



HAL
open science

Modélisation du comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales

Xavier Haller, Yann Monerie, Stéphane Pagano, Pierre-Guy Vincent

► **To cite this version:**

Xavier Haller, Yann Monerie, Stéphane Pagano, Pierre-Guy Vincent. Modélisation du comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales. 12e Colloque national en calcul des structures – CSMA2015, May 2015, Giens, France. hal-01400129

HAL Id: hal-01400129

<https://hal.science/hal-01400129>

Submitted on 21 Nov 2016

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.

Modélisation du comportement élastique effectif des matériaux nanoporeux à cavités sphériques et sphéroïdales

X. Haller^{1,3}, Y. Monerie^{2,3}, S. Pagano^{2,3}, P.-G. Vincent^{1,3}

¹ Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire PSN-RES/SEMIA/LPTM B.P. 3, 13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex France
xavier.haller@irsn.fr, pierre-guy.vincent@irsn.fr

² Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, Université de Montpellier, CC 048, 34090 Montpellier, France
yann.monerie@univ-montp2.fr, stephane.pagano@univ-montp2.fr

³ Laboratoire MIST (IRSN-CNRS-UMII)

Résumé — Ce travail propose un modèle de type Mori et Tanaka généralisé, fondé sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs, afin d'estimer les propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux avec des cavités sphériques et sphéroïdales dont la distribution des centres est ellipsoïdale.

Mots clés — Homogénéisation, Nanoporeux, Cavités sphéroïdales.

1 Introduction

Ce travail concerne la détermination des propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités de formes sphériques et sphéroïdales. L'application visée concerne le combustible nucléaire UO_2 fortement irradié, étudié par l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) afin d'estimer la tenue des crayons combustibles lors d'un accident de réactivité. Ce matériau a la particularité de posséder, en première approximation, deux populations de cavités : des cavités intragranulaires sphériques, de l'ordre de quelques nanomètres et des cavités intergranulaires, plutôt de forme lenticulaires et dont la taille varie de quelques dizaines à plusieurs centaines de nanomètres. Des travaux de dynamiques moléculaires récents [7] ont montré l'existence d'un effet de surface à l'échelle des cavités nanométriques dans l' UO_2 qui modifie de façon non négligeable son comportement élastique effectif. Cet effet, dû à la présence d'une zone perturbée de quelques rangées d'atomes entre les cavités et la matrice, devient plus important à mesure que le nombre d'atomes à proximité des surfaces augmente. Les propriétés mécaniques macroscopiques des matériaux nanocomposites dépendent fortement des longueurs caractéristiques nanométriques de la microstructure [5], telles que la taille des cavités dans le cas de l' UO_2 irradié.

Des travaux récents [2, 3, 5] ont étendu des modèles micromécaniques classiques, en particulier le modèle autocohérent généralisé et le modèle de Mori et Tanaka, aux cas des matériaux nanocomposites. Ces modèles fournissent des estimations du comportement élastique effectif des matériaux nanocomposites contenant des inclusions (ou cavités dans le cas présent) sphériques distribuées de façon homogènes et isotropes. Le travail présenté ici conduit à un modèle *de type Mori et Tanaka généralisé* permettant d'estimer les propriétés élastiques de matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales dont la distribution des centres des cavités est ellipsoïdale. Cette estimation est issue de l'application de l'approche par motifs morphologiques représentatifs de [10].

2 Méthodologie

2.1 Modélisation de la zone perturbée

Le modèle le plus couramment utilisé pour représenter les zones perturbées dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des matériaux nanocomposites est le modèle d'interface imparfaite cohérente initialement proposé par Gurtin et Murdoch [6]. Ce modèle décrit la zone perturbée entre un milieu 1 et un milieu 2 par une surface matérielle, notée Γ , à travers laquelle une discontinuité du vecteur contrainte est postulée alors que le déplacement est supposé continu. L'équilibre de la surface est décrit

par l'équation suivante, dite parfois de Young-Laplace généralisée :

$$[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n} + \mathbf{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0} \quad (1)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_s$ représente la contrainte surfacique, $[\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma}^{(2)} - \boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ le saut de contrainte à travers la surface, l'opérateur \mathbf{div}_s la divergence surfacique d'un champ de tenseurs surfaciques tangents d'ordre deux, \mathbf{n} le vecteur normal unitaire à Γ (orienté de 1 vers 2) et \mathbf{b} le tenseur (d'ordre deux) de courbure.

