Laboratoire de Physicochimie des Polymères et Interfaces (LPPI)
5 mail Gay-Lussac, Neuville sur Oise, 95031 Cergy-Pontoise Cedex
https://lppi.cyu.fr/

Sujet :

Modélisation de la dynamique de séparation de phase dans des mélanges de polymères

Encadrement : Elian Masnada, Odile Fichet, Sophie Cantin
Durée : 6 mois
Niveau : Master 2 / dernière année d'école d'ingénieurs
Domaines : physique statistique, thermodynamique, modélisation numérique, physique des polymères

Contexte scientifique

Les revêtements sont largement utilisés pour modifier les propriétés de surface des matériaux : hydrophobie, résistance mécanique, propriétés optiques, adhésion, etc. Leurs propriétés dépendent non seulement de leur composition chimique, mais également de leur morphologie. Lorsqu'ils sont constitués de mélanges de polymères, comprendre et contrôler les phénomènes de mélange et de séparation de phase devient donc essentiel pour maîtriser les propriétés du matériau final.

Les films ultraminces de polymères à l'interface air–eau, appelés **films de Langmuir**, constituent des systèmes particulièrement intéressants pour étudier ces phénomènes en **deux dimensions (2D)**. Ils peuvent de plus être transférés sur un substrat solide afin de former des nanorevêtements. Depuis plusieurs années, ces films sont étudiés expérimentalement au LPPI afin de caractériser les propriétés de mélange d'une large gamme de couples de polymères. Ces études ont notamment mis en évidence des comportements parfois très différents de ceux observés pour les mêmes systèmes en volume. En parallèle de ces travaux expérimentaux, le LPPI a développé dans le cadre du projet ANR **IPNanocoat,** une approche théorique permettant de prédire le comportement thermodynamique de ces systèmes. Ce modèle permet de reproduire les courbes de compression obtenues expérimentalement et d'estimer l'épaisseur des films ultraminces [2]. Il a ensuite été étendu aux **mélanges de polymères** [3] et permet de prédire, en fonction de la composition et de la pression appliquée au film, si les deux polymères restent mélangés ou se séparent en deux phases. Nous sommes donc capable aujourd'hui de prédire les **états d'équilibre** d'un mélange de polymères à l'interface air–eau. Cependant, connaître l'état final ne permet pas de savoir **comment le système l'atteint** : à quelle vitesse apparaît une séparation de phase ? Comment les domaines se forment-ils et grandissent-ils ? Quelle morphologie obtient-on au cours du temps ?

Décrire cette dynamique constitue l'objectif du présent stage.

Objectif du stage

L'objectif sera de développer un modèle numérique permettant de prédire **l'évolution dans l'espace et dans le temps d'un mélange de deux polymères en 2D**.

Le point de départ sera le modèle thermodynamique développé lors des travaux précédents [1–3]. Le film sera représenté par une grille 2D divisée en petites cellules, chacune étant caractérisée par

sa composition locale en polymères. Les polymères pourront se déplacer entre les cellules voisines en fonction de leur environnement local. Il sera ainsi possible de simuler l'évolution progressive de la composition du film et d'observer numériquement l'apparition puis la croissance de domaines riches en chacun des deux polymères (voir le lien suivant d'une simulation de ce type faite dans le cadre de l'ANR **IPNanocoat** https://youtube.com/shorts/Ca0-5QiTJ7g).

Travail proposé

Le ou la stagiaire commencera par prendre en main le modèle existant et se familiarisera avec les principaux mécanismes physiques gouvernant le mélange et la séparation de phase des polymères en 2D.

Le film sera ensuite représenté numériquement sous forme d'une grille bidimensionnelle. À partir du modèle thermodynamique existant, le ou la stagiaire établira les équations décrivant les échanges de matière entre les différentes zones du film, puis les implémentera et les résoudra numériquement.

Les simulations permettront de suivre au cours du temps, l'évolution de la morphologie du film et d'étudier notamment :

- l'évolution d'un mélange initialement homogène ;
- l'apparition d'une séparation de phase ;
- la formation et la croissance de domaines riches en chacun des deux polymères ;
- l'influence de la composition initiale et de la pression de surface ;

Les résultats numériques seront enfin comparés aux observations expérimentales réalisées au LPPI, afin de confronter les prédictions du modèle aux phénomènes observés expérimentalement.

Compétences recherchées

Ce stage s'adresse à un(e) étudiant(e) de **Master 2 de physique ou de dernière année d'école d'ingénieurs**, intéressé(e) par la modélisation et la simulation numérique de phénomènes physiques.

De bonnes bases en thermodynamique et/ou en physique statistique sont souhaitées. Une expérience en programmation scientifique (C/C++, Python ou langage équivalent) sera appréciée.

Le stage offre l'opportunité d'acquérir des compétences en **physique des polymères, thermodynamique, modélisation et simulation numérique** dans le cadre d'un projet de recherche associant approches numériques et expérimentales.

Références principales

[1] E. M. Masnada, G. Julien, D. R. Long, *Miscibility maps for polymer blends: Effects of temperature, pressure, and molecular weight*, **Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics**, 52, 419–443 (2014).

[2] M. Camara, E. Masnada, S. Cantin, O. Fichet, *Modeling Thermodynamic Behavior of Ultrathin Films: Comparison with Experiments*, **ChemPhysChem**, 26, e202500199 (2025).

[3] M. Camara, E. Masnada, A. El Haitami, B. Kővágó, E. H. G. Backus, S. Cantin, O. Fichet, *Thermodynamic Prediction of Phase Separation in Polymer Blends at the Air–Water Interface*, **Langmuir**, 42, 2212–2222 (2026).