



## Entreprises,

- Nom de l'entreprise : .....**Manufacture Françaises des Pneumatiques Michelin..**

.....

- Ville et code postal : .....Clermont-Ferrand (63)

- Nom du laboratoire académique partenaire (si déjà connu):

Laboratoire de Chimie-Physique (Paris-Sud Orsay)

- Numéro de reconnaissance du laboratoire : .....UMR 8000...

- Descriptif de la thématique de recherche (*sans aucun caractère confidentiel*) :

### **Etude des propriétés dynamiques de mélanges de polymères par dynamique particulaire dissipative**

Ce projet se situe dans le contexte général de la modélisation de matériaux polymères par des approches de simulation. La simulation moléculaire, qui s'appuie sur une description des objets à un niveau atomique est parfaitement adaptée à l'étude des propriétés thermophysiques des fluides simples. Toutefois, les échelles de temps et d'espace mises en jeu dans la description des matériaux polymères est, la plupart du temps, bien au-delà des capacités des ordinateurs actuels. Par conséquent, différentes approches ont été développées, regroupées sous le nom d'approches « mésoscopiques » avec la volonté d'atteindre des échelles de taille et de temps au-delà de celles accessibles par des approches moléculaires.

La construction d'un modèle mésoscopique consiste à intégrer les variables dynamiques des objets microscopiques associées aux degrés de liberté les plus rapides, pour former des objets de taille mésoscopiques. Le degré de nivellement (nombre d'atomes associés à une particule mésoscopique) est de l'ordre de quelques à quelques dizaines d'atomes. Pour de forts degrés de nivellement, chaque particule représente une sphère molle et les collisions entre ces particules sont, par nature, dissipatives. Ceci doit être pris en compte dans le choix de la dynamique engendrée. Ainsi, en plus des forces conservatives qui décrivent la structure et la thermodynamique du modèle gros-grain, des forces de friction et aléatoire qui miment la nature dissipative des particules, doivent être introduites.

A ce jour, un très petit nombre d'études se sont concentrées sur l'étude des propriétés dynamiques. Cependant, il a été montré que les modèles mésoscopiques surestiment fortement la diffusion à cause de la perte de friction causée par le lissage de l'enveloppe moléculaire. Cet aspect est d'autant plus important que le degré de nivellement est élevé. Pour un système dans lequel un seul coefficient de friction est nécessaire (un seul type de particules mésoscopiques, ce qui est le cas des modèles actuels des homopolymères), on peut corriger les temps caractéristiques de la dynamique à temps court et à temps long par l'utilisation d'un seul facteur correctif, directement lié au coefficient de friction. La situation est complètement différente dans les mélanges où chaque espèce, voire chaque type de particule mésoscopique possède, *a priori*, un facteur correctif différent. La plupart des systèmes d'intérêt industriel (et académique) étant constitués de différentes espèces, il est particulièrement important de comprendre comment les propriétés dynamiques de mélanges peuvent être correctement décrites par des simulations de dynamique dissipative. L'objectif de cette thèse sera donc consacré au développement de champs de forces adaptés à l'amélioration de la description des processus dynamiques dans les mélanges de polymères.

● Date de recrutement : .....01/10/2010

● Adresse e-mail à laquelle le candidat doit envoyer sa candidature :

[bernard.rousseau@u-psud.fr](mailto:bernard.rousseau@u-psud.fr) ou [www.michelinrecrute.fr](http://www.michelinrecrute.fr) offre [FB-577](#)