

Propriétés macroscopiques de résistance de matériaux nanoporeux : une affaire de taille

Djimedo Kondo^a, Luc Dormieux^b, Vincent Monchiet^c

a. Institut Jean Le Rond d'Alembert, UMR CNRS 7190, Université Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu, F75005 Paris, France

b. Unité de Recherche Navier, UMR 8205 CNRS, 6/8 Avenue B. Pascal, 77 455 Champs/Marne, France

c. Université Paris-Est, Laboratoire MSME, UMR 8208 CNRS, 5 boulevard Descartes, 77 454 Marne la Vallée Cedex, France

Résumé :

On s'intéresse dans cette étude à la résistance macroscopique des milieux nanoporeux ductiles. Pour cela, on rappelle d'abord brièvement le cadre de l'analyse limite appliquée aux matériaux mésoporeux, ainsi que les modèles classiques de type Gurson et ses dérivés qui s'en déduisent par approche cinématique. Une attention particulière est accordée aux effets de forme de cavités. Puis on expose des extensions de ces modèles que nous avons récemment proposées pour des systèmes nanoporeux. A cette fin, l'homogénéisation du milieu est réalisée en considérant des contraintes interfaciales sur le bord des nano cavités, l'interface obéissant à une loi de plasticité surfacique déduite de façon asymptotique et susceptible d'un saut du vecteur contraintes. Le critère macroscopique obtenu, pour le matériau nanoporeux, prédit des caractéristiques inhabituelles telles que (i) une dépendance significative de la résistance macroscopique avec la taille des nano cavités, (ii) un effet combiné de la taille et de la forme et des cavités, particulièrement marqué pour des nano cavités aplaties.

Abstract :

We aim at studying the macroscopic strength of ductile nanoporous media. To this end, we first briefly recall the limit analysis framework applied to mesoporous materials. Attention is paid to the voids shape effects. Then, we present extensions of existing models to nanoporous systems for which the homogenization procedure is achieved by considering interfacial stresses between the solid matrix and nano cavities. The macroscopic criterion obtained for the nanoporous material predicts unusual characteristics such as (i) a significant dependence of the macroscopic strength on the size of the nano cavities, (ii) a combined effect of the voids size and shape which is particularly marked for oblate nano cavities.

Mots clefs : Milieux nanoporeux ; Approche multiéchelle ; Plasticité ; Analyse limite ; Contraintes interfaciales

1 Introduction

Les effets de taille de cavités dans les milieux ductiles ont été mis en évidence expérimentalement puis étudiés numériquement par de nombreux auteurs parmi lesquels on peut mentionner Huang et al. [1]. Ils sont généralement capturés en considérant pour la matrice solide des modèles de plasticité à gradient. Alternativement, des travaux plus récents(cf. par exemple [2], [3]) ont permis d'aborder cette question par le biais d'interfaces imparfaites se situant en bord de cavités. Un des éléments clefs de cette démarche est la considération à l'interface solide-cavité d'une version plastique du modèle

d'élasticité surfacique de Gurtin et Murdoch¹ telle que celle récemment proposée par [4]. C'est dans ce cadre que peut être replacée l'extension du modèle de Gurson rendant explicitement compte de l'influence de la taille des vides a été proposée par Dormieux et Kondo [3].

Dans la prolongation de ces travaux, on se propose dans cette étude de déterminer le critère macroscopique de milieux nanoporeux, en recherchant une modélisation qui rend compte à la fois des effets de taille et de forme des cavités. A cette fin, on reprendra d'abord l'analyse limite du sphéroïde creux introduite par Gologanu et al. [5], en y adjoignant la présence d'interface solide-cavité où les contraintes interfaciales sont décrites dans l'esprit du modèle introduit par [4]. Ceci généralise les résultats établis dans [3] pour le cas particulier de la cavité sphérique. L'investigation des effets combinés de forme et de taille des cavités constituent le principal objectif de l'étude et étendent aussi les travaux de [5].

