

Propriétés de résistance de nanocomposites ductiles : simulation moléculaire et modélisation théorique

A. LUCCHETTA^a, D. KONDO^b

a. Institut d'Alembert, UMR 7190 CNRS, UPMC (Paris 6), antoine.lucchetta@upmc.fr

b. Institut d'Alembert, UMR 7190 CNRS, UPMC (Paris 6), djimedo.kondo@upmc.fr

Résumé

Cet article porte sur une étude des propriétés de résistance des nanocomposites à renforts sphériques. Des simulations numériques de dynamique moléculaire ont été d'abord réalisées à l'aide du logiciel LAMMPS pour des tailles de particules sphériques de l'ordre du nanomètre. On observe que, pour une fraction volumique fixée, la résistance effective augmente lorsque la taille des particules diminue. Afin de rendre compte des données numériques obtenues, nous avons développé une approche cinématique d'analyse limite conduisant à une estimation du critère de résistance mécanique du nanocomposite. Cette approche s'appuie sur la considération d'une interface imparfaite cohérente autour des particules. Le modèle issu de ce développement a été calibré à partir des données numériques.

Abstract

This article deals with strength properties of spherically reinforced nanocomposites. Numerical simulations of molecular dynamic have been realised with LAMMPS software for nanoscale spherical particles size. For a fixed volume fraction, it is observed that the effective strength increases when the particles size decreases. To return numerical data, a kinematic limit analysis approach was developed, leading to an estimate of the nanocomposite mechanical strength criterion. This approach relies on the consideration of a coherent imperfect interface around the particles. The resulting model was calibrating from the numerical data.

Mots clefs : Nanocomposites, Analyse limite, Dynamique moléculaire

1 Introduction

L'émergence des nanocomposites dans divers domaines de l'ingénierie des matériaux a suscité depuis une vingtaine d'années des efforts majeurs de recherche tant sur le plan de l'élaboration et de la caractérisation mécanique que sur les aspects de modélisation par changement d'échelle. L'objectif principal de bon nombre de ces recherches est la compréhension et la prédiction des propriétés inhabituelles de ces nouveaux matériaux. L'une des questions au cœur des recherches en cours est celle de la description des effets de taille des nano-renforts observés expérimentalement (cf. [1] [2]). Il est largement admis que ces derniers proviennent du rapport surface/volume très élevé qui caractérise les matériaux nano-renforcés. Des études ont été menées pour étendre les modèles d'homogénéisation linéaires classiques aux matériaux nano-renforcés en considérant une interface imparfaite cohérente autour des particules. On mentionnera à titre d'exemple Brisard et al. [3] et [4] qui ont étendu les bornes de Hashin–Shtrikman, Duan et al. [5] le schéma de Mori-Tanaka, ou encore Li et al. [6] le schéma autocohérent. C'est la raison pour laquelle nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés de résistance des

nanocomposites à renforts rigides sphériques. N'ayant de plus pas trouvé de données sur les effets de taille sur les propriétés de résistance des nanomatériaux, nous avons d'abord réalisé des simulations numériques par dynamique moléculaire, puis nous avons ensuite déterminé une estimation du critère de résistance des nanocomposites à l'aide d'une méthode cinématique d'analyse limite. A cette fin, nous avons considéré une interface imparfaite cohérente plastique autour des particules. Le critère de résistance obtenu a été calibré et évalué sur nos données de simulations numériques.

2 Simulations moléculaire des propriétés de résistance

Afin d'étudier le comportement effectif des nanocomposites pour différentes tailles de particules, nous avons opté pour des simulations par Dynamique Moléculaire (DM) à l'aide du logiciel LAMMPS.

La DM s'avère être l'outil adéquat de simulations de la physique et des mécanismes de déformation que l'on souhaite modéliser à l'échelle nanoscopique.

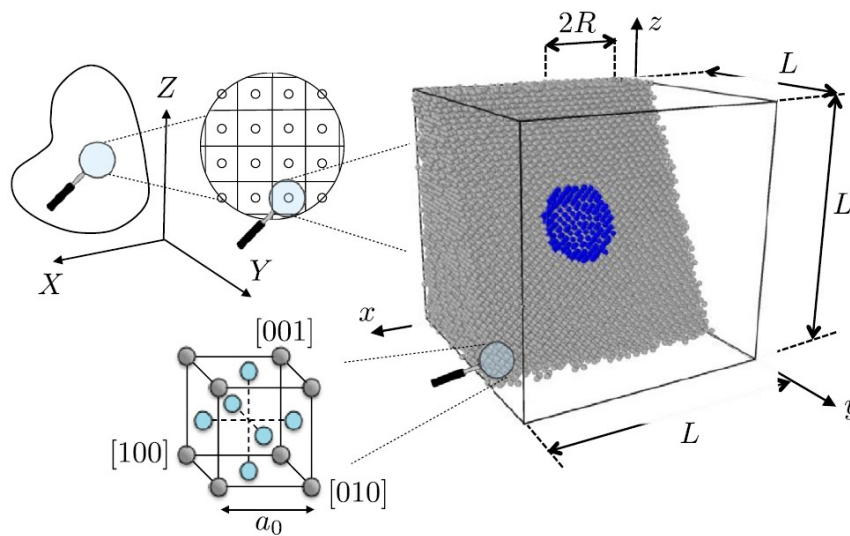


FIGURE 1 – Cellule cubique de nanocomposite de dynamique moléculaire

Pour les simulations nous avons considéré une cellule cubique (cf. figure 1 provenant de Brach et al. [7]) composée d'une matrice d'Aluminium (Al) (en gris) contenant en son centre une particule sphérique de Nickel (Ni) (en bleu). Des investigations ont été réalisées pour une fraction volumique f fixée à 1% et des rayons de particules variant de 0.25 à 1.25nm (0.25, 0.5, 0.75 et 1.25nm). On a choisi une structure cristallographique Cubique Face Centrée (CFC) pour la matrice et le renfort. Cette structure est connue pour avoir une faible anisotropie.

