

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **27 janvier 2025**

Nom de famille et prénom de l'auteur. e : **Madame Aurore JULLIN**

Titre de la thèse : Design de nanocomposites à hautes propriétés barrière par la combinaison d'approches expérimentales, de modélisation et d'apprentissage automatique

Résumé



Les nanocomposites à base de polymère et de charges imperméables suscitent un grand intérêt pour les applications barrière mais ils représentent des matériaux complexes. En effet, les propriétés de fonction de ces matériaux dépendent d'un nombre important de paramètres liés aux charges et à leur état de dispersion, à la matrice polymère, aux interactions charge/matrice pouvant conduire à des propriétés interfaciales variées ainsi qu'à des effets indirects potentiels des charges sur la matrice, ces paramètres pouvant jouer des rôles additifs ou au contraire antagonistes. Ainsi, les objectifs de ce travail de thèse sont de définir des voies de développement robustes de nanocomposites à propriétés barrière optimisées sur la base d'approches expérimentales, théoriques et d'apprentissage automatique. Dans un premier temps les études se sont focalisées sur une plateforme de nanocomposites à matrice acide polylactique (PLA), qui permet de faire varier aisément la microstructure de la matrice, le procédé de mise en œuvre et le type de domaines imperméables. L'analyse détaillée des paramètres matériaux et des propriétés fonctionnelles est exploitée par des modèles théoriques mais également dans une approche d'apprentissage automatique. Ainsi les relations entre paramètres matériaux et propriétés barrière ont pu être établies et les différents paramètres hiérarchisés. À l'issue de ces résultats, l'étude a été étendue à un grand nombre de matrices et de charges, permettant ainsi de couvrir une large gamme de niveaux de perméabilité. Pour l'ensemble des plateformes de nanocomposites, une hiérarchisation pertinente des paramètres matériaux a pu être réalisée mettant en lumière les facteurs gouvernant la perméabilité. Des modèles d'apprentissage automatique ont été entraînés avec succès à partir de ces facteurs, permettant d'une part de prédire les valeurs de perméabilité relative pour cette famille

étendue de matériaux mais aussi de proposer des designs de matériaux répondant à des propriétés fonctionnelles choisies.

Mots-clés : nanocomposites, propriétés barrières, morphologie, apprentissage automatique