



**Atelier sur les Solvants à Eutectiques  
Profonds organisé par le GDR SolvATE**

**10-11 oct. 2019**

**Rennes  
France**





## Jeudi 10 octobre 2019

### Heures

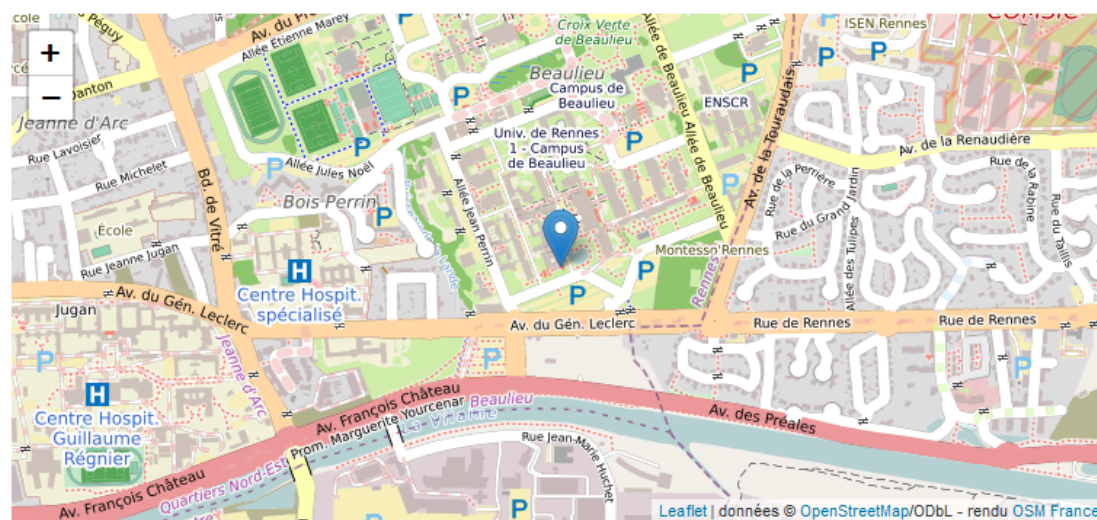
- 13:00 - 14:30      Accueil - Buffet et café (Véranda - ISCR - Bat. 10B)
- 14:30 - 15:00      Introduction (Amphithéâtre D. Grandjean - Bat. 10B)
- 15:00 - 16:15      Conférence invitée (Amphithéâtre D. Grandjean - Bat. 10B) - Chair : Karine Vigier
- 15:00 - 16:15      › DES – Do they exist? And why you should you be concerned about it... -  
*João Araújo Pereira Coutinho, CICECO – Aveiro Institute of Materials, Department of Chemistry, University of Aveiro*
- 16:15 - 16:45      Pause café (Hall - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu)
- 16:45 - 18:15      Apports conjugués modélisation/expérience (Amphithéâtre D. Grandjean - Bat. 10B) - Chair : Rachel Schurhammer
- 16:45 - 17:15      › Insights into the phase behaviour of Deep Eutectic Solutions - *Laura Kollau, Laboratoire de Chimie de l'ENS de Lyon*
- 17:15 - 17:45      › A brief introduction on force field development for Deep Eutectic Solvents. Achievements, drawbacks and outlooks. - *Alain CHAUMONT, Laboratoire de Chimie Moléculaire de l'Etat Solide*
- 17:45 - 18:15      › Apport de la simulation de dynamique moléculaire pour la compréhension des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques des liquides moléculaires - *Frédéric Affouard, Unité Matériaux Et Transformations*



## Vendredi 11 octobre 2019

Heures	événement
09:00 - 10:00	Propriétés fondamentales et méthodes de caractérisation (Télé-amphithéâtre - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu) - Chair : Corinne Lagrost
09:00 - 09:30	› SUPRADES: NEW GREEN SOLVENT WITH SUPRAMOLECULAR PROPERTIES - <i>David Landy, Unité de chimie environnementale et interactions sur le vivant</i>
09:30 - 10:00	› Contribution de la spectroscopie Raman basse fréquence à l'étude de systèmes moléculaires désordonnés: de la physique fondamentale au domaine pharmaceutique - <i>Alain Hedoux, Unité Matériaux et Transformations - UMR 8207</i>
10:00 - 10:20	Pause café (Hall - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu)
10:20 - 11:40	Propriétés fondamentales et méthodes de caractérisation (Télé-amphithéâtre - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu) - Chair : Fabienne Gauffre
10:20 - 10:50	› Experimental assessment of the structural and dynamical homogeneity of DES at the nanoscale. - <i>Denis Morineau, Institut de Physique de Rennes</i>
10:50 - 11:20	› Cinétique de Transfert Electronique dans les DES - <i>Philippe Hapiot, CNRS - ISCR</i>
11:20 - 11:40	› Extraction de composés naturels, de la théorie à la pratique. - <i>Nicolas Papaïconomou, Institut Chimie Nice</i>
11:40 - 12:30	Table Ronde - Propriétés fondamentales - Méthodes de caractérisation & Théorie (Télé-amphithéâtre - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu) - Chairs : Natalia Correia - Alain Chaumont - Denis Morineau
12:30 - 14:00	Déjeuner (Hall - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu)
14:00 - 15:30	Applications et débouchés industriels (Télé-amphithéâtre - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu)
14:00 - 14:30	› Effect of Choline Chloride on the Synthesis of Furfural from a Highly Concentrated Feed of Xylose - <i>Karine De Oliveira Vigier, INSTITUT DE CHIMIE DES MILIEUX ET MATERIAUX DE POITIERS</i>
14:30 - 15:00	› Développement de systèmes innovants à base de solvants eutectiques profonds destinés au traitement des leishmanioses cutanées - <i>François-Xavier LEGRAND, Institut Galien Paris-Sud</i>
15:00 - 15:30	› Deep eutectic solvent for extraction of natural product - <i>Lucie PERCEVAULT, Institut des Sciences Chimiques de Rennes</i>
15:30 - 16:30	Table Ronde - Applications et débouchés industriels (Télé-amphithéâtre - PNRB - Pôle Numérique Rennes Beaulieu) - Chairs : Margarida Costa Gomes - Karine Vigier - Ludovic Paquin

