

Soutenance de thèse

Institut de Chimie Séparative de Marcoule / CEA Marcoule
(UMR 5257, CEA, CNRS, Université Montpellier, ENSCM)

AURELIO BARBETTA

soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Thermodynamique de l'adsorption de l'eau dans le modèle des systèmes moléculaires structurés, qui comprennent des analogues de l'hémicellulose, cellulose cristalline et la lignine

Soutenance prévue le **lundi 20 novembre 2017 à 14h30**

dans l'Auditorium de l'ICSM

Le bois est un matériau nanocomposite complexe, fortement anisotrope et hiérarchiquement organisé. La micro-structure à l'échelle nanométrique est caractérisée par des nanofibres rigides de cellulose cristalline parallèles les unes aux autres et noyées dans une matrice plus molle et moins anisotrope. Cette matrice est composée par l'hémicelluloses et la lignine, avec une absorption contrôlée par l'entropie et les liaisons hydrogène entre hémicelluloses, lignine, et la surface de micro-cristaux de cellulose. La matrice est hygroscopique et se gonfle avec les changements de l'humidité relative, en fournissant une source de stress interne, tandis que les fibrilles de cellulose s'enroulent en spirale autour de la lumière centrale à un angle précis, qui est appelé AMF, angle des micro-fibrilles. Les micro-fibrilles se réorganisent passivement selon les contraintes osmotiques appliquées. Selon l'AMF, le positionnement et les propriétés mécaniques des fibres de bois varient considérablement: le matériau rigide se rétrécit ou il s'allonge dans le sens de la longueur lors du gonflement, en générant de cette façon une grande déformation anisotrope.

Une première forme d'équation d'état comprenant l'entropie et les termes chimiques, colloïdaux (comme la force d'hydratation) et les termes mécaniques macroscopiques a été établie et permet de prédire sans paramètres l'absorption d'eau en fonction de l'humidité relative du composite de bois non traité.

Le but de la thèse est d'étendre cette équation d'état au bois traité par absorption d'électrolytes en conditions hydrothermales, en intégrant l'équation avec des termes chimiques liés à la présence d'électrolytes. Les résultats du modèle sont comparés avec les données expérimentales de sorption d'électrolytes formulés en fonction de la balance entre chaotropes et cosmotropes de l'échelle de Hofmeister. Les données expérimentales sont produites à partir des isothermes de sorption et des mécanismes moteurs pour tester la prédiction de la théorie en explorant l'effet du soluté (introduit dans le bois par mise en équilibre avec une solution utilisée comme une réservoir osmotique) sur la structure et les dimensions du matériau.

Mots clés : Thermodynamique ; adsorption ; eau ; hémicellulose ; cellulose ; lignine.