La cellule a été soumise à une extension uniaxiale

$$\mathbf{D} = D \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 \quad (1)$$

avec \mathbf{D} le tenseur du taux de déformation macroscopique, D étant la vitesse de déformation du système choisie égale à $D = 5e9 \text{ \AA}/ps$. Brach et al. [7] ont montré que pour obtenir des résultats par DM dans des temps raisonnables, ce choix de vitesse de déformation semble constituer un bon compromis. De plus, Horstenmeyer et al. [8] ont prouvé numériquement que la résistance effective d'un métal ayant une structure CFC reste inchangée pour des vitesses inférieures à $1e10 \text{ \AA}/ps$. La forme du tenseur des contraintes obtenue pour la forme du tenseur des déformations \mathbf{D} choisi est

$$\boldsymbol{\Sigma} = \Sigma_{11} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \Sigma_{33} (\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3) \quad (2)$$

ce qui vient confirmer la faible anisotropie du système.

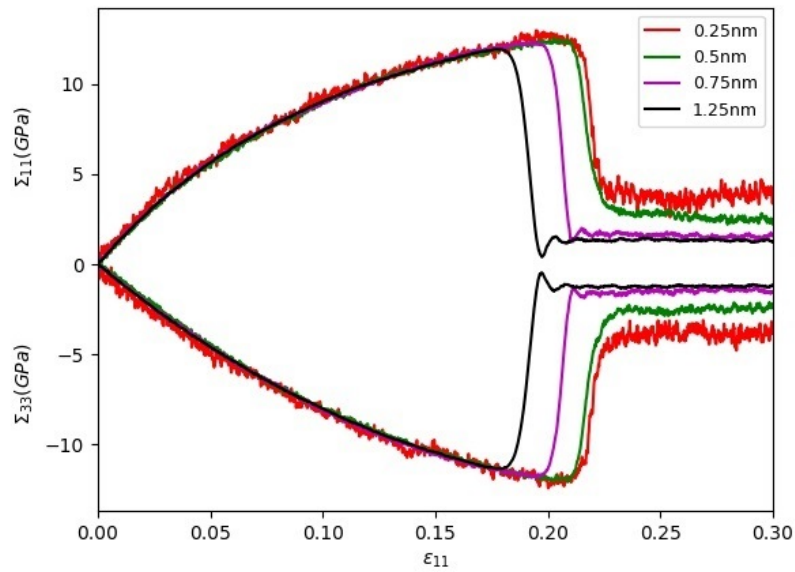


FIGURE 2 – Variation de Σ_{11} et de Σ_{33} des nanocomposites pour différents rayons avec $f = 1\%$ en fonction de ε_{11}

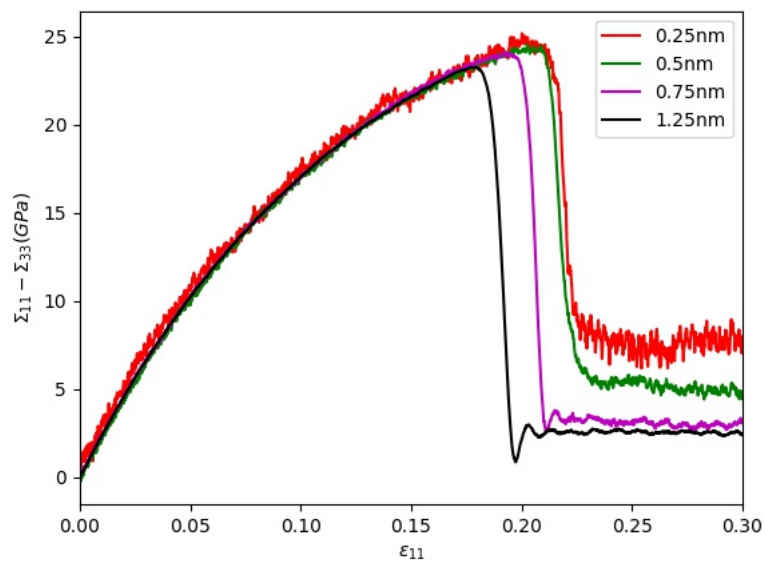


FIGURE 3 – Réponse globale des nanocomposites pour différents rayons avec $f = 1\%$ en fonction de ε_{11}

On s'est intéressé au comportement effectif du nanocomposite pour lequel la variation des contraintes macroscopiques Σ_{11} et Σ_{33} de la cellule en fonction de $\varepsilon_{11} = D \times t$, avec $t = 0.001\text{ns}$, est représenté sur la figure 2. On observe que plus la taille des particules augmente plus les contraintes macroscopiques sont importantes.

La résistance du matériau est définie comme la valeur maximale de $\Sigma_{11} - \Sigma_{33}$. On a déterminé que la

résistance de la matrice vaut $\sigma_0 = 15.86\text{GPa}$. On remarque sur la figure 3 qui représente la variation de $\Sigma_{11} - \Sigma_{33}$ en fonction de la taille des particules pour $f = 1\%$ que plus la taille des renforts diminue plus le matériau est résistant.