## PLAN D'ACCÈS



Le workshop se déroulera sur le **Campus de Beaulieu à l'Université de Rennes 1**

263 Avenue Général Leclerc - Rennes

L'accueil et la première journée se tiendront l'Amphithéâtre D. Grandjean (bat. 10B) de l'Institut des Sciences Chimiques de Rennes.

Amphithéâtre D. Grandjean : <https://goo.gl/maps/rnneSxJwES5dsKgj7>

La seconde journée se tiendra au Pôle Numérique Rennes Beaulieu (PNRB) (Entrée sud du campus)

PNRB : <https://goo.gl/maps/PNRafG9K2vmqoXtJA>

### Accès

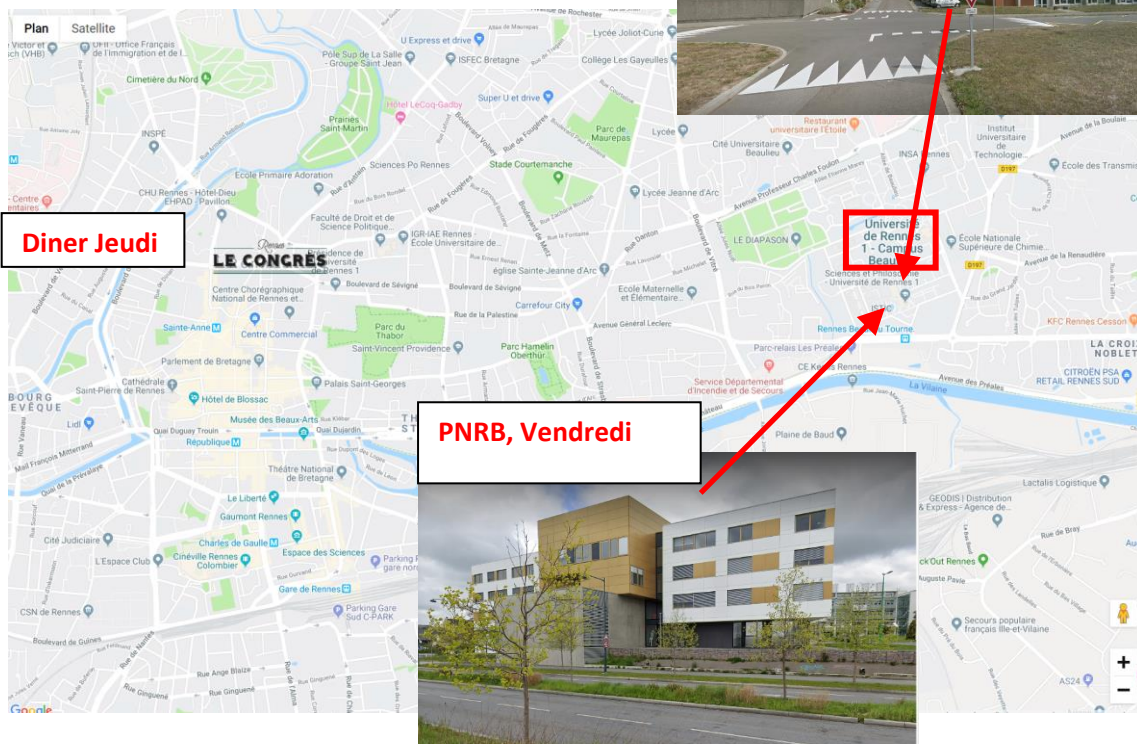
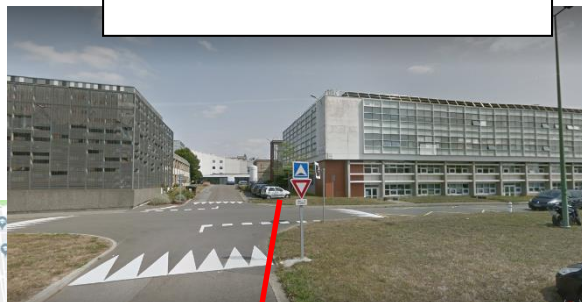
**Depuis Gare SNCF** : Métro de Gare -> Station république

