

Etude théorique de la dégradation du bois lors de son traitement par plasma froid (décharge DBD). Approche microscopique par simulation en dynamique moléculaire.

Encadrant : Emmanuel Duffour

emmanuel.duffour@univ-bpclermont.fr – Tel : 04.73.40.77.40 – fax: 04.73.40.72.62

Institut Pascal – Axe MMS – Université Blaise Pascal – 63170 AUBIERE



Présentation :

L'usinage de nouveaux matériaux, basés sur du bois brut ou sur des composites de bois, nécessite la plupart du temps une étape de collage de plaques (contre-plaqué) ou de fibres (Medium Density Fiberboard). L'efficacité du collage est largement dépendante de l'énergie de surface du matériau dont va dépendre ses propriétés de mouillabilité. Le vieillissement du bois et/ou son exposition à des traitements thermiques dégradent ses propriétés de surface.

On pense à l'heure actuelle que cette dégradation est due à la baisse du rapport (O/C) aux interfaces. Des groupes polaires comme C-O et C=O disparaissent à la faveur de groupes non polaires comme C-C et C-H, ce qui entraîne une baisse de la mouillabilité.

Afin d'estimer l'évolution du rapport O/C en fonction du traitement, on se propose dans un premier temps de modéliser le bois à l'aide de la dynamique moléculaire. En effet à partir de cet outil numérique, il est possible de simuler les différents processus d'interactions possibles et d'en quantifier les effets sur la matière.

Contenu du stage :

Le sujet de ce stage de recherche théorique s'inscrit dans le cadre d'une demande de collaboration de l'Institut du bois de Varsovie et est complémentaire à un sujet expérimental portant sur le traitement d'échantillons de bois à partir plasma d'un plasma froid généré par une décharge à barrière diélectrique (DBD). Le stage pourra se dérouler de la façon suivante :

- Etude bibliographique et théorique portant sur la composition du bois, proposition d'une structure moléculaire générique.
- Etude théorique de l'interaction plasma-surface appliquée au traitement du bois par plasma froid.
- Modélisation du bois par dynamique moléculaire, proposition du calcul du champ de force, évaluation des potentiels d'interaction.
- Essais et optimisation du traitement d'échantillons de bois par DBD à partir du banc expérimental du laboratoire.

Mots Clés :

Dynamique moléculaire, potentiels d'interaction, modélisation, plasma froid, décharge à barrière diélectrique (DBD), traitement de surface, matériaux, bois, mouillabilité.

Références :

[1] Mohamed Ali GMIHA, stage M2 recherche, « Traitements plasmas pour l'amélioration des caractéristiques d'adhésion du bois », Juillet 2014.

[2] Ammar BOUBAKOUR, stage M2 recherche, « Etude bibliographique et théorique du bois, approche théorique en dynamique moléculaire », Aout 2014.

[3] U. Kogelschatz, B. Eliasson, et W. Egli, « Dielectric-barrier discharges. Principle and applications », Journal De Physique, vol.7, 2003.

[4] H.E. Wagner, R. Brandenburg, K.V. Kozlov, A. Sonnenfeld, P. Michel, et J.F. Behnke, « The barrier discharge: Basic properties and applications to surface treatment », Vacuum, vol.71, 2003

[5] A. Sarko and R. Muggli, « Packing Analysis of Carbohydrates and Polysaccharides. 111. Vulonia Cellulose and Cellulose II », Macromolecules 1974, pp 486-94.

[6] A.P. Heiner, J. Sugiyama, O. Teleman, « Crystalline cellulose I α and I β studied by molecular dynamics simulation », Carbohydrate Research 1995, 273, pp207-23.

[7] M. Bergenstråhle, L.A. Berglund, and K. Mazeau, « Thermal Response in Crystalline I β Cellulose: A Molecular Dynamics Study », J. Phys. Chem. B 2007, 111, pp9138-45.