

Ecole doctorale : SMRE  
Laboratoire : EA CMF 4478  
Discipline : Molécules et  
Matière Condensée

NOM/PRENOM DU CANDIDAT : MÜHLBAUER Andrea

N° d'ordre : 41582

**JURY :**

**Directeur de Thèse :** Pr. Véronique Rataj (Université Lille1), Pr. Werner Kunz (Universität Regensburg)

**Rapporteurs :** Dr. François Jérôme (CNRS, Université Poitiers), Pr. Stefan Stolte (Universität Bremen)

**Membres :** Pr. Dirk de Vos (Université Leuven), Pr. Dominik Horinek (Universität Regensburg), Dr. Boris Estrine (A.R.D.)

**TITRE DE LA THESE :**

Synthèse et caractérisation physicochimique de nouveaux liquides ioniques biocompatibles pour la solubilisation de biopolymères

**RESUME :**

Depuis une quinzaine d'années, la chimie verte, devenue un axe prioritaire des recherches académiques et industrielles, connaît un développement considérable. Dans ce contexte, de nombreuses recherches s'intéressent aux solvants alternatifs, respectueux de l'environnement. Parmi eux, on trouve les liquides ioniques (LIs) et les eutectiques profonds (DESs). L'objectif de la thèse était de développer de nouveaux LIs et DESs biocompatibles pour la solubilisation de biopolymères tels que la cellulose. Les alkylammonium quaternaires à chaîne courte (C<sub>3</sub> à C<sub>6</sub>) bi- et tricaténaires associés à divers carboxylates d'origine naturelle (*e.g.* itaconate, lactate, lévulinate) se sont révélés être de bons candidats et ont permis d'identifier les effets structuraux clés pour la solubilisation de la cellulose. Par cette approche systématique couplée à une étude physicochimique approfondie des LIs, les lévulinate de [DiC<sub>3</sub>], [DiC<sub>4</sub>] et [TriC<sub>4</sub>] et l'itaconate de [DiC<sub>4</sub>] sont les plus efficaces et permettent de solubiliser jusqu'à 10 % de cellulose, voire 20% en présence d'un co-solvant biosourcé, la  $\gamma$ -valérolactone. Malgré leur très bonne biodégradabilité en comparaison à celle des imidazolium, les ammonium quaternaires ne sont pas naturels. Ils ont donc été, dans un second temps, substitués par des cations biocompatibles dérivés de la choline, de la bétaine et de la carnitine, associés aux carboxylates précédents. Les dérivés de type éther et ester sont des liquides ioniques et l'éthyl-choline éther lévulinate permet de solubiliser 10% de cellulose. Par ailleurs, en présence d'urée, les sels de dibutylammonium et les esters de bétaine se comportent comme des DESs dont les températures de fusion sont de l'ordre de 30 à 40 °C. De même, des DESs à base de dérivés de sucre possédant une fonction éther sur le carbone anomérique ont été obtenus en présence des sels de choline, de bétaine et de carnitine. Enfin, une approche théorique utilisant le logiciel COSMO-RS a été utilisée pour la modélisation des propriétés des LIs et des DESs ainsi que pour la solubilisation de la cellulose afin de la prédire.

**Soutenance le 11 décembre 2014 à 10h30**  
**Amphithéâtre Francis Petit (ENSCL, C7)**