



**Laboratoire de Physicochimie des
Polymères et des Interfaces (LPPI)**
5, mail Gay Lussac
95031 Cergy Pontoise (FRANCE)
Phone: +33 (0) 134.257.050



Proposition de thèse

Laboratoire de Physicochimie des Polymères et Interfaces (LPPI)

Modélisation des phénomènes de mixtion/démixtion dans les mélanges de polymères

Une partie des recherches développées au LPPI concerne la synthèse et la caractérisation de réseaux interpénétrés de polymères (RIP) qui représente la seule voie d'élaboration de « mélanges à façon » de polymères qui soit stable dans le temps. Outre l'intérêt fondamental de l'élaboration de telles architectures, ces matériaux offrent d'importantes possibilités de valorisation, puisque, à leur stabilité dimensionnelle dans le temps, s'ajoutent des propriétés de résistance aux vieillissements chimique et physique [1,2].

La multiplication des combinaisons de polymères associés au sein de ces architectures nous a permis d'établir des bases fondamentales permettant de mieux comprendre l'influence des paramètres de synthèse sur la morphologie des matériaux obtenus et les propriétés qui en découlent [3,4]. Cette maîtrise nous permet aujourd'hui, de concevoir une large diversité de matériaux aux propriétés nouvelles et modulables, pour une application préalablement ciblée. Plus récemment, la synthèse de tels matériaux a été développée en 2D, à l'interface air-eau, et nous avons alors mis en évidence des propriétés de mélange significativement différentes de celles obtenues en 3D [5].

Aujourd'hui, pour continuer à proposer des solutions innovantes, il est important d'étayer notre compréhension des mécanismes de séparation de phase opérant lors de l'élaboration de tels mélanges de polymères, sachant que les combinaisons de polymères aux propriétés très différentes sont les plus difficiles à maîtriser, mais également les plus intéressantes. Paradoxalement, assez peu de modèles physiques ont été développés ces dernières années afin de décrire la thermodynamique et la dynamique de tels mélanges de polymères. L'objectif de la thèse proposée est ainsi :

- de développer un modèle thermodynamique en s'appuyant sur un modèle existant [6]. En effet, avoir la capacité de prédire la compatibilité thermodynamique, ou non, de deux polymères est de la première importance pour de nombreuses applications et notamment pour envisager des associations pertinentes pour une application donnée.
- de modéliser la dynamique de séparation de phase dans les mélanges de polymères. En effet, du fait du couplage entre les forces thermodynamiques et les mécanismes polymériques de relaxation, l'incompatibilité thermodynamique de deux polymères n'est pas suffisante pour qu'une séparation de phase se produise nécessairement. Cette étude permettra alors d'identifier les paramètres expérimentaux dynamiques et thermodynamiques pouvant



Laboratoire de Physicochimie des Polymères et des Interfaces (LPPi)
5, mail Gay Lussac
95031 Cergy Pontoise (FRANCE)
Phone: +33 (0) 134.257.050



stabiliser les mélanges (température de transition vitreuse, compositions, température, pression...) et de définir le mode de séparation de phase (nucléation/croissance ou décomposition spinodale) qui en découle afin de prédire la morphologie des mélanges de polymères et donc ensuite les propriétés des matériaux.

Cette démarche sera appliquée dans un premier temps à des mélanges de polymères en 2D, puis aux réseaux (semi-) interpénétrés de polymères. Enfin, une extension aux matériaux 3D sera envisagée.

Les résultats de ces modélisations seront confrontés à ceux obtenus expérimentalement dans la littérature, c'est-à-dire aux morphologies des phases détectées dans les mélanges de polymères réalisés en 2D à l'interface eau-air et sous forme de matériaux 3D.

REFERENCES :

- [1] L.H. Sperling, Adv. Chem. Am. Chem. Soc. (1994) 3-34.
- [2] S.P. Thomas and M.N. Alghamdi in "Micro- and Nano-structured Interpenetrating Polymer Networks: From Design to Applications" (2016) Eds:Wiley & Sons, 341-364
- [3] C.Vancaeyzeele, O.Fichet, S.Boileau, D.Teyssié, Polymer, 46(2006) 2046-2060.
- [4] X. Wu, G. He, X. Yan, X. Li, W. Xiao, X. Jiang, in "Micro- and Nano-structured Interpenetrating Polymer Networks: From Design to Applications" (2016) Eds:Wiley & Sons, 29-68
- [5] A. El Haitami, M. Goldmann, F. Cousin, G. Dosseh, S. Cantin; Langmuir **31** (23), 6395–6403 (2015).
- [6] Masnada, E. M., Julien, G., & Long, D. R. (2014). Miscibility maps for polymer blends: Effects of temperature, pressure, and molecular weight. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 52(6), 419-443.

Profil du candidat :

Le candidat recherché aura une formation de physicien ou de physico-chimiste (Master 2 avec une note >12/20). L'objectif sera de développer les modèles physiques et les méthodes de résolution numérique pour décrire la thermodynamique et la dynamique dans les mélanges de polymères. Il devra ainsi avoir des compétences en thermodynamique, en physique statistique et un goût prononcé pour la physique numérique et la programmation (idéalement en C, C++ ou Python).

Financement de la thèse : Contrat doctoral CY Cergy Paris Université, début 1^{er} novembre

Encadrants : Odile Fichet, Sophie Cantin, Elian Masnada

Contact :

Elian Masnada

e-mail : elian.masnada@cyu.fr

Pièces à fournir : CV, relevés de notes de M1 and M2, lettre de motivation



**Laboratoire de Physicochimie des
Polymères et des Interfaces (LPPi)**
5, mail Gay Lussac
95031 Cergy Pontoise (FRANCE)
Phone: +33 (0) 134.257.050





**Laboratoire de Physicochimie des
Polymères et des Interfaces (LPPI)**
5, mail Gay Lussac
95031 Cergy Pontoise (FRANCE)
Phone: +33 (0) 134.257.050

