



Sujet de thèse : Approche multi-échelle pour la construction d'une loi de comportement des explosifs au HMX : de l'échelle atomique à l'échelle continue

Descriptif de la thèse :

Les compositions explosives solides sont en général constituées d'un assemblage de cristaux moléculaires énergétiques et d'un liant polymérique présent en très faible proportion par rapport au matériau énergétique. Ces compositions explosives requièrent d'être finement élaborées et caractérisées afin de répondre à plusieurs contraintes drastiques, du fait de leur domaine d'application. En effet, elles doivent être en mesure de délivrer une certaine énergie au moment de leur utilisation mais doivent également être le moins sensible possible afin de ne pas exploser lors d'une situation accidentelle par exemple. Ainsi, la mise en place de lois de comportement les plus fiables possible pour ce type de matériaux est un enjeu crucial puisqu'elles permettent alors de modéliser un large panel de scénarios et de mieux comprendre la réponse des compositions explosives aux diverses agressions qu'elles pourraient subir en fonctionnement.

Le comportement thermomécanique des matériaux énergétiques (explosifs) est d'autant plus complexe du fait de leur structure interne. Ces matériaux sont des cristaux moléculaires dont les propriétés en température et pression diffèrent de celles de matériaux métalliques ou céramiques par exemple. Afin de construire une loi de comportement à l'échelle continue, exploitable dans des codes de simulations de type éléments finis, une chaîne de calcul multi-échelle a été spécifiquement mise en place ces dernières années pour le TATB [1,2], un autre explosif moléculaire très peu sensible. Cette chaîne exploite les simulations de dynamique moléculaire classique, où les interactions interatomiques sont résolues via un potentiel interatomique, calibré sur des calculs *ab-initio* et résultats expérimentaux. A l'aide de ces simulations à l'échelle moléculaire, certaines propriétés thermodynamiques de l'explosif peuvent être calculées. Ces simulations sont également exploitées pour mieux comprendre les mécanismes de déformation impliqués dans le comportement sous haute vitesses de déformation et sous choc par exemple. Une fois les propriétés thermodynamiques calculées et les mécanismes de la déformation identifiés, une loi de comportement à l'échelle continue peut être construite. Les simulations à l'échelle continues sont ensuite validées par comparaison directes avec les simulations à l'échelle atomique et potentiellement avec des mesures expérimentales aux échelles compatibles. L'objectif principale de cette thèse est de mettre en place une loi de comportement pour le HMX, un autre cristal moléculaire plus sensible mais aussi plus étudié à la fois expérimentalement et numériquement [3,4,5,6]. La littérature contient en effet déjà beaucoup d'éléments concernant ce dernier et le code de mécanique des milieux continus développés au CEA permet d'ores et déjà d'exploiter les lois de comportement existantes. Une première étape, demandant peu d'efforts, consistera à exploiter cette loi afin d'en identifier les points forts/faibles et d'orienter les recherches futures visant à améliorer la restitution des résultats expérimentaux par la loi de comportement.

Références :

- [1] P. Lafourcade, C. Denoual, J.-B. Maillet, *Mesosopic constitutive law with nonlinear elasticity and phase transformation for the twinning-buckling of TATB under dynamic loading*, Physical Review Materials **3** (2019)
- [2] P. Lafourcade, J.-B. Maillet, N. Bruzy, C. Denoual, *Molecular dynamics informed calibration of crystal plasticity critical shear stresses for the mesoscopic mechanical modeling of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene (TATB) single crystal*, Journal of Applied Physics **135** (2024)
- [3] R.A. Austin, N.R. Barton, J.E. Reaugh, L. Fried, *Direct numerical simulation of shear localization and decomposition reactions in shock-loaded HMX crystal*, Journal of Applied Physics **117** (2015)
- [4] O. Shen, C.A. Duarte, N.K. Rai, M. Koslowski, H.S. Udaykumar, *An Eulerian crystal plasticity framework for modeling large anisotropic deformations in energetic materials under shocks*, Journal of Applied Physics **132** (2022)
- [5] M. Zecevic, M.J. Cawkwell, K.J. Ramos, D.J. Lusher, *Crystal plasticity including a phase-field deformation twinning model for the high-rate deformation of cyclotetramethylene tetranitramine*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids **163** (2022)
- [6] P. Dax, P. Zhao, D. Perera, T. Sewell, H.S. Udaykumar, *Molecular dynamics-guided material model for the simulation of shock-induced pore collapse in β -octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (β -HMX)*, Journal of Applied Physics **130** (2021)

Financement :

Financement CEA DAM DIF garanti. Rémunération : environ 2300 euros brut / mois.

Encadrement :

La thèse sera dirigée par Paul Lafourcade et Jean-Bernard Maillet au CEA DAM DIF de Bruyères-le-Châtel.

Profil du candidat :

Le candidat devra disposer d'un Master ou diplôme équivalent en Physique-chimie, physique ou mécanique à l'été 2024. Une connaissance préliminaire des techniques de simulations de dynamique moléculaire classique et mécanique des milieux continus serait un plus. Une maîtrise de la programmation scientifique (C++/Fortran/python) est essentielle.

Candidature :

Adresser un CV complet et une lettre de motivation à

Paul Lafourcade : paul.lafourcade@cea.fr

Jean-Bernard Maillet : jean-bernard.maillet@cea.fr