HAL open science

Modélisation micromécanique non-linéaire du comportement d'une classe de nanocomposite à renforts plaquettaires

Ludovic Cauvin, Djimédo Kondo, Mathias Brieu, Naresh Bathnagar

▶ **To cite this version:**

Ludovic Cauvin, Djimédo Kondo, Mathias Brieu, Naresh Bathnagar. Modélisation micromécanique non-linéaire du comportement d'une classe de nanocomposite à renforts plaquettaires. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. pp.Clé USB. hal-00592818

HAL Id: hal-00592818

https://hal.science/hal-00592818

Submitted on 3 May 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CSMA 2011
10e Colloque National en Calcul des Structures
9-13 Mai 2011, Presqu'île de Giens (Var)

Modélisation micromécanique non-linéaire du comportement d'une classe de nanocomposites à renforts plaquettaires.

L. Cauvin[1], D. Kondo[2], M. Brieu[3], N. Bathnagar[4]

[1] *Laboratoire Roberval UMR-CNRS 6253,UTC, Compiègne, France, Ludovic.Cauvin@utc.fr*
[2] *Institut Jean Le Rond d'Alembert, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France, djimedo.kondo@upmc.fr*
[3] *Laboratoire de Mécanique de Lille-UMR CNRS, U.S.T.L.,Lille, France, mathias.brieu@ec-lille.fr*
[4] *Mech. Eng. Dpt., Indian Institute of Technology, HausKhaz, New Delhi, India, nareshb@mech.iitd.ac.in*

Résumé — Dans cette étude, nous présentons d'abord brièvement les résultats d'essais de traction uniaxiale à rupture menés sur un polypropylene renforcé par des nanoplaquettes d'argiles de Montmorillonite, ces essais montrant une augmentation significative des propriétés mécaniques du matériau par rapport à la matrice. La mise en oeuvre, dans le régime élastique d'une borne de type Voigt avec prise en compte d'un effet de taille des renforts et dans le domaine non-linéaire d'une adaptation de la méthode incrémentale de Hill [1], a fourni des résultats en accord avec les données expérimentales.
Mots clés — nanocomposite, homogénéisation, élasticité, non-linéaire, effet de taille.

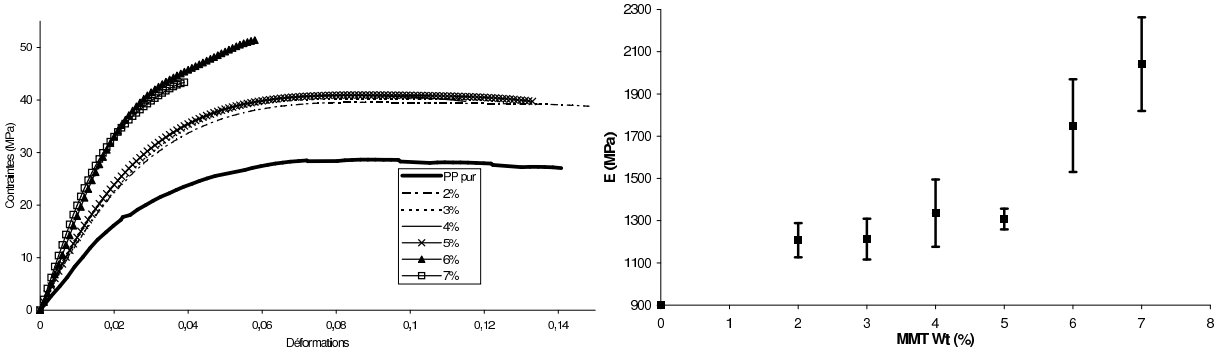
1 Introduction

L'obtention de niveaux remarquables de propriétés mécaniques pour des taux de renforts très faibles (inférieurs à 5%) font des nanocomposites une nouvelle classe de matériaux à fort potentiel. L'impact réel des nanoplaquettes sur les propriétés mécaniques effectives du nanocomposite reste néanmoins encore mal connu et peu maîtrisé. L'objet principal de la présente étude concerne le comportement mécanique de nanocomposites à renforts plaquettaires et notamment l'influence de la morphologie nanostructurale sur leurs propriétés macroscopiques. Les résultats d'essais de traction uniaxiale à rupture sur le nanocomposite à différents taux de renforts, matrice polypropylène (PP) renforcée par des nanoplaquettes d'argile de Montmorillonite (MMT), sont suivis d'une estimation de ses propriétés élastiques par des techniques d'homogénéisation prenant en compte un effet de taille des nanoplaquetets, la modélisation du comportement non linéaire étant faite à l'aide d'une adaptation de la méthode incrémentale de Hill [1] couplée au schéma d'homogénéisation proposé par Ponte Castañeda et Willis [2]. Ces différentes modélisations permettent de prendre en compte simultanément la géométrie des renforts et la distribution spatiale de ceux-ci au sein de la matrice polymérique. La confrontation des simulations numériques aux données expérimentales permet d'évaluer leur pertinence.

