



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr **ARBIA Ayoub**

Soutiendra : le Samedi 18/07/2026 à 10H00

Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

Rôle des polymères téléchéliques PEO monofonctionnels et difonctionnels sur les propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques de microémulsions neutres : étude par diffusion de neutrons et simulation de dynamique moléculaire

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : Sciences et Techniques

Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr. NAJI Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Président
Pr. TALHA Lamiae	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Rapporteur
Pr. ALAMI Mohammed	Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, Meknès	PES	Rapporteur
Pr. RRHIOUA Abdeslem	Faculté des Sciences, Oujda	PES	Rapporteur
Pr. TOUTI Rodouan	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examinateur
Pr. MRHARRAB Lamiae	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examinateur
Pr. FILALI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse
Pr. AHFIR Rachid	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Co-directeur de thèse



Résumé :

Dans cette thèse, nous avons étudié, par simulations de dynamique moléculaire (DM) combinées aux expériences de diffusion de neutrons aux petits angles (DNPA), les propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques de microémulsions huile dans- eau neutres stabilisées par les tensioactifs non ioniques Triton X₁₀₀ et Triton X₃₅. Ces systèmes ont été modifiés par l'ajout de polymères téléchéliques hydrophobes, de type PEO-D et D-PEO-D, greffés à la surface des gouttelettes, avec un nombre de chaînes par particule noté n.

Les propriétés structurales obtenues par les deux approches montrent un bon accord. La comparaison entre les intensités de diffusion simulées et expérimentales confirme aussi la validité du modèle adopté dans les deux parties de ce travail. Les expériences DNPA montrent que l'ajout de PEO, à différentes concentrations, ne modifie ni la forme ni la taille des microémulsions huile/eau. Ainsi, les microémulsions étudiées sont décrites comme des nanosphères fortement polydispersées, avec un rayon moyen de 82 Å.

L'effet du polymère PEO-C₁₂H₂₅, noté PEO-D, a été étudié à différentes fractions volumiques ϕ . Les interactions entre les gouttelettes de microémulsions TX₁₀₀ ont été décrites par un potentiel effectif combinant l'exclusion de volume, l'attraction de Van der Waals et une répulsion de type Yukawa induite par les tensioactifs, auquel s'ajoute une contribution stérique liée au polymère. Les résultats obtenus à partir de la fonction de distribution radiale $g(r)$, du facteur de structure $S(q)$ et de la compressibilité osmotique χ_T montrent que l'augmentation de ϕ et du nombre de polymères greffés renforce les interactions répulsives entre les gouttelettes. L'analyse dynamique, basée sur le déplacement quadratique moyen (MSD), le coefficient de diffusion (D) et la fonction d'autocorrélation des vitesses (VACF), met en évidence un ralentissement progressif de la dynamique des particules lorsque la fraction volumique ou la quantité de PEO-D augmente.

L'étude a ensuite été étendue au copolymère tri bloc C₁₂H₂₅-PEO-C₁₂H₂₅, noté D-PEO-D, dans des régimes dilués et concentrés. Le modèle d'interaction inclut, en plus des contributions précédentes, des termes supplémentaires permettant de tenir compte des effets stériques et des interactions de pontage induites par le polymère. Les résultats structuraux montrent que le D-PEO-D favorise des interactions attractives aux faibles fractions volumiques, tandis qu'un comportement plus répulsif apparaît aux fractions volumiques élevées. L'étude dynamique montre que l'augmentation du nombre de chaînes D-PEO-D associées aux gouttelettes réduit la diffusivité et rend le mouvement des particules plus complexe, en particulier dans les systèmes concentrés. L'ensemble des résultats met en évidence le rôle essentiel de la fraction volumique ϕ et du nombre de polymères greffés (n) dans le contrôle des interactions, de l'organisation structurale et de la dynamique des microémulsions neutres TX₁₀₀.

Mots clés :

Microémulsion, poly (oxyde d'éthylène) (PEO), dynamique moléculaire (DM), Diffusion de neutrons aux petits angles (DNPA), Déplacement quadratique moyen (MSD), Fonction d'autocorrélation de la vitesse (VACF).



ROLE OF MONOFUNCTIONAL AND DIFUNCTIONAL PEO TELECHELIC POLYMERS ON THE STRUCTURAL, DYNAMIC AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF NEUTRAL MICROEMULSIONS : STUDY BY NEUTRON SCATTERING AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION.

Abstract:

In this thesis, we studied, using molecular dynamics (MD) simulations combined with small-angle neutron scattering (SANS) experiments, the structural, dynamic, and thermodynamic properties of neutral oil-in-water microemulsions stabilized by the nonionic surfactants Triton X₁₀₀ and Triton X₃₅. These systems were modified by the addition of hydrophobic telechelic polymers, of the PEO-D and D-PEO-D types, grafted onto the surface of the droplets, with the number of chains per particle denoted by n .

The structural properties obtained by the two approaches show good agreement. The comparison between the simulated and experimental scattering intensities also confirms the validity of the model adopted in the two parts of this work. The SANS experiments show that the addition of PEO at different concentrations does not modify either the shape or the size of the oil/water microemulsions. Thus, the studied microemulsions are described as highly polydisperse nanospheres, with an average radius of 82, Å.

The effect of the polymer PEO-C₁₂H₂₅, denoted PEO-D, was studied at different volume fractions ϕ . The interactions between the TX100 microemulsion droplets were described by an effective potential combining volume exclusion, Van der Waals attraction, and a Yukawa-type repulsion induced by the surfactants, to which a steric contribution related to the polymer is added. The results obtained from the radial distribution function $g(r)$, the structure factor $S(q)$, and the osmotic compressibility χT show that increasing ϕ and the number of grafted polymers strengthens the repulsive interactions between the droplets. The dynamic analysis, based on the mean squared displacement (MSD), the diffusion coefficient (D), and the velocity autocorrelation function (VACF), reveals a progressive slowing down of particle dynamics when the volume fraction or the amount of PEO-D increases.

The study was then extended to the triblock copolymer C₁₂H₂₅-PEO-C₁₂H₂₅, denoted D-PEO-D, in dilute and concentrated regimes. The interaction model includes, in addition to the previous contributions, extra terms accounting for the steric effects and bridging interactions induced by the polymer. The structural results show that D-PEO-D promotes attractive interactions at low volume fractions, while a more repulsive behavior appears at high volume fractions. The dynamic study shows that increasing the number of D-PEO-D chains associated with the droplets reduces diffusivity and makes particle motion more complex, especially in concentrated systems. Overall, the results highlight the essential role of the volume fraction ϕ and the number of grafted polymers (n) in controlling the interactions, structural organization, and dynamics of neutral TX₁₀₀ microemulsions.

