



## PhD position available in Computational Mechanics at Arts et Métiers-ParisTech in collaboration with CMMS / Polish Academy of Science in Lodz

### Scientific context:

Deformation of a polymer was long used as a mean to obtain thin and strong fibers. However, large stretching is not easily obtained and fibers become thick and not strong enough. The main difficulty arises from entanglements of macromolecules. To get unentangled macromolecules is not easy. There are three ways to achieve disentanglement: (1) by dissolving a polymer at low-concentration and cool slowly until a gel formation, (2) by crystallization of certain polymers under high pressure and (3) by polymerization below melting temperature with simultaneous crystallization. Polymers with unentangled macromolecules can be drawn to a very high degree of deformation up to 100 000 times. At such high deformation polymer nanofibers can be produced with a thickness as low as 10 nm. A new idea **to deform crystalline polymer particles made of unentangled macromolecules into nanofibers by shearing via viscous media** has been exploited recently in [1,2]. The deformation of the crystalline particles involves crystal plasticity mechanisms without melting. Nanofibers can be generated by shearing of polymer particles dispersed in another molten polymer. **The larger the deformation ratios and shear rates, and the longer the shearing times, the thinner and stronger polymer nanofibers are obtained.** Shearing during compounding results in generation of nanofibers within polymer matrix and thus, forming all-polymer nanocomposites. An important problem is the stress transfer from molten polymer matrix to crystals. That aspect is related to dynamic viscosity, interfacial tension, wettability and critical shear stresses required for crystal plasticity [3]. Polymer crystal plasticity was studied in the past based on bulk crystallized polymers where crystals were interconnected with fragments of macromolecules. Those macromolecules were entering the crystals only on crystalline lamellae basal planes while none of them were attached to side walls of the crystals. Crystal side walls were in contact with the surrounding matter via Van der Waals interaction. **The system with embedded single crystals in a molten polymer which interacts only via Van der Waals forces is a unique opportunity to determine the deformability and true parameters of polymer crystal plasticity.**

### Main objectives of the PhD work:

Although it was observed experimentally, the phenomenon of crystal plasticity taking place within crystalline should be investigated from a computational viewpoint using finite elements. The role of various microstructural (crystal orientation, elastic anisotropy) and experimental parameters (shear rate, temperature) will be assessed. Full-field simulation of the fibrillation process of crystalline polymer has never been performed. Most of the computational work resides in implementing generalized continua theories able to account for interfacial tension, in a FE large deformation crystal plasticity framework. Crystal plasticity of polymer crystallites interacting with a matrix only through Van der Waals bounds is a new topic both from an experimental and numerical viewpoint. Finally, by furthering our understanding of the mechanisms taking place during plastic shearing of polymer crystals, and validating the approach proposed in this work, we aim at developing a predictive computational tool for nanocomposites processing.

### Candidate:

The candidate should have obtained a Master's degree with a strong background in computational mechanics, numerical methods or any related field, as well as interest in polymer science; although prior knowledge of the French language is not mandatory, spoken and written English proficiency is needed. The employment contract is for 3 years full-time, starting from October 2015. Net salary is about 1400-1800 EUR per month, depending on the will of the candidate to take on teaching responsibilities (64 hours per year). Applications should be sent to [justin.dirrenberger@ensam.eu](mailto:justin.dirrenberger@ensam.eu) by May 15th 2015.

PhD advisors: Justin Dirrenberger (France), Gilles Régner (France) & Andrzej Galeski (Poland).

### References:

- [1] K. Jurczuk, A. Galeski, E. Piorkowska, *Polymer*, 2014, **54**, 4617.
- [2] K. Jurczuk, A. Galeski, E. Piorkowska, *J. Rheology*, 2014, **58**, 589.
- [3] A. Galeski, G. Regnier, *In Nano- and Micromechanics of Polymer Blends and Composites*, eds. J. Karger-Kocsis, S. Fakirov, HANSER, Cincinatti, (2009) Chapter 1, pp.3-58

## Thèse en mécanique numérique des polymères cristallins aux Arts et Métiers-ParisTech en collaboration avec le CMMS / Polish Academy of Science in Lodz

