

Titre

QUAND LE CALCUL THERMODYNAMIQUE DANS LES ALIMENTS EST PLUS RAPIDE QUE L'EXPERIENCE : un tournant pour le 21^{ème} siècle

Résumé

Les propriétés de la matière à l'équilibre thermodynamique sont indispensables pour le développement des procédés industriels, le traitement des effluents, l'évaluation de la contamination de l'environnement et des aliments. Les données sont expérimentalement longues à acquérir : de quelques heures à plusieurs mois. Elles ont été collectées initialement au siècle dernier et font cruellement défaut pour les nouvelles applications (polymères, aliments), les nouveaux contaminants, etc. Nous avons développé un cadre général pour les calculer rapidement à l'échelle atomique dans les polymères sur la base de la seule structure chimique des espèces mises en jeu. Nous montrons que l'approche est transposable aux aliments et aux espèces polaires, y compris l'eau. L'ensemble des résultats est obtenu en quelques heures avec une précision comparable avec l'expérience.

Contexte de la réalisation

Les propriétés thermodynamiques sont utilisées dans de nombreux modèles et outils de simulations. Elles résument en quelque sorte la réalité moléculaire de notre monde. Diagrammes de phase, énergies de mélange, potentiels chimiques... peuvent être calculés à l'échelle moléculaire. Nous avons développé un cadre formel qui permet de les réaliser de manière semi-automatique et à grande échelle en utilisant des calculs parallèles. Nous avons montré qu'elles s'appliquaient bien au-delà de notre domaine de développement initial – les polymères de synthèse – mais également aux constituants des aliments.

1

Résultat

Nous utilisons des champs de force obtenus à partir de calculs quantiques. De sorte que l'ensemble de l'approche de calcul peut être considéré ab initio (sans aucune donnée de quelque sorte). Des calculs rapides sont obtenus en combinant calculs « force brute » à l'échelle atomique et éléments théoriques (théorie des de Buff-Kirkwood, théorie des volumes libres, théorie de Flory). Nous avons détaillé les procédures de calcul des isothermes de sorption/désorption dans les principales phases amorphes d'intérêt : liquides, homo et hétéropolymères pour des solutés organiques (additifs, arômes, éthanol) et l'eau.

Perspectives, impact possible à terme

L'approche sera proposée à tout industriel via l'Unité Mixte Technologique SafeMat « Matériaux sûrs » en cours d'évaluation.

Partenaires

Plastics Europe (Bruxelles, Belgique), Arkema (France).
Université de Bourgogne.

Valorisation :

Les méthodes sont utilisées pour créer des bases de données (actuellement 3000 données, bientôt cinq fois plus) utilisables par l'industrie chimique dans le cadre d'une collaboration avec l'association européenne des industries plastiques (90 % des polymères produits en Europe).

Références :

- [1] Gillet G, Vitrac O, Desobry S. Prediction of Solute Partition Coefficients between Polyolefins and Alcohols Using a Generalized Flory-Huggins Approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2009;48:5285-301.
- [2] Durand M, Meyer H, Benzerara O, Baschnagel J, Vitrac O. Molecular dynamics simulations of the chain dynamics in monodisperse oligomer melts and of the oligomer tracer diffusion in an entangled polymer matrix. *Journal of Chemical Physics*. 2010;132:194902.
- [3] Gillet G, Vitrac O, Desobry S. Prediction of Partition Coefficients of Plastic Additives between Packaging Materials and Food Simulants. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2010;49:7263-80.
- [4] Vitrac O, Gillet G. An Off-Lattice Flory-Huggins Approach of the Partitioning of Bulky Solutes between Polymers and Interacting Liquids. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*. 2010;8.
- [5] Kadam A, Karbowiak T, Voilley A, Bellat J-P, Vitrac O, Debeaufort F. Sorption of n-hexane in amorphous polystyrene. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*. 2014;52:1252-8.
- [6] Nguyen P-M, Guiga W, Dkhissi A, Vitrac O. Off-lattice Flory-Huggins approximations for the tailored calculation of activity coefficients of organic solutes in random and block polymers. Accepted in *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2016.
- [7] Nguyen P-M, Guiga W, Vitrac O. Molecular thermodynamics for food science and engineering. *Food Research International*. 2016;88, Part A:91-104.

