
SIMULATION DE LA FORMATION DE FILMS POLYMERES PAR SECHAGE DE COLLOÏDES AQUEUX

DIRECTEUR DE THESE : YVES HOLL

ICS, 23, RUE DU LOESS BP 84047, 67034 STRASBOURG

TEL : 03 88 41 41 16; E-MAIL : YVES.HOLL@UNISTRA.FR

La formation de matériaux polymères en couches minces par séchage de colloïdes (latex) intervient dans un grand nombre d'applications : peintures, adhésifs, papiers couchés, cosmétiques, vecteurs de principes actifs, impression jet d'encre, films biocompatibles,... Si les fondements scientifiques du séchage des liquides purs remontent au XIX^e siècle, le séchage des fluides complexes demeure à ce jour une question mal résolue, objet d'une littérature scientifique abondante. La formation d'un film mince à matrice polymère à partir d'un système colloïdal par séchage est étonnamment difficile à appréhender en raison du couplage complexe de phénomènes thermiques, de transport et mécaniques, sur des longueurs caractéristiques étendues, entre les échelles moléculaires et macroscopiques [1]. Le séchage joue un rôle crucial dans la distribution finale d'espèces présentes dans le système de départ : molécules hydrophiles, hydrophobes, tensioactives, nanoparticules de fonctionnalités diverses, particules polymères et minérales. Cette distribution a, elle-même, une influence déterminante sur les propriétés du film [2]. La complexité des mécanismes de séchage impose de les aborder conjointement par les trois approches complémentaires de la démarche scientifique : expérimentale, théorique et par simulation numérique. Cette dernière voie est prioritaire dans le projet.

Notre objectif est de développer une simulation du processus de formation d'un film mince polymère à partir d'un système colloïdal, validée par un contrôle expérimental rigoureux et confortée par des modèles théoriques, et menée suffisamment loin pour, d'une part, présenter une aide réelle à la formulation de systèmes pratiques innovants et à leur mise en œuvre dans des secteurs industriels exigeants et, d'autre part, constituer le point de départ de travaux fondamentaux plus avancés. La simulation sera basée sur le modèle des automates cellulaires, systèmes dynamiques distribués spatialement, gouvernés par l'application de règles locales. Ce type de simulation est particulièrement bien adapté à la modélisation de systèmes physiques discrets présentant des dynamiques complexes [3]. De plus, cette approche offre une grande flexibilité en permettant de considérer un grand nombre de variables d'état et de lois d'évolution. Au niveau expérimental, une difficulté majeure réside dans la détermination de la cinétique de séchage *locale*. Une part du travail initial sera consacrée à la mise au point de la mesure dynamique de la fraction volumique locale du colloïde par la technique "multi-speckle diffusing wave spectroscopy" [4], si possible résolue en épaisseur.

[1] Keddie JL, Routh AF. *Fundamentals of Latex Film Formation, Processes and Properties*. (Springer, 2010).

[2] C. Arnold, F. Thalmann, C. Marques, P. Marie, Y. Holl, *Surfactant Distribution in Waterborne Acrylic Films. Bulk Investigation*. Journal of Physical Chemistry B 114 (2010) 9135.

[3] B. Chopard, M. Droz. *Cellular Automata Modeling of Physical Systems* (Cambridge University Press, 1998).

[4] V. Viasnoff, F. Lequeux, D.J. Pine, *Multispeckle diffusing wave spectroscopy: a tool to study slow relaxation and time dependent dynamics*. Rev. Sci. Instrum. 73 (2002) 2336.