

# Simulation du comportement de la silice sous indentation Vickers par la méthode des éléments discrets: densification et mécanismes de fissuration.

Mohamed JEBAHI<sup>a</sup>, Damien ANDRÉ<sup>b</sup>, Frédéric DAU<sup>b</sup>, Jean-luc CHARLES<sup>b</sup>, Ivan IORDANOFF<sup>b</sup>

a. Univ. Bordeaux, I2M, UMR 5295, F-33400 Talence, France

b. Arts et Metiers ParisTech, I2M, UMR 5295 CNRS F-33400, Talence, France

## Résumé :

*Le comportement mécanique des verres sous indentation microscopique est classiquement répertorié en trois classes : normal, anormal ou intermédiaire selon les mécanismes de déformation et de fissuration. Particulièrement, la silice est un verre typique de la classe dite anormale. Une fois indenté par un indenteur de type Vickers, ce type de verre subit dans un premier temps une forte densification se traduisant par une diminution locale du volume pouvant atteindre 17.4% dans la zone indentée. Ensuite, une fissure conique peut se développer autour de l'empreinte d'indentation avant que d'autres fissures radiales, médianes et latérales apparaissent. Ce travail concerne la mise en oeuvre numérique par la méthode des éléments discrets de ce phénomène de densification. Un nouveau modèle spécifique de densification adapté à la méthode des éléments discrets a été développé. Après calibration et validation de ce modèle à l'échelle macroscopique, des simulations d'indentation microscopique avec un indenteur de type Vickers ont été réalisées. Confrontés à des résultats expérimentaux, les résultats numériques obtenus permettent une bonne estimation quantitative de l'état de densification et des mécanismes de fissuration.*

## Abstract :

*The indentation response of glasses can be classified into three classes : normal, anomalous and intermediate depending on the deformation mechanism and the cracking response. Silica glass, as a typical anomalous glass, deforms primarily by densification and has a strong tendency to form cone cracks that can accompany median, radial and lateral cracks when indented with a Vickers tip. This is due to its propensity to deform elastically by resisting plastic flow. Several investigations of this anomalous behavior can be found in the literature. The present paper serves to corroborate these results numerically using the discrete element method. A new pressure-densification model involving the discrete element method (DEM) is developed that allows for a quantitative estimate of the densification under very high pressure. This model is then used to simulate the Vickers indentation response of silica glass under various indentation forces. The numerical results obtained compare favorably with past experimental results.*

**Mots clefs :** silice; densification; rupture

## 1 Introduction

A cause des excellentes propriétés physiques du verre (mécaniques, thermiques et optiques), ce type des matériaux a attiré plusieurs chercheurs scientifiques. Un intérêt particulier est accordé au verre de silice qui appartient à la classe dite anormale. Ce matériau présente un comportement irréversible sous hautes pressions. En plus, ses propriétés mécaniques présentent une forte dépendance à ce comportement. Pour des pressions relativement faibles, le verre de silice se comporte d'une manière parfaitement



FIGURE 1 – Modèle élastique

élastique. Au delà de la limite élastique ( $\approx 8 \text{ GPa}$ ), il subit une déformation permanente connue sous le nom “densification”. La déformation permanente du verre de silice est très différente de la plasticité des métaux. En effet, la densification de la silice peut avoir lieu sous pression hydrostatique. Cependant, ce type de chargement n’a aucun effet sur la plasticité des métaux, définie comme le glissement des dislocations dans la structure cristalline. Une fois indenté par un indenteur de type Vickers, ce type de verre présente un mécanisme de fissuration plus complexe que dans d’autres types des verres (dont on cite le verre de silicate sodo-calcique). En effet, Il est caractérisé par l’apparition d’une fissure conique autour de l’empreinte d’indentation avant que d’autres fissures (médiannes, radiales et latérales) n’apparaissent. Ceci revient à la forte tendance de ce matériau à se densifier pour former une zone de densification sphérique au dessous de l’indenteur. Cette zone joue, ensuite, le rôle d’un indenteur sphérique qui résulte classiquement des fissures de forme conique. Plusieurs travaux scientifiques sur ce comportement anormal de la silice peuvent être trouvés dans la littérature [7, 1, 2, 12]. S’ils sont, pratiquement, tous en accord sur l’effet de la pression hydrostatique sur ce comportement, leurs analyses vis à vis l’effet du cisaillement sont souvent contradictoires. En effet, certains chercheurs [13] considèrent que cisaillement est sans effet sur la densification, d’autres [6] établissent qu’il est un facteur majeur de ce comportement. Ce travail a pour but de renforcer ces travaux via la voie numérique. Posant une hypothèse favorisant la première attitude (effet de cisaillement est négligeable), un modèle de densification a été développé. Après calibration et validation de ce modèle, il sera utilisé pour simuler le comportement de la silice indenté par un indenteur de type Vickers. La comparaison des résultats numériques avec des résultats expérimentaux nous permettra de tirer des conclusions sur la validité de l’hypothèse de départ.