2 Effets combinés de forme et de taille des nanocavités

2.1 Analyse limite du sphéroïde creux avec contraintes interfaciales

On propose une extension du cadre usuel d'analyse limite du sphéroïde creux, en y incorporant des effets de contraintes interfaciales. La cellule élémentaire, décrite sur la figure 1, est donc constituée d'une matrice obéissant au critère de von Mises et à la règle d'écoulement associée correspondante. Son bord extérieur est soumis à des conditions usuelles de taux de déformation homogène au bord. On note σ_0 la limite d'écoulement en traction uniaxiale de la matrice. Le comportement de l'interface entre la surface de la cavité et la matrice est décrit à l'aide la version plastique du modèle de Gurtin, décrite en [4] et incluant de plus la vérification des équations de Young-Laplace généralisées.

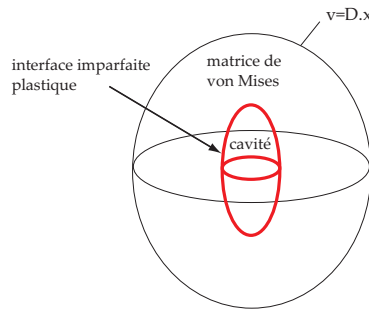


FIGURE 1 – Cellule élémentaire sphéroïdale contenant une cavité sphéroïdale confocale au bord extérieur et une interface imparfaite plastique cohérente

La dissipation macroscopique, donnant le critère du milieu poreux, se présente sous la forme :

$$\Pi(\mathbf{D}) = \inf_{\underline{v} \in \mathcal{K}} \frac{1}{V_2} \left[\int_{\Omega-\omega} \sigma_0 d_{eq} dV + \int_{\Gamma} [\underline{t}]_{\Gamma} \cdot \underline{v} dS \right] \quad (1)$$

Le saut du vecteur contrainte, $[\underline{t}]_{\Gamma}$, à la traversée de l'interface Γ , vérifiant la relation de Young Laplace généralisée, on montre alors que :

$$\Pi(\mathbf{D}) = \Pi_1(\mathbf{D}) + \Pi_2(\mathbf{D}) + \Pi_3(\mathbf{D}) \quad (2)$$

où les quantités $\Pi_1(\mathbf{D})$, $\Pi_2(\mathbf{D})$ et $\Pi_3(\mathbf{D})$ s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Pi_1(\mathbf{D}) = \frac{1}{V_2} \int_{\Omega-\omega} \sigma_0 d_{eq} dV; \quad \Pi_2(\mathbf{D}) = \frac{1}{V_2} \int_{\Gamma} \tau_r \operatorname{tr}(\mathbf{d}_s) dS; \quad \Pi_3(\mathbf{D}) = \frac{1}{V_2} \int_{\Gamma} \tau_0 d_{eq}^s dS \end{array} \right. \quad (3)$$

1. On notera que l'incorporation de ce modèle dans les méthodes d'homogénéisation de milieux nanocomposites introduit généralement la nécessité de prise en compte d'une discontinuité du vecteur contrainte à la traversée de l'interface imparfaite qui doit satisfaire à l'équation de Young Laplace généralisée.

La contribution $\Pi_1(\mathbf{D})$ à la dissipation macroscopique est associée à la déformation plastique de la matrice ; sa détermination, classique maintenant, a été effectué par Gologanu et al. [5] dans le cadre de l'analyse limite des milieux ductiles contenant des cavités sphéroïdales. $\Pi_2(\mathbf{D})$ et $\Pi_3(\mathbf{D})$ sont des contributions de l'interface ; elles ont été considérées par [3] dans le cas d'une cavité sphérique.

2.2 Dissipation macroscopique et critère dérivé pour le matériau nanoporeux

Une estimation de la dissipation macroscopique et de la résistance qui en dérive peut être obtenue en considérant un champ d'essai incompressible et cinématiquement admissible. Compte tenu de la difficulté supplémentaire qui apparait ici en raison de la prise en compte des contraintes interfaciales, on adopte pour la présente analyse un champ de vitesse classique, celui considéré par Gologanu et al. [5]. Il vient que l'expression de la contribution $\Pi_1(\mathbf{D})$ à la dissipation macroscopique est celle déjà établie par ces auteurs (voir également Monchiet et al. [6] sous une forme unifiée valable aussi bien pour des cavités sphéroïdales allongées qu'aplaties). Son expression est :