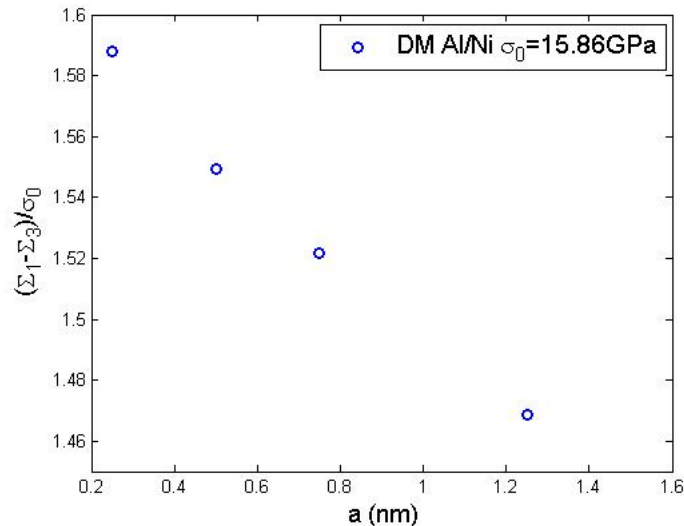


FIGURE 4 – Variation de $(\Sigma_{11} - \Sigma_{33})/\sigma_0$ en fonction de la taille des particules pour $f = 1\%$ et $\sigma_0 = 15.86\text{GPa}$

La figure 4 représente la variation de la résistance du nanocomposite normalisée en fonction de la taille des particules pour $f = 1\%$. On observe un effet de taille notable, la résistance étant plus élevée lorsque la taille des particules diminue. Par exemple, pour un rayon de 0.25nm le nanocomposite est d'environ 1.6 fois plus résistant que la matrice pure.

3 Critère de résistance pour les composites à renforts rigides

L'objectif de cette partie est de déterminer une estimation du critère de résistance des nanocomposites par une méthode cinématique d'analyse limite. Nous avons tout d'abord déterminé un critère de résistance pour les composites classiques que nous avons validé en le comparant à des données de la littérature. Ce critère a ensuite été étendu aux nanocomposites en considérant une interface imparfaite cohérente autour des particules.

3.1 Principe de base de l'approche cinématique d'analyse limite

Nous nous proposons de déterminer une estimation de la résistance des nanocomposites. A cette fin nous mettons en œuvre une approche cinématique d'analyse limite sur une cellule de base.

Pour la modélisation, on considère une cellule élémentaire d'un composite Ω constituée d'une matrice supposée incompressible parfaitement plastique Ω_s (dont le bord extérieur est donné par $r = b$) renforcée par une particule rigide sphérique Ω_p de rayon a , tel que $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_p$ (cf. figure 5). La fraction volumique de la particule est alors $f = a^3/b^3$.

On introduit tout d'abord l'ensemble des champs de vitesses \mathbf{v} cinématiquement admissible $K_c = \{\mathbf{v}/\mathbf{v}(\underline{x}) = \mathbf{D} \cdot \underline{x}, \forall \underline{x} \in \partial\Omega\}$ avec \mathbf{D} le taux de déformation macroscopique et \underline{x} le vecteur position. De plus, on impose au champ de vitesse recherché d'être incompressible, i.e. $\text{div}(\mathbf{v}) = \text{tr}(\mathbf{d}) = 0$ avec $\mathbf{d} = \frac{1}{2}(\nabla(\mathbf{v}) + \nabla(\mathbf{v})^t)$ le tenseur de vitesses des déformations locales.

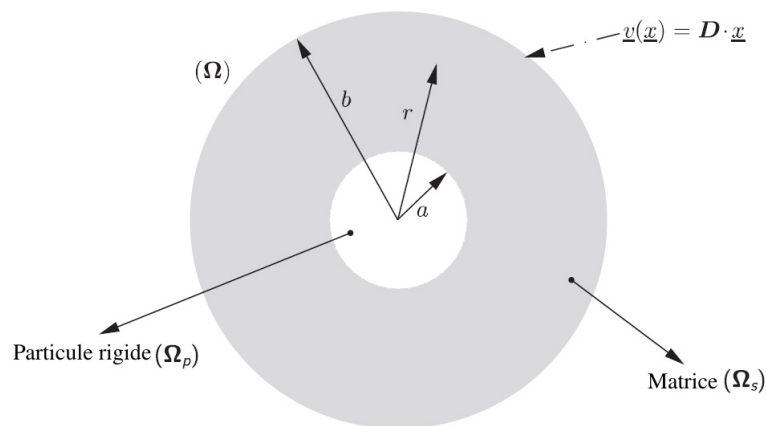


FIGURE 5 – Cellule sphérique d’une matrice plastique de rayon b renforcée par une particule sphérique rigide de rayon a

Ayant fait le choix d’un matériau de von-Mises, le critère local s’écrit :

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \sqrt{\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d} - k \leq 0 \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \quad (3)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_d$ est la partie déviatorique du tenseur des contraintes de Cauchy, k la résistance en cisaillement et σ_0 la résistance en contrainte uniaxiale.

On obtient ainsi l’ensemble convexe des champs de contraintes plastiquement admissibles $G(\underline{x})$ tel que $G(\underline{x}) = \{\boldsymbol{\sigma} / f(\boldsymbol{\sigma}) \leq 0\}$

Une formulation équivalente au critère de plasticité est fournie par la fonction d’appui sur l’ensemble convexe G :

$$\pi(\mathbf{d}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma} \in G} \{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}\} \quad (4)$$

Pour le critère de von-Mises, on vérifie aisément que (cf. Salençon [9]) la fonction d’appui se présente sous la forme :

$$\begin{cases} \pi(\mathbf{d}) = +\infty & \text{si } \text{tr}(\mathbf{d}) \neq 0 \\ \pi(\mathbf{d}) = k \sqrt{2 \mathbf{d} : \mathbf{d}} & \text{si } \text{tr}(\mathbf{d}) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

En raison d’éventuelles discontinuités de la vitesse à l’interface, on définit aussi la contribution de l’interface à la fonction d’appui :

$$\pi(\mathbf{n}, \mathbf{v}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma} \in G} \{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}\} \quad (6)$$

qui dans le cas du critère de von-Mises s’exprime comme (cf. Salençon [9]) :

$$\begin{cases} \pi(\mathbf{n}, \mathbf{v}) = +\infty & \text{si } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \neq 0 \\ \pi(\mathbf{n}, \mathbf{v}) = k \|\mathbf{v}\| & \text{si } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

avec \mathbf{n} le vecteur normal extérieur en $r = a$.

