

ED SMAER

Sujet de thèses 2013

Laboratoire : Institut Jean Le Rond d'Alembert

Etablissement de rattachement : UPMC

Directeur de thèse et section CNU ou CNRS : Djimédo KONDO, Section 60

Codirection et section CNU et CNRS : Renald BRENNER, CR CNRS, Section 09, HDR

Collaborations : Unité de Recherche Navier, UMR 8208 CNRS, ENPC. LEMTA, UMR 5013 CNRS, Nancy

Titre de la thèse : Approche par homogénéisation non linéaire du comportement des milieux nano renforcés et/ou nanoporeux

Résumé du sujet :

La compréhension et l'amélioration des propriétés et comportements de matériaux nano renforcés ou de systèmes nanoporeux passe par une prise en compte appropriée des mécanismes de déformations qui se jouent aux échelles nanométriques. L'émergence au début des années 90 de cette nouvelle classe de matériaux a suscité un vif intérêt de la communauté scientifique et des industriels dans divers domaines d'ingénierie : industries automobiles, aéronautique, génie pétrolier et/ou génie civil. L'investigation de tels milieux, tant du point de vue des procédés d'élaboration que de la compréhension de leur comportement mécanique, ont largement confirmé la nécessité de mettre en place et développer des approches de modélisation véritablement nouvelles et qui leur sont dédiées. De telles approches doivent prendre en compte de façon pertinente la présence des nano objets. Dans le contexte des méthodes d'homogénéisation, visant donc à construire un milieu homogène équivalent à l'échelle macroscopique, l'une des difficultés principales réside dans la nécessité de rendre compte des spécificités des nano inclusions/pores et plus particulièrement des effets de leur taille sur la réponse mécanique effective. Il est clair que de nombreux aspects des modélisations théoriques requises sont de nature interdisciplinaire et intéressent au moins un des divers domaines précités. Les pistes explorées dans divers travaux récents de la littérature depuis à peu près une décennie exploitent non seulement des simulations atomistiques, mais également des approches du type « Continuum Nanomechanics » dans lesquelles on cherche à établir sur le plan physique des liens forts avec les très petites échelles. A titre d'exemple, la considération de surfaces/interfaces cohérentes ayant un comportement décrit à l'aide d'une élasticité surfacique à la Gurtin-Murdoch (1975), a permis d'obtenir des résultats remarquables pour les comportements élastiques de nanocomposites (cf. par exemple Brisard et al., 2011). Malgré leur intérêt, ces progrès restent limités à des renforts sphériques et/ou à des comportements linéaires, excluant de fait la plupart des matériaux fonctionnels de structures.

Le sujet de thèse proposé vise de façon générale à étendre les méthodes d'homogénéisation de matériaux à microstructure aléatoire, par la prise en compte d'énergie interfaciales se manifestant de manière déterminante aux très petites échelles (typiquement de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres). Plusieurs directions de recherche feront l'objet de ces extensions.

- 1) **En régime linéaire, on étudiera notamment le cas des nano inhomogénéités ellipsoïdales** qui constitue encore un des verrous majeurs à lever, la difficulté résidant dans la prise en compte des équations de Young-Laplace généralisées régissant l'équilibre mécanique de l'interface solide-solide. Les avancées attendues dans ce domaine sont nombreuses et devraient notamment permettre de formuler un cadre général de modélisation qui étend celui issu des résultats fondamentaux d'Eshelby et des bornes d'Hashin-Shtrikman. L'utilisation de techniques variationnelles usuelles sera fortement mise à profit à ce stade du travail de thèse. Les résultats attendus dans ce volet concernent aussi bien les nanocomposites que les milieux nanoporeux.
- 2) **La validation des résultats théoriques obtenus à l'aide d'approches numériques dédiées.** Il peut d'abord s'agir des approches par grilles de type FFT qu'il s'agira à d'étendre pour une gestion des interfaces cohérentes. Il n'est pas exclu de recourir également à des calculs en champs complets basés sur des outils de calculs plus standard de type Eléments Finis. Enfin, la justification de certains paramètres de l'approche « Continuum Nanomechanics » pourra requérir la réalisation de simulations atomistiques, par exemple à l'aide de codes « open source » comme LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).
- 3) **L'investigation des régimes non linéaire (viscolélasticité, plasticité, éventuellement endommagement),** constitue une étape véritablement cruciale du travail de thèse. Elle nécessitera le recours à deux classes d'outils différents dans leur conception : les approches variationnelles d'homogénéisation non linéaire visant à construire les potentiels macroscopiques correspondant aux comportements recherchés ; les outils d'analyse limite avec prise en compte des discontinuités de champs de vitesse. Compte tenu d'avancées récentes dans ce domaine sur des systèmes nanoporeux, une attention plus forte sera accordée ici à l'influence de la taille des nano inclusions sur le comportement non linéaire des milieux nano renforcés et en particulier à leurs propriétés de résistance. Enfin, il conviendra de voir dans quelle mesure les modélisations proposées pourront être évaluées/enrichies grâce à des résultats issus de simulations moléculaires. De même, la prise en compte de cas des comportements non associés pourra également faire l'objet d'efforts de recherches soutenus.
- 4) **Vers une véritable nanoporomécanique des milieux saturés ;** un aspect important pour certaines applications de systèmes nanoporeux, en génie pétrolier et ou en géomécanique, requiert la prise en compte de la pression de fluides interstitiels (solides nanoporeux complètement ou partiellement saturés) et leur impact à l'échelle macroscopique sur la réponse dite poromécanique. Dans de tels cas, en plus de la pression du fluide s'exerçant sur les parois des nanopores, des effets additionnels (par exemple ceux dus au confinement du fluide dans de très petits pores doivent être incorporés dans l'analyse, de sorte à évaluer et/ou prédire très correctement les effets de taille sur les comportements poromécaniques couplés. Le caractère véritablement pluridisciplinaire (possibles interactions avec la physique/chimie des poreux avec effets de confinement) fera l'objet d'une attention particulière.

