



HAL
open science

Les Simulations de Dynamique Moléculaire comme outil d'une meilleure compréhension de la physique locale du contact

Mathieu Solar, Hendrick Meyer, Christian Gauthier, Robert Sherrer, Jörg Baschnagel

► To cite this version:

Mathieu Solar, Hendrick Meyer, Christian Gauthier, Robert Sherrer, Jörg Baschnagel. Les Simulations de Dynamique Moléculaire comme outil d'une meilleure compréhension de la physique locale du contact. CFM 2009 - 19ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2009, Marseille, France. <hal-03391363>

HAL Id: hal-03391363

<https://hal.science/hal-03391363v1>

Submitted on 21 Oct 2021

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.



HAL Authorization

Simulations de dynamique moléculaire de l'indentation sur surfaces de polymères amorphes : vers une meilleure compréhension de la physique locale du contact

M. SOLAR, C. GAUTHIER, H. MEYER, O. BENZERARA,
H. PELLETIER, C. FOND, J. BASCHNAGEL, R. SCHIRRE

ICS, CNRS - UPR 22, 23 rue du Loess, BP 84047, F-67034 Strasbourg Cedex 2

Résumé :

En mécanique du contact, la mécanique des milieux continus (MMC) est utilisée pour analyser le comportement mécanique volumique et surfacique. Cette approche trouve ses limites dans l'analyse de phénomènes où la physique locale contribue au comportement global, ce qui est le cas de la modélisation des essais de nano-indentation à la frontière de la modélisation MMC. Une première analyse de la mécanique du contact par simulations de dynamique moléculaire (DM) est présentée. Les résultats sont comparés à des résultats expérimentaux, et à des modélisations par éléments finis avec le logiciel CAST3M[®]. Cette première étude porte sur l'indentation avec une pointe conique sur une surface de polymère amorphe à chaînes linéaires.

Abstract :

Continuum mechanics (CM) is generally employed to analyse the volume and surface behaviour of materials. This approach is nevertheless limited when the local physics contributes to the global behaviour. In contact mechanics, the modeling of nano-indentation / scratch tests lies at the limits of CM since on the nano scale the behaviour is a blend of the bulk mechanical behaviour described by phenomenological laws and the local physics including surface properties. We present here a first mechanical analysis of normal contact using molecular dynamics (MD) simulations. The results are compared with those obtained by finite element simulations using a standard finite element software and with experimental results for PMMA. The case of indentation with a conical tip on a polymer film (made of linear chains) is considered.

Mots clés : film, polymère, indentation, dynamique moléculaire.

1 Contexte et généralités

Pour les polymères, l'amélioration de la résistance à la rayure, propriété mécanique importante des surfaces fonctionnelles (matériaux massifs ou en couches minces), passe par la réduction du coefficient de frottement, par la recherche d'un minimum de déformation plastique et d'une recouvrance après rayure. Il se révèle également important de différencier le comportement de surface et celui du volume en étudiant la zone confinée sous le contact, à l'interface entre l'indenteur et le polymère, en indentation comme en rayure (voir par exemple [1, 2, 3, 4]). Du fait de leurs propriétés viscoélastiques / viscoplastiques et de leur comportement en cisaillement confiné (frottement interfacial) complexe, l'amélioration du comportement surfacique des polymères nécessite une meilleure compréhension de la physique locale du frottement, du processus d'indentation et de rayure. La Mécanique des Milieux Continus (MMC) a permis de mieux identifier les sollicitations mécaniques subies par la matière sous le contact pendant les essais d'indentation et de rayure (champ de déformation, de contrainte...) (voir par exemple [5, 6, 7]). Néanmoins, de par l'utilisation généralisée d'une formulation thermodynamique macroscopique [8], de par l'utilisation de lois de comportement matériaux souvent phénoménologiques, et enfin de par sa vision continue de la matière, la MMC reste tributaire d'une formulation plus globale et des possibilités techniques d'observation des phénomènes. Elle permet difficilement de prévoir certains phénomènes, comme un changement local d'une propriété mécanique, sauf si cette possibilité de changement est explicitement incluse dans le modèle. Le besoin d'étudier la physique locale du contact reste entier, et le recours aux simulations de dynamique moléculaire (DM) trouve ici pleinement son sens. En effet, cette technique de simulation permet de modéliser la matière avec des détails moléculaires, et de par sa formulation thermodynamique microscopique et statistique, elle permet d'observer d'éventuels changements fondamentaux dans les propriétés de la matière. Cependant, elle reste très consommatrice en temps de calcul, et les échelles de temps et d'espace simulées restent encore très petites par rapport à celles de la MMC. L'objectif est de présenter une première comparaison entre des résultats expérimentaux, de simulations de DM et de modélisations par méthode des éléments finis (MEF), dans le cas du contact normal (indentation). Ceci permettra de présenter la richesse proposée par une modélisation thermodynamique microscopique sous-jacente.

