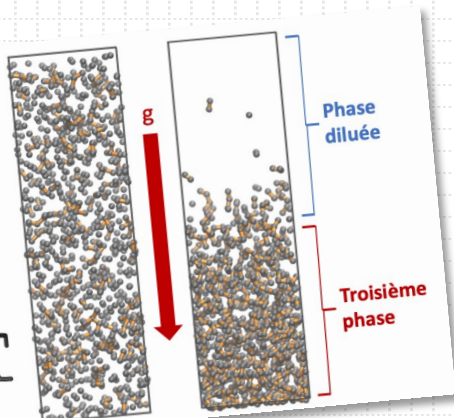
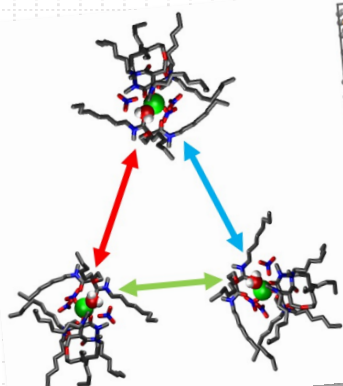




SOUTENANCE DE THÈSE



Gustave SZCZEPAN

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

Stabilité des dispersions organiques colloïdales prédite par modélisation multi-échelle



**Mardi 6
octobre 2026**



9h00



**Auditorium
ICSM**

Cette thèse étudie les mécanismes responsables de la formation de la troisième phase lors de l'extraction liquide-liquide des lanthanides. Son objectif principal est de relier la structure moléculaire des micelles inverses à leur comportement collectif afin de déterminer si cette séparation de phase peut être décrite comme une transition liquide-gaz, par la mise en œuvre d'approches de modélisation de chimie théorique couplant des simulations de dynamique moléculaire classique et gros-grains. Les simulations de dynamique moléculaire montrent que les agrégats sont plus dynamiques et désordonnés que ce qui est communément admis dans la littérature, avec une forte pénétration du diluant dans la couronne apolaire. Les simulations d'umbrella-sampling mettent également en évidence le rôle essentiel des molécules d'eau dans la fusion des agrégats et identifient les forces de van der Waals comme la principale interaction attractive. À partir de ces résultats, un modèle gros-grains, représentant chaque agrégat par une particule unique, a été développé. Les interactions de paires reproduisent une transition liquide-gaz, mais elles ne permettent pas de décrire correctement les propriétés thermodynamiques expérimentales. L'introduction explicite d'interactions à trois corps, extraites des simulations atomistiques, permet d'améliorer le modèle et de reproduire de manière quantitative les concentrations de coexistence observées expérimentalement. Ces travaux démontrent que la troisième phase peut être interprétée comme une transition liquide-gaz gouvernée par les interactions entre agrégats, mais que sa description nécessite la prise en compte d'effets collectifs et d'interactions à plusieurs corps. Plus généralement, cette étude propose une approche multi-échelle pour la modélisation des systèmes d'extraction liquide-liquide et le développement de modèles prédictifs pour les procédés de séparation des métaux stratégiques.

Mots-clés : *Dynamique moléculaire ; Dynamique moléculaire biaisée ; Simulations gros-grains ; Extraction liquide-liquide ; Micelles inverses*



**NOUS VOUS
ATTENDONS
NOMBREUX !**



**UNIVERSITÉ DE
MONTPELLIER**

