

Le pneumatique et la chimie théorique

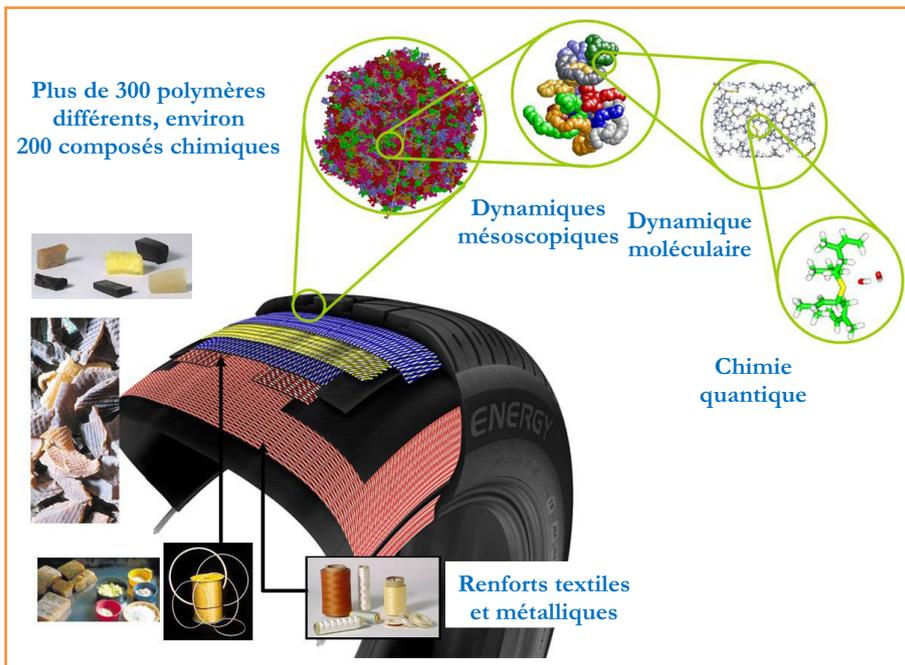
Marc Couty

Un pneu, c'est rond, c'est noir. Sous cet aspect uniforme se cache une structure composite de renforts textiles et métalliques associés par des matériaux élastomères fortement déformables, aux propriétés adaptées aux différents fonctionnements thermo-mécaniques des matériaux du pneu en usage. Ces matériaux élastomères sont eux-mêmes des composites à base de polymères, d'agents chimiques et de charges renforçantes formant une architecture sur des échelles allant du nanomètre au micron [1].

Afin de comprendre les mécanismes physico-chimiques mis en jeu dans ces matériaux, de leur synthèse à leur usage, Michelin a complété l'approche expérimentale traditionnelle par l'utilisation des méthodes de la chimie théorique et a investi dans le développement de nouvelles méthodes de simulation avec un focus particulier sur les méthodes de changement d'échelles à la frontière entre chimie et physique.

Les méthodes de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) de la chimie quantique ont été utilisées pour comprendre les mécanismes de polymérisation du butadiène et de l'isoprène et l'activité de catalyseurs organométalliques à base de néodyme vis-à-vis de la copolymérisation avec des oléfines. Autres domaines d'application des méthodes de réactivité chimique, les mécanismes d'oxydation et d'action de molécules anti-oxydantes, les mécanismes de réticulation des polymères et d'action des activateurs de vulcanisation, les mécanismes de greffage de polymères fonctionnels ou d'agents de couplage sur des surfaces de silice ou de noir de carbone ont fait l'objet de nombreux travaux en vue d'étendre le portefeuille de molécules et de fonctions disponibles à un coût moindre, des performances améliorées pour le consommateur et, en anticipation, des évolutions des normes et règlements en matière d'hygiène, sécurité et environnement.

La dynamique moléculaire des polymères, qui a fait des progrès considérables dans les dix dernières années, et l'étude de la relaxation segmentale et des relaxations des groupes latéraux dans des polymères, accessible sur des échelles de temps allant jusqu'à la dizaine de nanosecondes, permettent de prédire les propriétés mécaniques dans la zone de transition vitreuse dynamique à haute fréquence et haute température, domaine de fonctionnement du matériau au freinage sur sol mouillé. Dans le but de simuler la dynamique de polymères sur des échelles de temps (et d'espace) supérieures, des travaux sont en cours avec des partenaires académiques pour mettre en place des techniques dites « gros grain » telles que la DPD (« dissipative particle dynamics »). Le challenge du changement d'échelle consiste à extraire l'information pertinente de la dynamique atomistique réalisée



Le pneu : un produit multi-constituants... avec une physique multi-échelles.

sur la microstructure chimique du polymère d'intérêt tout en conservant les contraintes topologiques de non-croisement des chaînes propres aux polymères et en permettant d'introduire les surfaces des charges renforçantes.

Des méthodes de nivellement à des échelles supérieures permettant d'accéder aux propriétés rhéologiques des polymères et des nanocomposites sont aussi à l'étude, en particulier pour intégrer explicitement les enchevêtrements, les macrostructures branchées de polymères complexes, voire des interactions non covalentes supramoléculaires. Ces techniques, à la frontière entre chimie théorique, physique et sciences des matériaux, sont des approches nouvelles pour la compréhension et de formidables sources d'inspiration pour la génération des matériaux de demain.

[1] Couty M., Structure multiéchelles et propriétés des matériaux du pneu, *Reflets de la physique*, 2008, 12, p. 12 (www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2008/05/refdp_12.pdf).



Marc Couty

est ingénieur de recherche chez Michelin*.

* Groupe Performances et Mécanismes, Manufacture Française des Pneumatiques Michelin, F-63040 Clermont-Ferrand. Courriel : marc.couty@fr.michelin.com