2 Essais de nano-indentation expérimentaux

Le test de nanoindentation est un moyen pratique dans l'étude des propriétés mécaniques de surfaces, en dépit de nombreux problèmes d'interprétation des résultats pour les matériaux polymères, dont le comportement est sensible à la vitesse de déformation (viscoélasticité et viscoplasticité). En effet, pour un indenteur conique, le niveau de déformation moyen est $\bar{\epsilon} \propto \cot \theta$ [5], et le niveau de vitesse de déformation moyen est $\bar{\dot{\epsilon}} \propto \dot{P}/P$ [9]. Dans le cas des polymères et des essais à vitesses linéaires de chargement ($dP/dt = Cte$) (assez répandu), la matière n'est pas sollicitée à vitesse de déformation constante. Le pilotage en exponentiel, qui ne sera pas l'objet de ce travail, paraît alors plus approprié [9]. Des tests classiques de nano-indentation (utilisant un *Nano Indenter*[®] *XP*) ont été réalisés sur surfaces de *PMMA* à température ambiante, avec un indenteur de type Berkovich (de cône axisymétrique équivalent $\theta = 70.3^\circ$). Les tests se font à $dP/dt = Cte$. Ces tests serviront de premier point de comparaison pour les simulations numériques du contact aussi bien en *MEF* qu'en *DM*, et ceci pour le cas de polymères couramment utilisés. La figure 3 montre des résultats typiques de nano-indentation sur surfaces de *PMMA* coulé, où il est possible d'observer l'influence de la vitesse de chargement sur la réponse (P vs. δ). En effet, pour ce matériau relativement sensible à la vitesse de déformation et donc à la vitesse d'application de la charge P , le "fluage de contact" (dû à la viscoélasticité et/ou à la viscoplasticité du polymère) apparaît de façon plus prononcée pour une vitesse de chargement plus lente. A contraintes égales ($\tilde{\sigma} = \tilde{C}\tilde{\epsilon}_e$), la déformation totale $\tilde{\epsilon}$ sera plus grande que celle obtenue pour une vitesse de chargement plus rapide, d'où un enfoncement final plus grand pour une même force P .

3 Modélisation du contact avec modélisation par *MEF*

Afin de comparer avec les simulations de *DM*, l'indentation avec un cône parfait est modélisée sous *CAST 3M*[®]. Une analyse des courbes force vs. enfoncement (P vs. δ) est alors possible (cf. Fig. 1 (b)). L'indenteur est modélisé par une région de l'espace interdite et mobile, où la matière ne peut pas pénétrer. Le contact cône-matériau est supposé sans frottement et sans adhésion (pour être conforme aux modélisations du contact par simulations de *DM*). Le problème est traité en formulation axisymétrique *2D*. Le calcul se fait en mode grands déplacements et grandes déformations, avec dérivée de Truesdell¹ (notée $\dot{\cdot}$) pour le tenseur des contraintes de Cauchy. Le maillage, constitué de quadrilatères à 4 noeuds, et les conditions aux limites imposées sont présentées en figure 1. Le maillage est raffiné sous le contact, et les dimensions totales de celui-ci sont suffisamment grandes pour que les bords n'aient pas d'influence. Le pilotage de l'indenteur peut être en déplacement, où δ est piloté (indentations aller-retour), ou bien être en force, où P est contrôlée (indentations aller-retour). En effet, ces deux modes de pilotage diffèrent pour les matériaux à comportement dépendant du temps. Pour ce qui concerne la loi de comportement du matériau, le tenseur des vitesses de déformation (1) est classiquement décomposé en une part élastique (indice e) et une part inélastique (indice in) [8]. Dans notre modèle, la part inélastique n'aura pour origine que le fluage (part viscoplastique) : il n'y aura donc pas d'élasticité retardée d'origine viscoélastique². Le matériau est modélisé par une loi de fluage polynomiale (1), où $\tilde{\epsilon}$, \tilde{C} , $\tilde{\sigma}$, $\dot{\epsilon}_f$, $\tilde{\sigma}^d$ et σ_{VM} sont respectivement le tenseur de déformation, la matrice d'élasticité (E et ν sont le module d'Young et le coefficient de Poisson), le tenseur des contraintes de Cauchy, la vitesse de déformation viscoplastique (ici de fluage) équivalente, la part déviatorique du tenseur des contraintes et la contrainte équivalente de Von-Mises.