Le comportement mécanique de la surface est supposé élastique linéaire isotrope dans le plan tangent à Γ et est caractérisé par le tenseur de rigidité surfacique \mathbf{C}_s :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{C}_s : \boldsymbol{\epsilon}_s \quad \text{avec} \quad \mathbf{C}_s = 2(k_s \mathbf{J}_T + \mu_s \mathbf{K}_T) \quad (2)$$

où $\mathbf{J}_T = \frac{1}{2}(\mathbf{i}_T \otimes \mathbf{i}_T)$ et $\mathbf{K}_T = \mathbf{I}_T - \mathbf{J}_T$ avec \mathbf{i}_T ($\mathbf{i}_T = \mathbf{i} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$) et \mathbf{I}_T les tenseurs identités respectivement d'ordre deux et quatre dans le plan tangent à Γ . Les scalaires k_s et μ_s sont les coefficients d'élasticité surfacique exprimés en J/m^2 (ou en N/m). La déformation surfacique $\boldsymbol{\epsilon}_s$ est égale à la partie tangentielle de la déformation dans le milieu 1 (ou dans le milieu 2 car le déplacement et par conséquent la déformation tangentielle sont supposés continus à travers Γ) sur la surface Γ ($\boldsymbol{\epsilon}_s = \mathbf{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}_1(\mathbf{x}) = \mathbf{I}_T : \boldsymbol{\epsilon}_2(\mathbf{x})$, $\forall \mathbf{x} \in \Gamma$).

Il a été constaté que les équations du modèle précédent correspondent, in fine, aux équations d'une voile, c'est-à-dire d'une coque mince (d'épaisseur h finie) de Kirchoff-Love dont les efforts nécessaires pour la fléchir sont négligeables devant les efforts pour l'allonger. Dans le cadre de cette théorie, le tenseur de rigidité volumique de cette coque équivalente (déjà mis en évidence dans [2, 11]) s'écrit dans la base d'isotropie $\{\mathbf{J}, \mathbf{K}\}$:

$$\mathbf{C}_{ph} = 3k_{ph} \mathbf{J} + 2\mu_{ph} \mathbf{K} \quad \text{où} \quad k_{ph} = \frac{1}{h} \frac{4k_s \mu_s}{3(3\mu_s - k_s)} \quad \text{et} \quad \mu_{ph} = \frac{\mu_s}{h} \quad (3)$$

2.2 Approche par motifs morphologiques représentatifs

L'approche par motifs morphologiques représentatifs (MMR) a été initialement proposée par C. Stolz et A. Zaoui [10] et fortement développée par la suite par Bornert et al. [1]. Contrairement à l'approche classique, fondée sur le problème d'inclusion d'Eshelby, l'approche par MMR permet de déterminer les propriétés élastiques effectives d'un matériau hétérogène en considérant des champs élastiques admissibles hétérogènes par phases. Cela permet de prendre en compte l'arrangement local des phases et donc d'introduire des longueurs caractéristiques de la microstructure dans les modèles micromécaniques. Elle est donc particulièrement adaptée pour déterminer les propriétés élastiques effectives des matériaux nanocomposites pour lesquels les zones perturbées sont localisées entre les hétérogénéités (cavités dans le cas présent) et la matrice.

L'approche par MMR suppose que le volume élémentaire représentatif (VER) peut être décomposé en sous-domaines disjoints, connexes, de dimensions finies. Ces sous-domaines sont regroupés en famille appelées *motifs morphologiques représentatifs*. Les membres d'un même motif ont une géométrie et une distribution spatiale des propriétés mécaniques locales identiques.