$$\Pi_1(\mathbf{D}) = \sigma_0 f \left[Y \operatorname{arcsinh} \left\{ \frac{uY}{X} \right\} - \frac{\sqrt{X^2 + u^2 Y^2}}{u} \right]_{u=f/(1+g)}^{u=f/(f+g)} \quad (4)$$

où, f étant la porosité, les quantités X et Y sont définies par :

$$\begin{aligned} X &= [(1 - \zeta)(D_q + (1 - 3\alpha_2)D_m)^2 + D_s^2 + D_t^2]^{1/2}, \\ Y &= \frac{1}{f\kappa} [3 + \eta(1 - 3\alpha_2)] D_m + \frac{\eta}{f\kappa} D_q \end{aligned} \quad (5)$$

et où les paramètres η , ζ , κ et g dépendent des excentricités e_1 et e_2 des sphéroïdes intérieurs et extérieurs, respectivement. α_2 dépend de e_2 (voir [6]). Les quantités D_m , D_q , D_s et D_t sont des invariants isotropes transverses du tenseur taux de déformations macroscopique, définis par :

$$\begin{cases} D_m = \frac{1}{3}(D_{11} + D_{22} + D_{33}); & D_q = \frac{2}{3}D_{33} - \frac{1}{3}(D_{11} + D_{22}) \\ D_s = \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{(D_{22} - D_{11})^2 + 4D_{12}^2}; & D_t = \frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{D_{13}^2 + D_{23}^2} \end{cases} \quad (6)$$

Concernant la contribution $\Pi_2(\mathbf{D})$ à la dissipation macroscopique, on montre en [8] que :

$$\Pi_2(\mathbf{D}) = \frac{\tau_r S_1}{V_1} (g_1 D_m + g_2 D_q) \quad (7)$$

dans lequel on a posé (avec a_1 et b_1 les longueur des 2 axes de la cavité) :

$$S_1 = \begin{cases} \frac{2\pi a_1^2 b_1}{c} \arctan \left\{ \frac{c}{b_1} \right\} + 2\pi b_1^2 & \text{(pour les cavités allongées)} \\ \frac{2\pi a_1^2 b_1}{c} \operatorname{arctanh} \left\{ \frac{c}{b_1} \right\} + 2\pi b_1^2 & \text{(pour les cavités aplaties)} \end{cases} \quad (8)$$

et où les coefficients g_1 et g_2 sont définis par :

$$g_1 = 2 - \frac{1}{2}(1 - 3\gamma)(1 - 3\alpha_1 - f(1 - 3\alpha_2)), \quad g_2 = \frac{f}{2}(1 - 3\gamma) \quad (9)$$

avec le paramètre γ dépendant de la forme de la cavité et s'écrivant : $\gamma = \frac{b_1^2}{a_1^2 - b_1^2} \left(1 - \frac{4\pi b_1^2}{S_1} \right)$. S'agissant de l'expression de $\Pi_3(\mathbf{D})$, on montre également dans [8] qu'elle s'écrit :

$$\Pi_3(\mathbf{D}) = \frac{\tau_0 S_1}{V_1} \sqrt{h_1 D_m^2 + h_2 D_q^2 + 2h_3 D_m D_q + h_4 D_s^2 + h_5 D_t^2} \quad (10)$$

où les coefficients h_n s'écrivent :

$$\begin{cases} h_1 = (3\gamma + 3\mu - 2)U^2 + 2(3\gamma - 1)U + 4; & h_2 = f^2(3\gamma + 3\mu - 2) \\ h_3 = f(2 - 3\gamma - 3\mu)U + f(1 - 3\gamma); & h_4 = f^2(2\gamma + \mu)/2; & h_5 = f^2(5 - 4\mu - 5\gamma)/2 \end{cases} \quad (11)$$

avec $U = 1 - 3\alpha_1 - f(1 - 3\alpha_2)$ et où le paramètre μ est défini par : $\mu = \frac{a_1^2}{a_1^2 - b_1^2} (1 - 3\gamma)$.

On notera que les expressions analytiques des contributions interfaciales $\Pi_2(\mathbf{D})$ et $\Pi_3(\mathbf{D})$ font apparaître le rapport $\frac{\tau_0 S_1}{V_1}$, ce qui introduit de fait des effets de taille des cavités.