2 Caractérisation expérimentale du nanocomposite à renforts plaquettaires

Les matériaux étudiés sont des nanocomposites, fournis dans le cadre d'une collaboration avec l'Indian Institute of Technology (IIT) de Delhi (Inde), et constitués d'une matrice polypropylène (PP) REPOL H020EG (Reliance) renforcée par des plaquettes d'argile de Montmorillonite (MMT) CRYSNANO 1010 (Southern Clay). La taille des nanoplaquettes de MMT a été mesurée à l'aide d'un analyseur de taille de nanoparticule Brookhaven 90Plus à l'IIT. Les particules de formes ellipsoïdales ont un diamètre principal de 209nm, un diamètre médian de 189nm et une épaisseur de 50nm. La diffraction par rayons x a permis de mettre en évidence que les nanocomposites obtenus ont une structure dite partiellement intercalée/partiellement exfoliée (voir [3]). Des essais de traction uniaxiale jusqu'à rupture ont été réalisés sur une machine conventionnelle (INSTRON 4302) équipée d'une cellule de charge de faible capacité (1kN) et compatible avec les efforts mis en jeu. La vitesse de déformation retenue pour l'ensemble de l'étude étant de $10^{-3}/s$, le caractère quasi-statique des sollicitations était assuré. Les déformations subies par le matériau étant à priori grandes, elles ont été mesurées par extensiomètrie (Apollor).

Les matériaux testés sont des polypropylènes renforcés par 2%, 3%, 4%, 5%, 6% et 7% de fraction massique de plaquettes d'argile. La caractérisation expérimentale de ces matériaux a déjà fait l'objet de publications ([3], [4]). La figure 1 (a) montre les courbes de réponse à la sollicitation de traction uniaxiale de ce matériau.On note à travers ces données expérimentales un effet renforçant assez significatif des plaquettes pour de faibles taux de renforts (7% de fraction massique de renforts correspond environ à 3% de fraction volumique). Le matériau, qu'il soit renforcé par 2%, 3%, 4% et 5% de fraction massique de nanoplaquettes, a un palier plastique sensiblement constant et environ 1,33 fois plus élevé que pour la matrice. Avec 6% et 7% de MMT ce palier est plus de deux fois supérieure à celui de la matrice mais le comportement est davantage fragile (nette diminution de la déformation à rupture). Si on ne s'interesse qu'au régime élastique (figure 1 (b)), on note une croissance nette du module de Young avec l'augmentation de la fraction massique de renforts par rapport à la matrice seule (E = 900MPa, $\nu = 0.4$).



(a) (a) (b) (b)

FIGURE 1 – Réponse en traction uniaxiale du nanocomposite PP-MMT pour différentes fractions massiques de MMT : (a) essai à rupture, (b) module de Young avec écarts types.

3 Modélisation micromécanique et confrontation aux données expérimentales

3.1 Régime élastique

Comme nous l'avons montré dans [3] et [4], les approches par champs moyens peuvent prédire le comportement élastique de nanocomposites à renforts plaquettaires, sous réserve de bien connaître la microstructure du matériau. Il est toutefois bien connu que les modèles classiques d'élasticité prenant en compte des inclusions inhomogènes (approche d'Eshelby) ne prédisent pas d'effets dus à la taille de celles-ci. Cependant à l'échelle nanoscopique les effets de taille, dus à la très grande surface de contact entre matrice et inclusions dans le cas de nano renforts, deviennent non négligeables. Il est généralement considéré (voir [5]) que pour des renforts sphériques d'un diamètre inférieur à 100nm, le rapport entre la surface et le volume de renforts peut être significativement important. Les propriétés élastiques effectives ne peuvent plus alors être déterminées uniquement à partir de l'énergie de déformation élastique. Le rapport entre la surface et le volume de renforts devenant très élevé, alors que les fractions volumiques de nano renforts restent généralement faibles, les énergies élastiques de déformation risquent d'être comparables à celles mises en jeu par les effets de surface. Les propriétés locales et macroscopiques du nanocomposite peuvent donc être différentes de celles obtenues sans effet de surface. Lequang et He [6] ont développé la formulation d'une borne de type Voigt [7], en y incluant ces effets de surface. Pour prendre en compte un effet de taille des nano renforts, en plus des équations classiques d'élastostatique, il est nécessaire de préciser les équations régissant l'interface matrice/inclusions ∂V. De l'analyse de l'équilibre mécanique d'une interface entre deux corps, Povstenko [8] et Chen et al. [9] ont fourni une généralisation des équations de Young-Laplace pour les solides :

$$[\![\underline{\underline{\sigma}}]\!].\underline{n} + (\underline{\underline{\sigma}}^s : \underline{\underline{\kappa}}).\underline{n} + \nabla^s.\underline{\underline{\sigma}}^s = 0 \tag{1}$$