Sujet développé : Homogénéisation et réponse non linéaire des milieux nano renforcés

Contexte : La compréhension et l'amélioration des propriétés de matériaux de structures nano renforcés passe par une prise en compte explicite des mécanismes physiques de déformations qui se jouent à des échelles nanométriques. L'émergence au début des années 90 de nanocomposites et des systèmes nanoporeux a généré un engouement général, tant au plan européen que mondial. Les travaux menés depuis quelques années et au travers de diverses collaborations (cf. par exemple thèse de L. Cauvin et al., 2007-2010 ; travaux de Brisard et al.) ont d'abord porté sur la caractérisation et la modélisation du comportement élastique des nanocomposites à renforts plaquettaires. Tout comme d'autres équipes dans ce domaine, nos recherches, plus récentes, en matière d'homogénéisation ont largement confirmé la nécessité de mettre en place et développer des approches véritablement nouvelles des milieux contenant des nano objets. Un des aspects majeurs de ces nouveaux développements concernent plus particulièrement la prise en compte dans les modèles d'un certain nombre de spécificités de ces milieux telles que les effets de taille d'inclusions sur la réponse mécanique à l'échelle macroscopique. De façon générale, ces effets de taille sont liés au ratio surface/volume très élevé qui caractérise les milieux nanorenforcés et/ou nanoporeux. La prise en compte explicite dans les modèles de comportements des effets de surface/interface constitue un des enjeux importants, dépassant par certains aspects le cadre strict de la mécanique des matériaux hétérogènes. Il convient de noter que divers aspects amont de la modélisation des matériaux nanostructurés et des milieux nanoporeux intéressent de nombreux domaines de l'ingénierie parmi lesquels l'industrie automobile, l'aéronautique, le génie civil et/ou pétrolier).

Objectifs et Méthodologie : Le sujet de thèse vise à étendre les méthodes d'homogénéisation de milieux à microstructure aléatoire en prenant en compte des interfaces/surfaces. Dans ce contexte des méthodes d'homogénéisation, visant à construire un milieu homogène équivalent à l'échelle macroscopique, l'une des difficultés principales réside dans la nécessité de rendre compte des spécificités des nano inclusions/pores et plus particulièrement des effets de taille qu'ils induisent sur la réponse mécanique effective. Il est clair que de nombreux aspects des modélisations théoriques requises sont de nature interdisciplinaire et intéressent au moins un des divers domaines d'ingénierie précités. Les pistes explorées dans divers travaux récents de la littérature exploitent non seulement des simulations atomistiques, mais également des approches plus « Continuum Nanomechanics » dans lesquelles on cherche à établir sur le plan physique des liens forts avec les très petites échelles. A titre d'exemple, la considération de surfaces/interfaces cohérentes ayant un comportement décrit à l'aide d'une élasticité surfacique à la Gurtin-Murdoch (1975), a permis d'obtenir des résultats remarquables pour les comportements élastiques de nanocomposites (cf. par exemple Brisard et al., 2011). Ces progrès restent toutefois limités au contexte des renforts sphériques et/ou à des comportements linéaires, excluant de fait la plupart de matériaux fonctionnels.

Le sujet de thèse proposé vise de façon générale à étendre les méthodes d'homogénéisation de matériaux à microstructure aléatoire, par la prise en compte d'énergie interfaciales se manifestant de manière déterminante aux très petites échelles (typiquement de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres).