Prendre ensuite Lignes de bus C4, C6 ou C40 depuis la station République - > arrêt Les Préales

**Depuis aéroport** : Lignes de bus C6 jusqu'à arrêt Les Préales

## Plan

**Amph. Grandjean, Bat 10B, Jeudi**



## Diner Jeudi soir au restaurant



Le Congrès - Restaurant à Rennes 21 rue de Saint Malo 35000

02 99 63 89 39



## Comités

Comité Scientifique GDR SolvATE

Frédéric Affouard, UMET Lille

Carine Clavaguéra, LPC Orsay

Abdenacer Idrissi, LASIR Lille

Francesca Ingrosso, LPCT Nancy (Directrice)

Laurent Joly, ILM Lyon

Anne Milet, DCM Grenoble

Denis Morineau, IPR Rennes

Thierry Tassaing, ISM Bordeaux

Comité d'Organisation

Alain Chaumont, MSM Strasbourg

Fabienne Gauffre, ISCR Rennes

Corinne Lagrost, ISCR Rennes

Denis Morineau, IPR Rennes

Ludovic Paquin, ISCR Rennes

Rachel Schurhammer, MSM Strasbourg

Karine Vigier, IC2MP Poitiers

# réseau

LIGNES URBAINES  
LIGNES MÉTROPOLITAINES  
PROCHES DE RENNES

## Où acheter les titres de transport STAR ?

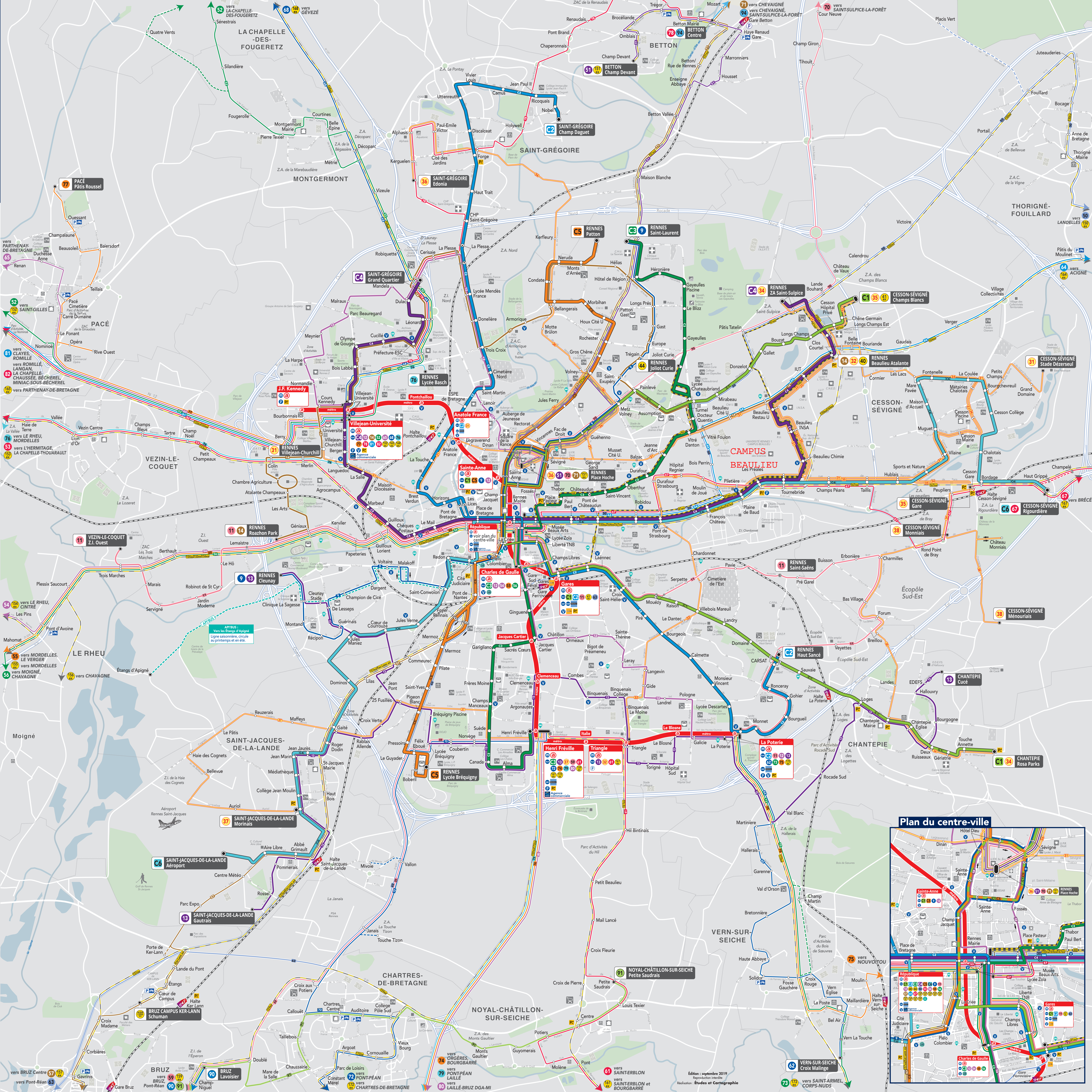
- Chez les commerçants agréés STAR**  
Plus de 130 commerçants dans les 43 communes de Rennes Métropole. Plus d'infos sur star.fr
- Dans les distributeurs automatiques STAR**  
dans les stations de métro
- Dans les distributeurs automatiques du Crédit Mutuel de Bretagne**  
liste des distributeurs disponible sur star.fr
- À bord des bus**  
auprès des agents commerciaux de conduite.  
Ticket 1 heure  
+ 100€ Quatre Air
- Sur www.star.fr**  
de commander et de recharger ma carte KorriGo Services 24h/7j.  
en ligne, sur star.fr  
+ auprès des 3 agences STAR
- À l'espace KorriGo**  
à la station de métro Gare  
du lundi au samedi de 7h à 20h  
du dimanche et jours fériés (hors périodes d'été) de 13h à 20h
- La Maison du vélo**  
45 rue du Puits Mouger  
du mardi au samedi de 10h à 19h  
Horaires d'été : du mardi au samedi, de 10h à 18h, du 15 septembre 2020 au 14 avril 2021.
- Infostar 09 70 821 800**  
du lundi au samedi de 7h à 20h
- Dans l'une des 3 agences STAR**  
  - Agence STAR République  
12 rue du Puits Mouger  
du lundi au samedi de 8h30 à 18h30, du 15 septembre 2020 au 14 avril 2021.
  - Agence STAR Henri Fréville  
Station de métro  
du lundi au samedi de 7h30 à 12h30.
  - Agence STAR J.F. Kennedy  
Station de métro  
du lundi au samedi de 7h30 à 12h30.

