



Offre de thèse automne 2021

Compréhension des mécanismes de libération de substances actives dans des matrices polymères biodégradable par modélisations moléculaires.

CONTEXTE

Michelin est à la recherche constante de nouvelles solutions technologiques pour répondre aux exigences croissantes en termes de développement durable et d'empreinte environnementale. La conception de matériaux innovants de hautes performances est par conséquent indispensable pour répondre à ces attentes sociétales et environnementales. L'entreprise souhaite tirer parti de son expertise en R&D dans les matériaux composites à base de polymères pour développer des nouveaux domaines d'activités. Les matériaux dans le domaine médical en font partie, notamment les polymères biodégradables utilisables pour des applications de relargage contrôlé de substances actives. Ces nouveaux matériaux et applications posent de nouvelles questions comme la biodégradabilité et la biocompatibilité avec les milieux vivants, et nécessitent le développement de nouvelles approches pour avoir une compréhension fine des mécanismes physico-chimiques, et anticiper leurs performances. Les modélisations aux échelles moléculaires permettent d'apporter des éléments de compréhension de ces phénomènes, et également de prédire des propriétés de nos futurs matériaux proche de leurs conditions d'usage.

Ce sujet sera hébergé au sein du laboratoire commun SimatLab, regroupant des chercheurs industriels de Michelin et académiques de l'Institut de Chimie de Clermont-Ferrand. Ce laboratoire est dédié à la modélisation et à la simulation numérique des polymères et nano composites à différentes échelles de temps et d'espace. La recherche effectuée dans le laboratoire SimatLab s'inscrit parfaitement dans le contexte de ce sujet, traitant des questions fondamentales (compréhension de la matière) en lien direct avec des matériaux d'intérêt industriel.

DESCRIPTION GLOBALE DU PROJET

Ce projet portera sur le relargage contrôlé de principes actifs (API, active pharmaceutical ingredients) contenus dans une matrice polymère biodégradable. L'objectif de cette étude consiste à mieux comprendre les phénomènes qui sont présents entre la matrice polymérique, les API présentant des caractéristiques physicochimiques différentes et le milieu environnant lors du relargage de l'API en s'appuyant sur la simulation moléculaire de type dynamique moléculaire avec des potentiels classiques et réactifs. Nous pourrons ainsi caractériser les paramètres matériaux influents (interaction polymère/API, caractérisation microscopique du réseau, ...) qui pourront alimenter des modèles macroscopiques de relargage en cours de développement chez Michelin. De façon complémentaire, des expériences seront menées en laboratoire pour objectiver les interactions entre le polymère et les API. La confrontation des résultats donnés par la simulation moléculaire aux résultats expérimentaux permettra la validation des modèles développés.

L'interprétation de ces simulations permettra d'avancer des hypothèses sur le mécanisme précis de l'interaction polymère/API et de l'influence de cette dernière sur la dégradation du polymère. Cette thèse apportera donc des informations non disponibles à ce jour, susceptibles d'expliquer certains phénomènes liés à la dégradation et à l'interaction avec l'API et d'envisager à terme de les maîtriser lors du développement de nouveaux systèmes de relargage contrôlés. Ces travaux permettront de limiter les expérimentations longues et coûteuses (par ailleurs non exhaustives au regard de la multiplicité des API) et représentent une initiative originale et particulièrement utile pour le développement de nouvelles solutions industrielles de polymères biodégradables pour les dispositifs de relargage contrôlé.

Profil et compétences recherchées

Master ou équivalent en sciences des matériaux (polymères et/ou biologique) avec une expérience préalable en matière de simulations ou de programmation.

Ou un master en chimie physique/théorique avec une expérience préalable dans la simulation atomique de la matière molle.

Une appétence pour la programmation scientifique (Python, ...) serait un plus.

CONTACT

Alain Dequidt : alain.dequidt@uca.fr

Sébastien Garruchet : sebastien.garruchet@michelin.com

Patrice Malfreyt : patrice.malfreyt@uca.fr

Severin Dronet : severin.dronet@michelin.com