$$\dot{\tilde{\epsilon}} = \dot{\tilde{\epsilon}}_e + \dot{\tilde{\epsilon}}_{in} = \tilde{C}^{-1}\dot{\tilde{\sigma}} + \frac{3}{2} \cdot \dot{\epsilon}_f \cdot \frac{\tilde{\sigma}^d}{\sigma_{VM}} \quad \text{avec} \quad \dot{\epsilon}_f = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot (\dot{\tilde{\epsilon}}_{in} : \dot{\tilde{\epsilon}}_{in}) = A_1 \cdot \sigma_{VM}^{A_2}$$

4 Modélisation du contact par simulations de *DM*

Les simulations de *DM* (réalisées avec le code *MD Spherical*, développé en interne) permettent de simuler l'évolution au cours du temps de la matière, sous d'éventuelles sollicitations mécaniques, par intégration numérique des équations du principe fondamental de la dynamique de Newton. Une description plus complète de cette technique de simulation est faite dans les ouvrages suivants [11] [12]. La technique de nano-indentation étant le plus souvent à la limite du volume élémentaire représentatif (*VER*) d'un polymère, l'utilisation de la *DM* se justifie. Quelques travaux ont déjà été publiés [13]. Dans notre cas, un polymère est modélisé par un modèle mathématique générique type "coarse - grained" (ou granulation de la matière). Une particule désigne dans ce cas un ou plusieurs groupe(s) d'atome(s) d'une macrochaîne, et est considérée comme étant une sphère quasi-impénétrable, de diamètre σ et de masse m . Dans cette étude, l'indentation avec un cône parfait a été simulée sur des films de polymères amorphes linéaires, donc sans ramifications de nature chimique entre les chaînes macromoléculaires (noeuds de nature physique uniquement). Il est rappelé enfin qu'en simulations de *DM*, les résultats sont présentés en unités adimensionnées de Lennard - Jones (Unités *LJ*, symboles avec exposants *). Les plus utilisées sont rassemblées dans le tableau de la figure 2, où sont également données des

¹ \tilde{L} est le tenseur gradient du champ eulérien des vitesses, et $\dot{\tilde{\sigma}} = d\tilde{\sigma}/dt = \partial\tilde{\sigma}/\partial t + \overset{\vee}{\nabla}(\tilde{\sigma})\tilde{v}$; $\overset{\vee}{\nabla}(\tilde{\sigma})$ est un tenseur d'ordre trois [10]. On note aussi $\overset{\sim}{\sigma} = \tilde{\sigma} - \tilde{L}\tilde{\sigma} - \tilde{\sigma}\tilde{L}^T + (tr\tilde{L}) \cdot \tilde{\sigma}$.

²Il est supposé que pour $T < T_g$, un modèle viscoplastique et non viscoélastique convient.