On précise que $\nabla^s.\underline{\underline{\sigma}}^s$ est la divergence surfacique de $\underline{\underline{\sigma}}^s$ sur la surface ∂V, $\underline{\underline{\kappa}}$ le tenseur de courbure et $[\![\underline{\underline{\sigma}}]\!]$ représente la discontinuité de contraintes à l'interface ∂V. La divergence surfacique s'écrit par définition :

$$\nabla^s.\underline{\underline{\sigma}}^s = \nabla\underline{\underline{\sigma}}^s : \underline{\underline{P}} \tag{2}$$

Notons également que (1) est en accord avec les équations introduites par Gurtin et Murdoch [10].
On se réfère aux travaux de Bottomley et Ogino [11] et Duan et al [12] pour lier le tenseur de contrainte surfacique $\underline{\underline{\sigma}}^s$ et le tenseur de déformation surfacique $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$:

$$\underline{\underline{\sigma}}^s = \mathbb{C}^s : \underline{\underline{\varepsilon}}^s = 2\mu_s\underline{\underline{\varepsilon}}^s + \lambda_s(tr\underline{\underline{\varepsilon}}^s)\underline{\underline{1}} \tag{3}$$

où $\mathbb{C}^s$ est un tenseur de rigidité surfacique et μ_s et λ_s les modules surfaciques (en N/m).
En posant :

$$\mathbb{T} = \underline{\underline{P}}\overline{\otimes}\underline{\underline{P}} \tag{4}$$

$\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{1}} - \underline{n}\otimes\underline{n}$ étant l'identité tangentielle pour une surface de normale $\underline{n}$, les déformations surfaciques $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$ à l'interface s'écrivent :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^s = \mathbb{T} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{(i)} = \mathbb{T} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{(0)} \tag{5}$$

$\underline{\underline{\varepsilon}}^{(i)}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^{(0)}$ sont les tenseurs de déformations dans l'inclusion et dans la matrice.
Compte tenu de nombreuses difficultés dans le cas de renforts sphéroïdaux, les travaux de Lequang et He [6] se limitent au cas d'inclusions sphériques ou cylindriques. Nous proposons donc d'étendre le domaine d'application de leurs développements au cas des nanocomposites à renforts sphéroïdaux.
S'appuyant sur l'équation généralisée de Young-Laplace (1), Lequang et He [6] ont établi l'expression de l'énergie potentielle $U(\underline{\widetilde{u}})$ associée au champ de déplacement cinématiquement admissible $\widetilde{u}$:

$$U(\underline{\widetilde{u}}) = \frac{1}{2}\int_\Omega \widetilde{\varepsilon} : \mathbb{C} : \widetilde{\varepsilon} dV + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p}\int_{\partial V} \widetilde{\varepsilon}^s : \mathbb{C}^s : \widetilde{\varepsilon}^s dS \geq \frac{1}{2} vol(\Omega)\varepsilon_0 : \mathbb{C} : \varepsilon_0 \tag{6}$$

Ce qui permet d'aboutir à une relation du type "borne de Voigt" :

$$\varepsilon_0 : [\overline{\mathbb{C}} + \mathbb{Q}] : \varepsilon_0 \geq \varepsilon_0 : \mathbb{C}^{hom} : \varepsilon_0 \tag{7}$$

où les tenseurs d'ordre quatre $\overline{\mathbb{C}}$ et $\mathbb{Q}$ sont définis par :

$$\overline{\mathbb{C}} = f_{(0)}\mathbb{C}_{(0)} + \sum_{i=1}^{p} f_{(i)}\mathbb{C}_{(i)} \tag{8}$$

$$\mathbb{Q} = \frac{1}{vol(\Omega)}\sum_{i=1}^{p}\int_{\partial V} \mathbb{T} : \mathbb{C}^s : \mathbb{T} dS \tag{9}$$

$$\mathbb{C}^s = K_s\underline{\underline{P}}\otimes\underline{\underline{P}} + 2\mu_s(\mathbb{T} - \frac{1}{2}\underline{\underline{P}}\otimes\underline{\underline{P}}) \tag{10}$$

Il est évident que lorsqu'aucun effet d'interface n'est pris en compte ($\mathbb{C}^s = 0$), $\mathbb{Q}$ vaut 0, (7) conduit alors à la borne classique de Voigt.
A la différence du terme $\overline{\mathbb{C}}$ qui ne fait pas intervenir la forme des inclusions considérées, le terme $\mathbb{Q}$, correspondant à la contribution de l'interface, en dépend et a été déterminé par Lequang et He [6] pour des inclusions sphériques et cylindriques.
De manière à estimer cette nouvelle borne de Voigt dans le cas des inclusions sphéroïdales (requises pour les nano plaquettes), nous considérons une inclusion occupant un domaine Ω_I de forme sphéroïdale, d'axe de révolution $\underline{e}_3$ et de propriétés élastiques $K^{(1)}$ et $G^{(1)}$ (ou $E_{(1)}$ et $\nu_{(1)}$), plongée dans une matrice de propriétés élastiques $K^{(0)}$ et $G^{(0)}$ (ou $E_{(0)}$ et $\nu_{(0)}$). La géométrie de cette inclusion sphéroïdale est définie par le demi-axe a (suivant $\underline{e}_3$) et le demi-axe b (suivant $\underline{e}_1$ et $\underline{e}_2$). $a > b$ correspond à un sphéroïde allongé tandis que $a < b$ est associé à un sphéroïde aplati. Le V.E.R. (Volume Elémentaire Représentatif) du composite est constitué d'une matrice renforcée d'inclusions sphéroïdales aléatoirement orientées. Il sera donc nécessaire d'évaluer le tenseur $\mathbb{Q}$ dans le cas des sphéroïdes. Il est donc judicieux d'introduire