Lorsque la distribution spatiale des centres des motifs est supposée ellipsoïdale, la détermination des propriétés élastiques effectives passe par l'étude de problèmes auxiliaires. Chaque problème correspond à l'étude du comportement d'un motif lorsqu'il est plongé dans un milieu de référence infini (de rigidité \mathbf{C}_0), soumis à l'infini à une déformation $\boldsymbol{\epsilon}^0$. Lorsque le milieu de référence est la matrice, notée m (de rigidité \mathbf{C}_m), il est possible de construire des estimations de type Mori et Tanaka généralisées (MTG) en identifiant sur chaque problème auxiliaire le tenseur d'ordre quatre \mathbf{T}_{Mr}^m tel que :

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle_{D_r} = \mathbf{T}_{Mr}^m : \boldsymbol{\epsilon}^0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D_r} - \mathbf{C}_m : \langle \boldsymbol{\epsilon} \rangle_{D_r} \quad (4)$$

où l'opération $\langle \cdot \rangle_{\omega}$ fait référence à la moyenne spatiale sur le domaine ω d'un champ tensoriel et D_r au domaine occupé par le motif r . Le champ de contrainte $\boldsymbol{\tau}$ est appelé champ de polarisation. Le tenseur de rigidité effectif issu de l'estimation de type MTG s'exprime alors :

$$\mathbf{C}_M^{\text{MTG}} = \mathbf{C}_M^{\text{HS}}(\mathbf{C}_m) = \mathbf{C}_m + \left(\mathbf{I} - \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M : \mathbf{P}_d^m \right)^{-1} : \langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M \quad (5)$$

où $\langle \cdot \rangle_M$ est défini comme une moyenne volumique sur l'ensemble des motifs. Le tenseur \mathbf{P}_d^m est le tenseur de Hill relatif à la distribution ellipsoïdale des centres des motifs lorsque le milieu de référence est la matrice [1].

3 Estimation des propriétés élastiques effectives des matériaux poreux à cavités bi-modales : nano-sphériques et nano-sphéroïdales

3.1 Problèmes auxiliaires

Deux motifs de forme extérieure sphérique (de rayon r_0) sont définis. Le premier, noté \mathcal{S} et relatif aux cavités sphériques, est constitué d'une cavité sphérique (de rayon r_1) entourée d'une couche de matrice de forme extérieure sphérique concentrique avec le centre de la cavité. Le second, noté \mathcal{E} et relatif aux cavités sphéroïdales, est constitué d'une cavité sphéroïdale également entourée d'une couche de matrice de forme extérieure sphérique concentrique avec le centre de la cavité. Dans les deux motifs, des conditions d'interface imparfaite cohérente sont appliquées entre la cavité et la matrice. La distribution des centres des cavités étant supposée ellipsoïdale, la détermination des propriétés élastiques effectives, par l'intermédiaire de l'approche par MMR, passe par la résolution de deux problèmes auxiliaires associés aux motifs \mathcal{S} et \mathcal{E} , représentés respectivement sur la Figure 1(a) et la Figure 1(b). Des estimations de type Mori et Tanaka généralisées sont obtenues en identifiant les propriétés du milieu de référence à celles de la matrice.

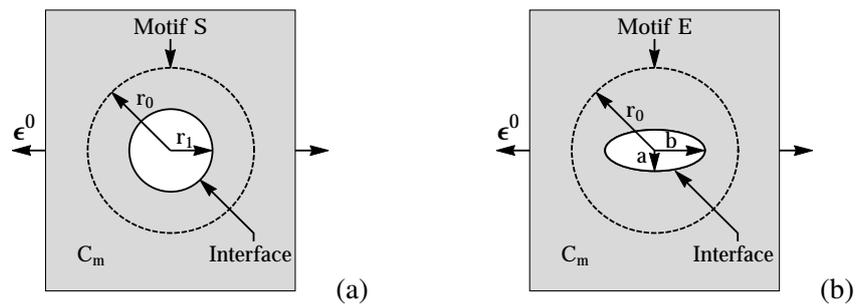


FIGURE 1 – Représentation des deux problèmes auxiliaires.

