

PROPOSITION DE SUJET DE MASTER RECHERCHE
(Année 2006-2007)

Domaine de recherche : modélisation moléculaire, physico-chimie des polymères

Sujet : MODELISATION MOLECULAIRE DE LA DIFFUSION DE MOLECULES LINEAIRES DANS UNE MATRICE DE POLYETHYLENE.

Contexte

Parce que la diffusion modifie la réactivité des additifs (ex. antioxydants) et leur capacité à se désorber, la compréhension et la maîtrise des processus de diffusion moléculaire au sein des matériaux plastiques est particulièrement importante pour l'optimisation de leur durée de vie et leurs fonctions d'usage. Il n'existe pas aujourd'hui de modèles généraux pour prédire les coefficients de diffusion des molécules natives ou dégradées de type additifs (masses molaires comprises entre 100 et 1000 g·mol⁻¹) dans les matrices polymères enchevêtrées. Ces travaux visent à simuler et à analyser, à l'échelle moléculaire, les trajectoires d'alcane linéaires, dont la longueur est inférieure à la longueur d'enchevêtrement, dans une matrice de polyéthylène. Cette première étude contribuera à une première typologie des mouvements coopératifs du système polymère+additif responsables de la translation et donc de la marche aléatoire de l'additif au sein de la matrice. Parce que les alcanes ne sont que des modèles très grossiers des additifs, ces travaux pourront être poursuivis dans le cadre d'une thèse cofinancée par l'INRA et le CNRS.

Ces travaux s'inscrivent dans un Contrat de Programme de Recherche interdisciplinaire du CNRS 2006-2010 « Composite Polymer Ageing » (acronyme COPOLA) auquel participent 13 unités de recherche du CNRS, du CEA et de l'INRA et des industriels (EDF, Nexans, Laborelec, Areva). Le sujet proposé s'appuie sur une collaboration entre une équipe de l'Institut Charles Sadron spécialisée dans la théorie et la simulation des polymères et une équipe de l'Institut National de Recherche Agronomique attachée à la maîtrise du risque de contamination des aliments par les substances des matériaux des emballages.

Descriptif

A la différence de la diffusion des gaz, la translation ou la réorientation des molécules de masse intermédiaire requiert une succession de mouvements coopératifs des chaînes du polymère. L'amplitude des fluctuations requises pour leur translation dépend fortement de la taille, la rigidité et la forme de la molécule diffusante. Les premières dynamiques moléculaires ont confirmé les effets très significatifs du confinement et du piégeage de ces molécules sur le coefficient de diffusion de ces molécules. Parce que les contraintes géométriques qui contrôlent ces effets entropiques sont différentes de celles identifiées pour des chaînes enchevêtrées (ex. diffusion par reptation), les travaux visent à étudier de manière systématique les lois d'échelle qui décrivent la diffusion d'alcane linéaires « courts » dans une matrice polymère. Les trajectoires de ces molécules et les mouvements collectifs des segments de molécules qui accompagnent leurs translations seront étudiés par dynamique moléculaire appliqués à des modèles dits « gros grains » sur des échelles de temps comprises entre 10⁻⁵ s et 10⁻⁶ s.

Méthodes utilisées : dynamique moléculaire semi empirique, physique statistique (des connaissances en programmation seront appréciées).

Intitulé du Master souhaité: Matière Condensée, Chimie et Physico-chimie de la Matière, Chimie et Physico-chimie des Polymères, Chimie informatique et Théorique, Physico-chimie des Matériaux Macromoléculaires, Polymères, Spectrométries et Physico-chimie Structurales, Génie des Procédés ou tout Master incluant un volet physico-chimie.

Responsables : Hendrik Meyer (hmeyer@ics.u-strasbg.fr), Chargé de Recherche CNRS
tel. +33 (0)388 414 032 – fax. +33 (0)388 414 099
Olivier Vitrac (vitrac@ensia.fr), Chargé de Recherche INRA
tel. +33 (0)169 935 063 – fax. +33 (0)169 935 185