le système de coordonnées sphéroïdales caractérisé par λ, φ, θ et défini, dans le système de coordonnées cylindriques (ρ, θ, z) et cartésien (x_1, x_2, x_3), par :

$$\begin{cases} x_1 = b\sin(\varphi)\cos(\theta) \\ x_2 = b\sin(\varphi)\sin(\theta) \\ x_3 = a\cos(\varphi) \end{cases} \qquad \begin{cases} \rho = b\sin(\varphi) \\ \theta = \theta \\ x_3 = a\cos(\varphi) \end{cases} \tag{11}$$

Pour un sphéroïde allongé, on pose les demi-axes $a = c\cosh(\lambda)$ et $b = c\sinh(\lambda)$, les iso-λ surfaces définissant les sphéroïdes. Pour un sphéroïde aplati, les iso-λ surfaces définissent des sphéroïdes de demi-axes $a = c\sinh(\lambda)$ et $b = c\cosh(\lambda)$. L'iso-surface λ définit le bord du sphéroïde. Les vecteurs unitaires de la base sphéroïdale sont :

$$\begin{cases} \underline{e}_\lambda = \dfrac{1}{L_\lambda}\left\{b\sin(\varphi)\ \underline{e}_\rho + a\cos(\varphi)\ \underline{e}_3\right\} \\ \underline{e}_\varphi = \dfrac{1}{L_\lambda}\left\{b\cos(\varphi)\ \underline{e}_\rho - a\sin(\varphi)\ \underline{e}_3\right\} \\ \underline{e}_\theta = \underline{e}_\theta \end{cases} \tag{12}$$

avec $L_\lambda = \sqrt{a^2\sin^2(\varphi) + b^2\cos^2(\varphi)}$, $\theta \in [0, 2\pi]$, $\varphi \in [0, \pi]$ et $\underline{e}_\rho = \cos(\theta)\underline{e}_1 + \sin(\theta)\underline{e}_2$.
Pour l'évaluation du tenseur $\mathbb{Q}$ dans le cas d'inclusions sphéroïdales, il importe de connaître l'élément de surface dS associé à une surface sphéroidale :

$$\int_{\partial V} dS = \int_{\varphi=0}^{\varphi=\pi}\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} bL_\lambda \sin\varphi\ d\varphi d\theta \tag{13}$$

Le vecteur normal $\underline{n}$ à la surface est dans le cas du sphéroïde considéré $\underline{e}_\lambda$.
L'évaluation du tenseur $\mathbb{Q}$ nécessite une intégration numérique, la méthode des trapèzes ayant été retenue. Compte tenu de la symétrie sphéroïdale des inclusions, le tenseur $\mathbb{Q}$ dispose des symétries isotropes transverses, il en est donc de même pour $\overline{\mathbb{C}} + \mathbb{Q}$. Afin d'avoir une estimation de cette borne de Voigt, dans le cas d'une matrice renforcée par des sphéroïdes de même forme et mêmes propriétés élastiques, orientés de manière aléatoire, le résultat de l'intégration de $\mathbb{Q}$ est moyenné sur toutes les orientations possibles des sphéroïdes en se servant des résultats déjà publiés dans [4] (équations 9, 10 et 11). Le résultat de cette moyenne est un tenseur isotrope $\mathbb{C}_{VS}^{hom}$ dont peut être déduit le module de Young effectif du matériau considéré. Les nano plaquettes présentes dans le nanocomposite ayant une forme proche du sphéroide applati, elles peuvent être assimilées à des sphéroïdes de rapport d'aspect $\omega = \frac{50}{200} = 0,25$, nous avons décidé d'effectuer des développements limités, autour de $\omega = 0,25$, des modules de compressibilité et de cisaillement homogénéisés. Il en résulte :

$$\begin{aligned} K_{VS}^{hom} =& (1 - f_{(1)})K_{(0)} - 0,2.10^{-9}(1 - f_{(1)})G_{(0)} + f_{(1)}K_{(1)} - 0,2.10^{-9} f_{(1)}G_{(1)} \\ &+ \frac{35357836 f_1 K_s}{a} + \frac{35408551 f_1 \mu_s}{a} - \frac{131862926,5 f_1 K_s \omega}{a} - \frac{132040745,8 f_1 \mu_s \omega}{a} \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} G_{VS}^{hom} =& (1 - f_{(1)})G_{(0)} + f_{(1)}G_{(1)} - \frac{79064409,85 f_1 \mu_s \omega}{a} - \frac{79197774,75 f_1 K_s \omega}{a} \\ &+ \frac{21237523,4 f_1 K_s}{a} + \frac{21199487 f_1 \mu_s}{a} \end{aligned} \tag{15}$$

Rappelons que les propriétés élastiques de la matrice sont un module de Young $E = 900MPa$ et un coefficient de Poisson $\nu = 0.4$. Celles des nano plaquettes de MMT sont considérées telles que E = 178GPa et $\nu = 0.2$ (voir Fornes et al. [13]).

