

## OFFRE DE THESE – OCTOBRE 2025

### *Développement de polyhydroxyuréthanes biosourcés à forte réactivité pour la substitution des isocyanates dans les polyuréthanes*

#### Contexte et Objectifs

Les polyuréthanes sont des matériaux thermodurcissables fortement impactant sur le plan environnemental, et sont synthétisés à partir d'isocyanates, substances très dangereuses (toxiques, sensibilisantes, voire CMR pour certaines) et visées par des restrictions REACH. Dans ce contexte, les polyhydroxyuréthanes (PHU) présentent plusieurs avantages : plus facilement biosourçables que les PU conventionnels, leur synthèse ne fait pas intervenir d'isocyanate, mais permet au contraire la séquestration pérenne de CO<sub>2</sub>. Néanmoins, les précurseurs utilisés dans la synthèse des PHU (carbonates cycliques et amines) présentent des réactivités beaucoup plus faibles que les isocyanates, induisant des temps de réticulation actuellement incompatibles avec les cadences de production attendues pour ce type de matériau. Plusieurs axes de recherche ont été proposés pour optimiser les cinétiques de réticulation des PHU et concernent l'identification de nouveaux précurseurs carbonates cycliques et amines chimiquement substitués à proximité de la fonction réactive, et de nouveaux catalyseurs performants permettant d'activer les deux types de précurseurs.

Dans ce contexte, le doctorant aura pour mission de **synthétiser de nouveaux précurseurs carbonates cycliques et amines, et d'étudier leur réactivité**, afin d'identifier les conditions les plus favorables pour la synthèse de PHU hautement réactifs. Les résultats acquis durant ces travaux seront ensuite analysés par des **modèles d'Intelligence Artificielle symbolique** développés au CEA. Ce projet de thèse s'inscrit dans le cadre du **projet PHURIOUS**, financé par le **PEPR DIADEM**, qui prévoit de coupler des techniques de synthèse et de caractérisation haut-débit en chimie des polymères, et des outils numériques en amont (calculs DFT, dynamique moléculaire) et en aval (IA) des étapes de synthèse.

#### Laboratoires d'accueil

Le doctorant sera principalement basé au sein du **Laboratoire d'Innovation pour les Technologies des Energies Nouvelles et les nanomatériaux (LITEN)** sur le site du CEA Grenoble. Des déplacements sont à prévoir au **Laboratoire de Chimie des Polymères Organiques (LCPO)**, à Bordeaux. Le doctorant sera affilié à l'**ED CSV** de l'Université Grenoble Alpes.

#### Candidatures

Le (la) candidat(e) devra être titulaire (ou en cours d'obtention) d'un Master 2 ou d'un diplôme d'ingénieur en chimie organique ou en chimie des polymères, avec un goût prononcé pour le travail expérimental. Un intérêt pour les technologies numériques (utilisation de l'IA en sciences) est attendu. Dôté(e) d'une grande curiosité scientifique, et de bonnes capacités de synthèse et de communication écrite et orale, en français comme en anglais, le (la) candidat(e) sera force de proposition, et capable de travailler de manière autonome mais aussi de collaborer avec les équipes impliquées dans le projet.

Pour postuler, merci de fournir :

- votre CV avec références et une lettre de motivation
- vos relevés de notes et classements des deux dernières années
- au moins deux lettres de recommandation

#### Contacts

Sébastien ROLERE (CEA LITEN) : [sebastien.rolere@cea.fr](mailto:sebastien.rolere@cea.fr) – 04.38.78.15.56

Simon HARRISSON (LCPO) : [simon.harrisson@enscbp.fr](mailto:simon.harrisson@enscbp.fr) – 05 40 00 60 71

Thomas VIDIL (LCPO) : [thomas.vidil@enscbp.fr](mailto:thomas.vidil@enscbp.fr) – 05 56 84 79 48