

Post-doctoral position for the period 2021-2022

Proposition de contrat post-doctoral en Français en pages #3 et 4

Numerical simulation and first experimental scale up of a Chemical Vapor Deposition process of innovative functional coatings for the plastics industry

When it comes to producing a large quantity of plastic parts, injection molding is the gold standard. It allows the fabrication of complex in shape parts with high productivity, which depends on the cycle time and the number of inserts in the mold. While high productivity is often associated with a reduction in production cost, it can nevertheless lead to a decrease in parts quality. This degradation of the quality often corresponds to defects that appear during the premature cooling of the thermoplastic in the mold, or to a modification of the mold by erosion / corrosion when it is heavily used.

Global competition in the plastics market requires cross-sectoral cooperation to foster competitive advantage and innovation, especially in complex production and supply chains. The durability of the injection mold, central element of the production technology and the improvement of the properties of the finished product such as the quality of the surface (aesthetic appearance), become key elements in this competition. These needs are echoed in several areas, such as aeronautics, health (medical, pharmacy) or automotive. In order to meet these needs, two collaborative projects, in France and in Germany, are underway. Each has mixed industrial and academic partnerships, and the two are intimately linked to produce added value.

In this context, the post doc project concerns the development of a chemical vapor deposition (CVD) process providing functional coatings for thermal regulation and anti-corrosion protection, applicable on plastic injection molds. These coatings will be amorphous complex oxides based on zirconium oxide, in particular rare earth zirconates, for example lanthanum¹ or gadolinium². Their low thermal conductivity³, combined with their barrier character reinforced by their amorphous state⁴ should allow to meet these restrictive specifications. In addition, attention will be paid to the industrially transferable nature of the process, through continuous interaction with the companies participating in the project.

The deposition process and the characteristics of the deposited thin films will be experimentally studied at the lab scale during another post-doctoral work organized in parallel in the same consortium. The two post doc fellows will work in synergy.

The objectives of the present post doc project are (1) to simulate the CVD process using a CFD (Computational Fluid Dynamics) code and (2) to perform an experimental scale up of the CVD reactor to treat scale one mold inserts, using the experimental results obtained by the other post doc fellow.

The post doctoral research will be conducted in two research laboratories located at the National School of Chemical and Technological Arts (ENSIACET) of the National Polytechnic Institute of Toulouse (INPT). The Interuniversity Center for Research and Engineering of Materials (CIRIMAT, <https://www.cirimat.cnrs.fr/?lang=en>) and the Chemical Engineering Laboratory (LGC, <https://lgc.cnrs.fr/en/>) have complementary and internationally recognized experience in the field of CVD processed thin films⁵⁻⁶. Close collaborations are planned with the Inorganic Materials Chemistry team of Prof. A. Devi at the University of Bochum in Germany, which will supply innovative zirconium oxide precursors, with the Fachhochschule Dortmund which will analyze the barrier property of the films by electrochemical impedance spectroscopy as well as with the Surface, Friction, Vibration team of Prof. S. Benayoun at the Laboratory of Tribology and Dynamics of Systems (LTDS) of the Ecole Centrale de Lyon, which will analyze heat transfer through films.

The successful candidate will have a PhD in chemical engineering applied to CVD or ALD processes or in materials engineering with skills in CFD (fluid mechanics, thermal and mass transfers considering kinetics of chemical reactions). He (she) will have a strong affinity for computational studies and for experimental work. He (she) will be in charge of all the tasks of CFD process simulation and experimental scale up, in interaction with the various above mentioned collaborators. As such, he (she) will have strong teamwork capacity, excellent communication skills in English, strong autonomy and large facility in writing scientific reports.

