



Offre de thèse automne 2021

Design de réseaux réversibles pour des résines durables : approche par modélisation moléculaire multi-échelle.

CONTEXTE

Michelin est à la recherche constante de nouvelles solutions pour répondre aux exigences croissantes en termes de sécurité, de longévité et d'empreinte environnementale (économie d'énergie et pneumatiques plus verts). La conception de matériaux innovants de haute performance est par conséquent indispensable pour répondre à ces attentes sociétales et environnementales. Fort de son expérience sur les matériaux composites à base de polymères, l'entreprise souhaite concevoir des matériaux de haute performance, notamment des résines époxy plus respectueuse de l'environnement. Le développement de ces résines pose de nouvelles questions comme la recyclabilité ou l'utilisation de matériaux biosourcés. Il nécessite aussi le développement de nouvelles approches pour avoir une compréhension fine des mécanismes physico-chimiques de ces systèmes et définir et anticiper leurs performances. La modélisation aux échelles moléculaires permet d'apporter des éléments de compréhension, et également de prédire des propriétés mécaniques et thermiques de nos futurs matériaux. L'enjeu étant de concevoir de nouvelles résines biosourcées et recyclables en conservant les performances du matériau final.

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

L'utilisation de molécules biosourcées dans la synthèse des résines époxy impacte la structuration du réseau tri-dimensionnel, ce qui modifie les propriétés et les performances du matériau. De plus, les matériaux hautement réticulés que sont les résines époxy sont difficilement recyclables du fait de la formation irréversible de liaisons covalentes entre les chaînes polymériques. L'une des voies envisagées pour rendre ces résines recyclables est l'incorporation de liaisons covalentes réversibles dans le réseau. Ces liaisons réversibles doivent garantir les performances mécaniques du matériau durant son usage et une dégradation efficace en fin de vie. Dans cette optique, Il est nécessaire de commencer à développer des outils de modélisation qui orienteront à termes les choix de conception.

L'objectif de cette étude consiste à mieux comprendre les mécanismes qui rentre en jeu dans ces réactions chimiques de formation de réseaux réversible et impactent les propriétés matériaux. Ce travail comportera aussi, le développement d'outils de modélisation moléculaire (QM, dynamique moléculaire, ReaxFF) permettant de modéliser la formation du réseau tri-dimensionnel afin de prédire les propriétés mécaniques et thermiques de la résine. Ces outils permettront de déterminer le taux de liaisons réversibles nécessaire à une bonne tenue mécanique et à une recyclabilité du matériau. De façon complémentaire, des expériences de caractérisation seront menées pour objectiver les propriétés matériaux. La confrontation des résultats donnés par la simulation moléculaire aux résultats expérimentaux permettra la validation des modèles développés.

Ces travaux permettront de limiter les expérimentations longues et coûteuses et représentent une initiative originale et particulièrement utile pour le développement de nouvelles solutions industrielles de résines biosourcées et biodégradables dans une optique de développement durable.

Profil et compétences recherchées

Master ou équivalent en science des matériaux (polymères) avec une expérience préalable en matière de simulations moléculaires ou chimie des polymères.

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

Marie-Noelle Poradowski : marie-noelle.poradowski@michelin.com

Sébastien Garruchet : sebastien.garruchet@michelin.com

Patrice Malfreyt : patrice.malfreyt@uca.fr