

**DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1 SCIENCES ET TECHNOLOGIES**

**N° d'ordre : 41815**

**NOM/PRENOM DU CANDIDAT : Lukowicz Thomas**

Ecole doctorale : SMRE  
Laboratoire : UCCS CISCO  
Discipline : Molécules et Matière Condensée  
Si cotutelle, établissement partenaire :

**JURY :**

- Directeur(s) de thèse : Prof. Jean-Marie Aubry, Prof. Véronique Nardello-Rataj
- Rapporteurs : Dr. Thomas Sottmann, Dr. Fabienne Testard
- Examineurs : Dr. Liudmila Mokrushina

**SOUTENANCE : 12.10.2015, 14h, Salle Wozniak, Bât.C7 RdC**

**TITRE DE LA THESE :**

Solubilisation synergique de parfums dans des systèmes binaires de tensioactif et prédiction de leur valeur d'EACN avec COMSO-RS.

**RESUME :**

Les "solvo-surfactants" appartiennent à une nouvelle classe de molécules amphiphiles qui présentent à la fois les propriétés de tensioactifs et de solvants. Ils sont en effet capables de former des agrégats et peuvent ainsi solubiliser des composés hydrophobes. De plus, ces molécules présentent une volatilité importante, ce qui les rend particulièrement intéressantes pour des applications où cette propriété est décisive, notamment au cours de la solubilisation aqueuse de parfums. Les comportements de phase et d'agrégation de solvo-surfactants en solution aqueuse sont ici étudiés. L'influence de tensioactifs ioniques est aussi considérée afin de mettre en évidence une synergie avec les amphiphiles non ioniques. Il est montré que des faibles quantités (traces) de tensioactifs ioniques permettent d'augmenter significativement la miscibilité des solvo-surfactants dans l'eau, particulièrement pour les systèmes riches en eau. Dans un système solvo-surfactant/huile/eau (SHE), le comportement de phase est fortement influencé par l'hydrophobicité de l'huile. Le nombre équivalent de carbones d'alcane (EACN) de différentes huiles polaires telles que dialkyléthers, 2-alcانونes, 1-chloroalcanes etc... est ainsi étudié. La diminution de l'EACN en comparaison avec les n-alcanes est reliée à leur fonctionnalisation, et elle est rationalisée grâce au paramètre d'empilement effectif pour chaque type d'huile correspondante. Les EACN de 94 huiles différentes ont été utilisés dans une analyse de régression multilinéaire basée sur les sigma moments de COSMO-RS, dans le but d'établir un modèle QSPR capable de prédire l'EACN d'hydrocarbures qui ne contiennent pas de groupement donneur de liaison hydrogène. Enfin, l'influence de tensioactifs ioniques sur un système SHE est déterminée avec plusieurs huiles d'EACN différents. Il est montré que le tensioactif ionique augmente fortement la température de stabilité du pseudo système ternaire de même que l'efficacité de solubilisation de l'huile. Cependant, cette efficacité atteint un maximum à un certain ratio molaire en tensioactif ionique car ce dernier empêche le système de s'inverser. Ainsi, une microémulsion bicontinue, connue pour solubiliser une grande quantité d'huile et d'eau, ne peut pas être formée.