

Sujet de thèse : Caractérisation du comportement non-élastique en grandes déformations de matrices et composites carbonés par simulations de dynamique moléculaire

Descriptif de la thèse :

La capacité des matériaux composites C/C à maintenir des propriétés mécaniques élevées jusqu'à très hautes températures (supérieures à 3000 K), associée à leurs faibles densités, justifie l'utilisation de ces matériaux en conditions extrêmes, notamment dans des applications aérospatiales et de dissuasion. Cependant, en raison de la très forte anisotropie de leurs constituants, de leur ordre cristallin partiel, et de la difficulté à effectuer certains tests dans les conditions d'utilisation, la relation entre la structure de ces matériaux et leur comportement mécanique est incomplète. Notamment, la prédiction du comportement individuels des différents constituants (fibres, matrices) aux petites échelles est une étape fondamentale dans la mise au point de matériaux virtuels aux échelles du composite ou de la pièce.

Le développement récent d'une méthode de synthèse numérique de carbones denses anisotropes (PolyGranular Image Guided Atomistic Reconstruction PG-IGAR) a permis la reconstruction d'une grande base de données de microstructures de matrices de pyrocarbones (pyCs) anisotropes de l'ordre de $12 \times 12 \times 12 \text{ nm}^3$ [1,2]. Les propriétés structurales et texturales de ces matériaux ont été finement analysées et mises en regard avec leur constantes élastiques [3], éléments essentiels à la mise en place de lois de comportement aux échelles supérieures [4,5]. L'objectif de cette thèse est de caractériser les mécanismes de déformation non linéaires des matrices de pyrocarbone (pyC) et des fibres de carbone, sortant ainsi du cadre de l'élasticité classique, déjà abordé dans une précédente thèse. La méthode PG-IGAR a récemment été implémentée dans un code de dynamique moléculaire hautement parallélisable, permettant la génération de microstructures de plus grande taille, plus adaptée à l'étude de leur comportement mécanique en grandes déformations. Elle sera également adaptée à la génération de textures plus complexes comme celle des fibres de carbone (C_f). Finalement, les synthèses de nanocomposites pyC/ C_f et pyC-diamant, en tant que modèles des composites SiC/SiC à interphases de pyC, seront également envisagées. Les comportements de ces systèmes en grandes déformations seront étudiés sous plusieurs angles. Premièrement, on étudiera l'influence de la vitesse de déformation et de la taille des systèmes sur leur réponse mécanique. On abordera également la détermination de leurs surfaces d'écoulement sous cisaillement et traction/compression, éléments permettant de calibrer et d'informer les modèles aux échelles supérieures. Enfin, des simulations spécifiques seront mises en place afin d'aborder les problématiques de propagation et déviation de fissures aux abords des interfaces dans les nanocomposites.

Références :

- [1] B. Farbos, P. Weisbecker, H.E. Fischer, J.P. Da Costa, M. Lalanne, G. Chollon, C. Germain, G. L. Vignoles, J.-M. Leyssale, *Nanoscale structure and texture of highly anisotropic pyrocarbons revisited with transmission electron microscopy, image processing, neutron diffraction and atomistic modelling*, Carbon **80** (2014) 472–489.
- [2] F. Polewczyk, P. Lafourcade, J.-P. Da Costa, G. Vignoles, J.-M. Leyssale, *Polygranular image guided atomistic reconstruction: A parametric model of pyrocarbon nanostructure*, Carbon **212** (2023)
- [3] F. Polewczyk, J.-M. Leyssale, P. Aurel, N. Pineau, C. Denoual, G. Vignoles, *Elasticity of dense anisotropic carbons: A machine learning model of the structure-property relationship fed by large scale molecular dynamics data*, Under Review (2024).
- [4] P. Lafourcade, C. Denoual, J.-B. Maillet, *Dislocation core structure at finite temperature inferred by molecular dynamics simulations for 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene single crystal*, J. Phys. Chem. C **121** (2017) 7442-7449.
- [5] P. Lafourcade, C. Denoual, J.-B. Maillet, *Irreversible Deformation Mechanisms for 1, 3, 5-Triamino-2, 4, 6-Trinitrobenzene Single Crystal through Molecular Dynamics Simulations*, J. Phys. Chem. C **122** (2018) 14954-14964.

Financement :

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

Encadrement :

La thèse sera dirigée par Paul Lafourcade au CEA DAM DIF de Bruyères-le-Châtel et co-dirigée par Jean-Marc Leyssale à l'Institut des Sciences Moléculaires de Bordeaux (CNRS, Univ. Bordeaux). Le candidat passera son temps au CEA DAM DIF et des visites régulières sont prévues à l'Institut des Sciences Moléculaires.

Profil du candidat :

Le candidat devra disposer d'un Master ou diplôme équivalent en Physique-chimie, physique ou mécanique à l'été 2024. Une bonne connaissance des techniques de simulations de dynamique moléculaire classique est souhaitée, une expérience avec les calculs de propriétés mécaniques par dynamique moléculaire serait un plus. Une maîtrise de la programmation scientifique (C++/Fortran/python) est essentielle. En raison du type de financement, seuls des candidats de nationalité européenne ou suisse peuvent être retenues.

Candidature :

Adresser un CV complet et une lettre de motivation à

Paul Lafourcade : paul.lafourcade@cea.fr

Jean-Marc Leyssale : jean-marc.leyssale@u-bordeaux.fr