

Stage de master

Fracturation des milieux hétérogènes fragiles: cas du verre par simulation moléculaire

Contexte: La résistance à la rupture des matériaux hétérogènes fragiles est un enjeu industriel majeur (céramiques, ciments). Dans le cadre du projet ANR DURABLE, consacré à l'effet de l'hétérogénéité des matériaux sur leur comportement en fracture, nous nous intéressons dans ce stage plus particulièrement à l'étude de la fracturation des verres de silice par simulation moléculaire. Ces matériaux constituent un cas d'étude privilégié car : 1) ils sont si fragiles que la zone de délamination en pointe de fissure est nanométrique et donc accessible aux simulations moléculaires, et 2) leur structure atomique amorphe intègre des hétérogénéités intrinsèques. La fracturation des verres est ainsi un cas d'étude particulier pour lequel la simulation moléculaire offre un niveau de détail inédit.

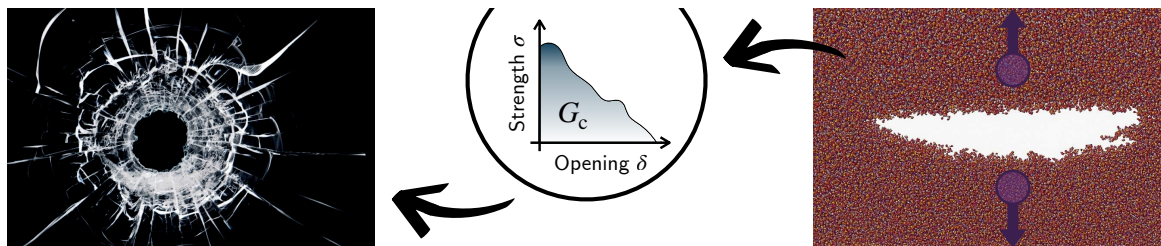


Figure 1: La rupture des matériaux fragiles comme le verre (gauche, Adobe Stock 480404920) peut être décrite par des modèles cohésifs (centre), reliant résistance à la tension σ à l'ouverture locale de la fissure δ . Ces modèles peuvent être identifiés sur la base de simulations moléculaires (droite, généré par IA).

Objectifs: Le stage consistera à mettre en place et réaliser des simulations moléculaires de fracturation de verres de silice. L'étudiant pourra s'appuyer sur la littérature existante conséquente pour le choix d'un potentiel d'interatomique adapté et pour la génération de structures vitreuses. Les études existantes dédiées plus spécialement à la fracturation des verres ont montré que le front de fissure n'est pas régulier et la propagation est intermittente, conséquences directes de l'hétérogénéité du matériau [1]. On cherchera à caractériser statistiquement les événements de propagation. L'amorçage de la fissuration, très peu étudié jusqu'à présent, sera également exploré dans ce stage. En lien avec l'équipe du projet DURABLE, une analyse inverse est envisagée pour mieux comprendre l'effet des hétérogénéités sur le processus de fracturation et à proposer une modélisation continue simplifiée fondée sur une formulation variationnelle des modèles de zones cohésives.

Détails pratiques:

- **Profil recherché :** Le stage s'adresse à un(e) étudiant(e) de Master 2 ou de dernière année d'ingénieur en mécanique ou physique des matériaux, ayant un intérêt marqué pour la modélisation numérique et la physique de la rupture. Des connaissances préalables en simulation moléculaire sont un plus, mais ne sont pas indispensables : une familiarisation avec ces méthodes pourra être acquise au cours du stage. Le travail, à l'interface entre mécanique, physique et simulation numérique, conviendra particulièrement à un(e) candidat(e) motivé(e) par les approches multi-échelles et par les problématiques de compréhension fine des mécanismes de rupture.
- **Durée:** 6 mois, début en mars/avril/mai 2026.
- **Localisation :** Champs-sur-Marne, France 20 minutes en transport public depuis le centre de Paris.
- **Salaire :** ~550/mois.
- **Encadrement:** Le stage se déroulera au sein du Laboratoire Navier, sous l'encadrement de Valeryia Kanavalava (doctorante), Laurent Brochard (chercheur) et Mathias Lebihain (chercheur, coordinateur du projet ANR DURABLE), en collaboration avec Djimedo Kondo (Sorbonne Université).