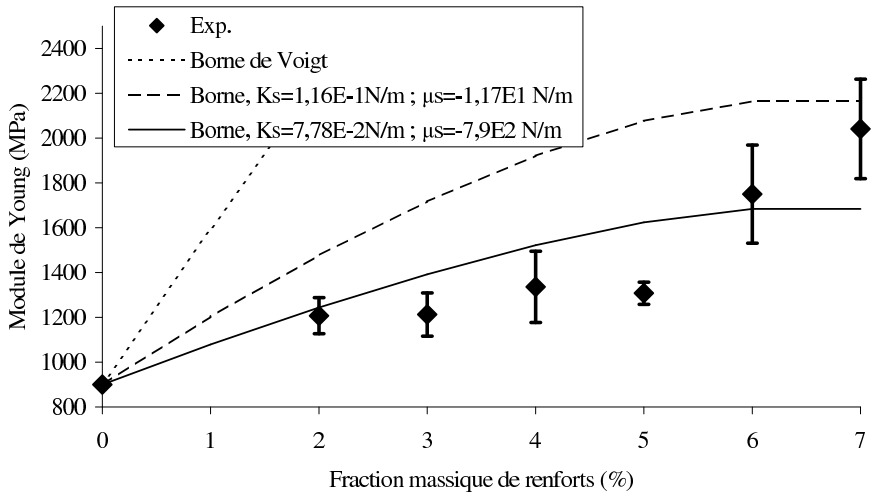


FIGURE 2 – Comparaison des données expérimentales d'un polypropylène renforcé par des nano plaquettes de MMT aux résultats de modélisations avec élasticité surfacique et à la borne de Voigt.

Très peu de publications fournissent une caractérisation des propriétés d'élasticité surfacique.Ce manque de données concernant l'élasticité surfacique et le fait qu'une borne de type Voigt soit une borne supérieure, nous ont conduit à la recherche d'un couple de valeur de K_s et μ_s capable de fournir une estimation par valeurs supérieures des données expérimentales, tout en étant moins raide que la borne classique de Voigt. Comme on peut le voir sur la figure (2), la borne de Voigt classique, comme on pouvait s'y attendre, surestime nettement les valeurs du module de Young. Toutefois les valeurs $K_s = 1,16.10^{-1} N/m$ et $\mu_s = -1,17.10^{-1} N/m$ permettent d'avoir une borne comprise entre la borne classique de Voigt et les données expérimentales. Ce résultat montre qu'en fonction des propriétés de l'élasticité surfacique présente à l'interface matrice/inclusion, la borne avec effet d'interface peut être plus raide ou plus souple que la borne classique de Voigt. Les valeurs $K_s = 7,78.10^{-2} N/m$ et $\mu_s = -7,9.10^{-2} N/m$ permettent même d'avoir une relative bonne proximité entre les résultats expérimentaux et les simulations. Ces résultats montrent la pertinence de l'élasticité surfacique dans la modélisation du comportement des nanocomposites, mais soulignent également la nécessité de disposer de moyens d'investigations donnant accès aux caractéristiques surfaciques K_s et μ_s.

3.2 Régime non linéaire

Une modélisation du comportement non linéaire de la classe de matériau considérée a été faite à l'aide de l'approche incrémentale de Hill ([1]).
La loi de comportement locale de chaque phase r est considérée sous la forme incrémentale :

$$\forall \underline{x} \in (r), \dot{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{x}) = \mathbb{L}^{(r)} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{x}) \tag{16}$$

où $\underline{x}$ est le vecteur position, $\dot{\underline{\underline{\sigma}}}$ le taux de contrainte, $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}$ la vitesse de déformation et $\mathbb{L}^{(r)}$ l'opérateur tangent de la phase r.
Il faut souligner que, pour la mise en oeuvre pratique de l'approche, l'hétérogénéité du champ de déformation plastique autour et dans l'inclusion est négligée, de sorte à pouvoir utiliser la solution du problème de l'inclusion inhomogène d'Eshelby. Le module $\mathbb{L}_{(r)}$ de chaque phase r est donc considéré uniforme. L'incrément de contrainte macroscopique s'écrit alors :

$$\dot{\underline{\underline{\Sigma}}} = \widetilde{\mathbb{L}} : \dot{\underline{\underline{E}}}, \text{ où : } \widetilde{\mathbb{L}} = \sum_{r=0}^{N} f_r \mathbb{L}^{(r)} : \mathbb{A}^{(r)} \tag{17}$$