Le problème auxiliaire associé au motif \mathcal{S} est résolu de façon exacte en suivant [5]. En revanche, le problème auxiliaire associé au motif \mathcal{E} est résolu de façon approchée en utilisant les résultats de [4] pour des ellipsoïdes enrobés d'une fine interphase et en appliquant les relations (3) (équivalence interphase/interface). Les deux tenseurs $\mathbf{T}_{M\mathcal{S}}^m$ et $\mathbf{T}_{M\mathcal{E}}^m$ sont ainsi déterminés et l'expression (5) permet de déterminer les propriétés élastiques effectives.

L'approche est appliquée dans un cas particulier : i. les cavités sphériques sont supposées de même taille, réparties de façon homogène et isotrope, ii. les cavités sphéroïdales sont supposées de même taille, même forme, orientées aléatoirement et réparties de façon homogène et isotrope. L'expression (5) permet de déterminer les propriétés élastiques effectives (isotropes) avec :

$$\langle \mathbf{T}_{Mr}^m \rangle_M = c_S \mathbf{T}_{M\mathcal{S}}^m + c_E \langle \mathbf{T}_{M\mathcal{E}}^m \rangle_{\odot} = c_S \mathbf{T}_{M\mathcal{S}}^m + c_E \left[\frac{\mathbf{T}_{M\mathcal{E}}^m \text{ :: } \mathbf{J}}{\mathbf{J} \text{ :: } \mathbf{J}} \mathbf{J} + \frac{\mathbf{T}_{M\mathcal{E}}^m \text{ :: } \mathbf{K}}{\mathbf{K} \text{ :: } \mathbf{K}} \mathbf{K} \right] \quad (6)$$

où l'opération $\langle \cdot \rangle_{\odot}$ fait référence à la moyenne sur toutes les orientations de l'espace. Les scalaires c_S et c_E désignent respectivement les fractions volumiques de motif \mathcal{S} et de motif \mathcal{E} dans le VER.

3.2 Application

Cette partie présente une application du résultat précédent dans le cas où seules des cavités sphéroïdales sont considérées. Les évolutions des modules de compressibilité et de cisaillement effectifs (normalisés respectivement par rapport au module de compressibilité et de cisaillement de la matrice) en fonction du rapport de forme $w = a/b$ des cavités sont représentées sur la Figure 2 pour une porosité fixe (égale à 25%) et différentes valeurs de b (0.5, 1 et 5 nm). Les constantes élastiques effectives issues de l'estimation de Ponte Castañeda et Willis (PCW) [9] (sans effet de surface) correspondant à cette microstructure sont également représentées.

Une dépendance à la forme et à la taille des cavités a bien été introduite dans le modèle par l'intermédiaire des paramètres w et b . Lorsque la taille des cavités devient grande, l'effet de surface devient négligeable et le modèle tend vers son modèle homologue sans effet de surface.