ordres de grandeurs pour un *PMMA*³. Pour alléger les notations, l'exposant * sera volontairement omis dans cette partie, sauf si une éventuelle ambiguïté subsiste. Pour ce qui concerne le modèle de comportement du film de polymère, les films de polymère simulés sont constitués de 192 chaînes de 64 particules, et reposent sur un substrat infiniment rigide (cf. Fig. 1 (c)). Une caractérisation complète de ce film-modèle a été réalisée par Peter *et al.* [15]. La simulation se fait dans une "boîte" de simulation, qui représente un volume élémentaire (VE). La taille de cette boîte est de $30[\sigma]$, $30[\sigma]$ et $30[\sigma]$, et la taille du film est de $30[\sigma]$, $\approx 14[\sigma]$ et $30[\sigma]$, suivant respectivement X , Y et Z . Les conditions aux limites périodiques sont appliquées au système suivant les axes \vec{X} et \vec{Z} . La simulation se fait dans le système thermodynamique NVT : le nombre N de particules dans la boîte reste constant ; le volume V de la boîte reste constant ; la température T moyenne de la boîte reste constante, et le film se dilate avec T (la régulation en température se fait avec un thermostat *DPD* [16]). La surface du film est laissée libre : le film s'arrange librement en surface (pression $P_h = 0$ en surface). Le modèle de chaînes flexibles est utilisé comme modèle générique grain - ressort pour représenter les chaînes de polymère linéaire. La connectivité des chaînes est assurée par un potentiel d'élongation harmonique, noté $U_{bond}(1)$, ($k_{bond} = 1111 \cdot \epsilon/\sigma^2$ est la raideur de la liaison, R_i est la longueur de la liaison et $r_0 = 0.967\sigma$ est sa longueur à l'équilibre). Les particules d'une même chaîne, qui ne sont pas directement liées, et les particules appartenant à des chaînes différentes interagissent via un potentiel de Lennard - Jones 12 - 6, noté $U_{LJ}(1)$, tronqué ($r_c = 2.3\sigma =$ rayon de coupure, pour lequel le potentiel est nul au-delà) et décalé ($C = 0.02684\sigma$ pour assurer la continuité du potentiel). La pointe est modélisée par un potentiel U_{LJ} (zone interdite par l'indenteur), où r devient la distance normale entre la surface de la pointe et une particule du film de polymère. Les valeurs suivantes ont été prises $r_c = 1.12\sigma$ et $C = 0.99982\sigma$. L'interaction est alors purement répulsive. Ceci associé au fait que la pointe est parfaitement lisse rend le contact modélisé parfaitement glissant.

$$U_{bond}(R_i) = 0.5 \cdot k_{bond} \cdot (R_i - r_0)^2 \quad \text{et} \quad U_{LJ}(r) = 4\epsilon \cdot [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] + C \quad (1)$$

5 Choix des paramètres pour l'analyse des résultats

Les règles de Bucaille *et al.* [17] préconisent : (1) une largeur de boîte de 20 fois le rayon de contact a ; (2) une hauteur de film de 6 fois l'enfoncement δ , pour s'affranchir des effets de bords. Le film utilisé en simulations de *DM* est de taille $30[\sigma]$, $\approx 14[\sigma]$ et $30[\sigma]$, soit approximativement $15[nm]$, $7[nm]$ et $15[nm]$ suivant respectivement X , Y et Z . Une valeur de l'ordre de $\delta = 5[\sigma]$ a été choisie pour atteindre des enfoncements jugés significatifs (typiquement quelques diamètres moléculaires) : la condition (2) n'est pas respectée, et une influence du substrat infiniment rigide sur la pente à la décharge est à attendre sur les courbes (P vs. δ). Par ailleurs, le diamètre de contact à un tel enfoncement pour un cône $\theta = 70.3^\circ$ serait de $27.9[\sigma]$, ce qui est trop comparé aux $30[\sigma]$ de largeur de boîte (condition (1)). Pour rester proche de ce cône, et afin d'éviter les fluctuations numériques observées pour les faibles angles de cônes ($\theta = 30^\circ$ et $\theta = 45^\circ$) en simulations de *DM*, le cône $\theta = 60^\circ$ a été choisi pour nos simulations ($2a$ sera alors de l'ordre de $17.3[\sigma]$). Ces choix arbitraires sont imposés par les limites actuelles concernant le nombre de chaînes et leur taille. Un calcul consomme actuellement en moyenne 15 jours de temps *CPU*. Ainsi en simulations par *MEF*, les valeurs des propriétés mécaniques du matériau sont les suivantes⁴ : $E = 2$ ou $4[GPa]$, $\nu = 0.31$, $A_1 = 0.01/E$ et $A_2 = 1.0$ (matériau fluant relativement peu). En simulations de *DM*, une gamme de vitesse sera étudiée, pour chaque type de pilotage et pour deux températures ($T = 0.2$ et $T = 0.4$). L'étude de l'évolution de l'épaisseur du film en fonction de la température [15], permet de connaître la température de transition vitreuse moyenne du film, qui est ici de $T_g = 0.4 \pm 0.03$. Les indentations présentées se font alors soit sur un film à l'état vitreux ($T = 0.2$), soit sur un film dans un état presque caoutchoutique ($T = 0.4$). Pour le pilotage en force, un coefficient de friction ($\zeta_{i/f} = 100$) entre l'indenteur et le film évite les oscillations numériques [13].