• $\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}$ et $\dot{\underline{\underline{E}}}$ sont les taux de contrainte et de déformation macroscopiques, respectivement.
• $\widetilde{\mathbb{L}}$ et $\mathbb{L}^{(r)}$ sont l'opérateur tangent effectif du matériau hétérogène et l'opérateur tangent de la phase r, respectivement.
• f_r correspond à la fraction voulumique de la phase r, la phase $r = 0$ étant la matrice et N le nombre de

phases constituants le matériau ($N = 2$ pour un biphasé).
• $\mathbb{A}_{(r)}$ est le tenseur de localisation des déformations de la phase r. Il relie le taux de déformation macroscopique au taux de déformation local $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_r$ de la phase r considérée :

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_r = \mathbb{A}^{(r)} : \underline{\underline{\dot{E}}} \tag{18}$$

La capacité du schéma de Ponte Castañeda et Willis [1] [2] à rendre compte de l'impact des renforts des nanoplaquettes d'argile en régime élastique ayant déjà été vérifié (voir Cauvin et al [3]), les tenseurs de localisation $\mathbb{A}^{(r)}$ utilisés seront également ceux prédits par ce schéma. Pour les N-1 familles d'inclusions, il s'écrit :

$$\begin{aligned} &\mathbb{A}^{(r)} = \left\{ \mathbb{I} + \mathbb{P}_i^{(r)} : (\mathbb{L}^{(r)} - \mathbb{L}^{(0)}) \right\}^{-1} : \\ &\left\{ f_0 \mathbb{I} + \textstyle\sum_{j=1}^{N-1} f_{(j)} \left[\mathbb{I} + (\mathbb{P}_i^{(j)} - \mathbb{P}_d)(\mathbb{L}^{(j)} - \mathbb{L}^{(0)}) \right] : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}_i^{(j)} : (\mathbb{L}^{(j)} - \mathbb{L}^{(0)}) \right]^{-1} \right\}^{-1} \end{aligned} \tag{19}$$

Et pour la matrice :

$$\mathbb{A}^0 = \frac{1}{f_0} \left(\mathbb{I} - \sum_{r=1}^{N-1} f_{(r)} \mathbb{A}^{(r)} \right) \tag{20}$$

Le tenseur d'ordre 4 $\mathbb{P}_i^{(j)}$ désigne le tenseur de Hill associé à la forme de l'inclusion j, tandis que $\mathbb{P}_d$ est associé à la forme de la distribution spatiale des inclusions.
Les propriétés de la matrice sont identifiées à partir des résultats d'essais de traction uniaxiale (section 2) avec une loi de type von Misès et un écrouissage élastoplastique sous la forme exponentielle :

$$\sigma^p(\varepsilon^p) = \sigma_m^p + (\sigma_0^p - \sigma_m^p) \exp^{-b\varepsilon^p} \tag{21}$$

où, σ^p est la contrainte plastique, ε^p la déformation plastique, σ_0^p le seuil initial de plasticité, σ_m^p la valeur asymptotique de la contrainte plastique et b la vitesse d'évolution de l'écrouissage plastique.
La fonction de charge s'écrit donc :

$$f = \sigma_{eq} - \sigma^p \tag{22}$$

où, σ_{eq} est la contrainte équivalent au sens de von Misès.
La figure 3 illustre l'aptitude de cette loi d'écrouissage plastique à rendre compte du comportement non

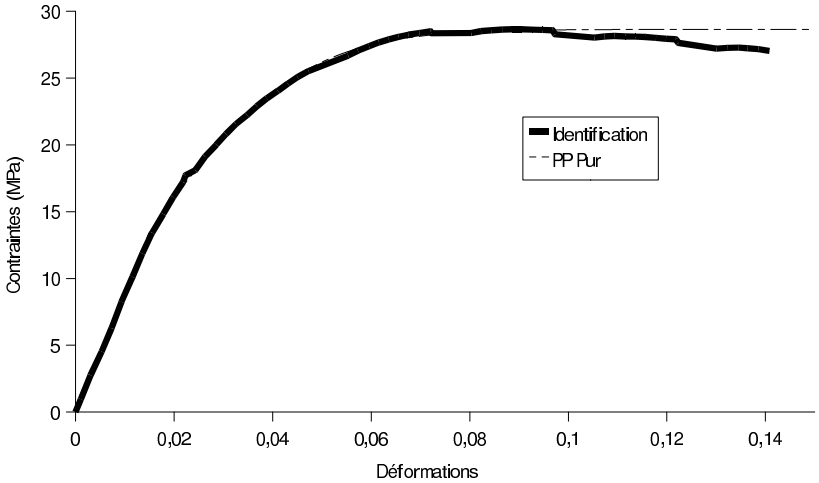


FIGURE 3 – Identification du comportement de la matrice polypropylène par la loi d'écrouissage

