

**Titre :** Influence de l'adhésion entre les principales phases cimentaires sur le comportement mécanique de la pâte de ciment hydratée

**Mots clés :** Modélisation multi-échelle, Pâte de ciment hydratées, Voigt-Reuss-Hill, homogénéisation, Dynamique Moléculaire, Méthode Éléments Discrets

**Résumé :** Cette thèse de doctorat porte sur la modélisation multi-échelle des propriétés mécaniques des matériaux cimentaires. L'objectif de cette thèse est d'obtenir les propriétés mécaniques des phases de pâte de ciment hydratées à l'échelle nanométrique à l'aide de simulations de Dynamique Moléculaire (DM). Les propriétés mécaniques de la pâte de ciment durcie à l'échelle microscopique ont ensuite été calculées à l'aide d'une méthode d'homogénéisation et de la Méthode Éléments Discrets (MED). En effet, les propriétés obtenues à l'échelle inférieure sont considérées comme les données d'entrée à l'échelle supérieure. À l'échelle nanométrique, le test de traction et le test de cisaillement ont été réalisés avec les principales phases de la pâte de ciment

hydratées à l'aide de simulations DM. En conséquence, des propriétés mécaniques à l'échelle nanométrique ont été obtenues. Une autre approche pour obtenir le module de Young et le coefficient de Poisson a été réalisée via l'approximation de Voigt-Reuss-Hill. Avec la méthode d'homogénéisation (i.e., Mori-Tanaka), le module d'Young et le coefficient de Poisson d'une pâte de ciment durcie simplifiée ont été calculés. Enfin, une simulation MED a été réalisée avec un essai de traction d'une pâte de ciment durcie simplifiée en prenant en compte les propriétés mécaniques à l'échelle nanométrique. Cette thèse de doctorat contribue à créer le pont permettant de réaliser la transition de l'échelle moléculaire à l'échelle microscopique continue.

**Title :** Influence of adhesion between the main cement phases on the mechanical behaviour of hydrated cement paste

**Keywords :** Multi-scale modelling, hydrated cement paste, Voigt-Reuss-Hill, homogenization, Molecular Dynamics, Discrete Element Method

**Abstract :** This PhD thesis focuses on the multi-scale modelling of mechanical properties of cementitious materials. The aim of this PhD thesis is to obtain the mechanical properties of hydrated cement paste phases at nano-scale using Molecular Dynamics (MD) simulations. Mechanical properties of hardened cement paste at micro-scale were then calculated with homogenization scheme and Discrete Element Method (DEM). Indeed, properties obtained at the lower scale are considered as the input data at the upper scale. At nano-scale, tensile test and shear test were performed with main hydrated cement paste phases (i.e., calcium-silicate-hydrates, portlandite and ettringite) via

MD simulations. As a result, mechanical properties at nano-scale were obtained. Another approach to obtain Young's modulus and Poisson ratio was done via Voigt-Reuss-Hill approximation. With homogenization scheme (i.e., Mori-Tanaka scheme), Young's modulus and Poisson's ratio of a simplified hardened cement paste were calculated. Finally, DEM simulation was done with tensile test of a simplified hardened cement paste by taking into account the mechanical properties at the nano-scale. This PhD thesis contributes to create the bridge of achieving the transition from the molecular scale to the continuous microscopic scale.