Il en résulte la fonction d’appui de l’ensemble convexe des tenseurs des contraintes macroscopiques admissibles $\tilde{C} = \{\boldsymbol{\Sigma} / \exists \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) \in G\}$

$$\Pi^{hom}(\mathbf{D}) = \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_{\Omega} \pi(\mathbf{d}) dV + \int_{S(a)} \pi(\mathbf{n}, \mathbf{v}) dS \right) \quad (8)$$

avec $S(a)$ la frontière de la sphère de rayon a . Les contraintes macroscopiques admissibles sont alors déterminées par :

$$\Sigma = \frac{\partial \Pi^{hom}(\mathbf{D})}{\partial \mathbf{D}} \quad (9)$$

qui est précisément l'équation donnant la surface de charge macroscopique.

3.2 Choix d'un champ de vitesse pertinent

En raison de l'incompressibilité de la matrice et du renforcement par des particules rigides, le matériau composite sera également incompressible. Il est donc suffisant de ne déterminer que la fonction d'appui macroscopique $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$ pour un taux de déformation macroscopique purement déviatorique.

La mise en œuvre de la méthodologie qui vient d'être exposée requiert le choix d'une classe de champ de vitesse pertinent pour le calcul de Π^{hom} .

On adopte pour cette étude le champ de vitesse incompressible ($\text{div}(\mathbf{v}) = 0$) initialement proposé par Budiansky et al. [10] et utilisé dans le contexte des composites classiques par Zhu et Zbib [11] et [12]. En coordonnées sphériques on a :

$$v_r = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\zeta(r, \theta) \sin \theta) \quad v_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\zeta(r, \theta)) \quad v_\varphi = 0 \quad (10)$$

En considérant des conditions aux limites en déformations déviatoriques $\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$, on vérifie que le polynôme $\zeta(r, \theta)$ prend la forme :

$$\zeta(r, \theta) = \left(\frac{r^3}{4} + \chi(r) \right) \sin 2\theta \quad (11)$$

avec $\chi(r)$ un polynôme de r . En reportant cette expression dans (10), le champ de vitesse s'écrit

$$v_r = -\frac{(1 + 3 \cos(2\theta))}{r^2} \left(\frac{r^3}{4} + \chi(r) \right) \quad v_\theta = \frac{\sin(2\theta)}{r} \left(\frac{3r^2}{4} + \chi'(r) \right) \quad v_\varphi = 0 \quad (12)$$

La condition de taux de déformation uniforme sur la surface externe $r = b$

$$\mathbf{v}(\underline{x} = b \mathbf{e}_r) = \mathbf{D} \cdot \underline{x} \quad (13)$$

implique directement que

$$\chi(b) = \chi'(b) = 0 \quad (14)$$

La condition d'admissibilité à l'interface particule matrice en $r = a$, (cf. (5), avec $\mathbf{n} = \mathbf{e}_r$) s'écrit

$$v_r(\underline{x} = a \mathbf{e}_r) = 0 \quad \forall \theta \in [0, 2\pi] \quad (15)$$

et donc

$$\chi(a) = -\frac{a^3}{4} \quad (16)$$

En résumé, le champ de vitesse incompressible \mathbf{v} , doit de plus vérifier (13) et (15) pour être pertinent. On peut alors considérer les fonctions d'appui pour le critère de von-Mises définies par les équations (5) et (7).

On notera qu'à la différence de Zhu et Zbib [11] qui à cette étape ont considéré la condition à l'interface par $v(a) = 0$, nous avons considéré $v_r(a) = 0$. Ceci implique que la classe de champ de vitesse retenue par Zhu et Zbib est plus restrictive que la nôtre qui la contient.

3.3 Critère de résistance des composites classiques

Comme le champ de vitesse est pertinent, le terme de saut s'écrit $\pi(\mathbf{n}, \mathbf{v}) = k \|\mathbf{v}(a)\|$, où $\|\cdot\|$ désigne la norme euclidienne usuelle. Il vient qu'à l'interface $\pi(\mathbf{n}, \mathbf{v}) = k |v_\theta(a)|$ avec $v_\theta(a) = \frac{\sin(2\theta)}{a} \left(\frac{3a^2}{4} + \chi'(a) \right)$. Le calcul donne $\int_{S(a)} k |v_\theta(a)| dS = 0$.

L'équation (8) devient alors :

$$\Pi^{hom}(\mathbf{D}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} k \sqrt{2\mathbf{d} : \mathbf{d}} d\Omega \quad (17)$$

Du fait de la difficulté de ce calcul, nous avons appliqué deux fois l'inégalité de Cauchy-Schwarz nous permettant d'obtenir un majorant de $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$. La méthode choisit pour déterminer le critère de résistance du composite est une approche cinématique d'analyse limite, ceci nous permet de considérer ce majorant comme l'estimation de $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$. A cette fin, considérons $\mathcal{S}(r)$ la sphère de rayon r . En appliquant une première fois l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient :

$$\int_{\mathcal{S}(r)} \sqrt{2\mathbf{d} : \mathbf{d}} dS \leq \sqrt{4\pi r^2} \sqrt{\int_{\mathcal{S}(r)} 2\mathbf{d} : \mathbf{d} dS} \quad (18)$$

En appliquant une seconde fois l'inégalité de Cauchy-Schwarz, (18) devient :

$$\Pi^{hom}(\mathbf{D}) \leq \frac{k}{|\Omega|} \sqrt{\frac{4\pi(b^3 - a^3)}{3}} \sqrt{\int_a^b \left\{ \int_{\mathcal{S}(r)} 2\mathbf{d} : \mathbf{d} dS \right\} dr} \quad (19)$$