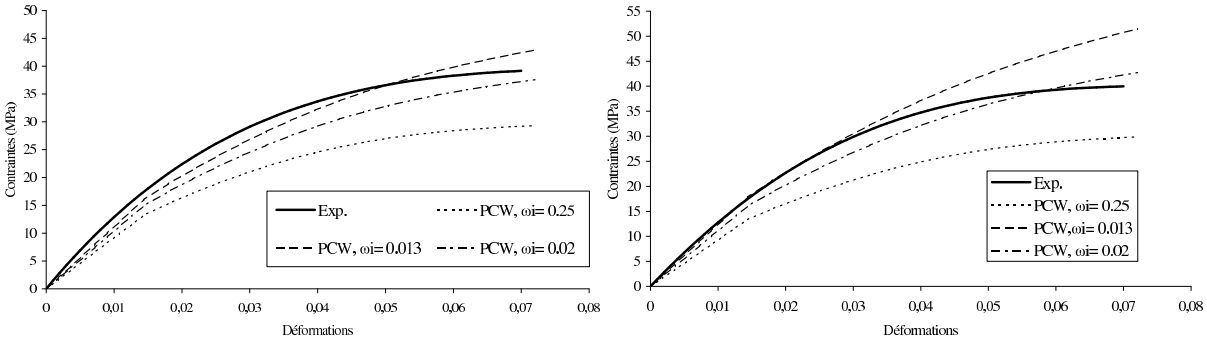
linéaire de la matrice PP. S'agissant des renforts (plaquettes d'argile MMT), ils ont les dimensions indiquées à la section 2. Ils peuvent ainsi être représentés à l'aide de sphéroïdes aplatis de diamètre 200nm et

1. On notera simplement qu'en plus de prendre en compte la forme des renforts comme dans le modèle de Mori-Tanaka, ce schéma d'homogénéisation est en mesure d'incorporer la distribution spatiale des renforts, ce qui est particulièrement crucial pour des plaquettes de faible rapport d'aspect et distribuées de manière isotrope dans l'espace.

d'épaisseur 50nm, soit un rapport d'aspect $\omega = \frac{50}{200} = 0.25$. Ces plaquettes étant très rigides par rapport à la matrice, elles sont supposées élastiques infiniment rigides.
L'utilisation du schéma d'homogénéisation de Ponte Castañeda et Willis permet de prendre en compte la distribution spatiale des renforts au sein de la matrice (voir [3]). Par simplicité, nous considérons une distribution spatiale isotrope de ces renforts au sein de la matrice ; toutefois, celle-ci est tout à fait conforme aux nanocomposites à microstructure partiellement intercalée/partiellement exfoliée. Pour une telle distribution spatiale, $\mathbb{P}_d$ isotrope est celui classiquement associé à une sphère.
Il faut également souligner que pour mettre en oeuvre la démarche incrémentale couplée à ce schéma d'homogénéisation avec une distribution spatiale isotrope ainsi qu'avec des orientations de renforts aléatoires, une isotropisation du tenseur $\mathbb{L}^{(0)}$ dans l'évaluation des tenseurs de Hill est considérée. Celle-ci est réalisée comme suit ([14]) :

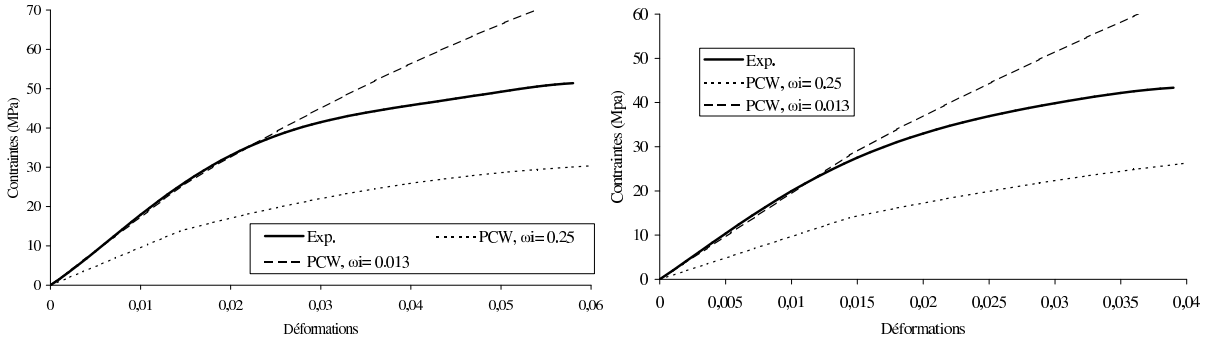
$$\mathbb{L}^0_{iso} = (\mathbb{J} :: \mathbb{L}^0)\mathbb{J} + \frac{1}{5}(\mathbb{K} :: \mathbb{L}^0)\mathbb{K}, \text{ où } \mathbb{L}^0_{iso} \text{ est l'isotropisation de } \mathbb{L}^0 \text{ ;} \tag{23}$$

$$\mathbb{J}_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}, \ \delta \text{ étant le symbole de kronecker ; } \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J} \tag{24}$$



(a) 2% MMT (b) 3% MMT

FIGURE 4 – Données expérimentales et résultats de simulation pour le PP renforcé par 2% et 3% en fraction massique de MMT.



