



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

M^r : KHATOURI Mohammed

Soutiendra : **le Samedi 24/12/2022 à 10H**

Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

**Etude structurale et dynamique de l'effet de l'addition d'un polymère
téléchélique sur la microémulsion par la simulation de dynamique
moléculaire**

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : Sciences des matériaux et procédés industriels

Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr RJEB Abdelilah	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PES	Président
Pr CHAHBOUN Adil	Faculté des Sciences et Techniques - Tanger	PES	Rapporteur & examinateur
Pr RAHMANI Abdelali	Faculté des Sciences Meknès	PES	Rapporteur & examinateur
Pr NAJI Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PH	Rapporteur & examinateur
Pr ABABOU Yahya	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PH	Examinateur
Pr AZOUGARH Abdelhafid	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PES	Examinateur
Pr FILALI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié par la simulation de la dynamique moléculaire l'effet de l'addition des polymères (PEO) sur les propriétés structurales et d'interaction de la microémulsion H/E chargée positivement. Nous avons combiné la méthode de simulation DM, les équations intégrales OZ résolues numériquement en utilisant la relation de fermeture HNC, et les expériences DNPA. Nous avons constaté que les propriétés structurales obtenues par les trois approches sont en bon accord. Les expériences DNPA ont montré que l'ajout de PEO en différentes quantités sur les microémulsions huile/eau ne change pas leurs formes et leurs tailles. Ainsi, les microémulsions sont décrites par des nanosphères légèrement polydispersées avec un rayon moyen de 62Å. Dans la première partie nous avons été intéressés à étudier l'effet de l'addition du PEO-D sur les nanogouttelettes de la microémulsion, nous avons remarqué que l'ajout du PEO-D induit une interaction répulsive de type stérique. Cette répulsion produit une augmentation de la distance moyenne entre les particules de la microémulsion. En ce qui concerne la diffusion des particules, nous avons étudié la variation du déplacement quadratique moyen (MSD) en fonction du temps. Nous avons remarqué que l'ajout du PEO₂₂₇-D réduit la diffusion des particules de microémulsion. Cette diminution est significative pour le système dense, mais pour le système dilué est faible. Dans la deuxième partie, nous avons discuté la relation interaction/structure des microémulsions recouvertes du copolymère tribloc C₁₂H₂₅-PEO- C₁₂H₂₅ (D-PEO-D) en utilisant les simulations de dynamique moléculaire (DM) comme méthode principale. L'étude a été menée pour différentes fractions volumiques ϕ , températures, et le nombre de polymères greffés en surface $n(D - PEO_{227} - D)$, avec un accent particulier sur leurs effets sur la transition sol/gel. Plus précisément, nous sommes intéressés par une étude quantitative de l'influence de la fraction volumique Φ , de la température (T), et du $n(D-PEO_{227}-D)$ sur la transition sol/gel de la microémulsion. A la fin, nous étudions d'abord la structure de la microémulsion non enrobée en fonction de Φ uniquement. Ensuite, nous déterminons la structure des microémulsions enrobées en fonction de $n(D-PEO_{227}-D)$ pour différents Φ . Enfin, nous examinons l'effet de la température sur la microémulsion non enrobée et enrobée. Nous montrons que la transition sol/gel est contrôlée par les trois paramètres principaux, Φ , T, et $n(D-PEO_{227}-D)$.

Mots clés : Microémulsion, poly (oxyde d'éthylène) (PEO), transition sol/ge, dynamique moléculaire (DM), les équations intégrales OZ, la relation de fermeture HNC, la diffusion des neutrons aux petits angles (DNPA), déplacement quadratique moyen (MSD).



STRUCTURAL AND DYNAMIC STUDY OF THE EFFECT OF THE ADDITION OF A TELECHELIC POLYMER ON THE MICROEMULSION BY MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Abstract :

In this work, we studied by molecular dynamics simulation the effect of polymer addition (PEO) on the structural and interaction properties of the positively charged O/W microemulsion. We combined the MD simulation method, the OZ integral equations solved numerically using the HNC closure relation, and SANS experiments. We found that the structural properties obtained by the three approaches are in good agreement. The SANS experiments showed that the addition of PEO in different quantity to the oil/water microemulsions does not change their shapes and sizes. Thus, the microemulsions are described by slightly polydisperse nanospheres with an average radius of 62Å. In the first part we were interested in studying the effect of the addition of PEO-D on the nanodroplets of the microemulsion, we noticed that the addition of PEO-D induces a steric type repulsive interaction. This repulsion produces an increase in the average distance between the particles of the microemulsion. With regard to the diffusion of the particles, we studied the variation of the mean square displacement (MSD) as a function of time. We noticed that the addition of PEO-D reduces the diffusion of the microemulsion particles. This decrease is significant for the dense system, but for the dilute system is small. In the second part, we discussed the interaction/structure relationship of microemulsions coated with the triblock copolymer C₁₂H₂₅-PEO- C₁₂H₂₅ (D-PEO-D) using molecular dynamics (MD) simulations as the main method. The study was conducted for different volume fractions ϕ , temperatures T, and the number of surface grafted polymers n(D-PEO-D), with a particular focus on their effects on the sol/gel transition. More specifically, we are interested in a quantitative study of the influence of volume fraction Φ , temperature (T), and n(D-PEO-D) on the sol/gel transition of the microemulsion. At the end, we first study the structure of the uncoated microemulsion as a function of Φ only. Then, we determine the structure of the coated microemulsions as a function of n(D-PEO-D) for different Φ . Finally, we examine the effect of temperature on the uncoated and coated microemulsion. We show that the sol/gel transition is controlled by the three main parameters, Φ , T, and n(D-PEO-D).

Keywords: Microemulsion, poly (ethylene oxide) (PEO), sol/gel transition, molecular dynamics (MD), OZ integral equations, HNC closure relation, small angle neutron scattering (SANS), mean square displacement (MSD)