6 Discussion et perspectives

Pour les polymères, la dureté de contact $H \propto P/S$, où S désigne l'aire projetée de contact, est généralement une fonction de la géométrie de l'indenteur, des propriétés mécaniques (E , σ_y , etc.) et d'une vitesse de déformation équivalente $\dot{\epsilon}_{eq}$. Quelques travaux concernant cette fonction ont été proposés pour des matériaux élasto-plastiques (par exemple dans [18]). Néanmoins, pour les matériaux à comportement dépendant du temps, cette fonction est délicate à établir aussi bien analytiquement qu'expérimentalement, et le serait d'autant plus en simulations de *DM*. En effet, il est actuellement délicat d'estimer des propriétés mécaniques à partir de grandeurs microscopiques. Des formalismes de fluctuation (basés notamment sur la notion d'énergie libre de Helmholtz) existent, mais ne feront l'objet de ce travail. Aussi, ce dernier se limitera à une analyse plus qualitative des résultats. Tout d'abord, il est possible de remarquer que les courbes (P vs. δ) obtenues par simulations de *DM* (figures 4 et 6) sont très similaires à celles obtenues soit par nano-indentation, soit par simulations de *MEF*, au niveau de l'allure de l'hystérésis. Ceci est un premier résultat intéressant, validant notre modèle, car il est connu dans la littérature concernant la *DM*, que les fluctuations microscopiques, dans

³Les valeurs suivantes ont été prises : $m = 1.660 \cdot 10^{-25} [kg]$, ce qui correspond à une masse molaire de $M = 100 [g \cdot mol^{-1}]$ [14]. À noter également que k_b est la constante de Boltzmann : $k_b \approx 1.380 \cdot 10^{-23} [J \cdot K^{-1}]$, τ est l'unité de temps avec $\tau = \sqrt{(m \cdot \sigma^2)/\epsilon}$.

⁴Il est important de garder à l'esprit que ces valeurs se veulent dans un ordre d'idée d'un comportement type polymère vitreux, mais ne résultent en aucun cas d'un processus d'identification inverse à partir d'un test de compression expérimental.