De façon classique, le critère macroscopique est obtenu à partir de la dissipation $\Pi(\mathbf{D})$, définie par (2) et où les termes $\Pi_1(\mathbf{D})$, $\Pi_2(\mathbf{D})$ et $\Pi_3(\mathbf{D})$ sont respectivement donnés par (4), (7) et (10). $\Pi(\mathbf{D})$ étant dépendant du taux de déformation \mathbf{D} uniquement à travers les quantités D_m , D_q , D_s et D_t définies par (6), le critère macroscopique est défini par les équations paramétriques suivantes :

$$\begin{cases} \Sigma_m = \frac{1}{3} \frac{\partial \Pi}{\partial D_m}(D_m, D_q, D_s, D_t); & \Sigma_q = \frac{\partial \Pi}{\partial D_q}(D_m, D_q, D_s, D_t) \\ \Sigma_s = \frac{\partial \Pi}{\partial D_s}(D_m, D_q, D_s, D_t); & \Sigma_t = \frac{\partial \Pi}{\partial D_t}(D_m, D_q, D_s, D_t) \end{cases} \quad (12)$$

Le détail de ces expressions peut être trouvé dans la publication récente [8].

3 Cas de nanocavités sphériques

On se propose tout d'abord d'illustrer les effets de taille de cavités sur le critère macroscopique de milieux ductiles contenant des cavités sphériques. Il convient de rappeler que dans le cas des nanocavités sphériques, le critère obtenu est la borne supérieure de la surface de charge macroscopique, proposée par Dormieux et Kondo [3].

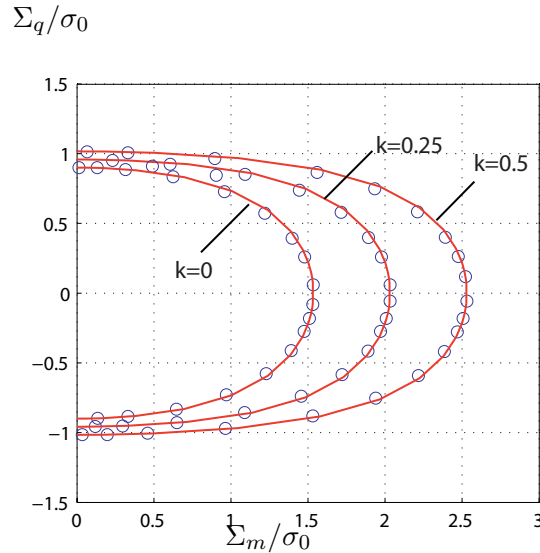


FIGURE 2 – Surface de charge pour des nanocavités sphériques, pour diverses valeurs de $k = \tau_0/(a_1\sigma_0)$ et pour une porosité $f = 0.1$. Comparaison du critère approché (ligne continue) et du critère exact à deux champs, déterminé numériquement (cercles).

Afin d'étudier l'effet de la contrainte interfaciale sur la résistance macroscopique, on a tout d'abord réalisé une calibration de la résistance interfaciale τ_0 sur la base des données de simulations atomistiques de Mi et al. [7] sur un aluminium poreux cristallin.

