

---

# Molecular dynamics study on the physical influence of water molecules on epoxy-amine curing

Alexandre Vivet\*<sup>1</sup>, Jean-Baptiste Jouenne<sup>2</sup>, Viwanou Hounkpati<sup>2</sup>, Germain Clavier<sup>2</sup>,  
Delphine Barbier<sup>3</sup>, and Laurent Cauret<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Centre de recherche sur les Ions, les MATériaux et la Photonique (CIMAP - UMR 6252) – CEA, CNRS : UMR6252, Université de Caen Basse-Normandie, Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Caen – CIMAP - UMR 6252, Bd H. Becquerel BP 5133 14070 Caen-cedex 5, France

<sup>2</sup>Centre de recherche sur les Ions, les MATériaux et la Photonique – Université de Caen Normandie, Institut Rayonnement Matière de Saclay (DRF), Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Caen, Centre National de la Recherche Scientifique, Institut de Recherche sur les Matériaux Avancés – France

<sup>3</sup>Polyvia Formation – Polyvia Formation, Pôle Universitaire d'Alençon – France

## Résumé

Les préoccupations environnementales incitent les industriels à développer des matériaux plus respectueux de l'environnement, tels que les composites biosourcés. Les fibres naturelles et les résines biosourcées sont de plus en plus considérées comme de bonnes matières premières pour remplacer les matrices pétrolières et les fibres de verre. Ce travail s'inscrit dans le cadre d'un projet de recherche plus vaste visant à caractériser l'influence des fibres de lin sur la réaction de réticulation époxy-amine. Une étude expérimentale a révélé que l'eau contenue dans les fibres naturelles accélère le durcissement de la résine. Cet effet est principalement dû aux réactions chimiques entre les molécules d'eau et les molécules d'époxy-amine. Mais les molécules d'eau ont-elles un effet sur le durcissement uniquement en raison de leur interaction physique avec d'autres molécules ? À partir de cette question, une étude de dynamique moléculaire (DM) sur un système époxy-amine contaminé par l'eau a été réalisée afin de comprendre l'influence physique des molécules d'eau sur la formation du réseau tridimensionnel époxyamine. Pour réaliser des simulations DM de la réaction de réticulation, un champ de force réactif de ReaxFF a été utilisé pour capturer l'intégralité du processus de durcissement. Les champs de force réactifs permettent de former et de rompre des liaisons entre atomes en tenant compte de toutes les contraintes liées à l'encombrement stérique ou aux forces interatomiques et intermoléculaires. Ils permettent ainsi une bonne prédiction du comportement du matériau dans diverses conditions. De plus, une méthode développée par Vashisth a été utilisée dans ce travail. Cette méthode repose sur le principe Bondboost. Après avoir formé avec succès un réseau époxy-amine tridimensionnel cohérent à partir de molécules isolées, une caractérisation de l'influence de l'eau sur la formation du réseau a été réalisée en évaluant deux aspects : l'évolution du taux de réticulation et la croissance du réseau. D'autres chercheurs ont travaillé sur l'influence de l'eau sur les systèmes époxy-amine, mais la plupart de ces travaux se sont concentrés sur l'absorption d'humidité par les systèmes durcis. Une étude récente de dynamique moléculaire sur la formation d'agrégats d'eau dans un réseau d'amine époxy a montré que la présence d'eau accélère la formation du réseau. Les auteurs attribuent cet effet à une augmentation de l'autodiffusion moléculaire

---

\*Intervenant

due à la présence de molécules d'eau. Un autre travail récent a montré l'importance de la présence d'eau dans le système d'amine époxy pour obtenir des réseaux hautement réticulés. Cependant, ces deux études mettent en évidence l'effet / les avantages de la présence d'eau sur la réaction de réticulation par le fait que les molécules H<sub>2</sub>O ont modifié les voies de réaction classiques. Dans notre étude, nous démontrons que non seulement les molécules d'eau modifient le comportement chimique mais ont également un rôle physique qui affecte la façon dont le réseau est formé. De plus, la nouveauté de ces travaux réside dans l'utilisation du champ de force réactif ReaxFF sur un système complexe de molécules commercialisé sous forme de résine époxy biosourcée.