Contact : ...

Olivier Vitrac

olivier.vitrac@agroparistech.fr

1 ou 2 illustrations (photos, graphes)

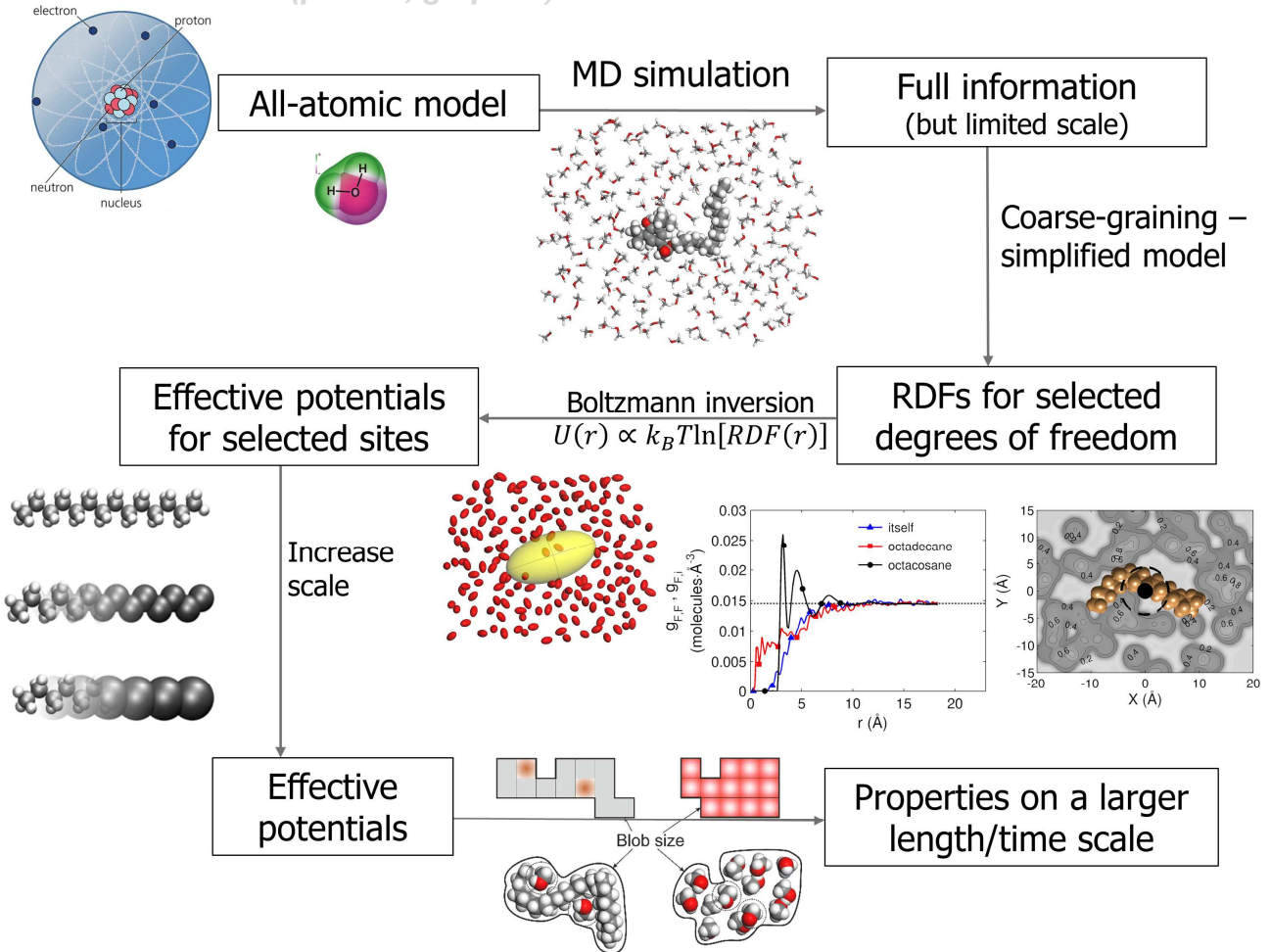


Figure 1. Approche multiéchelle générale pour le calcul des propriétés thermodynamiques. MD=simulation de dynamique moléculaire, RDF=fonction de distribution radiale