## 2 Modélisation du comportement de la silice

### 2.1 Élasticité

La version de la DEM utilisée dans ce travail est celle développée par André *et al.*[3] et implémentée dans le workbench GranOO<sup>1</sup>. Les éléments discrets sont liés par des liens cohésifs (poutres cylindriques) ayant des caractéristiques géométriques (longueur  $l_\mu$  et rayon dimensionnel  $\tilde{r}_\mu$ , défini par le rapport entre le rayon de la poutre et le rayon moyen des particules DEM) et des caractéristiques mécaniques (module de Young  $E_\mu$  et coefficient de Poisson  $\nu_\mu$ ) (Fig. 1). Les différents paramètres définissant le comportement élastique microscopique sont déterminés par calibration [3] (Tab. 1).

### 2.2 Densification

Une fois soumise à des grands chargements, la silice peut subir une déformation irréversible (densification). Pratiquement, tous les travaux sur ce sujet s’accordent que la densification peut avoir lieu sous hautes pressions. Néanmoins, l’effet du cisaillement sur ce comportement représente un enjeu majeur pour la compréhension du comportement de la silice. Ce travail vient renforcer les investigations du comportement de la silice par la voie numérique. Dans un premier temps, on a supposé que seule la partie sphérique du tenseur de contraintes peut causer la densification de la silice et aucun effet de la partie déviatorique n’est pris en compte. En se basant sur cette hypothèse, un nouveau modèle de densification mettant en jeu la méthode des éléments discrets est développé. Le comportement non linéaire de densification est géré par des systèmes “ressort-patin” connectés en série aux poutres reliant les particules DEM (Fig. 2). Lorsque la contrainte de compression  $\sigma_{beam}^c$  atteint la contrainte microscopique de densification  $\sigma_\mu^d$ , le “patin” s’active et le comportement de densification débute. Le

1. <http://www.granoo.org>

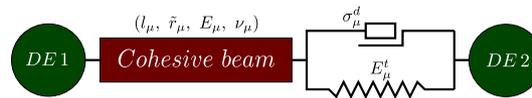


FIGURE 2 – Modèle de densification

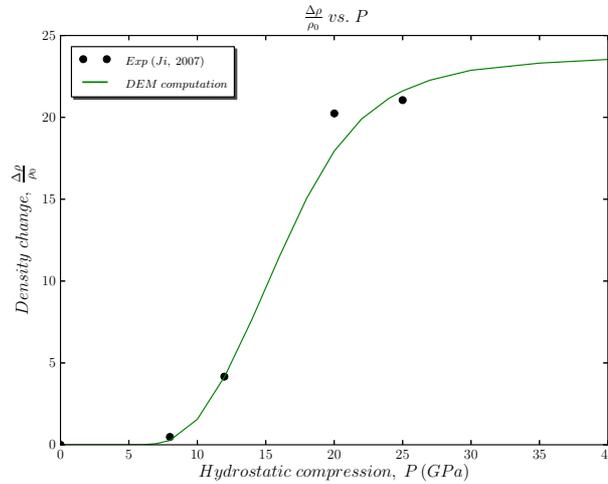


FIGURE 3 – Variation de la densité de la silice avec la pression : comparaison des résultats numériques avec des résultats expérimentaux [1, 2]

niveau de densification au delà de  $\sigma_\mu^d$  est contrôlé par un module tangentiel  $E_\mu^t$  réglable. Finalement, pour modéliser le domaine de saturation, le patin s’arrête de glisser au delà d’une limite contrôlée par la déformation axiale maximale des joints cohésifs  $\varepsilon_\mu^{pmax}$ . Les différents paramètres de densification sont déterminés par calibration (Tab. 1). La figure 3 présente la courbe de densification comparée à des résultats expérimentaux [1, 2]. Une étude complète de ce modèle peut être trouvée dans l’article [9].

## 2.3 Rupture

Les approches les plus utilisées pour modéliser la fissuration par les méthodes des éléments discrets sont basées sur le calcul des déformations ou des contraintes équivalentes dans les joints cohésifs. Lorsque ces quantités dépassent une certaine limite dans un joint, on le détruit. Dans ce travail, un nouveau critère basé sur la notion du tenseur “viriel” [14] calculé sur chaque particule est utilisé [5]. Puisque la fissuration des matériaux fragiles (tels que la silice) s’initie sous contrainte de traction [11], ce critère postule que lorsque la pression hydrostatique d’une particule dépasse une certaine limite (déterminée par calibration (Tab. 1)), elle se détache de toutes ses voisines (Fig. 4).

