

## ??? « From molecule to material : application to tires »

Intervenant : **Benoît SCHNELL**

Durée : **15h**

### **Objectives :**

To put into highlight the interest of multi-scale modeling for the studies of complex systems as polymeric materials. Giving some industrial outlooks and more particularly in the tire domain.

### **Prerequisites :**

Basis of molecular modeling (cf. lesson of D. Tildesley). Knowledge in polymer physics and chemistry will be a plus.

### **Plan :**

I- How is working a tire ? Some fundamentals...

- Tire functionalities
- Choice of materials
- Performances and labs properties

II- Polymers and elastomeric networks

- Synthesis and polymers properties
- Elastomeric networks : synthesis, analysis et mechanical properties

III- Molecular multi-scale modeling

- Short recall of the molecular modeling principle
- Simulation lengthscales
- Forcefields

IV- Atomistic lengthscales studies

- Elastomer intrinsic rigidity
- Glass transition phenomenon
- Miscibility

V- Mesoscopic lengthscales studies

- Generic coarse-grained model : some examples
- Realistic coarse-grained – a multi-scale approach
- Elastomeric networks

VI- Nanocomposites

- Introduction (definition, specific properties, ...)
- Modeling ? Necessity of a multi-scale approach : some examples

Reference: the different references from litterature will be explicitly given during the lectures.

Intervenant : **Benoît SCHNELL**

Durée : **15h**

**Objectifs:**

Mise en évidence de l'intérêt des simulations moléculaires multi-échelles pour l'étude de systèmes complexes tels que les matériaux polymériques. Perspectives dans le domaine industriel (du pneumatique plus particulièrement).

**Pré-requis:**

Notions de simulation moléculaire (cf. module de D. Tildesley ??). Des connaissances en physico-chimie des polymères seront bénéfiques.

**Plan:**

I- Fonctionnement d'un pneumatique : les fondamentaux

- Fonctions d'un pneu
- Choix des matériaux
- Performances et propriétés « laboratoire »

II- Polymères et réseaux élastomériques

- Synthèse et propriétés des polymères
- Réseaux élastomériques : obtention, analyse et propriétés mécaniques

III- Simulation moléculaire multi-échelles

- Rappel succinct du principe de la simulation moléculaire
- Les différentes échelles de simulation
- Champs de force

IV- Études à l'échelle atomique

- Rigidité intrinsèque d'un élastomère
- Phénomène de transition vitreuse
- Miscibilité

V- Études à l'échelle mésoscopique

- Modèle gros-grain générique : quelques exemples
- Modèle mésoscopique réaliste – approche multi-échelles
- Réseaux élastomériques

VI- Nanocomposites

- Introduction (définition, propriétés particulières, ...)
- Intérêt de l'approche « simulation multi-échelles » : quelques illustrations

Bibliographie: de nombreuses références de la littérature qui seront explicitement renseignées lors des séances.