

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le but de notre travail était double. Dans un premier temps, il s'agissait de caractériser par le gonflement des réseaux de polymères à base des monomères acryliques préparés par photopolymérisation radicalaire. L' Acrylate de Butyle (ABu) et Ethyl Hexyl Acrylate (EHA) ont été utilisés comme monomères de départ, 1,6-Hexane Diol Di Acrylate (HDDA) et Tri Propylène Glycol Di Acrylate (TPGDA) ont été utilisés comme agents de réticulation et 2-hydroxy 2-méthyl propiophénone (DAROCUR 1173) comme photoamorceur. Le travail expérimental a consisté à vérifier le gonflement de ces réseaux dans le styrène en comparant avec d'autres solvants. Puis on s'est intéressé à étudier l'architecture d'un réseau de polymère à base de polystyrène par la mécanique moléculaire.

Cette étude comprend quatre chapitres :

I. le chapitre I est réservé à une étude bibliographique sur les polymères, les différentes classes des polymères, les méthodes de polymérisation et les approches théoriques pour les caractériser ;

II. dans le chapitre II, nous avons partagé ce chapitre en deux parties, dans la première partie on a présenté la méthodologie de synthèse de réseaux de polymères, étudié la cinétique de gonflement des échantillons dans le styrène et comparé les résultats obtenus avec le gonflement des mêmes réseaux dans trois solvants différents (Méthanol, Toluène et Cyclohexane). Une analyse théorique des résultats obtenus nous a permis de déterminer le paramètre de solubilité des échantillons polymériques ainsi que leur solubilité dans les trois solvants considérés, dans la deuxième partie, nous avons exploité les résultats expérimentaux par le modèle de diffusion de Fick.

III. ce chapitre donne une description des différentes méthodes de la modélisation moléculaire : mécanique quantique, mécanique moléculaire et la dynamique moléculaire ; la définition de champ de force est aussi apportée. Nous avons donné aussi un aperçu sur l'analyse conformationnelle qui demeure une méthode qui nous permet de calculer l'énergie relative associée à la conformation d'une molécule, et enfin une vue générale sur le logiciel utilisé pour cette étude.

IV. le dernier chapitre est consacré aux résultats de la modélisation moléculaire obtenus et leur discussion basée sur les énergies stériques de différents composés, ainsi que l'optimisation géométrique des réseaux de polymères.

En ce qui concerne la caractérisation des réseaux des polymères acryliques, au départ nous avons commencé par donner les étapes de l'élaboration des réseaux puis étudier leur gonflement dans le styrène. Nous avons évalué des principaux facteurs pouvant affecter la photopolymérisation radicalaire telles que : la composition de la formulation (la nature du photoamorceur, la nature d'agent de réticulation, la concentration du monomère, ...). Ce qui nous a permis de tirer les conclusions suivantes :

- les résultats expérimentaux ont montré que l'oxygène dissous dans la solution de monomères a une grande influence sur la réaction de polymérisation radicalaire d'unités monomères. Celle-ci est très sensible à l'effet inhibiteur de l'oxygène moléculaire.
- l'inhibition par l'oxygène peut être réduite en travaillant dans un système purgé par un courant d'azote pour éliminer l'oxygène dissous dans la solution de départ ;
- la quantité d'agent réticulant dans la solution de départ donne un caractère dur et dense ;
- le taux de réticulation est inversement proportionnelle au taux de gonflement.
- le monomère du styrène peut être utilisé comme un solvant choisi pour les études de gonflement, puis qu'il est un très bon solvant puisqu'il gonfle les réseaux au bout d'un temps très court,
- Si la distance entre deux points de la réticulation est grande (le taux de réticulation est petit) le taux de gonflement est grande.

Par ailleurs, nous avons également étudié quelques propriétés des réseaux de polymères sur le plan théorique à l'aide de la mécanique moléculaire et les outils informatiques qui peut être utilisé comme méthode théorique pour exploiter les résultats expérimentaux. L'analyse des résultats nous a permis d'affirmer qu'on peut:

- ✓ Eliminer les conformations les moins stables dans l'espace et de trouver la géométrie qui présente une meilleure stabilité.

➤ Imaginer le réarrangement des molécules des chaînes de polymères dans l'espace avec des modèles simplifiés.

➤ Utiliser la variation de l'énergie stérique comme critère de stabilité relative de la structure en fonction du monomère.

➤ dans les réseaux de polymères la conformation la plus stable dépend de nombre de monomères constituant ce réseau,

➤ Appliquer l'étude conformationnelle à des réseaux plus dense.

➤ La spectroscopie de vibration permet de tester la validité des calculs géométriques et d'avancer dans le problème de l'attribution des bandes (calculées par le programme informatique) donc il est possible de faire le lien entre les approches théoriques et expérimentales.

Cette étude devra être approfondie en étudiant l'influence des divers paramètres sur la vitesse de la réaction de photopolymérisation pour préparer des réseaux avec des propriétés intéressantes, ainsi les paramètres qui déterminent les propriétés physiques des réseaux de polymères susceptibles d'être utilisés en tant que muscles artificiels.