Élasticité			Densification			Rupture
$E_\mu$	$\tilde{r}_\mu$	$\nu_\mu$	$\sigma_\mu^d$	$E_\mu^t$	$\varepsilon_\mu^{pmax}$	$\sigma_\mu^f$
414 GPa	0.57	0.3	7.13 GPa	98.82 GPa	0.067	67 MPa

TABLE 1 – Paramétrage du modèle DEM

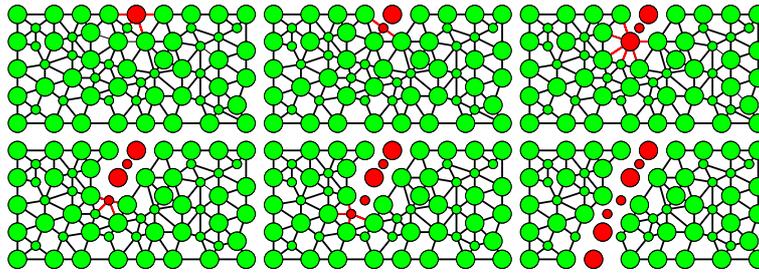


FIGURE 4 – Modèle de fissuration

		$V^- (\mu m^3)$	$V^+ (\mu m^3)$	$D (\mu m)$	$L (\mu m)$
$F_{indent} = 100 mN$	Numerical (DEM)	1.304	0.136	0.159	4.758
	Numerical (CNEM-DEM)	1.302	0.131	0.159	4.758
	Exp [1]	0.727	0.108	0.377	4.707
	Exp [15]	1.034	0.018	0.421	5.157
$F_{indent} = 500 mN$	Numérique (DEM)	14.534	1.174	0.397	9.318
	Exp [1]	9.971	1.138	0.908	10.371
/	Erreur expérimentale	$\pm 4\%$	$\pm 7\%$	$\pm 6\%$	$\pm 2\%$

TABLE 2 – Résultats d'indentation : cas de faibles forces d'indentation

$V^-$  et  $V^+$  sont, respectivement, le volume de l'empreinte d'indentation et le volume des bourrelets autour de l'indenteur,  $D$  est la profondeur d'indentation et  $L$  est la diagonale de empreinte d'indentation.

### 3 Simulation de l'indentation Vickers de la silice par la méthode des éléments discrets

Comme on l'a déjà vu ci-dessus, le verre de silice subit une déformation permanente sous hautes pressions. Des niveaux de contraintes comparables peuvent être atteints sous un indenteur vif (tel que l'indenteur de Vickers). Dans cette section, on va reproduire numériquement l'essai d'indentation de la silice par un indenteur de type Vickers en utilisant différentes forces d'indentation. Des faibles forces d'indentation sont utilisées pour investiguer les mécanismes de densification à l'échelle microscopique. Dans le but de réduire le temps de calcul, la méthode DEM (assez coûteuse en terme CPU) est utilisée seulement dans une zone étroite au dessous de l'indenteur. Le reste du domaine étudié est modélisé par la méthode des éléments naturels contraints (CNEM)[16] qui est une méthode continue sans maillage. Ces deux méthodes sont couplées par la technique d'Arlequin [8, 10]. Le tableau 2 présente les résultats des simulations dans le cas des faibles forces d'indentation. Comme on peut le remarquer, les résultats numériques obtenus sont en accord avec ceux expérimentaux [1]. La figure 5 montre l'empreinte d'indentation dans le cas des faibles forces. Les résultats numériques obtenus nous ont permis de conclure que l'hypothèse de départ est valide. Ainsi, l'effet de cisaillement peut être négligé dans la densification de la silice. Dans le but d'étudier l'effet de densification sur la fissuration, on a augmenté la force d'indentation à 30 N. Comme on peut le voir dans la figure 6, une fissuration conique est formée avant que d'autres types des fissures, conduisant à la destruction complète de l'échantillon numérique, n'apparaissent.

### 4 Conclusions

Dans ce travail, on a essayé d'investiguer numériquement le comportement anormal du verre de silice. Partant d'une hypothèse que la densification ne peut avoir lieu que sous pression hydrostatique (l'effet de cisaillement sur ce phénomène est négligé), un modèle de densification impliquant la méthode DEM est développé. Ce modèle a été utilisé pour étudier le comportement de la silice indenté par un indenteur de type Vickers. La comparaison des résultats numériques obtenus avec des résultats