### Contexte scientifique :

La déformation des polymères est depuis longtemps utilisée pour la production de fibres fines et résistantes. Cependant, un grand étirement est parfois difficile à obtenir, et dans ce cas les fibres résultantes sont plus épaisses et moins intéressantes mécaniquement. La principale difficulté provient de l'enchevêtrement des macromolécules. L'obtention de macromolécules non enchevêtrées est une opération complexe, 3 méthodes sont disponibles : (1) par dissolution d'un polymère à faible concentration et refroidissement lent jusqu'à formation d'un gel, (2) par cristallisation de certains polymères sous haute pression, et (3) par polymérisation en dessous de la température de fusion avec cristallisation simultanée. Les polymères à macromolécules non enchevêtrées peuvent être étirés avec un très haut degré de déformation (jusqu'à 100 000 fois). À de tels niveaux de déformation, des nanofibres de polymères peuvent être produites avec des épaisseurs de l'ordre de 10 nm. Une nouvelle voie consiste à **déformer des particules de polymères cristallins composés de macromolécules non enchevêtrées pour produire des nanofibres par cisaillement via un milieu visqueux** ; ce concept a été exploité récemment dans [1,2]. La déformation des particules cristallines implique des mécanismes de plasticité cristalline sans fusion. Les nanofibres peuvent être générées par cisaillement des particules de polymère dispersées dans un autre polymère fondu. **Plus le taux de déformation et de vitesses de cisaillement est élevé, et plus long est le temps de cisaillement, plus les nanofibres polymères obtenues seront minces et résistantes mécaniquement.** Le cisaillement pendant le mélange résulte dans la production de nanofibres à l'intérieur de la matrice polymère et est, par conséquent, une voie très prometteuse pour la production de nanocomposites avec tout type de matrice polymère. Un problème important est le transfert de contrainte de la matrice de polymère fondu vers les cristaux. Cet aspect est lié à la viscosité dynamique, la tension interfaciale, la mouillabilité et les contraintes de cisaillement critiques nécessaires à l'activation de la plasticité cristalline [3]. La plasticité des polymères cristallins a été étudiée dans le passé sur des polymères cristallisés en volume, où les cristaux étaient reliés entre eux par des fragments de macromolécules. Ces macromolécules entraînent dans les cristaux seulement sur les plans de basaux des lamelles cristallines alors qu'aucune d'entre-elles n'était fixée sur les parois latérales des cristaux. Ces parois étaient en contact avec la matière environnante via des interactions de type Van der Waals. **Le système de monocristaux polymères inclus dans une matrice de polymère fondu qui interagit uniquement via des liaisons de Van der Waals est un système expérimental idéal pour déterminer la déformabilité des cristaux et des paramètres associés à la plasticité cristalline.**

### Principaux objectifs du travail de thèse :

Bien qu'il ait été observé expérimentalement, le phénomène de plasticité cristalline ayant lieu dans ce type de matériaux n'est pas totalement compris ; une étude du point de vue numérique par méthode des éléments finis permettra d'approfondir notre compréhension des mécanismes et des énergies mises en jeu. Le rôle des différents paramètres microstructuraux (orientation cristalline, anisotropie élastique) et expérimentaux (taux de cisaillement, température) sera évaluée. La simulation en champs complets du phénomène de fibrillation des polymères cristallins n'a jamais été entreprise. Ce projet repose en partie sur l'implémentation EF en transformations finies de modèles de mécanique des milieux continus généralisés, à même de décrire les effets de la tension interfaciale au sein du mélange. La plasticité cristalline des polymères cristallins interagissant avec une matrice par les seules liaisons de Van der Waals est une thématique nouvelle à la fois du point de vue numérique et expérimental. Ainsi, en approfondissant notre compréhension des mécanismes se produisant lors de la déformation plastique des polymères cristallins, et en validant l'approche proposée, nous visons à développer un outil numérique prédictif pour la mise en œuvre des nanocomposites.

### Candidat :

Le candidat doit avoir obtenu un diplôme de master 2 R ou diplôme d'ingénieur dans une discipline pertinente : mécanique, méthodes numériques, matériaux, etc. et faire preuve d'un intérêt pour la science des polymères. Bien qu'encouragée, la connaissance préalable du français n'est pas obligatoire, mais un niveau avancé en anglais parlé et écrit est nécessaire pour ce projet international. Il s'agit d'un contrat doctoral de 3 ans à partir d'octobre 2015, un monitorat (64h/an) à l'ENSAM Paris est envisageable. Les candidatures doivent être envoyées à [justin.dirrenberger@ensam.eu](mailto:justin.dirrenberger@ensam.eu) avant le 15 mai 2015.

PhD advisors: Justin Dirrenberger (France), Gilles Régner (France) & Andrzej Galeski (Pologne).

### Références :

- [1] K. Jurczuk, A. Galeski, E. Piorkowska, *Polymer*, 2014, **54**, 4617.
- [2] K. Jurczuk, A. Galeski, E. Piorkowska, *J. Rheology*, 2014, **58**, 589.
- [3] A. Galeski, G. Regnier, *In Nano- and Micromechanics of Polymer Blends and Composites*, eds. J. Karger-Kocsis, S. Fakirov, HANSER, Cincinatti, (2009) Chapter 1, pp.3-58