

## Development of a finite element strategy for nano-reinforced materials modeling.

Direction de thèse : Dr Ludovic Cauvin, [ludovic.cauvin@utc.fr](mailto:ludovic.cauvin@utc.fr) ; Dr Delphine Brancherie, [delphine.brancherie@utc.fr](mailto:delphine.brancherie@utc.fr) . Equipe numérique, laboratoire Roberval.

Laboratoire d'accueil : Le candidat sera accueilli au sein du laboratoire Roberval UMR 7337 de l'Université de Technologie de Compiègne UTC (40 minutes de Paris, ligne SNCF).

Collaboration UTC : Dr Fahmi Bédoui, [fahmi.bedoui@utc.fr](mailto:fahmi.bedoui@utc.fr). Equipe matériaux, laboratoire Roberval.

Financement : Contractuel avec l'UTC pour une période de 36 mois ( $\approx 1685$  euros bruts / mois). Possibilité d'implication dans les enseignements ( $\approx 2025$  euros bruts / mois).

Début du contrat : A partir de septembre 2016.

### Descriptif du sujet :

Depuis la publication il y a une vingtaine d'années de résultats obtenus par Toyota Research sur la dispersion à l'échelle nanoscopique de silicates en feuillets dans du polyamide 6, un effort considérable de recherche a été entrepris au niveau mondial dans le domaine des matériaux nano-chargés. L'obtention en particulier de niveaux remarquables de propriétés mécaniques pour des taux de renforts très faibles (inférieurs à 5%), a suscité un vif intérêt dans les communautés industrielle et académique [1-7] et font des nano-composites une nouvelle classe de matériaux à fort potentiel. La majeure partie de ces études s'intéressent à la caractérisation expérimentale de ces matériaux ou à leur modélisation via des modèles d'homogénéisations analytiques. Tout l'enjeu de modélisation de ces matériaux réside dans la prise en compte d'un effet de taille des nano-charges sur le comportement macroscopique du matériau. Cet effet de taille, dû à des phénomènes locaux à l'échelle atomique, peut s'interpréter comme une augmentation du rapport (surface de contact matrice-inclusions)/(fraction volumique d'inclusions). La prise en compte de l'interphase matrice / inclusions devient alors cruciale pour la modélisation de l'effet de taille. Pour ce faire, une élasticité surfacique du type Gurtin et Murdoch [8] est généralement introduite à l'interface matrice/inclusions dans les modèles micromécaniques [5-6,9]. Une discontinuité des efforts de traction doit alors être gérée à l'interface matrice/inclusions dont l'équilibre est régie par l'équation de Young-Laplace généralisée [10,11] Les modèles micromécaniques ainsi développés présentent l'avantage de faire clairement intervenir un effet de taille des nano-renforts. Toutefois, la résolution analytique de ces problèmes ne permet actuellement pas de prendre en compte des formes d'inclusions complexes et se limitent très souvent aux inclusions sphériques. La prise en compte de renforts de type plaquettaire dans ce type de résolution n'est pas possible avec les approches analytiques. L'étude de nano-renforts plaquettaires (voire quelconque : tubes ou assemblage de nano-renforts) repose donc sur la mise en place d'une méthodologie numérique. Dans ce cadre, et afin de lever le principal verrou de modélisation des matériaux nano-renforcés, les modèles à discontinuités fortes [12] notamment mis en œuvre dans le cadre de la thèse de Jérémie Bude pour la simulation de la rupture ductile [13] pourraient être adaptés pour la prise en compte de discontinuités des efforts de traction à l'interface matrice/nano-renforts ou nano-systèmes. Ce type d'approche, à développer dans un premier temps dans le contexte de l'élasticité linéaire, pourrait dans un second temps être étendue à des comportements non linéaires ou pour des cas de chargement dynamique, là encore l'approche numérique sera plus appropriée que les approches analytiques. Les travaux réalisés pourront s'appuyer sur les résultats expérimentaux déjà obtenus dans le cadre de la thèse de Pierre Gélineau [14], portant sur la caractérisation multi-échelles et la modélisation analytique du comportement élastique [7] et viscoélastique [15] de nano-composites à renforts plaquettaires et microstructure intercalée (schématisée sur la figure 1). Comme précédemment évoqué, en raison de la forme des renforts, la modélisation analytique (figure 2) proposée dans les travaux de thèse de Pierre Gélineau n'a pas permis de rendre compte d'un effet de taille des nano-renforts et de prédire de façon

pleinement satisfaisante le comportement macroscopique du nano-composite. L'étude des matériaux à nano-renforts plaquettaires (voire quelconques : tubes ou assemblage de nano-renforts) nécessite donc la mise en œuvre d'une méthodologie numérique.

