

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE EN COTUTELLE

Monsieur Luis ACEVEDO FERNANDEZ

Candidat au Doctorat de Chimie physique,
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour
En cotutelle avec l'Université Centrale du Vénézuéla, Caracas (VENEZUELA)

Soutiendra publiquement sa thèse intitulée :

Etude par simulations de dynamiques moléculaires des interactions entre la matière organique dissoute et la silice meso-poreuse.

Dirigée par Monsieur GERMAIN VALLVERDU et Monsieur Jimmy Castillo

le 13 mai 2026 à 15h00

Lieu : IPREM (Institute of Analytical Sciences and Physico-Chemistry for Environment and Materials). Technopôle
Helioparc, 2 Av. du Président Pierre Angot, 64053 Pau Cedex 9
Salle : Amphithéâtre IPREM

Composition du jury :

M. Germain VALLVERDU, Maître de conférences HDR	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Directeur de thèse
M. Jose PARRA, Professeur	Université de Carabobo	Rapporteur
M. Fernando RUETTE, Directeur de recherche	IVIC - Institut vénézuélien de recherche scientifique	Rapporteur
Mme Raiza HERNANDEZ BRAVO, Chargé de recherche	CIDESI - Centre d'ingénierie et de développement industriel	Examinatrice
M. Didier BEGUE, Professeur des universités	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examineur
Mme Karinne MIQUEU, Directeur de recherche CNRS	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examinatrice

Mots-clés : Nanoparticule, dynamiques moléculaires, adsorption,

Résumé :

Les asphaltènes constituent la fraction la plus polaire du pétrole brut, et leur forte tendance à s'agréger peut conduire à la précipitation et à d'importants problèmes opérationnels lors de la production, du transport et du raffinage du pétrole. Dans ce travail, des simulations de dynamique moléculaire (MD) ont été utilisées pour étudier le comportement d'agrégation des asphaltènes dans différents solvants (toluène, heptane et tétrahydrofurane) ainsi que leurs interactions avec des hydrocarbures aliphatiques et des métalloporphyrines. Ces composés sont fréquemment piégés au sein des agrégats d'asphaltènes, ce qui peut compliquer les processus de séparation et contribuer à l'accumulation de métaux lors des opérations de raffinage. Un élément clé de cette thèse a été le développement et la validation d'un champ de force OPLS-AA pour les porphyrines de vanadyle (VO-porphyrines), permettant une description précise de leur structure et de leurs interactions dans des environnements analogues au pétrole brut. Les simulations révèlent une forte affinité entre les molécules de VO-porphyrine et les asphaltènes, principalement due à des liaisons hydrogène entre le groupe vanadyle et les groupes fonctionnels polaires des asphaltènes, en particulier les groupes hydroxyle. L'aromaticité des asphaltènes joue également un rôle dans le piégeage des VO-porphyrines : dans des modèles modérément aromatiques, les VO-porphyrine s'adsorbent à la surface des agrégats sans modifier significativement leur taille, tandis que dans des systèmes hautement aromatiques, les VO-porphyrine agissent comme des ponts moléculaires reliant différents agrégats, formant des structures plus grandes et moins compactes. Les répulsions stériques dues au groupe vanadyle entravent également les interactions directes d'empilement π - π , favorisant ainsi les liaisons hydrogène comme mécanisme d'interaction dominant. Les simulations incluant le cholestane (comme hydrocarbure aliphatique représentatif) indiquent en outre que le confinement de ces hydrocarbures n'est possible que s'ils sont piégés avant la mise en solution des agrégats d'asphaltènes. Cette observation soutient l'hypothèse proposée par Sócrates Acevedo, selon laquelle les nanoagrégats constituent des structures préexistantes dans la matrice du pétrole brut plutôt que de se former exclusivement lors de la précipitation. De plus, il a été observé que des nanoparticules de silice (SiO_2) peuvent adsorber les agrégats d'asphaltènes et influencer leur stabilité ainsi que leur dynamique d'agrégation, ce qui souligne leur rôle potentiel dans la modification du comportement d'agrégation des asphaltènes.