On peut alors considérer ce majorant comme une estimation de $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$ et on a :

$$\Pi^{hom}(\mathbf{D}) = \frac{k}{|\Omega|} \sqrt{\frac{4\pi(b^3 - a^3)}{3}} \sqrt{\mathcal{I}(\chi)} \quad (20)$$

avec

$$\mathcal{I}(\chi) = \frac{4}{15} \int_a^b \left(-768r\chi(r)\chi'(r) - 32r^3\chi'(r)\chi^{(2)}(r) + 24r^5\chi^{(2)}(r) + 208r^2(\chi'(r))^2 + 72r^4\chi'(r) + 96r^2\chi(r)\chi^{(2)}(r) + 864(\chi(r))^2 + 8r^4(\chi^{(2)}(r))^2 + 45r^6 \right) \frac{dr}{r^4} \quad (21)$$

où $\chi^{(n)}$ est la dérivée n-ième de χ . L'objectif maintenant est de déterminer la fonction χ vérifiant (14) et (16) et minimisant la fonctionnelle \mathcal{I} que l'on considère sous la forme :

$$\mathcal{I}(\chi) = \int_a^b \mathcal{L}(r, \chi, \chi', \chi^{(2)}) dr \quad (22)$$

Pour l'étude de la stationnarité de la fonctionnelle \mathcal{I} pour toute fonction χ , on s'appuie sur les équations d'Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi} - \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi'} \right) + \frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi^{(2)}} \right) = 0 \quad (23)$$

d'où il vient que la fonction χ doit être solution de l'équation différentielle :

$$24\chi'(r) - 12r\chi^{(2)}(r) + r^3\chi^{(4)}(r) = 0 \quad (24)$$

La solution est alors de la forme

$$\chi(r) = C_1 + C_2 \frac{b^2}{r^2} + C_3 \frac{r^3}{b^3} + C_4 \frac{r^5}{b^5} \quad (25)$$

La condition (14) donne

$$C_1 = -\frac{1}{2}(5C_3 + 7C_4) \quad ; \quad C_2 = \frac{1}{2}(3C_3 + 5C_4) \quad (26)$$

On peut ensuite déterminer aisément les deux constantes C_3 et C_4 avec la condition (16) :

$$C_3 = -\frac{5a^3(f^{7/3} - 1) + 2a\chi'(a)(2f^{7/3} - 7f^{2/3} + 5)}{2(4f^{10/3} - 25f^{7/3} + 42f^{5/3} - 25f + 4)} \quad (27)$$

$$C_4 = \frac{3a^3(f^{4/3} + f + f^{2/3} + f^{1/3} + 1) + 2a\chi'(a)(2f^{4/3} + 2f + 2f^{2/3} - 3f^{1/3} - 3)}{2(f^{1/3} - 1)^3(4f^2 + 16f^{5/3} + 40f^{4/3} + 55f + 40f^{2/3} + 16f^{1/3} + 4)} \quad (28)$$

avec $f^{1/3} = a/b$.

On observe que ces constantes dépendent du rayon a , de la fraction volumique f et de $\chi'(a)$. On connaît alors l'expression de χ et donc de $\mathcal{I}(\chi)$. Afin de déterminer $\chi'(a)$ nous avons injecté la fonctionnelle dans l'équation (18) et calculé la valeur de $\chi'(a)$ minimisant $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$ ce qui donne

$$\chi'(a) = \frac{3b^2(5f^{5/3} + 10f^2 + 8f^{7/3} + 6f^{8/3} + 4f^3 + 2f^{10/3})}{4(1 - f^{1/3})(2 + 6f^{1/3} + 12f^{2/3} + 15f + 15f^{4/3} + 12f^{5/3} + 6f^2 + 2f^{7/3})} \quad (29)$$

Ceci permet alors d'obtenir une expression de $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$ dépendant de la limite d'élasticité en cisaillement de la matrice k et de la fraction volumique f . D'où on déduit, en notant la relation $2\Sigma_d D_{eq} = \Pi^{hom}(\mathbf{D})$ (induit par la forme de \mathbf{D} choisie), l'expression de la contrainte admissible (résistance macroscopique)

$$\Sigma_d = k \sqrt{1-f} \sqrt{\frac{2 - 3f + 5f^{7/3} + 3f^{10/3}}{2 - 5f + 5f^{7/3} - 2f^{10/3}}} \quad (30)$$

Quand $f = 0$, on retrouve comme attendu la résistance de la matrice. De plus, lorsque $f \rightarrow 1$, $\Sigma_d \rightarrow +\infty$, ce qui correspond à la résistance d'une particule rigide.

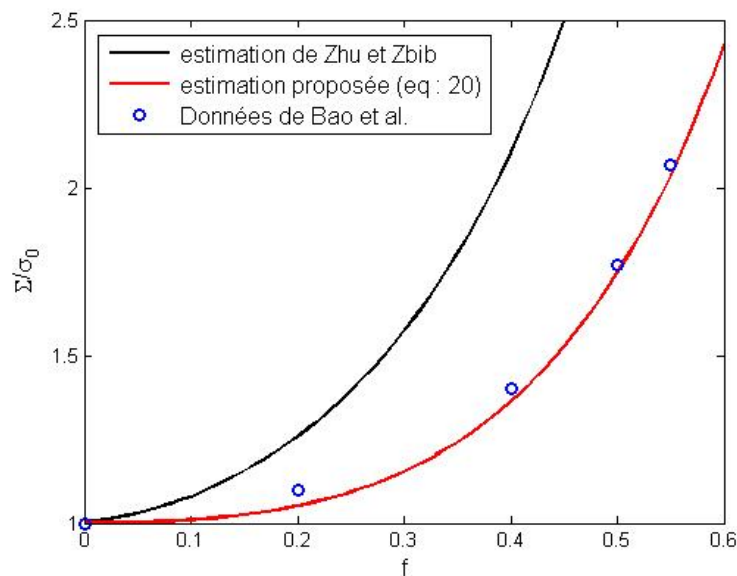


FIGURE 6 – Variation de la résistance uniaxiale normalisée, Σ/σ_0 , en fonction de la fraction volumique (donées de Bao et al. [13]). Comparaison également avec l'estimation de Zhu et Zbib [11] et avec le critère proposé (30)

La figure 6 montre la variation de Σ/σ_0 en fonction de la fraction volumique. L'estimation (30) et celle de Zhu et Zbib [11] sont comparées aux données de Bao et al. [13] qui proviennent de simulations numériques par éléments finis sous traction uniaxiale. Lors de leurs simulations ces auteurs ont considéré un composite composé d'une matrice parfaitement plastique renforcée par des particules sphériques rigides. On note sur cette figure une augmentation de la résistance macroscopique avec la fraction volumique de renforts. On remarque aussi que l'estimation proposée par Zhu et Zbib est éloignée des données issues des simulations alors que l'estimation (30) que nous avons obtenue permet de retrouver de manière satisfaisante les données de Bao et al.. Ceci permet de valider le critère que l'on se propose d'étendre aux nanocomposites.