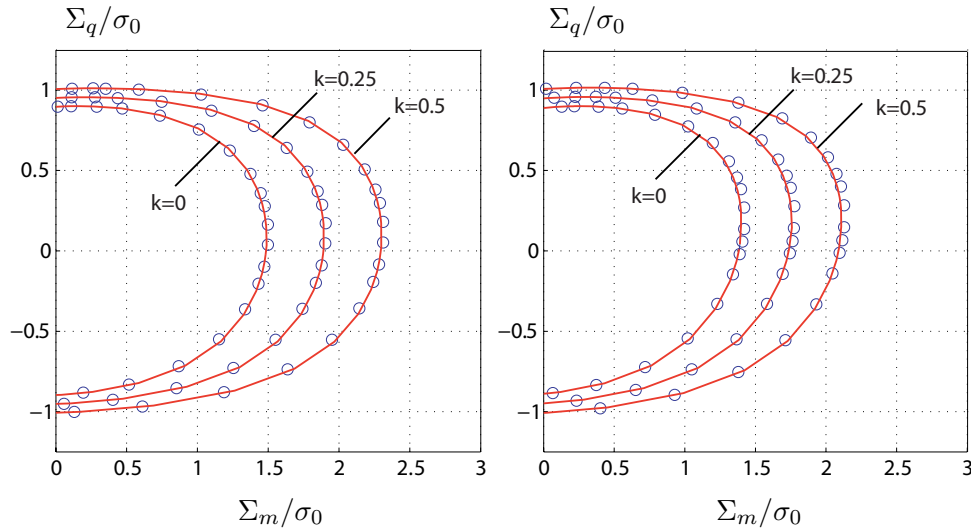


FIGURE 3 – Critère macroscopique pour le cas d’une cavité allongée de rapport d’aspect $a_1/b_1 = 2$ (à gauche) et $a_1/b_1 = 5$ (à droite). La porosité vaut $f = 0.1$.

Sur la figure 2 est illustrée l’effet de la taille des cavités sphériques pour un chargement arbitraire paramétré par Σ_m et Σ_q , la surface de charge macroscopique étant donnée par (12). Deux valeurs du paramètre adimensionnel $k = \tau_0/(a_1\sigma_0)$ ont été considérées ($k = 0.25$ et $k = 0.5$), tandis qu’une porosité $f = 0.1$ est retenue. Les valeurs $\tau_0 = 0.54N/m$ et $\sigma_0 = 0.59GPa$ étant celles issues de la calibration précédente, les cas $k = 0.25$ et $k = 0.5$ correspondent à un rayon d’environ $1.8nm$ et $3.7nm$, respectivement. Les résultats montrent un important effet de k , et par conséquent de la taille des nano cavités. On notera également sur cette figure un très bon accord entre le critère approché proposé (trait continu) et les résultats déterminés à l’aide d’une évaluation numérique (cercles) de la dissipation macroscopique (2).

4 Effets combinés de forme et de taille de nanocavités : illustrations

On se propose à présent d’illustrer les effets de taille de cavités sur le critère macroscopique de milieu ductiles contenant des cavités sphéroïdales. On adopte à cette fin un chargement macroscopique axisymétrique, défini par les composantes non nulles du tenseur des contraintes macroscopiques suivantes : $\Sigma_{22} = \Sigma_{11}$ et Σ_{33} . Les invariants isotropes transverses non nuls de ce tenseur Σ étant alors Σ_m et Σ_q , le critère macroscopique est déterminé par les deux premières équations dans (12).

Sur la figure 3, est représentée la surface de plasticité macroscopique pour le cas des cavités allongées. Deux rapports d’aspect ont été considérés : $a_1/b_1 = 2$ (résultats à droite) et $a_1/b_1 = 5$ (à gauche). La porosité est toujours prise égale à $f = 0.1$ et trois valeurs distinctes du paramètre $k = \tau_0/(b_1\sigma_0)$ ont été considérées, ce qui met clairement en évidence les effets de taille de cavités, sachant que $k = 0$ correspond au modèle classique (sans effet de taille) de Gologanu et al. [5]. Le critère paramétrique établi dans cette étude étant approché, en raison d’un certain nombre d’approximations requises pour mener à terme les calculs pour le champ d’essai considéré, il convient de le comparer au critère ”exact” obtenu par évaluation numérique des intégrales introduites en (3). On observe une bonne concordance entre les résultats numériques (cercles) et le critère approché, et ce pour les trois valeurs du paramètre adimensionnel k . Les résultats concernant des cavités aplaties sont présentées sur les figures 4 (à droite, pour un rapport d’aspect $a_1/b_1 = 1/2$, et à gauche pour $a_1/b_1 = 1/5$). On note une légère différence entre le critère approché (en ligne continue) et les résultats numériques (cercles) seulement dans le cas des cavités de rapport d’aspect $a_1/b_1 = 1/5$. En résumé, ces résultats montrent clairement des effets de taille nettement plus marqués pour des cavités aplaties que pour les cavités allongées. Cet effet combiné, tel qu’il est observé, s’explique par le fait qu’à porosité fixée, l’aire des surfaces des nanocavités par unité de volume est plus important dans le cas des cavités aplaties.

