

Sommaire

Introduction Générale	1
Références.....	6
Chapitre I : Généralités sur les polymères	
I- Définition d'un polymère.....	9
II- Différents classes de polymères.....	9
II-1- Classification selon l'origine.....	9
II-2- Classification selon l'architecture.....	10
II-3- Classification selon la structure chimique.....	11
II-4- Classification selon le comportement thermique.....	11
III- Application des polymères.....	12
IV- Réactions de polymérisation.....	13
IV-1- Réaction de Polycondensation.....	13
IV-2- Polymérisation en chaîne.....	14
IV-2-1- La polymérisation radicalaire.....	14
IV-2-2- La polymérisation anionique.....	15
IV-2-3- La polymérisation cationique.....	15
IV-2-4- La polymérisation par transfert de groupe.....	16
V- Propriétés de cohésion et paramètre de solubilité.....	16
V-1- Energie de cohésion.....	16
V-2- Détermination du paramètre de solubilité.....	17
V-2-1- Méthode de Hildebrand.....	17
V-2-2- Paramètre de solubilité de Hansen.....	18
V-2-3- Paramètre de solubilité de Fédors.....	19
VI- Polystyrène.....	20
VI-1- Synthèse du polystyrène.....	20
VI-2- Propriétés du polystyrène.....	22
VI-3- Polystyrène et copolymères du styrène.....	23
VI-4- Procédés de polymérisation.....	25
VI-5- Inconvénients du polystyrène.....	25
Références.....	26
Chapitre II: Étude de gonflement et exploitation des résultats	
Introduction	30
A- Élaboration des réseaux et étude de gonflement	32
I- Elaboration des réseaux.....	32
I-1- Produits utilisés.....	32
I-2- Dispositif expérimental.....	34
I-3- Formation des réseaux.....	35
I-3-1- Préparation de la solution de départ.....	35
I-3-2- la polymérisation.....	35
II - Etude de gonflement.....	36
II-1- Méthode de caractérisation.....	36
II-2- Taux de gonflement.....	36
II-3- Principe de la méthode.....	36
II-4- Solvant.....	37
III- Résultats et interprétations.....	37

IV- Paramètre de solubilité.....	41
IV-1-Méthode de FEDORS.....	41
IV-2-Comparaison des paramètres de solubilité.....	45
IV-3- La solubilité (S).....	46
V- Interprétation des résultats théoriques.....	47
VI- Conclusion.....	47
B- Exploitation des résultats avec un modèle théorique.....	48
I- Modèle de diffusion de Fick.....	48
II- Exploitation des résultats expérimentaux.....	49
II-1-Modèle mathématique.....	49
II-2- Résultats et discussions.....	50
III- Conclusion.....	52
Références.....	53

Chapitre III : Les calculs théoriques de la modélisation moléculaire

I- Introduction	56
II-La modélisation moléculaire.....	57
II-1-Mécanique quantique.....	57
II-1-1- Méthodes ab- initio.....	58
II-1-2-Méthodes semi empiriques.....	58
II-2-Mécanique moléculaire.....	59
II-2-1-Le champ de force.....	60
II-2-1-1- Énergie d'interaction entre atomes liés.....	61
II-2-1-2- Énergie d'interaction entre atomes non liés.....	63
II-2-2-Différents champs de forces.....	63
II-3-Dynamique moléculaire.....	64
II-4- La spectroscopie infrarouge (IR).....	65
II-4-1-Principe.....	65
II-4-2- Application.....	66
II-4-3-Les vibrations des molécules polyatomiques.....	67
III- Analyse conformationnelle.....	69
III-1- Minimisation de l'énergie stérique.....	70
III-2- Méthodes de minimisation de l'énergie.....	71
III-2-1- La méthode de la plus grande pente.....	71
III-2-2-La méthode du gradient conjugué.....	72
III-2-3-Méthode de Newton Raphson.....	72
III-2-4- Méthode du recuit simulé.....	72
III-2-5- Méthode de simplexe.....	73
IV- Visualisation tridimensionnelle des molécules.....	73
Références.....	75

Chapitre IV : Calculs conformationnelle vibrationnelle Résultats et discussions

I- Présentation des méthodes de calculs.....	80
I-1- Concept de calcul.....	81
I-2- Choix de la meilleure méthode.....	83
I-3- Optimisation de la géométrie.....	84
I-4 – Prévision des spectres.....	84

II- Présentation des molécules.....	84
II-1-Styrène.....	85
II-2- Darocur.....	87
II-3- HDDA.....	89
III- Synthèse des réseaux.....	91
IV- Résultats et discussions.....	92
IV-1- Analyse conformationnelle des monomères.....	93
IV-1-1-Styrène.....	93
IV-1-2-Darocur.....	94
IV-1-3-HDDA.....	95
IV-2- Analyse conformationnelle des réseaux.....	96
IV-2-1- Chaînes de Styrene.....	96
IV-2-2- Optimisation géométrique des réseaux.....	100
IV -3- Caractérisation des groupes fonctionnels par spectroscopie IR.....	102
V- Conclusion.....	106
Références.....	108
Conclusion Générale.....	110