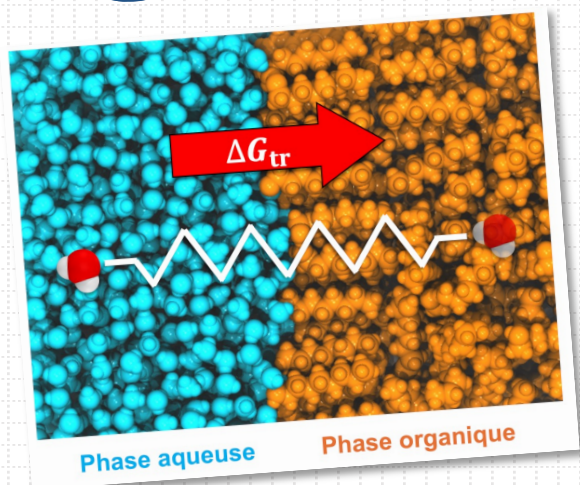




SOUTENANCE DE THÈSE

Erwann GUILLAM

**Laboratoire de Modélisation mésoscopique
et Chimie Théorique (LMCT)**



Prédiction moléculaire des enthalpies libres de transfert pour l'extraction liquide-liquide



**Mardi 2
décembre 2025**



14^h00



**Auditorium
ICSM**

Cette thèse propose une méthodologie de calcul des enthalpies libres de transfert fondée sur des simulations biaisées de type *Steered Molecular Dynamics* (SMD). Développée et appliquée à des systèmes d'extraction liquide-liquide, allant de simulants de phase organique à des interfaces phase aqueuse/phase organique, cette méthodologie est accompagnée d'une analyse approfondie des propriétés structurales de ces systèmes multiphasiques par dynamique moléculaire. La démixtion de mélanges binaires et ternaires eau / alcools a été, tout d'abord, explorée *via* l'identification des phases formées par théorie des graphes et reconstruction théorique de spectres de diffusion des rayons X. Nous nous sommes ensuite intéressés à la spéciation de sels de nitrate de lanthane ($\text{La}(\text{NO}_3)_3$) dans le méthanol. Les simulations ont mis en évidence la formation de complexes polynucléaires dont la structure et la thermodynamique d'agrégation ont été déterminées. Ensuite, l'étude des systèmes eau / octanol a révélé la présence de bicouches d'octanol aux interfaces. Une méthodologie basée sur des simulations de SMD a été développée dans ces systèmes, en prédisant une solubilité de l'eau dans l'octanol en accord avec les données expérimentales. Enfin, l'analyse énergétique et structurale des systèmes aqueux / DMDOHEMA / dodécane a mis en évidence l'influence de la concentration en extractant et en La^{3+} sur la structure interfaciale et sur les énergies libres de transfert de l'eau et des cations La^{3+} . Ces résultats offrent de nouvelles perspectives pour la modélisation des systèmes d'extraction liquide-liquide, en conciliant à la fois l'analyse des propriétés structurales et la prédiction des grandeurs thermodynamiques *via* des simulations SMD.

Mots-clés : *Dynamique Moléculaire ; Dynamique Moléculaire Biaisée ; Extraction liquide-liquide ; Interfaces ; Propriétés structurales ; Enthalpies libres de transfert*



**NOUS VOUS
ATTENDONS
NOMBREUX !**



**UNIVERSITÉ DE
MONTPELLIER**