The position is to be filled for March 2021 for 12 months and the application must be made through the site: <https://emploi.cnrs.fr/> or <https://bit.ly/2MrjsHO>

Contacts:

Prof. Brigitte Caussat, brigitte.caussat@ensiacet.fr

Dr. Constantin Vahlas, constantin.vahlas@ensiacet.fr

References:

1. Zhang, C. G.; Zhao, J. L.; Yang, L.; Zhou, Y. C.; Wang, Q. F.; Chen, H. F.; Yang, G.; Gao, Y. F.; Liu, B., Preparation and corrosion resistance of nonstoichiometric lanthanum zirconate coatings. *J. Eur. Cer. Soc.* 2020, 40 (8), 3122-3128.
2. Mahade, S.; Jonnalagadda, K. P.; Curry, N.; Li, X. H.; Bjorklund, S.; Markocsan, N.; Nylen, P.; Peng, R. L., Engineered architectures of gadolinium zirconate based thermal barrier coatings subjected to hot corrosion test. *Surf. Coat. Techn.* 2017, 328, 361-370.
3. Vassen, R.; Jarligo, M. O.; Steinke, T.; Mack, D. E.; Stover, D., Overview on advanced thermal barrier coatings. *Surf. Coat. Techn.* 2010, 205 (4), 938-942.
4. Zhang, X. T.; Wu, L., Synthesis of self-sacrifice amorphous titanium dioxide-coated aluminum via hydrolysis reaction for anticorrosion application. *Ionics* 2018, 24 (9), 2905-2913.
5. Vahlas, C.; Juarez, F.; Feurer, R.; Serp, P.; Caussat, B., Fluidization, spouting, and metalorganic chemical vapor deposition of platinum group metals on powders. *Advanced Mater. CVD* 2002, 8 (4), 127-144.
6. Topka, K. C.; Chliavoras, G. A.; Senocq, F.; Vergnes, H.; Samelor, D.; Sadowski, D.; Vahlas, C.; Caussat, B., Large temperature range model for the atmospheric pressure Chemical vapor deposition of Silicon dioxide films on thermosensitive substrates. *Chem. Eng. Res. Des.* 2020, 161, 146-158.

Proposition de contrat post-doctoral pour la période 2021-2022

Sujet : Simulation numérique et premier changement d'échelles d'un procédé de dépôt chimique en phase vapeur de revêtements innovants fonctionnels pour la plasturgie

Lorsqu'il s'agit de produire une grande quantité de pièces plastiques, le moulage par injection est le procédé de référence. Il permet la réalisation de formes complexes avec une forte productivité qui dépend du temps de cycle et du nombre d'empreintes dans le moule. Si la forte productivité est souvent associée à une réduction du coût de production, elle peut néanmoins mener à une diminution de la qualité de la pièce. Cette diminution de la qualité correspond souvent à des défauts qui apparaissent lors du refroidissement précoce du thermoplastique dans le moule, ou encore à une modification du moule par érosion/corrosion lorsqu'il est fortement utilisé.

La concurrence mondiale sur le marché des matières plastiques exige des coopérations intersectorielles pour favoriser l'avantage concurrentiel et l'innovation, en particulier dans la production et les chaînes d'approvisionnement complexes. La durabilité du moule d'injection, élément central de la technologie de production et l'amélioration des propriétés du produit fini telles que la qualité de la surface (aspect esthétique), deviennent des éléments clé dans cette compétition. Ces besoins trouvent écho dans plusieurs domaines, comme l'aéronautique, le sanitaire (médical, pharmacie) ou l'automobile. Afin de répondre à ces besoins, deux projets collaboratifs, en France et en Allemagne sont en cours. Chacun comporte des partenariats mixtes, industriels et académiques, et les deux sont intimement liés pour produire de la valeur ajoutée.

Dans ce contexte, ce contrat post-doctoral concerne le développement d'un procédé de CVD (Chemical Vapor Deposition), produisant des revêtements fonctionnels spécifiques de régulation thermique et de protection anticorrosion, applicables sur les moules d'injection de plasturgie. Ces revêtements seront des oxydes complexes amorphes à base d'oxyde de zirconium, notamment des zirconates de terres rares, par exemple du lanthane¹ ou du gadolinium². Leur faible conductivité thermique³, combinée avec leur caractère barrière renforcé par leur état amorphe⁴ doivent permettre de satisfaire ces cahiers de charge contraignants. Par ailleurs, l'attention sera portée sur le caractère industriellement transférable du procédé, par interaction continue avec les entreprises participant au projet.

Le procédé et les caractéristiques des dépôts seront étudiés expérimentalement à l'échelle du laboratoire par un autre travail de post doc organisé en parallèle dans le même consortium. Les deux étudiants en post doc travailleront en synergie.

Les objectifs du présent post doc seront (1) de simuler le procédé CVD en utilisant un code de calcul de CFD et (2) de réaliser un premier changement d'échelle expérimental pour traiter des inserts de moules, à partir des résultats obtenus par l'autre projet de post doc.

