

# Thèse : Mécanique des failles d'argiles gonflantes de la simulation moléculaire au séisme

*Supervision : L. Brochard (Laboratoire Navier, École des Ponts/Univ. Gustave Eiffel/CNRS)*

## Contexte

Les zones de failles des plaques tectoniques présentent une grande variété de comportements mécaniques, depuis des glissements aismiques jusqu'à des séismes majeurs. A ce jour, il n'y a pas de consensus sur les mécanismes contrôlant cette diversité des modes de glissement des failles. Une origine possible pourrait être le comportement des smectites, une argile gonflante fréquente dans les zones de failles, and qui peut absorber des quantités variables d'eau entre ses feuillets nanométriques. Malgré leur importance potentielle, la thermodynamique des réactions d'hydratation/déshydratation des smectites et le lien entre ces réactions et les déformations des failles, restent inconnus. Ces questions fondamentales sont au cœur du projet ANR SMEC finançant cette thèse.

Les objectifs du projet SMEC sont : 1) de clarifier la thermodynamique d'hydratation/déshydratation des smectites, en fonction des conditions de pression de confinement, de pression de fluide et de température, 2) de relier l'hydratation au comportement mécanique, et 3) de faire le lien avec les couplages hydratation-mécanique à l'échelle des failles dans la perspective d'application à des exemples naturels à grande échelle. Ces questions seront abordées en combinant des expériences de laboratoire et des simulations numériques depuis le minéral argileux jusqu'à la faille.

## Objectif

Ce projet de thèse porte sur le volet modélisation du projet SMEC. Plus précisément, nous proposons de combiner simulation moléculaire, modélisation granulaire et micromécanique dans le but de relier les réactions d'hydratation/déshydratation des smectites au comportement mécanique des zones de failles. Les avancées récentes en modélisation moléculaire fournissent des modèles atomiques d'argiles réalistes, capables de prédire raisonnablement bien le comportement de gonflement à l'échelle nanométrique pour des conditions arbitraires de contraintes de confinement, de pressions d'eau et de températures<sup>1</sup>. Cependant, l'interdépendance entre hydratation et mécanique, en particulier en ce qui concerne la réponse au cisaillement, reste mal connue, et constitue le premier objectif de ce projet de thèse. Une attention particulière sera accordée aux conditions d'hydratations représentatives des conditions de failles, et les résultats correspondants seront confrontés à des expériences de DRX de laboratoire et au synchrotron sous conditions in-situ, planifiées dans le cadre du projet SMEC (en-dehors de cette thèse).

---

<sup>1</sup> Brochard, L. (2021) Swelling of Montmorillonite from Molecular Simulations: Hydration Diagram and Confined Water Properties. *Journal of Physical Chemistry C* 128, 15527-15543.

Le second objectif de cette thèse sera le changement d'échelle depuis le nanomètre jusqu'au matériau de faille. A cet égard, le projet de thèse s'appuiera sur un modèle granulaire d'argile récent<sup>2</sup>, bâti à partir des interactions de l'échelle moléculaire, et capable de modéliser à la fois l'hydratation et la mécanique à l'échelle de la matrice argileuse ( $< \mu\text{m}$ ). Alors que la mécanique à l'échelle nanométrique a peu à voir avec le comportement macroscopique, la mécanique à l'échelle de la matrice argileuse présente déjà la plupart des caractéristiques de la mécanique habituelle des argiles (plasticité, réponse logarithmique à la compression, compaction thermique). Cependant, ce modèle granulaire reste limité aux argiles pures, alors que les zones de faille sont des mélanges d'argiles gonflantes et non-gonflantes, ainsi que de minéraux non-argileux. Dès lors, l'approche granulaire sera complétée par une approche micromécanique pour évaluer l'effet de composition minéral. Comme précédemment, les résultats de changement d'échelle seront confrontés à des expériences triaxiales prévues dans le cadre du projet SMEC (en dehors de cette thèse).

### Informations pratiques et procédure de candidature

Cette thèse commencera à l'automne 2024 et se déroulera au laboratoire Navier (Champs-sur-Marne, région parisienne), avec des déplacements occasionnels (réunions de projets SMEC, conférences). Le doctorant sera inscrit à l'école doctorale 'Science, Ingénierie, Environnement' de l'École des Ponts ParisTech, et sera financé par le CNRS dans le cadre de l'ANR SMEC. Le contrat doctoral est prévu pour une durée de trois ans, avec une rémunération brute de 2135€/mois à temps complet.

Les candidats doivent être diplômés d'un Master 2 ou équivalent en physique et/ou (géo)-mécanique des matériaux (ou domaine proche), avec un goût particulier pour le travail numérique. Ils doivent pouvoir communiquer en anglais couramment, à l'écrit comme à l'oral. Les candidats intéressés sont invités à candidater sur le portail emploi du CNRS (<https://emploi.cnrs.fr/Offres/Doctorant/UMR8205-LAUBRO-003/Default.aspx>) ou par mail en envoyant un CV, une lettre de motivation et leurs relevés de notes à L. Brochard ([laurent.brochard@enpc.fr](mailto:laurent.brochard@enpc.fr)).

---

<sup>2</sup> Asadi, F., Zhu, H.-X., Vandamme, M., Roux, J.-N., & Brochard, L. (2022). A meso-scale model of clay matrix: the role of hydration transitions in geomechanical behavior. *Soft Matter*, 18(41), 7931-7948.