

# Thèse Aurore Filly

25 septembre 2015

## **les Solvants alternatifs pour l'extraction des composés volatiles : Modélisation et Expérimentation**

Le domaine de la chimie en général et de l'extraction, en particulier, sont entrés dans une démarche de chimie « verte » utilisant moins de solvants, moins d'énergie et diminuant les rejets, tout en assurant la qualité des produits finis. Une prise de conscience des risques environnementaux et sanitaires liés à l'utilisation des solvants pétroliers, a conduit à la recherche de nouveaux solvants présentant un meilleur profil (HSE). Dans la première partie de cette thèse, il convient de déterminer qu'est-ce qu'un solvant « vert »? L'utilisation de solvants alternatifs a été possible pour l'extraction de composants odorants issus de substances naturelles convenant à différents types d'extraits. L'extraction d'huile essentielle à partir de plante aromatique a été possible en utilisant l'eau comme solvant, avec différents états physiques et chimiques, mais aussi sans solvant par la technique SFME. En ce qui concerne l'obtention d'une concrète, d'une résinoïde, l'étude de divers solvants verts a été réalisée selon deux approches : expérimentale et simulation grâce à l'utilisation d'outils d'aide à la décision : HSPiP (Paramètres de solubilité de HANSEN) et COSMO-RS afin de comprendre les mécanismes de dissolution. Les avantages et les inconvénients utilisant les solvants alternatifs ont été comparés avec les méthodes classiques en termes de cinétique, de rendement, d'impacts environnementaux, de profil aromatique et de qualité de l'extrait : huile essentielle, concrète, résinoïde, absolue.

## **Alternatives solvents for extraction of volatile compounds: Modeling and experimentation**

The field of chemistry, in general, and extraction, in particular, has entered a new era with "green" chemistry approach using less solvent, less energy and reducing emissions, while ensuring the quality of finished products. The awareness of the environmental and health risks associated with use petroleum solvents. Make urgent the need to find alternatives solvents with good ESH (Environment, Safety and Health) profiles. In the first part of the thesis, we focussed to be determined what are a "green" or "sustainable" solvents? The use of alternatives solvents has been possible for the extraction of odorous components from natural substances containing different types of extracts. Green method for the extraction of essential oil from aromatic herbs have been performed with water as solvent, with different physical and chemical states, but also without solvent by technical SFME. As regards obtaining concrete or resinoid, The study of varies "green" solvents has been performed via experimentation and simulation through the use of decision support tools HSPiP (Hansen parameters solubility) and COSMO-RS (Conductor like screening model - realistic solvation) for comprehension of dissolving mechanism. Advantages and drawbacks using alternatives solvents have been compared with conventional method in terms of yield, environmental impacts, aromatic profile and quality of extracts: essential oil, concrete, resinoid, absolute.