Le travail sera mené au sein de deux laboratoires de recherche situés à l'École Nationale Supérieure en Arts Chimiques et Technologiques (ENSIACET) de l'Institut National Polytechnique de Toulouse (INPT). Le Centre Interuniversitaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux (CIRIMAT, <https://www.cirimat.cnrs.fr/>) et le Laboratoire de Génie Chimique (LGC, <https://lgc.cnrs.fr/>) possèdent une expérience complémentaire et internationalement reconnue dans le domaine des matériaux en couches minces élaborés par CVD⁵⁻⁶. L'équipe projet comportera également deux autres post doctorants qui assureront le *scale up* et la modélisation du procédé. Des collaborations étroites sont prévues avec l'équipe de Chimie des Matériaux Inorganiques du Prof. A. Devi à l'Université de Bochum en Allemagne, qui fournira des précurseurs d'oxyde de zirconium innovants, avec le Fachhochschule Dortmund qui analysera la propriété barrière des couches par spectroscopie d'impédance électrochimique ainsi qu'avec l'équipe Surface, Friction, Vibration du Prof. S. Benayoun au Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes (LTDS) de l'École Centrale de Lyon, qui procédera à l'analyse des transferts thermiques à travers les films.

La personne retenue sera docteur en génie chimique appliqué aux procédés CVD ou ALD, ou en ingénierie des matériaux avec des compétences en simulation CFD (mécanique des fluides, transferts de chaleur et de matière avec prise en compte de cinétiques de réactions chimiques). Il(elle) aura un fort attrait pour les études de simulation numérique de procédés et pour des travaux expérimentaux. Il ou elle aura en charge toutes les tâches liées à la simulation CFD du procédé CVD et à l'étude expérimentale du changement d'échelle, en interaction avec les collaborateurs décrits plus haut. A ce titre, il(elle) aura de grandes capacités d'autonomie, de travail en équipe, de communication en Anglais et de rédaction de rapports scientifiques.

Le poste, d'une durée de 12 mois, est à pourvoir pour le mois de mars 2021 et la candidature doit se faire sur le site : <https://emploi.cnrs.fr/> ou <https://bit.ly/2MrjsHO>

Contacts:

Prof. Brigitte Caussat, brigitte.caussat@ensiacet.fr

Dr. Constantin Vahlas, constantin.vahlas@ensiacet.fr

Références

1. Zhang, C. G.; Zhao, J. L.; Yang, L.; Zhou, Y. C.; Wang, Q. F.; Chen, H. F.; Yang, G.; Gao, Y. F.; Liu, B., Preparation and corrosion resistance of nonstoichiometric lanthanum zirconate coatings. *J. Eur. Cer. Soc.* 2020, *40* (8), 3122-3128.
2. Mahade, S.; Jonnalagadda, K. P.; Curry, N.; Li, X. H.; Bjorklund, S.; Markocsan, N.; Nylen, P.; Peng, R. L., Engineered architectures of gadolinium zirconate based thermal barrier coatings subjected to hot corrosion test. *Surf. Coat. Techn.* 2017, *328*, 361-370.
3. Vassen, R.; Jarligo, M. O.; Steinke, T.; Mack, D. E.; Stover, D., Overview on advanced thermal barrier coatings. *Surf. Coat. Techn.* 2010, *205* (4), 938-942.
4. Zhang, X. T.; Wu, L., Synthesis of self-sacrifice amorphous titanium dioxide-coated aluminum via hydrolysis reaction for anticorrosion application. *Ionics* 2018, *24* (9), 2905-2913.
5. Vahlas, C.; Juarez, F.; Feurer, R.; Serp, P.; Caussat, B., Fluidization, spouting, and metalorganic chemical vapor deposition of platinum group metals on powders. *Advanced Mater. CVD* 2002, *8* (4), 127-144.
6. Topka, K. C.; Chliavoras, G. A.; Senocq, F.; Vergnes, H.; Samelor, D.; Sadowski, D.; Vahlas, C.; Caussat, B., Large temperature range model for the atmospheric pressure Chemical vapor deposition of Silicon dioxide films on thermosensitive substrates. *Chem. Eng. Res. Des.* 2020, *161*, 146-158.