## Légende

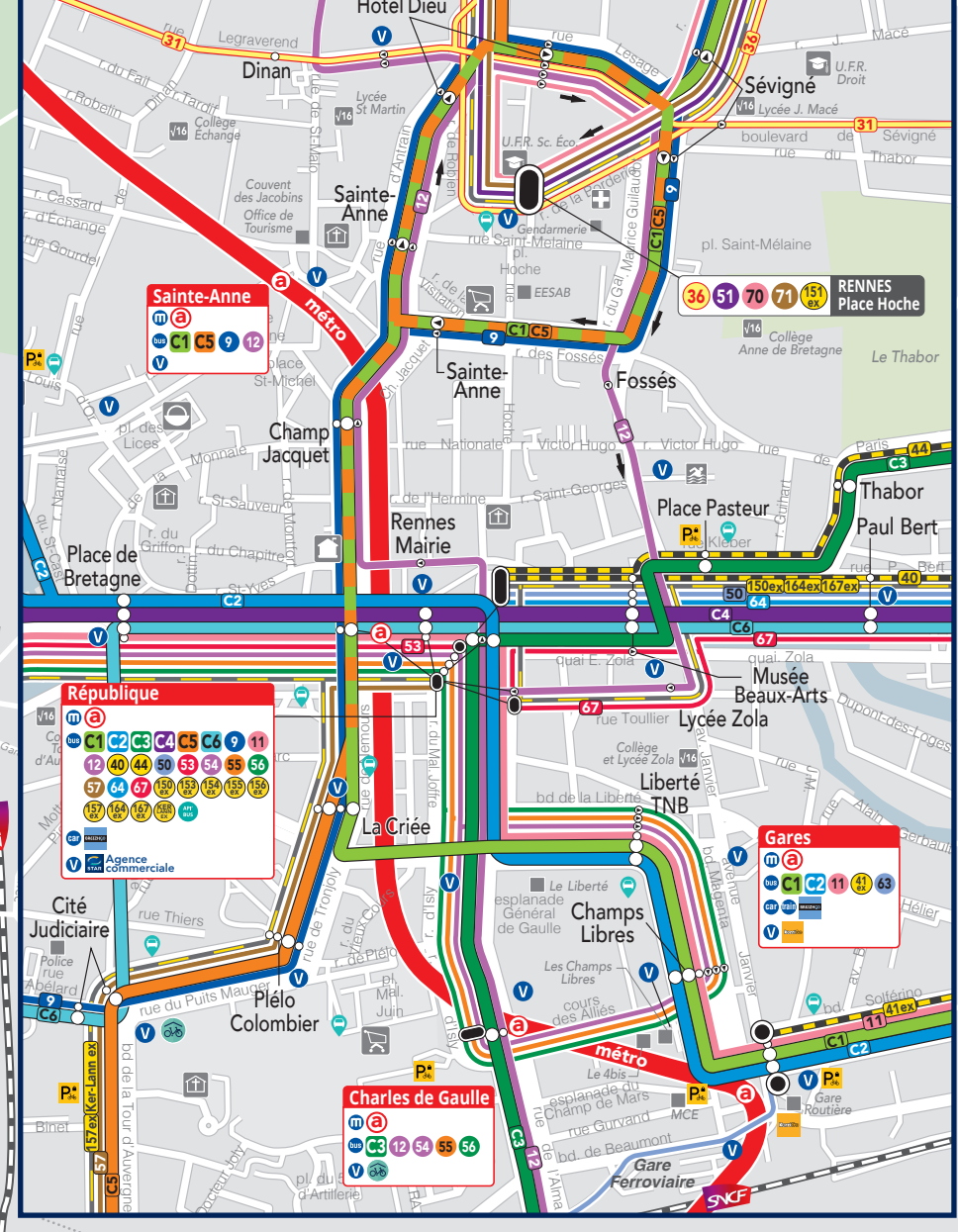
- Limite de commune
- 🚗 Parking vélo
- 🎓 Université et école supérieure
- 🏫 Lycée et collège
- 🏥 Hôpital et clinique
- 🏛️ Mairie
- 🏪 Centre commercial
- 🏪 Marché
- 🏪 Église
- 🏪 Équipement sportif
- 🏪 Piscinerie
- 🏪 Patinoire
- 🏪 Autre équipement
- 🚗 Station STAR, le vélo
- 🚗 Citiz : auto-partage
- 🚗 Parc relais gardienné
- 🚗 Parc relais non gardienné
- 🚗 Abris-vélos LE vélo PARK
- 🏢 Agence commerciale
- 🚗 La Maison du vélo
- 🏠 Espace KorriGo
- 🚗 Halte et Gare ferroviaire
- 🚗 Réseau de transport de Bretagne
- 🚗 Ligne et station de métro
- 🚗 Correspondance des lignes de bus à la station de métro
- 🚗 Ligne Chronostar (exemple de la ligne C1)
- 🚗 Ligne inter-quartier
- 🚗 Autre ligne
- 🚗 Desserte à certaines heures
- 🚗 Ligne express
- 🚗 Arrêt dans les deux sens
- 🚗 Arrêt dans un seul sens
- 🚗 Terminus des lignes