4 Extension du critère de résistance aux nanocomposites

4.1 Critère de résistance des nanocomposites

On considère à présent une classe de nanocomposite constituée d'une matrice incompressible parfaitement plastique, vérifiant le critère de von-Mises, renforcée par des nanoparticules sphériques rigides (dont le rayon est typiquement de l'ordre du nanomètre de diamètre).

A l'instar de travaux effectués par Dormieux et Kondo [14] dans le cas des nanoporeux, afin de rendre compte des effets de taille, nous introduisons une interface imparfaite cohérente (S) autour de la particule (cf. illustration sur la figure 7).

Afin de traduire les effets d'énergie de surface, cette interface est assujettie à un saut du vecteur contrainte tandis que le champ de déplacement reste continu. Son équilibre mécanique est régi par les équations de Young-Laplace généralisées :

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} &= -\text{div}(\boldsymbol{\tau}) : \boldsymbol{\kappa} \\ \mathbf{P} \cdot [\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} &= -\nabla_S \cdot \boldsymbol{\tau} \end{aligned} \quad (31)$$

dans lesquelles $\mathbf{P} = \mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$, $\mathbf{1}$ étant le tenseur identité d'ordre 2, \mathbf{n} le vecteur normal à l'interface entre les particules et la matrice (orientée vers l'extérieur de la particule), ∇_S désigne l'opérateur divergence défini sur l'interface S. $\boldsymbol{\kappa}$ est le tenseur de courbure, tandis que $\boldsymbol{\tau}$ représente les contraintes de l'interface ; celles-ci sont localement planes. $[\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma}^{(m)} - \boldsymbol{\sigma}^{(i)}$ représente le saut de contraintes à l'interface.

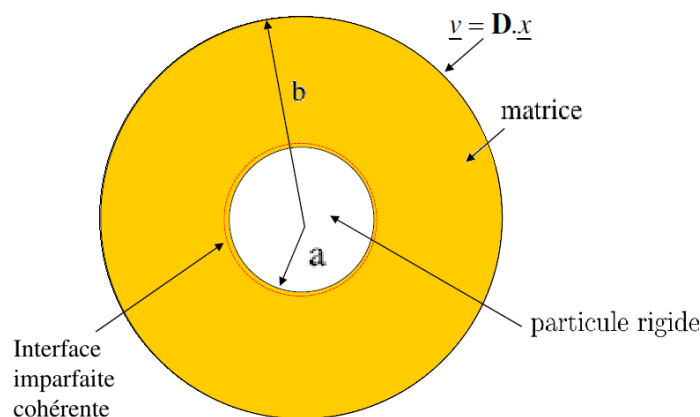


FIGURE 7 – Cellule de nanocomposite

Dans la présente étude, l'interface est supposée obéir à un critère du type $f^{int}(\boldsymbol{\tau}) = \sqrt{\frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}_d : \boldsymbol{\tau}_d} - k_{int} \leq 0$ où $k_{int} = \sigma_0^{int}/\sqrt{3}$ est la résistance au cisaillement de l'interface, σ_0^{int} la résistance à la traction de

l'interface et τ_d représente la partie dévitorique de la contrainte interfaciale τ .

Comme dans le cas des nanoporeux (p.ex. Dormieux et Kondo [14]), la dissipation macroscopique $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$ a 2 contributions :

$$\Pi^{hom}(\mathbf{D}) = \Pi_{mat}^{hom}(\mathbf{D}) + \Pi_{int}^{hom}(\mathbf{D}) \quad (32)$$

dont $\Pi_{mat}^{hom}(\mathbf{D})$ la dissipation due à la matrice et $\Pi_{int}^{hom}(\mathbf{D})$ la contribution de l'interface.

Le taux de déformation macroscopique \mathbf{D} , le champ de vitesse et les conditions aux limites en vitesse dans le cas du nanocomposite sont exactement les mêmes que ceux du composite classique. Il en résulte que la contribution de la matrice à la dissipation plastique dans le nanocomposite est précisément celle déjà calculée dans le composite classique.

Par ailleurs, il a été montré par [14] que $\Pi_{int}^{hom}(\mathbf{D}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{S(a)} \pi_{int}(\mathbf{d}^{int}) dS$ avec \mathbf{d}^{int} la projection du taux de déformation local \mathbf{d} sur le plan tangent local (Le Quang et He [15]) et $\pi^{int}(\mathbf{d}^{int})$ la fonction d'appui de l'interface du domaine convexe des contraintes interfaciales plastiquement admissibles $G^{int} = \{\boldsymbol{\tau} / f^{int}(\boldsymbol{\tau}) \leq 0\}$ définit par :

$$\pi_{int}(\mathbf{d}^{int}) = \sup_{\boldsymbol{\tau} \in G^{int}} \{\boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}^{int}\} = 2 k_{int} \sqrt{\frac{1}{3} \left(d_{\theta\theta}^2 + d_{\varphi\varphi}^2 + d_{\theta\varphi}^2 + d_{\theta\theta} d_{\varphi\varphi} \right)} \quad (33)$$

