

# Modeling Molecular Relaxation Mechanisms in Amorphous Polymers: Application to Polyamides

Anthony Bocahut, Solvay

Nous présentons une nouvelle approche numérique multi-échelles combinant *ab initio*, dynamique moléculaire et métadynamique afin de modéliser les mouvements moléculaires de polymères sur des échelles de temps très différentes.

Nous démontrons que les mouvements moléculaires correspondant aux relaxations secondaires  $\gamma$  et  $\beta$  (subglassy) peuvent être décrits précisément en termes d'enthalpie libre, d'énergie d'activation et d'échelles de temps et peuvent être identifiés avec des relaxations détectées expérimentalement par des techniques spectroscopiques et autres.

Cette méthode est illustrée dans le cas des polyamides aliphatiques et semi-aromatiques.

Le point culminant de cette approche innovante dans les polymères est la capacité de simuler des mouvements à grande échelle tout en conservant une description entièrement atomistique du matériau polymère.

Une description complète du paysage d'énergie libre, en termes de contributions conformationnelles (intramoléculaires) et interactionnelles (intermoléculaires), est obtenue (barrières énergétiques et échelles de temps).

Cette méthode peut donc fournir un outil prédictif pour comprendre les relaxations secondaires dans les polymères amorphes.