

Science des surfaces et des interfaces appliquée à la métallisation des composites

Laboratoire : CIRIMAT-ENSIACET, Toulouse, Equipe Surfaces : Réactivité et Protection (SURF)

Encadrants de thèse : Corinne Lacaze-Dufaure (Dir.) et Thomas Duguet (Co-encadrant)

Contact : par email à Thomas.Duguet@ensiacet.fr et corinne.dufaure@ensiacet.fr

Financement : bourse ministérielle (MESR)

Sujet de thèse

Le sujet proposé posera des bases fondamentales pour la compréhension des mécanismes de surface mis en jeu lors du traitement de pièces composites pour le spatial par dépôt chimique en phase vapeur. Cette thématique, portée par l'équipe SURF, et concrétisée par la création d'un laboratoire commun avec une PME du domaine aéronautique et espace, englobe la réactivité chimique et les interactions gaz/solide, la germination-croissance, les mécanismes d'adhésion, avec une portée moyen-terme impactant toutes nos activités de revêtement, dont la métallisation.

La thèse sera focalisée sur l'étude expérimentale et théorique de la surface d'un polymère poly-époxyde modèle. Cette dernière servira de support pour étudier sa fonctionnalisation par activation, greffage, et/ou revêtement. Actuellement, il n'existe pas de modèle satisfaisant permettant d'étudier la réactivité d'une surface polymère, notamment en raison du désordre structural. Les méthodes de traitement de surface sont jusqu'alors empiriques, et l'on trouve difficilement un traitement applicable à son propre matériau. Ainsi, de nombreux articles et brevets présentent des études expérimentales difficilement généralisables et/ou transférables. Afin de résoudre ce verrou, il est proposé de définir une méthodologie expérimentale et théorique qui aboutira à un modèle de surface d'un poly-époxyde. La méthodologie sera généralisable à d'autres systèmes, afin de proposer des modèles fiables de réactivité de surface. Le modèle théorique sera confronté à des expériences dites « modèles », en ce sens que la physico-chimie et les caractéristiques structurales des surfaces synthétisées introduiront un minimum d'erreur dans la comparaison.

Dans un premier temps, la méthodologie consistera à synthétiser des surfaces propres, homogènes chimiquement, et sans défauts, à l'échelle nanométrique, et à comparer les résultats de caractérisation à ceux des calculs de dynamique moléculaire et DFT, réalisés sur un réseau de macromolécules modèle. Expérimentalement, nous avons d'ores et déjà établi un protocole de synthèse d'un poly-époxy modèle qui a été caractérisé par DSC, FTIR, AFM, et XPS. La rugosité ($R_a < 1$ nm) et la densité de défauts ($0,21 \mu\text{m}^{-2}$) sont très faibles, et la surface est homogène. Des calculs sont en cours pour vérifier l'adéquation en les résultats d'XPS et les structures électroniques théoriques. L'étudiant(e) en thèse devra reproduire et compléter ces résultats.

Dans un second temps, la connaissance approfondie des propriétés de surface du poly-époxyde modèle permettront à l'étudiant(e) de l'utiliser comme patron pour étudier l'adsorption d'espèces sur sa surface. Notamment, une cartographie de l'énergie d'adsorption d'atomes métalliques sera réalisée, et comparée aux résultats d'AFM lorsqu'un film extrêmement mince de métal (< 1 monocouche) a été déposé sur la surface modèle expérimentale.

Ce sujet s'inscrit principalement dans deux disciplines très complémentaires : la science des surfaces et la chimie théorique. Avec le soutien de ses encadrants, l'étudiant(e) partagera donc son temps entre calculs théoriques et expérimentations, ce qui lui permettra d'ajuster son plan d'expérience de façon efficace.