



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

*Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que*

**Mr EL HAJJAM Redouane**

**Soutiendra : le Samedi 23/05/2026 à 10H00**

**Lieu : Centre des Etudes Doctorales - USMBA – Amphi 1**

*Une thèse intitulée :*

**Étude multi-échelle des propriétés structurales et dynamiques des microémulsions greffées par des polymères téléchéliques : approches expérimentales et simulations de dynamique moléculaire combinées.**

*En vue d'obtenir le Doctorat*

**FD : Sciences de Matériaux et Procédés Industriels**

**Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement**

*Devant le jury composé comme suit :*

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
NAJI Mohamed	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	MCH	Président
ALAMI Mohammed	Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, Meknès	PES	Rapporteur
RRHIOUA Abdeslem	Faculté des Sciences, Oujda	PES	Rapporteur
TALHA Lamiae	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	MCH	Rapporteur
TOUTI Rodouan	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	MCH	Examineur
LEMZIOUKA Hamane	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	MCH	Examineur
FILALI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse
AHFIR Rachid	Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz, Fès	MCH	Co-directeur de thèse



## Résumé :

L'objectif de ce travail est d'étudier l'effet de l'ajout de polymères modifiés hydrophobiquement ( $PEO-C_{12}H_{25}$ ) sur les propriétés d'interactions, structurales et dynamiques d'un système de microémulsion cationique huile/eau, qui sert comme modèle pour l'administration de médicaments. Nous avons combiné les expériences de la diffusion des neutrons aux petits angles (DNPA), les équations intégrales d'Ornstein-Zernike résolues numériquement à l'aide de la relation de fermeture HNC et la méthode de simulation de la dynamique moléculaire (DM). Tout d'abord, pour un système de microémulsion hautement dilué de fraction volumique  $\Phi = 2\%$ , l'analyse des données DNPA a montré que la taille et la forme sphérique de la microémulsion restent constantes, avec un rayon moyen de  $R_m = 61\text{Å}$ , lorsque le nombre de polymères  $N_p$  ( $PEO-C_{12}H_{25}$ ) par gouttelette est ( $N_p \leq 20$ ). En revanche, on observe une réduction du rayon des gouttelettes lorsque le nombre de polymères dépasse cette valeur ( $N_p > 20$ ), ce comportement est expliqué par l'échec d'émulsification. De plus, nous avons observé que l'ajout de polymères induit une interaction stérique répulsive entre les gouttelettes de microémulsion, améliorant ainsi leur solubilité. Nous avons combiné entre la théorie HNC et les données DPNA pour valider le modèle de potentiel d'interaction entre les particules dans le système étudié. Deuxièmement, nous avons utilisé des simulations DM pour explorer l'impact des polymères téléchéliques ( $PEO-C_{12}H_{25}$ ) sur les propriétés structurales et dynamiques d'un système de microémulsion très dilué ( $\Phi = 2.8\%$ ) à différentes températures. Nous avons montré que l'ajout de ces polymères induit une répulsion stérique qui améliore la stabilité et la solubilité des microémulsions, et modifie leur comportement dynamique, ce qui conduit à une diffusion plus lente. D'autre part, une augmentation de la température entraîne une diffusion accrue des gouttelettes de microémulsion. Nous avons également démontré que cette diffusion reste toujours normale, en accord avec la théorie de la diffusion. Les résultats obtenus permettent de mieux comprendre le contrôle de la diffusion des gouttelettes de microémulsion, notamment pour l'administration des médicaments, où la température corporelle est supérieure à la température ambiante. Enfin, nous avons examiné la transition sol-gel en fonction du nombre de polymères stériques adsorbés à la surface des gouttelettes de microémulsion. À l'aide de simulations DM, nous avons analysé les propriétés structurales, les interactions entre particules et la dynamique du système. Les résultats montrent qu'au-delà d'un nombre critique  $N_c$  de polymères, les systèmes de fractions volumiques modérées ou élevées subissent une transition de l'état liquide vers l'état gel.

## Mots clés :

Microémulsion, polymère, Diffusion des neutrons aux petits angles (DNPA), Dynamique moléculaire (DM), Les équations intégrales (OZ), La relation de fermeture (HNC), Structure, Dynamique, Interaction, Transition sol/gel.



## A MULTI-SCALE STUDY OF THE STRUCTURAL AND DYNAMIC PROPERTIES OF MICROEMULSIONS GRAFTED WITH TELECHELIC POLYMERS: COMBINED EXPERIMENTAL APPROACHES AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS.

### Abstract :

The objective of this work is to study the effect of adding hydrophobically modified polymers ( $PEO-C_{12}H_{25}$ ) on the interaction, structural and dynamic properties of a cationic oil/water microemulsion system, which serves as a model for drug delivery. We combined small-angle neutron scattering (SANS) experiments, Ornstein-Zernike integral equations solved numerically using the HNC closure relation, and molecular dynamics (MD) simulation methods. First, for a highly diluted microemulsion system with volume fraction  $\Phi = 2\%$ , analysis of the SANS data showed that the size and spherical shape of the microemulsion remain constant, with an average radius of  $R_m = 61\text{\AA}$ , when the number of polymers  $N_p$  ( $PEO-C_{12}H_{25}$ ) per droplet is ( $N_p \leq 20$ ). In contrast, a reduction in droplet radius is observed when the number of polymers exceeds this value ( $N_p > 20$ ), a behaviour explained by emulsification failure. Furthermore, we observed that the addition of polymers induces a steric repulsive interaction between microemulsion droplets, thereby improving their solubility. We combined HNC theory and DPNA data to validate the model of interaction potential between particles in the system studied. Secondly, we used DM simulations to explore the impact of telechelic polymers ( $PEO-C_{12}H_{25}$ ) on the structural and dynamic properties of a highly diluted microemulsion system ( $\Phi = 2.8\%$ ) at different temperatures. We showed that the addition of these polymers induces steric repulsion, which improves the stability and solubility of microemulsions and modifies their dynamic behaviour, leading to slower diffusion. On the other hand, an increase in temperature leads to increased diffusion of microemulsion droplets. We also demonstrated that this diffusion always remains normal, in accordance with diffusion theory. The results obtained provide a better understanding of the control of microemulsion droplet diffusion, particularly for drug delivery, where body temperature is higher than ambient temperature. Finally, we examined the sol-gel transition as a function of the number of steric polymers adsorbed on the surface of the microemulsion droplets. Using DM simulations, we analysed the structural properties, particle interactions and dynamics of the system. The results show that above a critical number  $N_c$  of polymers, systems with moderate or high volume fractions undergo a transition from the liquid to the gel state.

### Key Words :

Microemulsion, polymer, Small Angle Neutron Scattering (SANS), Molecular Dynamics (MD), Integral Equations (OZ), Closure Relation (HNC), Structure, Dynamics, Interaction, Sol-Gel Transition.