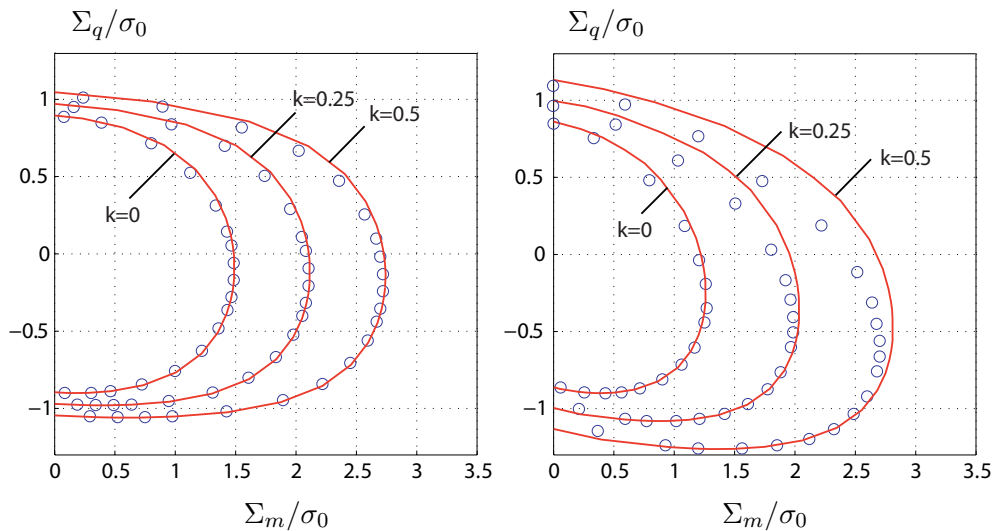


FIGURE 4 – Critère macroscopique pour la cavité aplatie de rapport d'aspect $a_1/b_1 = 1/2$ (à gauche) et $a_1/b_1 = 1/5$ (à droite). La porosité vaut $f = 0.1$.

5 Conclusion

Nous avons proposé une approche par analyse limite de la résistance macroscopique de milieux nanoporeux, avec comme objectif principal de rendre compte des effets combinés de forme et de taille des cavités. Ces effets ont pu être capturés en considérant un modèle d'interface imparfaite solide-cavité généralisant celui de Gurtin et Murdoch au contexte de la plasticité parfaite. Les résultats obtenus montrent un effet significatif de la taille des cavités sur la résistance macroscopique. En particulier, une diminution de la taille des cavités se traduit à l'échelle macroscopique par une augmentation du domaine de résistance. De façon tout à fait originale, des effets simultanés de taille et de forme de cavités ont été mis en évidence et quantifiés. Des validations larges sont en cours, sur la base de simulations atomistiques.

Références

- [1] Huang, M., Li.Z., Wang, C. 2005. Size effects on stress concentration induced by a prolate ellipsoidal particle and void nucleation mechanism. *International Journal of Plasticity*. **21** 1568-1590
- [2] W. Zhang, T.J. Wang, X. Chen. Effect of surface/interface stress on the plastic deformation of nanoporous materials and nanocomposites. *International Journal of Plasticity*, 26(7), 957-975, 2010.
- [3] Dormieux, L., Kondo, D. 2010. An extension of gurson model incorporating stresses effects. *Int. J. Eng. Science* **48** 575-580.
- [4] Monchiet, V., Bonnet, G. 2010. Interfacial models in viscoplastic composites materials. *Int. J. Eng. Science* **48** 1762-1768.
- [5] Gologanu, M., Leblond, J.B., Perrin, G., Devaux, J. 1997. Recent extensions of Gurson's model for porous ductile metals. *Continuum Micromechanics. ed. P. Suquet, Springer Verlag*
- [6] Monchiet, V., Cazacu, O., Charkaluk, E., Kondo, D. 2008. Approximate criteria for anisotropic metals containing non spherical voids. *International Journal of Plasticity*. **24** 1158-1189
- [7] Mi, C., Buttry, D.A., Sharma, Kouris. 2011. Atomistic insights into dislocation-based mechanisms of void growth and coalescence. *JJournal of the Mech. and Phys. of Solids* **59** 1858-1871.
- [8] Monchiet, V., Kondo, D. 2013. Combined voids size and shape effects on the macroscopic criterion of ductile nanoporous materials. *International Journal of Plasticity*. **43** 20-41