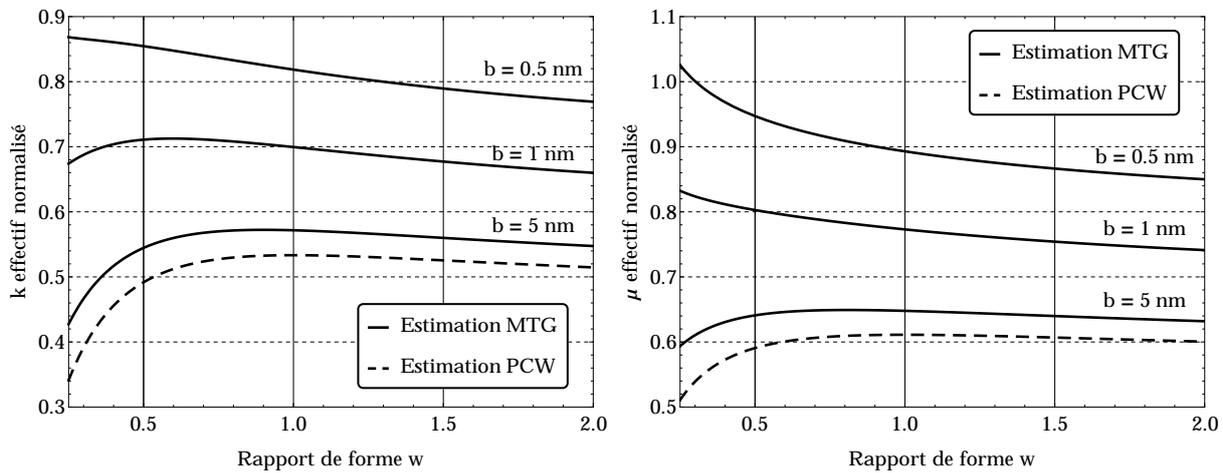


FIGURE 2 – Modules effectifs normalisés en fonction du rapport de forme des cavités pour une porosité de 25% et différentes valeurs de b (avec $k_m = 83 \text{ GPa}$, $\mu_m = 38 \text{ GPa}$, $k_s = 14.29 \text{ J/m}^2$ et $\mu_s = 7.69 \text{ J/m}^2$).

4 Conclusion

Ce travail propose un modèle de type Mori et Tanaka généralisé, basé sur l'approche par motifs morphologiques représentatifs, permettant d'estimer les propriétés élastiques effectives des matériaux nanoporeux contenant des cavités sphériques et sphéroïdales dont la distribution des centres est ellipsoïdale. L'approche par motifs fournit un cadre théorique général permettant de traiter aisément le cas de microstructures plus complexes, en tenant compte par exemple des distributions de taille des cavités ou en considérant d'autres types d'hétérogénéités. Le modèle proposé généralise le modèle de type Mori et Tanaka existant pour les nanocomposites [2, 3, 5] mais limité au cas des cavités (plus généralement au cas des inclusions) sphériques distribuées de façon homogène et isotrope. Il généralise également le modèle de Ponte Castañeda et Willis [9] au cas des matériaux nanoporeux.

Références

- [1] M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini, *Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Vol 1, Hermès Science Publications, 2001.
- [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, 48 (3), 589-596, 2010.
- [3] S. Brisard, L. Dormieux, D. Kondo, *Hashin-Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects*, Computational Materials Science, 50 (2), 403-410, 2010.
- [4] M. Cherkaoui, H. Sabar, M. Berveiller, *Elastic composites with coated reinforcements : A micromechanical approach for nonhomothetic topology*, International Journal of Engineering Science, 33 (6), 829-843, 1995.
- [5] H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, B.L. Karihaloo, *Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 53 (7), 1574-1596, 2005.
- [6] M.E. Gurtin, A.I. Murdoch, *A continuum theory of elastic material surfaces*, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 57 (4), 291-323, 1975.
- [7] A. Jelea, M. Colbert, F. Ribeiro, G. Tréglia, R.J.-M. Pellenq, *An atomistic modelling of the porosity impact on UO_2 matrix macroscopic properties*, Journal of Nuclear Materials, 415 (2), 210-216, 2011.
- [8] H. Le Quang, Q.-C. He, *Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces*, Mechanics of Materials, 40 (10), 865-884, 2008.
- [9] P. Ponte Castañeda and J.R. Willis, *The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 43 (12), 1919-1951, 1995.
- [10] C. Stolz, A. Zaoui, *Analyse morphologique et approches variationnelles du comportement d'un milieu élastique hétérogène.*, C. R. Acad Sci. (312), 143-150, 1991.
- [11] J. Wang, H.L. Duan, Z. Zhang, Z.P. Huang, *An anti-interpenetration model and connections between inter-phase and interface models in particle-reinforced composites*, International Journal of Mechanical Sciences, 47 (4-5 SPEC. ISS.), 701-718, 2005.