Une attention toute particulière sera portée à développement d'une approche numérique suffisamment générique pour pouvoir s'adapter à d'autres types de matériaux ou de problèmes pour lesquels le caractère imparfait de l'interface entre constituants doit être pris en compte. En particulier, la modélisation du comportement de matériaux fonctionnalisés constitués de nano-composants (de forme quelconque), qu'il s'agisse de la modélisation de propriétés thermiques ou électro-magnétiques, voire le développement de nouvelles classes de matériaux par un contrôle fin et optimisable des propriétés des interfaces matrice/nano-renforts ouvrent de nombreuses perspectives à ce travail.

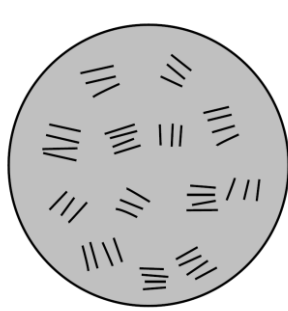


Figure 1 : Schéma de microstructure intercalée d'un polymère renforcé de nano-plaquettes

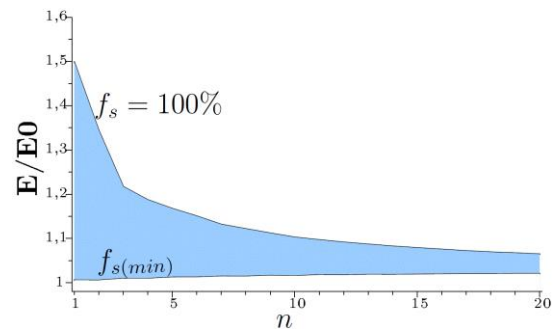


Figure 2 : Evolution de  $E/E_0$  pour un PLA renforcé de nanoplaquettes de MMT en fonction du nombre de plaquettes dans le sandwich ( $n$ ),  $f_s$  étant la fraction volumique de plaquettes dans le sandwich.

- [1] E. Chabert. Propriétés mécaniques de nanocomposites à matrice polymère : approche expérimental et modélisation. Thèse de doctorat, département Génie des Matériaux de l'INSA, Lyon, France, 2002.
- [2] T. Fornes and D. Paul. Modeling properties of nylon 6/clay nanocomposites using composite theories. *Polymer*, vol. 44, 4993-5013, 2003.
- [3] L. Cauvin et al. Mechanical properties of polypropylene layered silicate nanocomposites: Characterization and micro-macro modelling. *Polymer Testing*, vol. 29, 245-250, 2010
- [4] F. Bédoui and L. Cauvin. Elastic properties prediction of nano-clay reinforced polymers using hybrid micromechanical models. *Computational Materials Science*, vol. 65, 309-314, 2012.
- [5] S. Brisard et al. Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, vol. 48, 589–596, 2010.
- [6] S. Brisard et al. Hashin–Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects . *Computational Materials Science*, vol. 50, 403–410, 2010.
- [7] P. Gelineau et al. Elastic properties prediction of nano-clay reinforced polymer using multi-scale modeling based on a multi-scale characterization. *Mechanics of Materials*, vol. 89, 12–22, 2015.
- [8] M. Gurtin and A. Murdoch. A continuum theory of elastic material surfaces. *Arch Ration Mech Anal*, vol. 57, 291-323, 1975.
- [9] H. Le Quang and Q.-C. He. Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces. *Mechanics of materials*, vol. 40, 865-884, 2008.
- [10] Y. Povstenko. Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface tension in solids. *J Mech Phys Solids*, vol. 41, 1499-1514, 1993.
- [11] T. Chen, M.-S. Chiu, and C.-N. Weng. Derivation of the generalized young-laplace equation of curved interfaces in nanoscaled solids. *J Appl Phys*, vol. 100, 074308-1—074308-5, 2006.
- [12] D. Brancherie and A. Ibrahimbegovic. Novel anisotropic continuum-discrete damage model capable of representing localized failure of massive structures. part I : theoretical formulation and numerical implementation. *Engineering Computations*, 26(1-2) :100–127,2009.
- [13] J. Bude. Ductile fracture simulation using the strong discontinuity method Thèse de doctorat, UTC, Mécanique avancée, Compiègne, France, 2015.
- [14] P. Gelineau. Caractérisation morphologique et homogénéisation élastique et visco-élastique de polymères renforcés de nano-plaquettes d'argiles. Thèse de doctorat, UTC, Mécanique avancée, Compiègne, France, 2015.
- [15] P. Gelineau et al. Micromechanical modeling of visco-elastic properties of nano-clay reinforced polymers: case of MMT reinforced PLA. *Composite Structures*, soumis.