
Estimation de la température de transition vitreuse par simulation de dynamique moléculaire

Mohammed Ilhami^{*1}, Mohamed Diaeddine¹, and Antonella Esposito^{†1}

¹Groupe de physique des matériaux – Université de Rouen Normandie, Institut national des sciences appliquées Rouen Normandie, Centre National de la Recherche Scientifique, Institut de Recherche sur les Matériaux Avancés – France

Résumé

Des techniques expérimentales d'analyse thermique, telles que la calorimétrie différentielle à balayage (DSC) et l'analyse mécanique dynamique (DMA), sont couramment utilisées pour caractériser les matériaux et étudier leurs propriétés thermiques. Ces méthodes présentent toutefois des limites, notamment en ce qui concerne la masse de l'échantillon et la vitesse de refroidissement. Ce travail considère donc la possibilité d'employer la simulation par dynamique moléculaire (MD) pour étendre le domaine de ce qui est explorable expérimentalement, et notamment pour estimer les propriétés thermiques et thermomécaniques des polymères biosourcés, par exemple le polyéthylène furanoate (PEF), un polyester en pleine expansion. Les simulations de dynamique moléculaire dites "all-atoms" permettent d'étudier en finesse le comportement des matériaux dans diverses conditions, surmontant ainsi les restrictions des techniques expérimentales. Cette étude se concentre sur l'estimation de la température de transition vitreuse T_g et de la capacité thermique spécifique Δ

^{*}Intervenant

[†]Auteur correspondant: antonella.esposito@univ-rouen.fr