



# Institut de physique

Actualités scientifiques

## Pourquoi le gonflement de la cellulose lors de son hydratation est irréversible

Novembre 2018

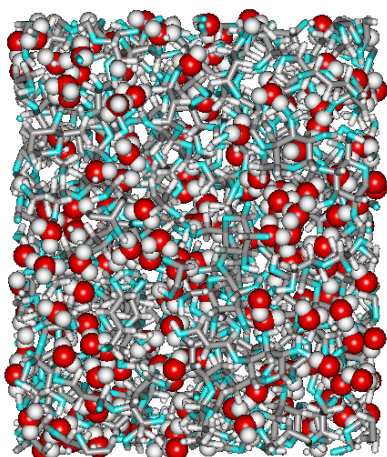
Des physiciens ont montré par simulation moléculaire que l'irréversibilité du gonflement de la cellulose lors de son hydratation est due à la forte stabilité des liaisons hydrogène entre les molécules d'eau et les chaînes de cellulose. Alors que ces liaisons se forment lors du gonflement induit par l'hydratation, la cellulose reste gonflée lors du séchage car ces liaisons ne disparaissent pas.

De nombreuses expériences ont permis de caractériser le phénomène d'hystérésis observé lors de l'hydratation de la cellulose amorphe : la cellulose gonfle beaucoup lorsque l'humidité augmente mais dégonfle de manière retardée lors du séchage. Des physiciens de l'ETH Zurich et de l'Empa (Suisse), de l'Université du Nevada (USA) et du Laboratoire interdisciplinaire de physique (LIPhy, CNRS/Univ. Grenoble Alpes) viennent d'expliquer ce phénomène en combinant des simulations numériques avec un modèle moléculaire de cellulose

amorphe. Ils ont montré que pour comprendre ce phénomène, il était essentiel de prendre en compte à la fois la déformation mécanique du matériau et la formation et la rupture des liaisons hydrogène. Ce travail est publié dans la revue *Nature Communications*.

Pour ce travail, les physiciens ont réalisé des simulations numériques hybrides combinant dynamique moléculaire et méthode de type Monte-Carlo pour analyser l'adsorption de molécules d'eau au sein d'un modèle réaliste de cellulose amorphe composé de chaînes de cellulose entrelacées. Ils ont notamment étudié la capacité des molécules d'eau à former des liaisons hydrogène avec la charpente de cellulose. Ils ont ainsi montré que la cellulose gonfle pour former plus de liaisons hydrogène entre l'eau et la cellulose lors de l'hydratation. En revanche, ces liaisons ne rompent pas à la même humidité relative lors de la déshydratation car elles sont plus stables que les liaisons formées entre molécules d'eau.

Ce mécanisme mis à jour a été corroboré par une évaluation des propriétés mécaniques et texturales des modèles moléculaires de cellulose amorphe développés par cette équipe de chercheurs.



Modèle moléculaire du gonflement de la cellulose amorphe induit par hydratation. Les atomes d'hydrogène et d'oxygène sont représentés par les sphères blanches et rouges. Les chaînes de cellulose, qui comprennent des atomes de carbone, d'oxygène et d'hydrogène sont représentés par les segments gris, cyan et blancs. L'image correspond à un échantillon cubique de quelques nanomètres de côté. © Mingyang Chen

### En savoir plus

[Role of hydrogen bonding in hysteresis observed in sorption-induced swelling of soft nanoporous polymers](#)

M. Chen, B. Coasne, R. Guyer, D. Derome et J. Carmeliet  
*Nature Communications* 9, Article number: 3507 (2018)  
DOI: 10.1038/s41467-018-05897-9

### Contact chercheur

[Benoit Coasne](#), directeur de recherche au CNRS

### Information complémentaire

[Laboratoire interdisciplinaire de physique](#) (LIPhy, CNRS/Univ. Grenoble Alpes)

cnrs

[www.cnrs.fr](http://www.cnrs.fr)

Institut de Physique

CNRS - Campus Gérard Mégie  
3 rue Michel-Ange, 75794 Paris Cedex 16  
T 01 44 96 42 53  
[inp.com@cnrs.fr](mailto:inp.com@cnrs.fr)  
[www.cnrs.fr/inp](http://www.cnrs.fr/inp)

Illustration du bandeau : © Cyril FRESILLON / Daumet / CNRS Photothèque