Oral

Modèles de pyrocarbones à l'échelle atomique : reconstruction, structure et propriétés.

J.-M. Leyssale[1], J.-P. da Costa[2], C. Germain[2], P. Weisbecker[1], G. L. Vignoles[1]
[1]LCTS – UMR 5801 CNRS/CEA/Snecma Propulsion Solide/Université Bordeaux 1, 3 allée de la Boetie 33600 Pessac
[2]IMS – UMR 5218 ENSEIRB/ENSCPB/ENITAB, Université Bordeaux1, 33405 Talence

Nous présentons une approche originale permettant de construire des modèles à l'échelle atomique de matériaux nanotexturés à partir de leurs images de Microscopie Electronique en Transmission à Haute Résolution (HRTEM). Cette méthode, publiée récemment [1] et illustrée fgure 1, est appliquée ici au cas d'un pyrocarbone laminaire rugueux.

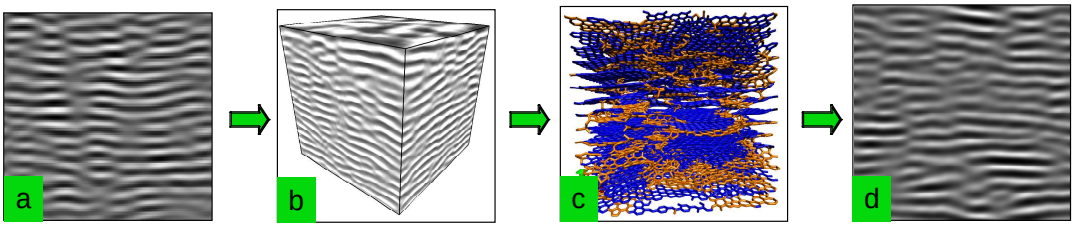

Fig. 1 : Reconstruction Atomique Guidée Image d'un pyrocarbone laminaire rugueux. a : image HRTEM filtrée ; b : analogue HRTEM 3D ; c : modèle reconstruit à l'échelle atomique ; d : image HRTEM simulée.

Partant d'une image HRTEM filtrée à haute et basse fréquences (a), un ensemble de descripteurs statistiques est collecté puis imposé à une image 3D (b). Cette dernière est ensuite utilisée comme champ de potentiel attirant les atomes sur les franges lors d'une trempe d'un liquide de carbone par dynamique moléculaire (c). Une simulation d'image HRTEM à partir du matériau virtuel obtenu permet de valider la qualité de la reconstruction (d).
Au cours de cet exposé nous présenterons en détail cette méthode ainsi que la structure et les propriétés mécaniques calculées pour des pyrocarbones laminaires rugueux, tel que préparé et traité thermiquement.

[1] J.M. Leyssale et al., *App. Phys. Lett.* **95** (2009),231912