Comment candidater? Les candidats intéressés sont invités à prendre contact avec Laurent Brochard (laurent.brochard@enpc.fr) et Mathias Lebihain (mathias.lebihain@enpc.fr)

Références:

1. Bonamy, D., Prades, S., Rountree, C. L., Ponson, L., Dalmas, D., Bouchaud, E., Guillot, C., 2006. Nanoscale damage during fracture in silica glass. *International Journal of Fracture*, 140(1), 3-14.

Stage de master

Fracture of brittle heterogeneous media: case study of glass by molecular simulation

Context: The fracture resistance of brittle heterogeneous materials is a major industrial challenge (ceramics, concrete). As part of the ANR DURABLE project, which focuses on the effect of material heterogeneity on fracture behavior, this internship will focus specifically on the study of silica glass fracturing using molecular simulation. These materials are an ideal case study because: 1) they are so brittle that the process zone at the crack tip is nanometric and therefore accessible to molecular simulations, and 2) their amorphous atomic structure incorporates intrinsic heterogeneities. Glass fracturing is therefore a special case study for which molecular simulation offers a level of detail that is inaccessible to experimentation.

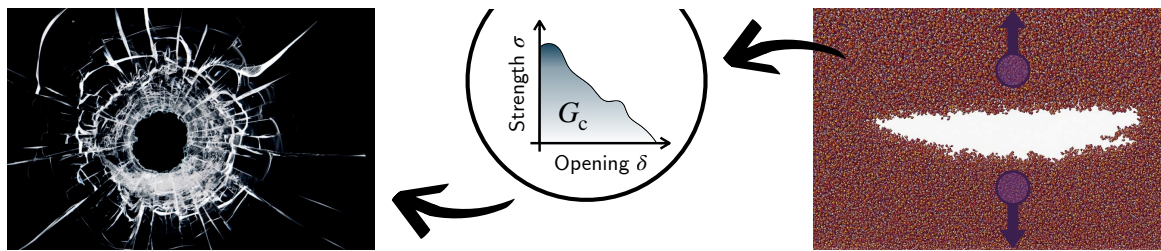


Figure 2: The tensile fracture of brittle materials like glass (left, Adobe Stock 480404920) can be described using cohesive zone models (center), which link the tensile strength σ to the local material opening δ . These models can be identified based on molecular dynamics simulations (right).

Objectifs: The internship will consist of setting up and performing molecular simulations of silica glass fracturing. The student will be able to draw on the extensive existing literature to choose a suitable interatomic potential and generate glass structures. Existing studies dedicated more specifically to glass fracturing have shown that the crack front is not regular and propagation is intermittent, which are direct consequences of the material's heterogeneity [1]. The aim will be to statistically characterize the propagation events. Crack initiation, which has been little studied to date, will also be explored in this internship. In collaboration with the DURABLE project team, an inverse analysis is planned to better understand the effect of heterogeneity on the fracturing process and to propose a simplified continuous model based on a variational formulation of cohesive zone models.

Détails pratiques:

- **Candidate profile:** This internship is open to Master's students or final-year engineering students studying mechanical engineering or material science, with a keen interest in numerical modeling and fracture physics. Prior knowledge of molecular simulation is a plus, but not essential: proficiency with these methods can be acquired during the internship. The work, at the interface between mechanics, physics, and numerical simulation, will be particularly suitable for a candidate motivated by multi-scale approaches and issues related to a detailed understanding of fracture mechanisms.
- **Duration:** 6 months, starting from March/April/May 2026.
- **Location:** Champs-sur-Marne near Paris, France 20 minutes by train from the city center.
- **Salary:** ~550/month.
- **Research team:** The internship, lasting 4 to 6 months, will take place at the Navier Laboratory, under the supervision of Valeryia Kanavalava (PhD candidate), Laurent Brochard (researcher), and Mathias Lebihain (researcher, coordinator of the ANR project DURABLE), in collaboration with Djimedo Kondo (Sorbonne Université).

How to apply? Interested candidates are invited to contact Laurent Brochard (laurent.brochard@enpc.fr) and Mathias Lebihain (mathias.lebihain@enpc.fr).

References:

1. Bonamy, D., Prades, S., Rountree, C. L., Ponson, L., Dalmas, D., Bouchaud, E., Guillot, C., 2006. Nanoscale damage during fracture in silica glass. *International Journal of Fracture*, 140(1), 3-14.