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz à $\Pi_{int}^{hom}(\mathbf{D})$ on obtient un majorant et donc une estimation de la contribution de l'interface qui va dépendre, outre de la fraction volumique f de particules, de leur rayon a , et de la résistance de l'interface k_{int} , de $\chi'(a)$. Pour les nanocomposites, ce dernier est choisi égal à celui des composites classiques, de sorte à retrouver le critère (30) lorsque les effets d'interface seront négligés. On déduit ainsi l'expression de $\Pi^{hom}(\mathbf{D})$, en injectant celles de $\Pi_{mat}^{hom}(\mathbf{D})$ et de $\Pi_{int}^{hom}(\mathbf{D})$ dans (32). Considérant la relation $2\Sigma_d D_{eq} = \Pi^{hom}(\mathbf{D})$, il vient :

$$\begin{aligned} \Sigma_d = & k \sqrt{1-f} \sqrt{\frac{2-3f+5f^{7/3}+3f^{10/3}}{2-5f+5f^{7/3}-2f^{10/3}}} \\ & + \frac{k_{int}}{a} \sqrt{\frac{33}{5} \frac{f^{1/3}(f^{2/3}+2f+3f^{4/3}+4f^{5/3}+5f^2+5/2f^{7/3})}{1+2f^{1/3}+3f^{2/3}+3/2f-3/2f^{5/3}-3f^2-2f^{7/3}-f^{8/3}}} \end{aligned} \quad (34)$$

On notera lorsque $k_{int}/a \rightarrow 0$ ($k_{int} = 0$ ou a très grand) que le critère de résistance effectif du nanocomposite se réduit à celui du composite classique (30). De plus, quand $f = 0$, $\Sigma_d = k$ et quand $f \rightarrow 1$, $\Sigma_d \rightarrow +\infty$, ce qui traduit une cohérence du critère établi.

4.2 Calibration et validation de l'estimation sur les données

Pour les données issues de nos simulations, nous avons réalisé une identification inverse afin de déterminer la valeur de k_{int} pour chaque rayon de particule. La figure 8 représente la variation de la résistance de l'interface k_{int} calibrée, en fonction du rayon des particules. Il apparaît que la reproduction des effets de taille mis en évidence à partir des simulations numériques requiert une résistance de l'interface qui augmente avec la taille des particules.

Une loi de variation de k_{int} en puissance du rayon des particules a a été obtenue. Pour son obtention, nous avons d'abord tracé la courbe $\ln(k_{int})$ en fonction de $\ln(a)$, dont une approximation satisfaisante est fournie par une équation linéaire de la forme $\ln(k_{int}) = \alpha \ln(a) + \beta$ avec α et β deux scalaires. D'où il vient :

$$k_{int} = e^{45.3531} \times a^{0.9370} \quad (a \text{ en nanomètre}) \quad (35)$$

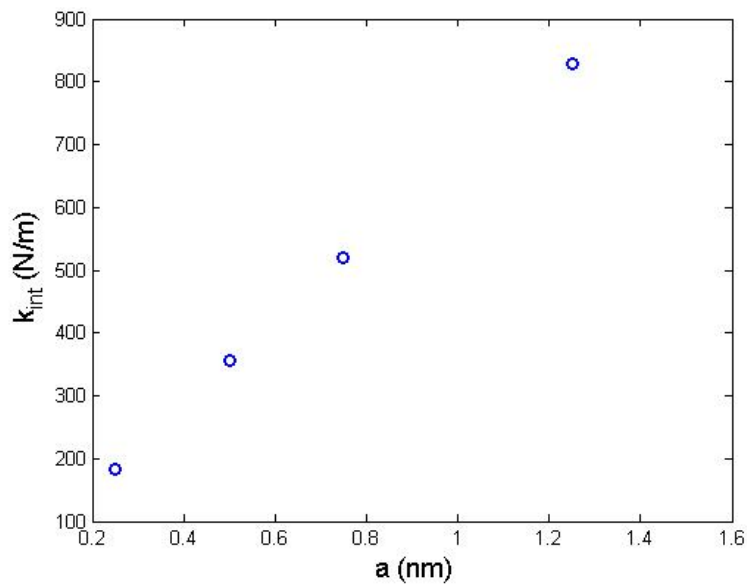


FIGURE 8 – Variation de k_{int} en fonction du rayon des particules

En reportant (35) dans (34), on obtient une expression analytique dont la comparaison aux données numériques est reportée sur la figure 9 (variation de la résistance macroscopique, $(\Sigma_{11} - \Sigma_{33})/\sigma_0$, en fonction de la taille des particules). Cette comparaison est plutôt satisfaisante.

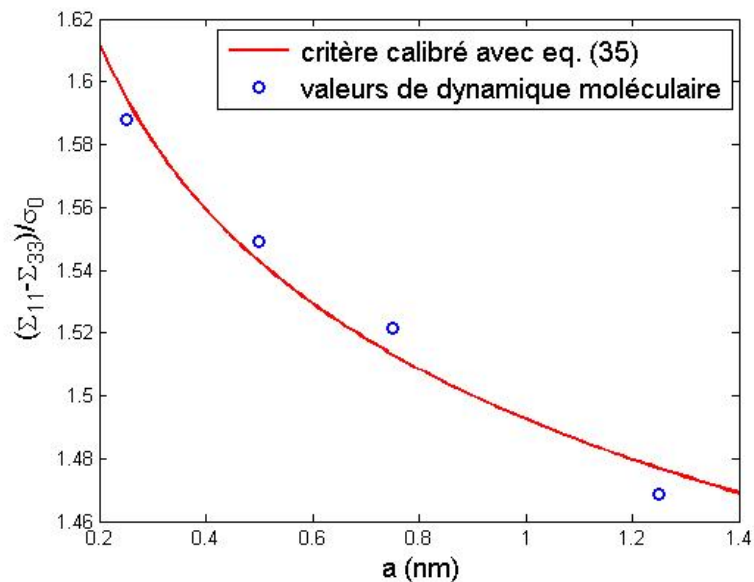


FIGURE 9 – Variation de $(\Sigma_{11} - \Sigma_{33})/\sigma_0$ de l'estimation (34) calibrée sur les données de la dynamique moléculaire avec (35) en fonction de la taille des particules pour f fixée à 1%

On observe sur la figure 10 que le critère de résistance normalisé calibré avec l'équation (35) diminue avec la taille des particules pour atteindre 1.35 pour un rayon de 10nm et une fraction volumique de 1%.