Différents volets du projet de thèse

- 1) **En régime linéaire, on étudiera notamment le cas des nano inhomogénéités ellipsoïdales** qui constitue encore un des verrous majeurs à lever, la difficulté résidant dans la prise en compte des équations de Young-Laplace régissant l'équilibre mécanique de l'interface solide-solide. Les avancées attendues dans ce domaine permettront notamment de formuler un cadre général de modélisation qui étend le cadre classique issu des résultats fondamentaux d'Eshelby et des bornes d'Hashin-Shtrikman. L'utilisation de techniques variationnelles usuelles sera fortement mise à profit à ce stade du travail de thèse. Les résultats attendus dans ce volet concernent aussi bien les nanocomposites que les milieux nanoporeux.
- 2) **La validation des résultats théoriques obtenus à l'aide d'approches numériques dédiées.** Il peut d'abord s'agir des approches par grilles de type FFT qu'il s'agira à d'étendre pour une gestion des interfaces cohérentes. Il n'est pas exclu de recourir également à des calculs en champs complets basés sur des outils de calculs plus standard de type Eléments Finis. Enfin, la justification de certains paramètres de l'approche « Continuum Nanomechanics » pourra requérir la réalisation de simulations atomistiques, par exemple à l'aide de codes « open source » comme LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).
- 3) **L'investigation des régimes non linéaire (viscolélasticité, plasticité, éventuellement endommagement),** constitue une étape véritablement cruciale du travail de thèse. Elle nécessitera le recours à deux classes d'outils différents dans leur conception : les approches variationnelles d'homogénéisation non linéaire visant à construire les potentiels macroscopiques correspondant aux comportements recherchés ; les outils d'analyse limite avec prise en compte des discontinuités de champs de vitesse. Compte tenu d'avancées récentes dans ce domaine sur des systèmes nanoporeux, une attention plus forte sera accordée ici à l'influence de la taille des nano inclusions sur le comportement non linéaire des milieux nano renforcés et en particulier à leurs propriétés de résistance. Enfin, il conviendra de voir dans quelle mesure les modélisations proposées pourront être évaluées/enrichies grâce à des résultats issus de simulations moléculaires. De même, la prise en compte de cas des comportements non associés pourra également faire l'objet d'efforts de recherches soutenus.
- 4) **Vers une véritable nanoporomécanique des milieux saturés ;** un aspect important pour certaines applications de systèmes nanoporeux, en génie pétrolier et ou en géomécanique, requiert la prise en compte de la pression de fluides interstitiels (solides nanoporeux complètement ou partiellement saturés) et leur impact à l'échelle macroscopique sur la réponse dite poromécanique. Dans de tels cas, en plus de la pression du fluide s'exerçant sur les parois des nanopores, des effets additionnels (par exemple ceux dus au confinement du fluide dans de très petits pores doivent être incorporés dans l'analyse, de sorte à évaluer et/ou prédire très correctement les effets de taille sur les comportements poromécaniques couplés. Le caractère véritablement pluridisciplinaire (possibles interactions avec la physique/chimie des poreux avec effets de confinement) fera l'objet d'une attention particulière.

Résultats attendus :

Les résultats attendus concernent au premier plan la mise en place d'outils théoriques et numériques dédiés à l'homogénéisation des matériaux contenant des nano inclusions de taille nanoscopique. Le succès de ce projet de thèse permettra de disposer de modèles pour analyser et prédire les propriétés et comportements encore incompris d'une large classe de

nanocomposites, ce qui est actuellement encore hors de portée. L'étude de matériaux contenant des nano fissures (avec une attention particulière pour l'analyse des singularités), ou de la résistance de milieux nanoporeux/nano renforcés seront des retombées directes du travail de thèse. Enfin, à moyen terme, le travail qui sera réalisé pourra servir de base à l'élaboration d'une théorie de milieux nanoporeux saturés par un fluide, situation dans laquelle le confinement jouera un rôle important.

Quelques références bibliographiques :

- [1] L. Dormieux, D. Kondo, F.J. Ulm. *Microporomechanics*, Wiley, 352 pages, 2006
- [2] 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*, Vol. 48, 589-596, 2010
- [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*, Vol. 50, 403-410, 2010
- [4] L. Cauvin, D. Kondo, M. Brieu, N. Bhatnagar. Mechanical properties of polypropylene layered silicate nanocomposites: characterization and micro-macro modeling. *Polymer Testing*, vol. 29, pp. 245-250, 2010
- [5] Dingreville R., Qu J., Cherkaoui M., Surface free energy and its effect on the elastic behavior of nano-sized particles, wires and films, *J. Mech. Phys. Solids*, 53:1827–1854 (2005)
- [6] L. Dormieux, D. Kondo. An extension of Gurson model incorporating interface stresses effects. *Intern. Journ. Eng. Science*, vol. 48, 575-581, 2010
- [7] Duan H. L., Wang J., Huang Z. P., Karihaloo B. L., Size dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress, *J. Mech. Phys. Solids*, 53:1574–1596 (2005)
- [8] A. Mitrushchenkov, G. Chambaud, J. Yvonnet, Q.-C. He, Towards an elastic model of wurtzite AlN model, *Nanotechnology*, 21(25):255701 (2010).
- [9] V. Monchiet, D. Kondo. Combined voids size and shape effects on the macroscopic criterion of ductile nanoporous materials. *International Journal of Plasticity*, 43, pp. 20-41, 2013