un système de relative petite taille, peuvent conduire à des résultats délicats à étudier. Ensuite, en comparant les figures 4 et 5, il est possible de remarquer que les simulations de *DM* prévoient naturellement une diminution de la dureté du film de polymère avec la température d'essai : la force sur la pointe diminue pour un même enfoncement, lorsque la température augmente. En *MEF*, ceci n'est possible uniquement que par l'implantation d'une loi du type $E = f(T)$ et/ou $\sigma_y = f(T)$ (par exemple), provenant d'essais expérimentaux. La figure 5 montre, par exemple, qu'il est nécessaire de diminuer E pour observer un abaissement de la courbe (P vs. δ). Egalement, en comparant les figures 6 et 7, les simulations de *DM* prévoient encore naturellement une diminution de la dureté du film de polymère avec la température d'essai : l'enfoncement est plus conséquent pour la même force, lorsque la température augmente. Egalement, le "fluage de contact" dans la décharge, caractérisé par le nez⁵ apparaît de façon plus prononcée à forte température (cf. Fig. 6) ou pour des vitesses de décharge plus lentes (cf. Fig. 7). Ceci peut être observé par le fait que la raideur (liée à la pente de la courbe (P vs. δ) à la décharge) semble diminuer. Néanmoins au-delà d'un enfoncement de $\delta = 3[\sigma]$, cette tendance semble légèrement s'inverser, ceci étant dû à l'effet du substrat infiniment rigide, qui vient "rigidifier" la réponse (P vs. δ) à la décharge. Enfin, des essais de recouvrance dans le contact ont été réalisés par simulations de *DM*, aux deux températures d'essais $T = 0.2 (< T_g)$ et $T = 0.4 (\approx T_g)$ et pour une vitesse de déplacement $V = d\delta/dt = Cte$ constante. Les profils d'indentation sont présentés en figures 8 et 9. Ils révèlent que le film de polymère passe progressivement d'un comportement viscoplastique prédominant, puisque la recouvrance est partielle dans le temps (cf. Fig. 8), vers un comportement viscoélastique prédominant, puisque la recouvrance est quasi-totale, mais différée dans le temps (cf. Fig. 9). En *MEF*, un modèle incluant la viscoplasticité et la viscoélasticité, et tenant compte de l'importance de ces deux parts avec T et $\dot{\epsilon}_{eq}$ est nécessaire. Des travaux en cours sur *CAST3M*[©] permettront un tel objectif. A noter au passage que la rhéologie du film est difficile à identifier avec la seule donnée de la courbe (P vs. δ) : il faut encore disposer d'un essai de recouvrance. En conclusion, les simulations de *DM* appliquées à la mécanique du contact offrent des résultats intéressants, car similaires à ceux obtenus par l'expérimentation ou par simulations par *MEF*. Cependant, il est clair qu'une comparaison stricte n'est actuellement pas encore possible. Cet outil de modélisation bénéficie d'une formulation thermodynamique microscopique sous-jacente, et donc plus appropriée pour étudier la physique locale du contact. Une première validation du modèle du contact normal ayant été présentée ici, il sera possible à plus long terme d'étudier l'orientation des liaisons sous le contact, les contraintes sous l'indenteur (tenseur viriel), et ceci pendant le contact normal et tangentiel. Des travaux sont en cours sur des films de plus grande taille.



FIG. 1 – (a) : schéma montrant l'échelle spatiale servant de cadre à cette étude ; (b) : P désigne la charge appliquée sur l'indenteur, δ l'enfoncement sous la surface, $2a$ le diamètre de contact et θ le demi-angle d'ouverture du cône ; (c) : modélisation du contact en simulations de *DM* sur films de polymère. La pointe est modélisée avec des particules pour une meilleure clarté, mais elle est parfaitement lisse. Le modèle de chaînes est de type "chaînes flexibles" ; (d) : maillage utilisé pour les simulations par *MEF* de l'essai de nanoindentation.

⁵Ce phénomène a pour origine soit la viscoélasticité, soit la viscoplasticité du polymère.

symbole <i>LJ</i>	Désignation	symbole <i>SI</i>
$r^* = (1/\sigma) \cdot r$	longueur	r [m]
$\sigma \approx 0.5 \cdot 10^{-09}$ [m]		
$T^* = (k_b/\epsilon) \cdot T$	température	T [K]
$\epsilon/k_b \approx 8.5 \cdot 10^{+02}$ [K]		
$t^* = (1/\tau) \cdot t$	temps	t [s]
$\tau \approx 1.9 \cdot 10^{+00}$ [ps]		
$F^* = (\sigma/\epsilon) \cdot F$	force	F [N]
$\epsilon/\sigma \approx 2.3 \cdot 10^{+01}$ [pN]		

FIG. 2 – Principales unités *LJ* et unités *SI*. Des ordres de grandeur pour un *PMMA* sont donnés. Les échelles de temps et d'espace sont encore faibles par rapport à celles des simulations par *MEF* ou de l'expérimental. Néanmoins, l'objectif à long terme de ce travail est d'étudier des mouvements moléculaires, donc des mouvements à des échelles de temps et d'espace microscopiques.

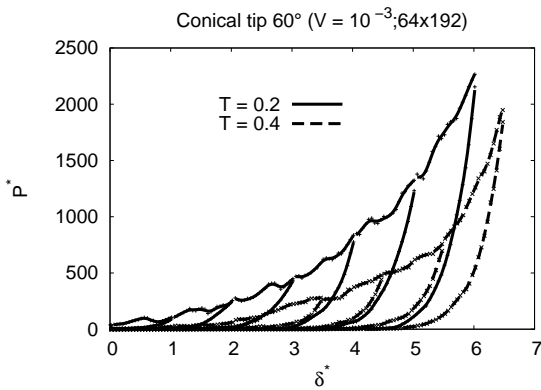


FIG. 4 – Simulations de *DM* d'indentations avec $V = d\delta/dt = Cte$. La raideur du film décroît avec la température. Les courbes (P vs. δ) contiennent plusieurs retours, car plusieurs profondeurs ont été testées.

