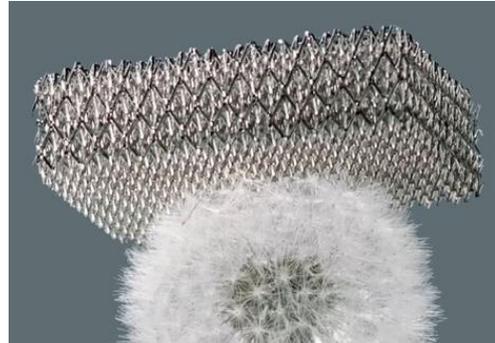


PROPOSITION DE STAGE/THESE 2022

DESIGN PAR IA D'ARCHITECTURES OPTIMALES POUR METAMATERIAUX ULTRA-LEGERS ET RESISTANTS A LA RUPTURE ET DEFORMATION

La recherche de matériaux combinant légèreté et résistance mécanique est un domaine en plein essor, tiré, dans le domaine du transport notamment par la volonté de réduire les émissions de CO₂ et de développer des véhicules économes en carburant. Des progrès importants ont été accomplis récemment ; les méta-matériaux ou matériaux architecturés offrent dans ce contexte un potentiel considérable (e.g micro-lattice inventé au Caltech, produit par Boeing).



Microlattice développé par Boeing

Les voies explorées actuellement portent sur des architectures périodiques, inspirées des cristaux. Le critère de Maxwell permet alors, à partir du nombre d'entretoises et de joints présents dans une maille élémentaire, de prévoir si la structure se déformera du fait de l'étirement, ou de la flexion de ses entretoises, et par suite d'estimer la rigidité du métamatériau et sa variation avec la densité du matériau. En revanche, les matériaux architecturés observés dans la nature (os, structure alvéolaire des écorces...) présentent des architectures aléatoires optimisées pour répondre à une certaine sollicitation du milieu ou remplir une fonction précise.



L'idée proposée ici vise à utiliser les outils de l'intelligence artificielle (IA) et de l'optimisation topologique pour renforcer les architectures sans présupposer celles-ci. Le stage est principalement numérique et théorique. Nous partirons d'un modèle de poutres récemment développé dans le laboratoire. L'objectif final est le développement d'un algorithme permettant de définir des architectures optimales en termes de rigidité mécanique et résistance à la fissuration, sous contrainte de conditions de densité et d'isotropie mécanique, avec l'aide

d'outils à définir : fonction de coût et poids associés, descente de gradient pour la minimisation, réseau de neurones etc. Une composante expérimentale pourra être incluse, avec la fabrication additive des métamatériaux obtenus numériquement et leur caractérisation mécanique sur les bancs expérimentaux développés dans notre laboratoire.

Ce sujet de stage met en jeux des notions appartenant à la fois à l'algorithmique et l'intelligence artificielle, l'ingénierie mécanique, la physique de l'état condensé et la science des matériaux. Le candidat aura donc l'opportunité de manipuler les outils utilisés dans ces trois domaines. Il s'inscrit dans une collaboration associant deux laboratoires au CEA : le SPHYNX au SPEC et le LIONS au NIMBE.

CONTACTS :

Daniel Bonamy ([web](#)), 01 69 08 21 14, daniel.bonamy@cea.fr

Antoine Montiel, 01 69 08 72 37, antoine.montiel@cea.fr

Thuy Nguyen, thuy.nguyen@devinci.fr

Patrick Guenoun, patrick.guenoun@cea.fr

Valérie Geertsens, valerie.geertsens@cea.fr

Cindy Rountree, cindy.rountree@cea.fr

PROPOSITION DE STAGE 2021/2022

**NEAR AND FAR FIELD INTERACTION BETWEEN MOVING ATOMS MEDIATED BY THE
ELECTROMAGNETIC VACUUM**

*INTERACTION EN CHAMP PROCHE ET LOINTAIN D'ATOMES EN MOUVEMENT
MÉDIÉE PAR LE VIDE ÉLECTROMAGNÉTIQUE*

Quantum friction – i.e. Friction of moving matter on the quantum vacuum – has been shown theoretically to produce a braking torque on rotating nanomaterials [1]. At SPEC, we extended this property to interacting atoms in rotation one around the other, using atomic oscillators and a semi-classical model of vacuum [2]. Recent work [3.a] showed that the extension of this property to more realistic configurations necessitates a more complete calculation of the interaction between atoms and the electromagnetic field.

The importance of electromagnetic wave propagation is well known in the long-range Casimir-Polder case, but it also affects the near field situation, where its inclusion in calculations is necessary to interpret physically the friction phenomenon and induced energy exchanges. Moreover, a fully quantum model must be developed for the rotating pair of atoms, in order to explore rigorously some properties of mixed pairs of different atoms [3.b], and other more realistic configurations.

The master's student will take up the first step, the effect of wave propagation. This effect will be studied within the already developed semi-classical model, by using both formal calculations and numerical programs. We will be interested in both potential energy and friction force determinations. The PhD student will complete those calculations and work towards of fully quantum model. The PhD research will be directed jointly with a specialist of quantum electrodynamic calculations

La friction quantique – c'est-à-dire la friction de la matière en mouvement sur le vide quantique – a été démontrée théoriquement sur des nanomatériaux en rotation [1]. Nous avons étendu cette propriété aux atomes en interaction, en calculant avec un modèle semi-classique la friction du vide sur des oscillateurs atomiques en rotation l'un autour de l'autre [2]. Des travaux récents [3.a] ont montré que l'extension de cette propriété à des configurations plus réalistes nécessite un calcul plus complet de l'interaction entre les atomes et le champ électromagnétique.