## Lignes urbaines

- Le métro :**
  - À partir de 5h10 le matin et jusqu'à 1h45 le soir
  - La solution la plus rapide pour se déplacer du Nord au Sud de Rennes, avec un métro toutes les 90 secondes.
  - 🚇 J.F. Kennedy
  - 🚇 La Poterie
- Les lignes CHRONOSTAR :**
  - À partir de 5h30 le matin et jusqu'à 1h35 le soir
  - Ligne de bus haute qualité de service : un bus toutes les 7 à 10 minutes (12 minutes pour la C6) toute la journée.
  - 🚗 Cesson-Sévigné Champs Blancs ..... Chantepie Rosa Parks
  - 🚗 Saint-Grégore Champ Daguet ..... Haut Sancé
  - 🚗 Saint-Laurent ..... Henri Fréville
  - 🚗 Grand Quartier ..... ZA Saint-Sulpice
  - 🚗 Patton ..... Lycée Bréquigny
  - 🚗 Cesson-Sévigné Rigourdière ..... Saint-Jacques Aéroport
- Les lignes urbaines :**
  - À partir de 6h le matin (5h30 pour la ligne 9), elles circulent à Rennes avec un bus toutes les 10 à 15 minutes.
  - 🚗 Saint-Laurent ..... Cleunay
  - 🚗 Z.I. Ouest / Roazon Park ..... Saint-Saëns / La Poterie
  - 🚗 Villejean-Université ..... La Poterie
  - 🚗 Saint-Jacques Gautrais / Rennes Cleunay ..... Chantepie Cucé
  - 🚗 Roazon Park ..... Beaulieu Atalante
- Les lignes inter-quartiers :**
  - À partir de 6h30 jusqu'à 20h30.
  - Pour aller d'un quartier à l'autre sans passer par le centre-ville.
  - 🚗 Villejean-Churchill ..... Cesson-Sévigné Stade Dézeureul
  - 🚗 Triangle ..... Beaulieu Atalante
  - 🚗 ZA Saint-Sulpice ..... Chantepie Rosa Parks
  - 🚗 Cesson-Sévigné Gare ..... Cesson-Sévigné Champs Blancs
  - 🚗 Place Hoche ..... Saint-Grégore Edonia
  - 🚗 Henri Fréville ..... Saint-Jacques Morinai
  - 🚗 Cesson-Sévigné Morinai ..... Cesson-Sévigné Ménéourai
- Les lignes Express :**
  - Elles circulent en heures de pointe, pour se déplacer rapidement et en direct entre le centre-ville, les campus, les zones d'activités ou communes de Rennes Métropole.
  - 🚗 République ..... Beaulieu Atalante
  - 🚗 Gares ..... Cesson-Sévigné Champs Blancs
  - 🚗 République ..... Joliot Curie
- Le métro (et toutes les lignes de bus (sauf ligne 9)) sont accessibles aux personnes à mobilité réduite.**  
\*Métrobus amputés et fauteuils confortables