(a) 6% MMT (b) 7% MMT

FIGURE 5 – Données expérimentales et résultats de simulation pour le PP renforcé par 6% et 7% en fraction massique de MMT.

Les résultats de simulations fournis par le modèle sont reportés sur les figures 4 et 5. On observe qu'avec un rapport d'aspect de $\omega = 0,25$, l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (PCW) sousestime le pouvoir renforçant des plaquettes. La mesure des dimensions des plaquettes n'étant cependant pas très bien maîtrisée, du fait des faibles dimensions (nanoscopiques) en jeu, il est probable que le rapport d'aspect de 0.25 mesuré soit celui d'un agrégat dans lequel de la matrice est intercalée et pas celui d'une plaquette. Cette incertitude sur les dimensions des plaquettes a conduit dans l'étude [3] à la recherche

d'un rapport d'aspect permettant de reproduire les données expérimentales. Le rapport d'aspect $\omega = 0,013$ ayant conduit à de bons résultats en régime élastique, les simulations du comportement non linéaire ont ainsi été menées avec ce rapport d'aspect. Il s'avère dans ce cas (figures 4, 5) que les niveaux de contraintes dans le domaine plastique sont légérement surestimés. Il apparaît toutefois que le rapport d'aspect de $0,02$ permet d'avoir une relative bonne adéquation entre les données expérimentales et les simulations pour le PP renforcé par 2%, 3%, 4% et 5% de fraction massique de renforts [2]. Pour 6% et 7% de fraction massique de MMT, ce rapport d'aspect conduit à une réponse un peu plus raide que le comportement expérimentale.

4 Conclusions

La caractérisation expérimentale en traction uniaxiale du nanocomposite étudié (PP renforcé par des nanoplaquettes de MMT) a mis en évidence une augmentation significative de la rigidité pour de faibles taux de renforts. L'échelle nanoscopique et la forme des renforts sont sans doute responsables de cette augmentation. La modélisation de la réponse à cette sollicitation de traction uniaxiale offre une bonne adéquation entre les simulations et les expérimentations dans le régime élastique (avec ou sans prise en compte d'un effet de taille) mais surestime les niveaux de contraintes du domaine plastique. L'étude du le rôle de l'interface (ou interphase) sur le comportement non-linéaire du nanocomposite constitue une voie capable de rendre compte des spécificités de cette classe de matériau.

Références

[1] R. Hill. *Continuum Micro-mechanics of elastoplastic polycristals.*, J. of Mech. Phys. Solids, 13, 89-101, 1965.

[2] P. Ponte Castañeda, J.R. Willis. *The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media.*, J. Mech. Phys. Solids, 43, 1919-1951, 1995.

[3] L. Cauvin, N. Bhatnagar, D. Kondo, M. Brieu. *Experimental study and micromechanical modeling of MMT platelet-reinforced PP nanocomposites.*, C. R. Mecanique, 335, 702-707, 2007.

[4] L. Cauvin, D. Kondo, M. Brieu, N. Bhatnagar. *Mechanical behavior of a PP platelet-reinforced nanocomposite : experimental characterization and two scale modeling of linear and non-linear response.*, Materials Science and Engineering A, 527(4-5), 1102-1108, 2010.

[5] P. Sharma, S. Ganti, N. Bhate. *Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities.*, Applied Physics Letters, 82(4), 535-537, 2003.

[6] H. Le Quang, Q.-C. He. *Variationnal principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces.*, Mechanics of materials, 40, 865-884, 2008.

[7] W. Voigt. *Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper.*, Wied. Ann., 38, 573-587, 1889.

[8] Y.Z. Povstenko. *Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface tension in solids.*, J. Mech. Phys. Solids, 41, 1499-1514, 1993.

[9] T. Chen, M.-S. Chiu, C.-N Weng. *Derivation of the generalized Young-Laplace equation of curved interfaces in nanoscaled solids.*, J. Appl. Phys., 100, 074308-1-074308-5, 2006.

[10] M.E. Gurtin, A. Murdoch. *A Continuum Theory of Elastic Material Surfaces.*, Arch. Ration. Mech. Anal., 57, 291-323, 1975.

[11] D.J. Bottomley, T. Ogino. *Alternative to the Shuttleworth formulation of solid surface stress.*, Phys. Rev. B, 37, 165412-1-165412-5, 2001.

[12] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, B.L.Karihaloo. *Size-dependent effective elastic constant of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress.*, J. Mech. Phys. Solids, 53, 1574-1596, 2005.

[13] T.D. Fornes, D.R. Paul. *Modelling properties of nylon6/clay nanocomposites using composite theories.*, Polymer, 44, 4993-5013, 2003.

[14] M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2 - Comportements non linéaires et problèmes ouverts.*, Hermes Science publications, 2001.

2. Les résultats avec 4% et 5% de fraction massique de plaquettes ne sont pas représentés mais fournissent des résultats équivalents à ceux obtenus avec 2% et 3%