L'importance de la propagation des ondes électromagnétiques est bien connue dans le cas de l'attraction de Casimir-Polder à longue distance, mais elle affecte également la situation de champ proche, où son inclusion dans les calculs est nécessaire pour interpréter physiquement le phénomène de friction et les échanges d'énergie induits. En outre, un modèle entièrement quantique doit être développé pour la paire d'atomes en rotation, afin d'explorer rigoureusement certaines propriétés des paires mixtes d'atomes différents [3.b], et d'autres configurations plus réalistes.

L'étudiant de master se chargera de la première étape, l'effet de la propagation des ondes. Cet effet sera étudié dans le cadre du modèle semi-classique déjà développé, en utilisant à la fois des calculs formels et des programmes numériques. Nous nous intéresserons à la détermination de l'énergie potentielle et de la force de friction. Le doctorant complétera ces calculs et travaillera à l'élaboration d'un modèle entièrement quantique. La recherche doctorale sera dirigée conjointement avec un.e spécialiste des calculs d'électrodynamique quantique.

[1] Manjavacas, A., García de Abajo, F. J., "Vacuum Friction in Rotating Particles", Phys. Rev. Lett. 105, 113601 (2010).

[2] Bercegol, H., Lehoucq, R., "Vacuum friction on a rotating pair of atoms", Phys. Rev. Lett. 115, 090402 (2015).

[3] a. Klein, B. "Approche quantique de la friction du vide dans les collisions atomiques et subatomiques", CentraleSupélec, 2021.

b. De Izarra, A. "Effet du champ électromagnétique du vide sur les collisions atomique", Univ. Tours, 2016.

Nom Laboratoire : SPEC, CEA-Saclay
 Code d'identification CNRS : UMR 3680
 Nom du ou des responsables du stage ou thèse: Cesare Nardini
 e-mail : cesare.nardini@cea.fr
 Lieu du stage: Saclay/Paris

téléphone : 06 32 33 27 70

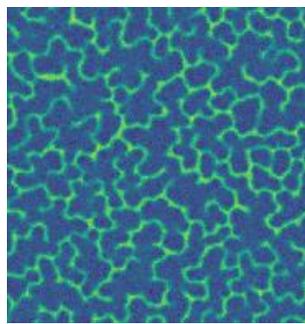
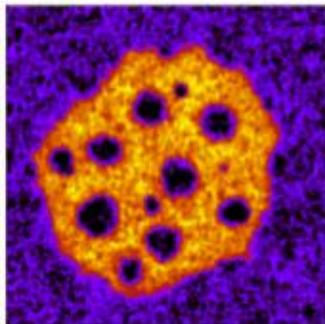
Stage uniquement : NON
 Stage pouvant déboucher sur une thèse : OUI
 Financement proposé : OUI (stage)

Thèse uniquement: NON
 si oui, type de financement : OK pour stage

Controlling phase separation in active systems

Examples of active systems, formed of units that are able to extract energy from the environment and dissipate it to self-propel, are found everywhere in nature: flocks of birds, animal swarms, suspensions of bacteria or tissues are all biological active systems. Recently, scientists have built synthetic active systems using catalytic colloidal particles or micro-robots; active matter is a class of soft materials capable of new forms of self-organization. Furthermore, active systems have theoretically fascinating properties, a fact that drove a very intense research activity lately. Future applications may encompass the engineering self-assembling materials using active units, considered as a defining agenda in the community.

Large assemblies of active units display collective phenomena that are absent in equilibrium. One of the most ubiquitous is phase separation: unlike in equilibrium systems, even repulsive but active particles phase separate into dense and dilute phases. In some cases, this resemble to liquid-vapor phase separation of standard fluids. Due to broken time-reversibility, however, phase separation in active systems often shows very different features from a liquid-vapor phase separation, and currents in the steady state. For example, the dense regions can support a population of mesoscopic vapor bubbles (bubbly phase separation, qualitatively resembling to a boiling liquid), or the vapor-liquid interface is unstable, giving rise to active foam states.



Non-equilibrium types of phase separation arising in active systems. Shown is the density field (bright colors denote dense regions). Bubbly phase separation (Left) and an active foam state (Right). One of the main goals of this project is to control such phases in particle-based models.

The main open theoretical question is how to control these novel states of matter in terms of microscopically tunable parameters. The main goal of this internship, with possible extension to a PhD (subjected on funding), is to fill this gap. We will employ both analytical and numerical techniques, such as direct numerical simulations of particle systems and of continuum descriptions of the system (field theories). If successful, this work will provide a guide for experimentalists to design novel self-assembling materials using active units. Given the ubiquity of phase separation in non-equilibrium contexts, we will further explore the relevance of these results to other out-of-equilibrium systems, such as biological tissues and granular materials.

References:

- E. Thjung, C. Nardini, M.E. Cates, Cluster phases and bubbly phase separation in active fluids: reversal of the Ostwald process, PRX, **8**, 031080, 2018
- J. Tailleur, M.E. Cates, Motility-Induced phase separation, Ann. Rev. Cond. Mat., **6**, 219, 2015
- G. Gompper et al., The 2020 motile active matter roadmap, Journal of Physics: Condensed Matter **20**, 193001, 2020