acquises ont permis l'élaboration d'une microémulsion dégraissante verte dont l'efficacité repose sur un mécanisme original de décapage dégraissant.

**Soutenance le 23 octobre 2014 à 15 heures  
à l'ENSCL, amphithéâtre Francis Petit**