

Etude de l'interaction polymère-solide par une approche multi-échelle

L'addition de charges (espèce solide) de dimensions nanométriques dans un polymère peut modifier considérablement les propriétés mécaniques et rhéologiques du matériau composite par rapport à celles du fondu de polymère. La compréhension des propriétés des chaînes de polymères à l'interface polymère-charge est essentielle pour prédire les propriétés de ces matériaux, ou en concevoir de nouveaux possédant des propriétés spécifiques. Cependant, l'accès aux propriétés locales proches de la surface est difficile à réaliser expérimentalement. La simulation moléculaire est alors une alternative intéressante dès lors qu'elle permet un couplage entre les propriétés atomistiques et macroscopiques.

La principale difficulté pour les méthodes de simulation moléculaires de type dynamique moléculaire et Monte Carlo est de pouvoir échantillonner les échelles spatiales et temporelles caractéristiques des relaxations de chaînes de polymères qui peuvent aller jusqu'à la milliseconde. Ces échelles ne sont pas accessibles aux simulations « tous atomes ». Il faut donc simplifier la modélisation du système et utiliser des modèles dits gros grains. Dans cette représentation, une particule correspond à plusieurs monomères.

Afin de transférer la spécificité chimique d'un groupe d'atomes à une particule gros grains, il est possible de développer des potentiels à partir de configurations atomistiques en suivant une approche « bottom-up ». Cette approche fonctionne relativement bien pour des fondus de polymères. Dans le cas de l'interaction avec une surface, il faut alors développer le potentiel pour l'interaction polymère-surface et ce type d'étude est beaucoup moins répandu, étant donné que l'hétérogénéité du système complique fortement le processus.

Nous proposons dans cette thèse d'aborder l'interaction polymère-surface à une échelle mésoscopique afin d'étudier les propriétés structurale et dynamique de chaînes de polymère au voisinage de la surface. Le comportement thermodynamique et mécanique des chaînes de polymère confinées pourra être validée par des simulations mésoscopiques à potentiel chimique constant afin de comparer le profil de la force normale en fonction du taux de compression à celui obtenu par l'expérience. Cette comparaison est essentielle pour s'assurer de la transférabilité du modèle mésoscopique à différentes pressions.

Cette thèse réalisée en partenariat avec le CEA, qui fournira des systèmes représentatifs de ces problèmes, représente un travail méthodologique important, et offre de nouvelles perspectives pour les modèles mésoscopiques en vue de la prédiction quantitative de propriétés mécaniques et rhéologiques.

Contacts :

Patrice Malfreyt, Professeur, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, ICCF, UMR CNRS 6296, Tél : 04 73 40 72 04, Patrice.Malfreyt@univ-bpclermont.fr
E. Bourasseau, CEA/DAM/DIF, Arpajon, Emeric.bourasseau@cea.fr.

Financement : Région Auvergne + CEA,
Contrat Doctoral avec l'Université Blaise Pascal