## Plan du centre-ville





# Atelier sur les Solvants à Eutectiques Profonds organisé par le GDR SolvATE

10-11 oct. 2019

Rennes

France

# Table des matières

Cinétique de Transfert Electronique dans les DES, Fangchen Zhen [et al.] . . . .	3
DES – Do they exist? And why you should you be concerned about it..., João Araújo Pereira Coutinho . . . . .	4
SUPRADES: NEW GREEN SOLVENT WITH SUPRAMOLECULAR PROPERTIES, David Landy [et al.] . . . . .	5
Contribution de la spectroscopie Raman basse fréquence à l'étude de systèmes moléculaires désordonnés: de la physique fondamentale au domaine pharmaceutique, Laurent Paccou [et al.] . . . . .	6
Développement de systèmes innovants à base de solvants eutectiques profonds destines au traitement des leishmanioses cutanees, François-Xavier Legrand . . . .	7
Deep eutectic solvent for extraction of natural product, Lucie Percevault [et al.] .	8
Experimental assessment of the structural and dynamical homogeneity of DES at the nanoscale., Denis Morineau [et al.] . . . . .	9
Apport de la simulation de dynamique moléculaire pour la compréhension des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques des liquides moléculaires, Frederic Affouard . . . . .	10
Effect of Choline Chloride on the Synthesis of Furfural from a Highly Concentrated Feed of Xylose, Karine De Oliveira Vigier . . . . .	11
A brief introduction on force field development for Deep Eutectic Solvents. Achievements, drawbacks and outlooks., Alain Chaumont . . . . .	12
Extraction de composés naturels, de la théorie à la pratique., Nicolas Papaïconomou	13
Insights into the phase behaviour of Deep Eutectic Solutions, Laura Kollau [et al.]	14
<b>Liste des participants</b>	<b>14</b>



# Cinétique de Transfert Electronique dans les DES

Fangchen Zhen <sup>1</sup>, Ludovic Paquin <sup>2</sup>, Corinne Lagrost <sup>3</sup>, Philippe Hapiot \* <sup>4</sup>

<sup>1</sup> ISCR – CNRS UR1, Université de Rennes I – France

<sup>2</sup> ISCR – Université de Rennes 1, Université de Rennes 1 – France

<sup>3</sup> ISCR – Université de Rennes 1, Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS – France

<sup>4</sup> CNRS - ISCR – Université de Rennes 1 : UR1 – France

Pour un couple redox simple, la cinétique de transfert d'électron est en grande partie contrôlée par l'évolution de la solvation accompagnant le changement de charge au cours du processus électrochimique. L'étude de la cinétique de ce processus dans un DES fournit donc une vision directe de la solvation dans le milieu.

Dans ce contexte, les constantes de vitesse de transfert d'électron ont été mesurées pour plusieurs couples rédox dans les DES et comparées aux valeurs dans des liquides ioniques et des solvants organiques classiques

Les constantes de vitesse mesurées sont similaires à celles observées dans les solvants classiques et beaucoup plus élevées que dans les liquides ioniques, ce qui montre l'intérêt de ces milieux par rapport aux liquides ioniques mais posent aussi des questions fondamentales sur la nature de la solvation dans ces milieux.

---

\*Intervenant

# DES – Do they exist? And why you should you be concerned about it...

João Araújo Pereira Coutinho \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> CICECO – Aveiro Institute of Materials, Department of Chemistry, University of Aveiro – Portugal

After years of ionic liquids fad a new star seems to shine bright on thermodynamicists sky: Deep Eutectic Solvents (DES). Proposed more than a decade ago by Abbott and co-workers they seem to have been overshadowed by the ionic liquids for a long time, but as expectations about ionic liquids floundered they found a surprising new interest from the scientific community as cheaper and greener ionic liquid derivatives. Admittedly a number of interesting applications have been reported but the understanding about DES and its nature seems to be shrouded in myths that often hurt the sensibility of a thermodynamicist.

Having been working with ionic liquids for a long time and being forced to face the DES torrent our research group felt compelled to study them not just from an applied point of view but in an attempt to understand the nature of these mixtures, for mixtures they are, and to use the concepts of macroscopic thermodynamics, along with some tools of molecular simulation, to reach for an understanding of the nature of these mixtures.

This lecture will be about our findings that failed to identify DES where everybody reported they were, finding DES where nobody had look for them, and attempting at demystifying many ideas, and wrong assumptions, that are widespread in the literature. Using solid-liquid phase diagrams of these mixtures, that are surprisingly scarce in the literature, and the concepts of non-ideality, we will poke into the very nature of the liquid phase of a wide number of systems reported as DES to show that most are nothing else than ideal eutectic mixtures, and that some basic thermodynamic knowledge can prevent you to be a victim of the DES craze.

