

JOURNÉES SCIENTIFIQUES DE L'EDSF

THERMO-MECHANICAL PROPERTIES OF VARIOUS EPOXY-AMINE RESINS: EXPERIMENTS VERSUS MOLECULAR SIMULATIONS

Mathilde ORSELLY^{1,2}, Julien DEVEMY², Alain DEQUIDT², Agathe BOUVET-MARCHAND¹, Patrice MALFREY², Cédric LOUBAT¹

¹*SPECIFIC POLYMERS, Castries, France*

²*Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, Université Clermont Auvergne, Aubière, France*

Epoxyes are some of the most prominent thermosetting polymers valued nowadays due to their wide range of applications. This class of polymers is of interest for instance for structural components in aerospace applications as well as electronics packaging or various types of coatings. This is made possible by their interesting versatility. The final material can be easily modulated by the chemical structure, then responsible for its striking thermal and mechanical properties.

Therefore, it is of great importance to be able to characterize them and comprehend the influence of the structural network on their properties. Aside from the usual experimental testing, computational chemistry has shown to be a great asset to this task, in particular by using molecular simulations.^[1]

In the scope of this project, all-atom molecular dynamics performed on Lammmps with the CHARMM force field were used to characterise various epoxy resins, such as aliphatic or bisphenol-based ones. A multi-step crosslinking algorithm as well as several methodologies to obtain key properties, such as density, glass temperature, and elastic modulus, were designed. A quantitative comparison was made and was proven to be in good agreement with experimental data.

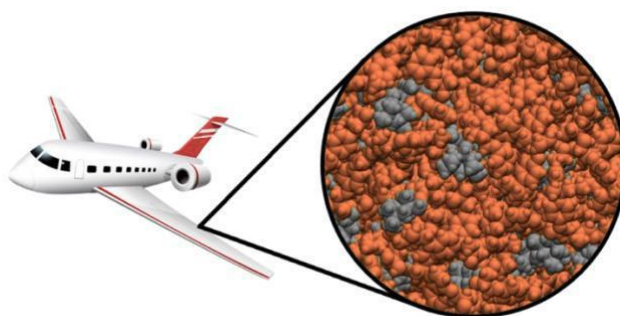


Fig. 1 Insights from a molecular viewpoint

References:

1. Li C., Strachan A., *Polym. Phys., Part B: Polym. Sci*, **2014**, 53(2), 103-22

JOURNÉES SCIENTIFIQUES DE L'EDSF

OPTIMISATION DE STRUCTURES PHOTONIQUES

Pauline BENNET¹, Perrine JUILLET², Mamadou Aliou BARRY¹, Vincent BERTHIER³, Bodo WILTS⁴, Marie-Claire CAMBOURIEUX¹, Rémi POLLES¹, Olivier TEYTAUD⁵, Emmanuel CENTENO¹, Nicolas BIAIS⁶, Sara IBRAHIM², François REVERET¹, Angélique BOUSQUET², Antoine MOREAU¹

¹Université Clermont Auvergne, CNRS, INP Clermont Auvergne, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

²Université Clermont Auvergne, CNRS, INP Clermont Auvergne, ICCF, F-63000 Clermont-Ferrand, France

³TAO, Inria, LRI, Université Paris Sud CNRS UMR 6823, Orsay Cedex, France

⁴Adolphe Merkle Institute, University of Fribourg, Chemin des Verdiers 4, 1700 Fribourg, Switzerland

⁵Facebook AI Research, 6 rue Menars, 75000 Paris, France

⁶Graduate Center of CUNY and Department of Biology, CUNY Brooklyn College, New York, NY 11210, USA

Les structures photoniques naturelles, nombreuses chez les insectes et les oiseaux, produisent des effets optiques éclatants en manipulant la lumière et sont considérées comme une source d'inspiration par les physiciens et les ingénieurs. Malheureusement, bien que ces structures soient élégantes, bien peu répondent à des besoins technologiques. Un algorithme inspiré de l'évolution naturelle a permis de générer de façon systématique une structure anti-reflet élégante, facile à comprendre et capable d'améliorer le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque^[1,2,3]. Assez similaire aux structures photoniques naturelles, l'anti-reflet présente une régularité qui permet de comprendre avec détails sa réponse optique. L'anti-reflet optimisé est constitué d'un cristal photonique qui présente une bande interdite décalée par rapport au domaine spectral exploité par les cellules photovoltaïques. En modélisant l'anti-reflet par une cavité Fabry-Pérot j'ai montré que les adaptations externes du cristal photonique permettent une adaptation d'impédance entre le milieu externe et le milieu effectif du cristal photonique^[4]. Cette approche montre que le résultat d'un algorithme d'optimisation peut être considéré comme une vraie source d'inspiration.

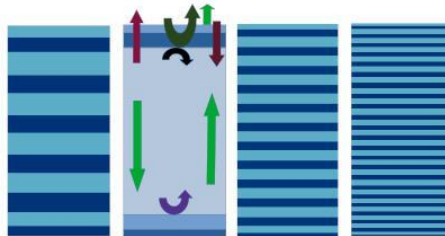


Fig. 1. Modélisation d'une structure anti-reflet pour le photovoltaïque par une cavité Fabry-Pérot.

References:

1. Mamadou Aliou Barry, et al., Sci Rep 10, 12024, **2020**.
2. J. Rapin and O. Teytaud, Nevergrad - A gradient-free optimization platform, **2018**
3. Pauline Bennet, et al., Phys. Rev. B 103, 125135, **2021**
4. Philippe Velha, Jean-Paul Hugonin, and Philippe Lalanne, Compact and efficient injection of light into band-edge slow-modes. Optics express, 15(10):6102–6112, **2007**