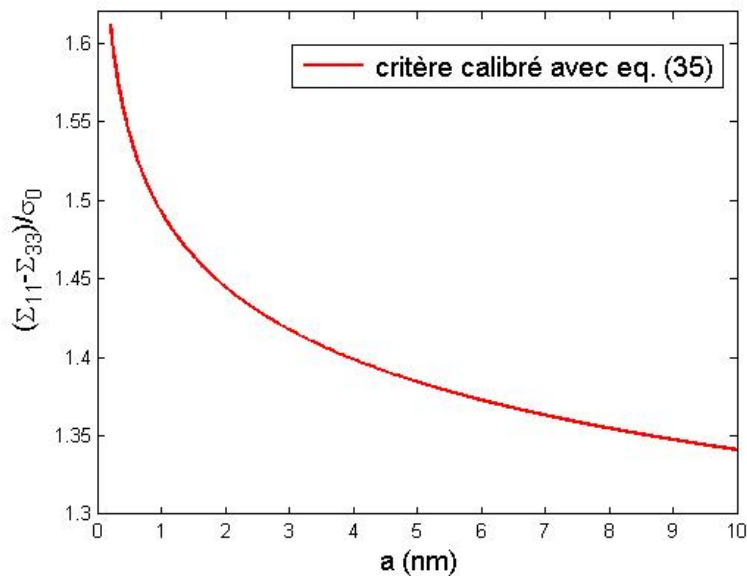


FIGURE 10 – Extrapolation à des plus grandes tailles de la résistance normalisé du nanocomposites

5 Conclusions et perspectives

Cette étude a porté sur une investigation des propriétés de résistance de nanocomposites, avec une attention particulière à l'analyse des effets de taille de particules sphériques. Une première partie a consisté en la réalisation de simulations numériques par dynamique moléculaire, simulations qui s'avèrent appropriées pour appréhender la physique qui se joue à la nanoéchelle. A cette fin, nous avons mis en œuvre le logiciel LAMMPS pour un nanocomposite constitué d'une matrice d'Aluminium renforcée par des nanoparticules sphériques de Nickel ayant une fraction volumique de 1%. Il a été observé que la résistance du nanocomposite diminue lorsque la taille des nanoparticules augmente, la gamme explorée ici étant inférieure à 2nm, ceci principalement pour des raisons de taille de calcul.

Le second volet de l'étude a été consacré à la détermination d'une estimation du critère de résistance effective des (nano)composites à l'aide d'une approche cinématique d'analyse limite. Le cas des composites classiques a été traité dans un premier temps puis une extension aux nanocomposites a été réalisée en considérant une interface imparfaite cohérente autour des particules. La calibration du modèle théorique sur des données numériques de résistance des nanocomposites suggère une dépendance de la résistance interfaciale k_{int} avec le rayon des particules. Il nous a été possible de déterminer une approximation satisfaisante de cette dépendance.

Cette étude ouvre de nombreuses perspectives dont une analyse approfondie des propriétés interfaciales (élasticité, résistance), en lien direct avec les résultats de dynamique moléculaire. De même, il conviendra d'étendre les résultats théoriques établis au cas d'une matrice cristalline dont une des spécificités est l'anisotropie plastique.

Références

- [1] T. D. Fornes, D. R. Paul, Modeling properties of nylon 6/caly nanocomposites using composite theories, *Polymer* 44 (2003) 4993–5013.
- [2] E. Reynaud, T. Jouen, C. Gauthier, G. Vigier, J. Varlet, Nanofillers in polymeric matrix : a study on silica reinforced PA6, *Polymer*, 42 (2001) 8759–8768.

- [3] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, Hashin-Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects, *Computational Materials Science*, 48 (2010) 589–596.
- [4] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, Hashin-Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects, *Computational Materials Science*, 50 (2010) 403–410.
- [5] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, B.L. Karihaloo, Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 (2005) 1174–1196.
- [6] P. Li, Q. Wang, S. Shi, Differential scheme for the effective elastic properties of nano-particle composites with interface effect, *Computational Materials Science*, 50 (2011) 3230–3237.
- [7] S. Brach, L. Dormieux, D. Kondo, G. Vairo, A computational insight into void-size effects on strength properties of nanoporous materials, *Mechanics of Materials*, 101 (2016) 102–117.
- [8] M. F. Horstemeyer, M. I. Baskes, S. J. Plimpton, Length scale and time scale effects on the plastic flow of fcc metals, *Acta Materiala*, 49 (2001) 4363–4374.
- [9] J. Salençon, *Calcul à la rupture en analyse limite*, Presse de l’Ecole nationale des ponts et chaussés, Paris, (1983).
- [10] B. Budiansky, J. W. Hutchinson, S. Slutsky, Void growth and collapse in viscous solids, in : *Mechanics of Solids : The Rodney Hill 60th Anniversary Volume*, H. G. Hopkins, M. J. Sewell, Pergamon Press, Oxford, (1982) 13–45.
- [11] H. T. Zhu, H. M. Zbib, A continuum model for flow strength of metal-matrix composites, *Scripta Metallurgica et Materiala*, 28 (1993) 1323–1328.
- [12] H. T. Zhu, H. M. Zbib, A macroscopic model for plastic flow in metal-matrix composite, *International Journal of Plasticity*, 11 (1995) 471–499.
- [13] G. Bao, J. W. Hutchinson, R. M. McMeeking, Particle reinforcement of ductile matrices against plastic flow and creep, *Acta metallica Material*, 39 (1991) 1871–1882.
- [14] L. Dormieux, D. Kondo, An extension of Gurson model incorporating interface stresses effects, *International Journal of Engineering Science*, 48 (2010) 575–581.
- [15] H. Le Quang, Q.-C. He, Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces, *Mechanics of Materials*, 40 (2008) 865–884.