---

\*Intervenant

# SUPRADES: NEW GREEN SOLVENT WITH SUPRAMOLECULAR PROPERTIES

David Landy \* <sup>1</sup>, Tracy El Achkar <sup>1</sup>, Tarek Moufawad <sup>1</sup>, Steven Ruellan <sup>1</sup>,  
Margarida Costa Gomes <sup>2</sup>, Sophie Fourmentin <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Unité de chimie environnementale et interactions sur le vivant – Université du Littoral Côte d’Opale :  
EA4492 – France

<sup>2</sup> Laboratoire de Chimie – École normale supérieure - Lyon (ENS Lyon) – France

In the last decade, deep eutectic solvents (DES) have emerged as a promising alternative to conventional solvents<sup>1</sup>. DES are cheap to produce, their synthesis is quite simple and compounds with high purity and no by-products are obtained. Some recent publications reported that DES appear to have some toxicity, therefore, the use of natural origin molecules to produce DES has been proposed and called natural deep eutectic solvent (NADES)<sup>2</sup>. In this study, we synthesized, characterized and investigated the solubilisation properties of newly discovered DES composed of cyclodextrin (CD), a supramolecular entity obtained from starch, and hydrogen bond donors (HBD). These new solvents (SUPRADES) are liquid at room temperature. Density, viscosity, differential scanning calorimetry and NMR measurements were performed in order to characterize these new DES. Finally, the solubilisation properties of these solvents were evaluated towards various organic compounds (aroma, essential oil, dye, pollutant and pharmaceutical ingredient)<sup>3,4</sup>. For example, SUPRADES are able to lower the vapour/liquid partition coefficient ( $C_g/C_l$ ) of *trans*-anethole by three orders of magnitude and to enhance the solubility of fluticasone propionate by four orders of magnitude, if compared to water.

## References

1. Abbott AP, Capper G, Davies DL, Rasheed RK, Tambyrajah V. Chem Commun. 2003;7(1):70-1.
2. Choi YH, van Spronsen J, Dai Y, Verberne M, Hollmann F, Arends IW, Witkamp GJ, Verpoorte R. Plant Physiol. 2011;156(4):1701-5.
3. Moufawad T, Moura L, Ferreira M, Bricout H, Tilloy S, Monflier E, Costa Gomes M, Landy D, Fourmentin S. ACS Sustainable Chemistry and Engineering. 2019;7 (6):6345-6351
4. Fourmentin S, Landy D, Moura L, Tilloy S, Bricout H, Ferreira M. Process for purifying a gaseous effluent. WO 2018/091379 A1, 2018.

---

\*Intervenant

# Contribution de la spectroscopie Raman basse fréquence à l'étude de systèmes moléculaires désordonnés: de la physique fondamentale au domaine pharmaceutique

Laurent Paccou <sup>1</sup>, Yannick Guinet <sup>1</sup>, Alain Hedoux \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Unité Matériaux et Transformations - UMR 8207 – Institut National de la Recherche Agronomique : UMR0638, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille, Université de Lille, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8207 – France

L'analyse du domaine basse fréquence de la diffusion Raman est encore très peu répandue car elle nécessite un équipement spécifique, longtemps lié à une configuration très dispersive et très onéreuse du spectromètre. Ce domaine est maintenant accessible avec des spectromètres de routine en utilisant une nouvelle génération de filtres. Cette présentation montrera l'information très riche qui peut-être tirée de l'étude de ce domaine spectral et les traitements de spectres nécessaires. Les études de différents types de systèmes moléculaires désordonnés plus ou moins complexes seront présentées illustrant des mécanismes de physique fondamentales (dévitrification) ainsi que des applications aux défis pharmaceutiques actuels.

---

\*Intervenant

# Développement de systèmes innovants à base de solvants eutectiques profonds destinés au traitement des leishmanioses cutanées

François-Xavier Legrand \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Galien Paris-Sud (CNRS UMR 8612) – CNRS : UMR8612, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay, – France

-

---

\*Intervenant



# Deep eutectic solvent for extraction of natural product

Lucie Percevault \* <sup>1</sup>, Ludovic Paquin , Fabienne Gauffre , Emmanuelle Limanton , Corinne Lagrost

<sup>1</sup> Institut des Sciences Chimiques de Rennes – Université de Rennes 1, Centre National de la Recherche Scientifique – France

Résumé à venir

---

\*Intervenant

# Experimental assessment of the structural and dynamical homogeneity of DES at the nanoscale.

Denis Morineau \* <sup>1</sup>, Aicha Jani

<sup>1</sup> Institut de Physique de Rennes (IPR) – Université de Rennes 1, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR6251 – Bâtiment 11A , B, C, E – 10B263 av. Général Leclerc35042 Rennes cedex FRANCE, France

---

\*Intervenant

# Apport de la simulation de dynamique moléculaire pour la compréhension des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques des liquides moléculaires

Frederic Affouard \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Unité Matériaux Et Transformations – Univ. Lille, CNRS, INRA, ENSCL, UMR 8207 - UMET -  
Unité Matériaux et Transformations, 59000 Lille, France – France

Apports de la simulation de dynamique moléculaire pour la compréhension  
des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques des liquides moléculaires

---

\*Intervenant

# Effect of Choline Chloride on the Synthesis of Furfural from a Highly Concentrated Feed of Xylose

Karine De Oliveira Vigier \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> INSTITUT DE CHIMIE DES MILIEUX ET MATERIAUX DE POITIERS (IC2MP) – Université de Poitiers, CNRS : UMR7285 – 4 RUE MICHEL BRUNET BAT B27 - CHIMIE 86022 POITIERS CEDEX, France