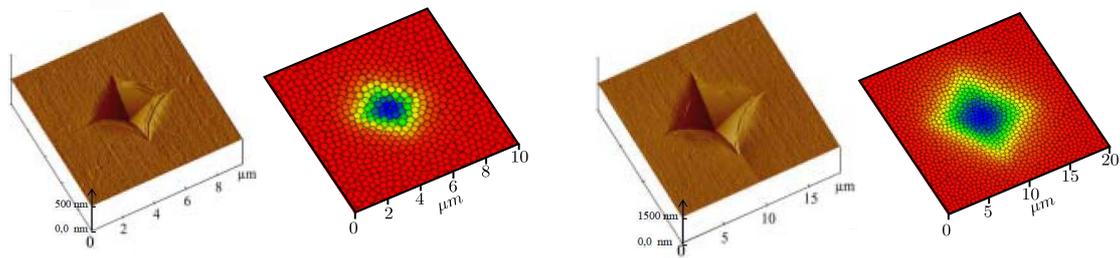


FIGURE 5 – Comparaison des états de densification avec les résultats expérimentaux [1]; gauche :  $F_{indent} = 100\text{ mN}$ , droite :  $F_{indent} = 500\text{ mN}$ .

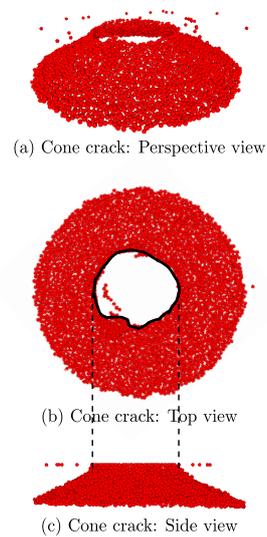


FIGURE 6 – Facturation de la silice sous un indenteur de type Vickers (début de fissuration)

expérimentaux nous a permis de conclure que l'hypothèse de départ est valide. Dans un second temps, on a étudié l'effet de la densification sur les mécanismes de fissuration en utilisant de grandes forces d'indentation. Pour ce faire, un nouveau critère de rupture basé sur la notion du tenseur viriel est utilisé. Les résultats numériques obtenus sont cohérents avec la littérature.

## Références

- [1] H. Ji, Mécanique et physique de l'indentation du verre , Ph.D. thesis, Université de Rennes 1 (2007).
- [2] H. Ji, V. Keryvin, T. Rouxel, T. Hammouda, Densification of window glass under very high pressure and its relevance to Vickers indentation, *Scripta Materialia* 55 (2006) 1159–1162.
- [3] D. André, I. Iordanoff, J. Charles, J. Néauport, Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 213-216 (2012) 113–125.
- [4] D. André, Modélisation par éléments discrets des phases d'ébauchage et de doucissage de la silice, Ph.D. thesis, Université Bordeaux 1 (2012).
- [5] D. André, M. Jebahi, I. Iordanoff, J. L. Charles, J. Néauport, Discrete element method to simulate brittle fracture. Application on silica glass indentation fracture with blunt indenter, Submitted.
- [6] C. WEIR, S. SPINNER, Comments on “Effects of Ultrahigh Pressures on Glass”, *Journal of the American Ceramic Society* 45 (4) (1962) 196.
- [7] P. Bridgman, I. Šimon, Effects of Very High Pressures on Glass, *Journal of applied physics* 24 (405).
- [8] M. Jebahi, J. Charles, F. Dau, L. Illoul, I. Iordanoff, 3D coupling approach between discrete and continuum models for dynamic simulations (DEM-CNEM), *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 255 (2013) 196–209. doi :10.1016/j.cma.2012.11.021.
- [9] M. Jebahi, D. André, F. Dau, J. L. Charles, I. Iordanoff, Simulation of densification and cracking behavior of silica glass indented with Vickers tip by the discrete element method., submitted
- [10] M. Jebahi, J. L. Charles, F. Dau, L. Illoul, and I. Iordanoff. On the H1 discrete - Continuum coupling based on the Arlequin method (DEM-CNEM). In 6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, pages 7685–7697, September 2012
- [11] A. Griffith, The Phenomena of Rupture and Flow in Solids, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A* 221 (1921) 163–198.
- [12] T. Rouxel, H. Ji, T. Hammouda, A. Moréac, Poisson's Ratio and the Densification of Glass under High Pressure, *Physical Review letters*.
- [13] H. Cohen, R. Roy, Reply to “Comments on ‘Effects of Ultrahigh Pressures on Glass’”, *Journal of the American Ceramic Society* 45 (8) (1962) 398–399.
- [14] M. Zhou, A new look at the atomic level virial stress : on continuum-molecular system equivalence, *Proceedings of the Royal Society A* 459 (2003) 2347–2392.
- [15] S. Yoshida, J. Sangleboeuf, T. Rouxel, Quantitative evaluation of indentation-induced densification in glass, *Journal of Materials Research* 20 (12).
- [16] F. Chinesta, E. Cueto, S. Cescotto, and P. Lorong. Natural element method for the simulation of structures and processes. ISTE Ltd / John Wiley&Sons, 2011.