S. Jiang, C. Verrier, Y. Queneau, C. Ma, M. Pera-Titus, F. Jérôme, K. De Oliveira Vigier

---

\*Intervenant

# A brief introduction on force field development for Deep Eutectic Solvents. Achievements, drawbacks and outlooks.

Alain Chaumont \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Chimie Moléculaire de l'Etat Solide – Université de Strasbourg, CNRS, UMR 7140 -  
Chimie de la Matière Complex – France

A. Chaumont, E. Engler and R. Schurhammer

---

\*Intervenant

# Extraction de composés naturels, de la théorie à la pratique.

Nicolas Papaïconomou \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Chimie Nice – CNRS : UMR7272 – France

-

---

\*Intervenant

# Insights into the phase behaviour of Deep Eutectic Solutions

Laura Kollau \* <sup>1</sup>, Mark Vis <sup>1</sup>, Margarida Costa Gomes <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Chimie de l'ENS de Lyon – École Normale Supérieure - Lyon – France

Previously we presented a simple theory to quantify the liquid window of deep eutectic systems

(DES), which can form when two solids are mixed at room temperature. A well-known example of a DES is a mixture of choline chloride–urea.<sup>1</sup> Being mixtures, the properties of the resulting liquid can be tuned by careful selection of its constituents. However, it is yet unknown how the molecular properties influence the extent of the liquid window. DES exhibit a freezing point depression far greater than predicted by ideal behaviour theory, often explained by hydrogen bonding. We show that it is possible to quantify the interactions between the constituents of the DES by applying regular solution theory using a single interaction parameter.<sup>2</sup> By adopting a Redlich–Kister-like polynomial expansion we show that we can describe the liquid window of three DES with varying degrees of non-ideality. This theory can be considered as an extension of regular solution theory and enables physical interpretation of the fit parameters.<sup>3,4</sup> In the future we aim to use apolar and polar gases like methane, carbon dioxide or sulphur dioxide as probes of the molecular structure and interactions in carefully chosen eutectic mixtures. The absorption of these gases will be studied as a function of temperature and pressure as their behaviour in the liquid mixtures can reveal insights into the relation of the building blocks and the solvation in DES.

1. Abbott, A. P., Capper, G., Davies, D. L., Rasheed, R. K. & Tambyrajah, V. Novel solvent properties of choline chloride/urea mixtures. *Chem. Commun.* 70–71 (2003).
2. Kollau, L. J. B. M., Vis, M., van den Bruinhorst, A., Esteves, A. C. C. & Tuinier, R. Quantification of the liquid window of Deep Eutectic Solvents. *Chem. Commun.* 54, 13351-13354 (2018).
3. Kollau, L. J. B. M., Vis, M., van den Bruinhorst, A., de With, G. & Tuinier, R. Activity modelling of the solid-liquid equilibrium of deep eutectic solvents. *Pure Appl. Chem.* 91, 1341-1349 (2019).
4. Kollau, L.J.B.M, Vis, M., van den Bruinhorst, A., Tuinier, R., & de With, G. Entropy models for the description of the solid-liquid regime of deep eutectic solutions. Submitted.

---

\*Intervenant

# Liste des participants

- Affouard Frederic
- Bassil Patricia
- Billard Isabelle
- Chaumont Alain
- Chevance Soizic
- Correia Natalia
- Costa Gomes Margarida
- Coutinho Joao Araujo Pereira
- De Oliveira Vigier Karine
- Deguelle Clément
- Gargadenec-Legouin Béatrice
- Gauffre Fabienne
- Guiheneuf Solene
- Guillemin Jean-Claude
- Hapiot Philippe
- Hédoux Alain
- Jani Aicha
- Kollau Louise
- Lagrost Corinne
- Landy David
- Le Devehat Françoise
- Legrand François-Xavier
- Limanton Emmanuelle
- Mark Vis
- Milet Anne



- Moréac Alain
- Morineau Denis
- Nicolas Pauline
- Paccou Laurent
- Papaiconomou Nicolas
- Paquin Ludovic
- Percevault Lucie
- Sayede Adlane
- Schurhammer Rachel
- Zhao Hengli

# Liste des auteurs

affouard, frederic, 10

CHAUMONT, Alain, 12

Costa Gomes, Margarida, 5, 14

Coutinho, João Araújo Pereira, 4

De Oliveira Vigier, Karine, 11

El Achkar, Tracy, 5

FOURMENTIN, Sophie, 5

Gauffre, Fabienne, 8

Guinet, Yannick, 6

Hapiot, Philippe, 3

Hedoux, Alain, 6

Jani, Aicha, 9

Kollau, Laura, 14

Lagrost, Corinne, 3, 8

Landy, david, 5

LEGRAND, François-Xavier, 7

Limanton, Emmanuelle, 8

Morineau, denis, 9

Moufawad, Tarek, 5

Paccou, Laurent, 6

Papaïconomou, Nicolas, 13

PAQUIN, Ludovic, 3, 8

PERCEVAULT, Lucie, 8

Ruellan, Steven, 5

Vis, Mark, 14

Zhen, Fangchen, 3