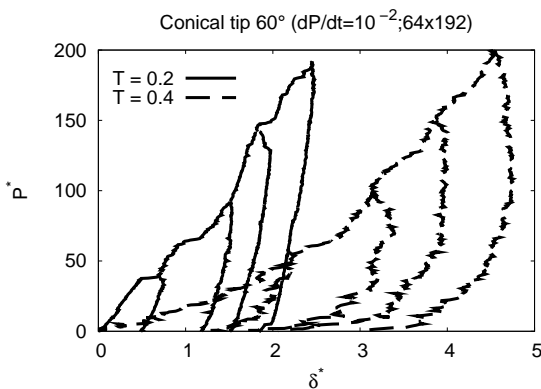


FIG. 6 – Simulations de *DM* d'indentations avec $dP/dt = Cte$. La dureté du film décroît avec la température et du fluage apparaît pendant le déchargement surtout à $T = 0.4$.

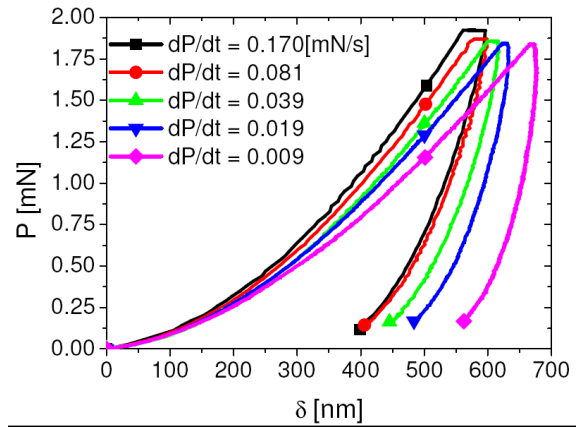


FIG. 3 – Essais expérimentaux de nano-indentation sur *PMMA* coulé, à vitesse de chargement dP/dt constante. La vitesse au chargement et au déchargement est la même.

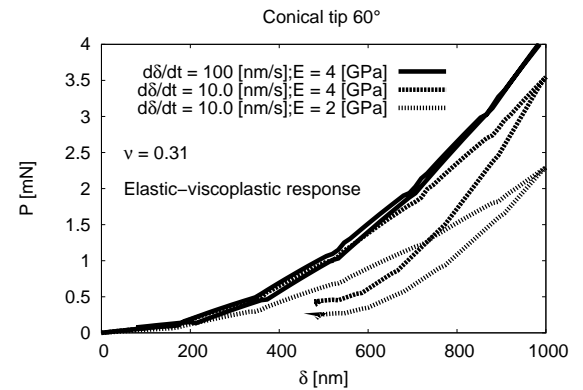


FIG. 5 – Simulations par *MEF* d'indentations avec $V = d\delta/dt = Cte$. Une apparition de plus en plus marquée du fluage, à mesure que V diminue, est observable. Le retour est ici purement élastique.

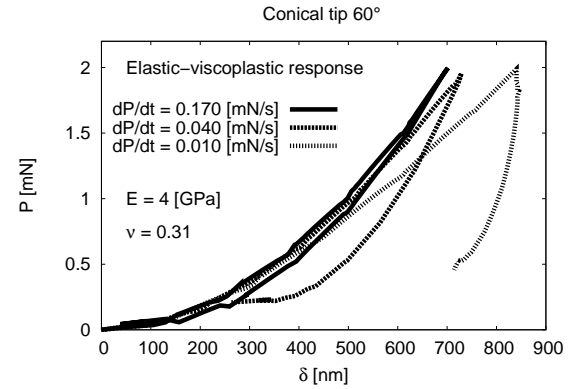


FIG. 7 – Simulations par *MEF* d'indentations avec $dP/dt = Cte$. Une apparition de plus en plus marquée du fluage dans le retour, à mesure que dP/dt diminue, est observable. Le retour n'est ici pas purement élastique.

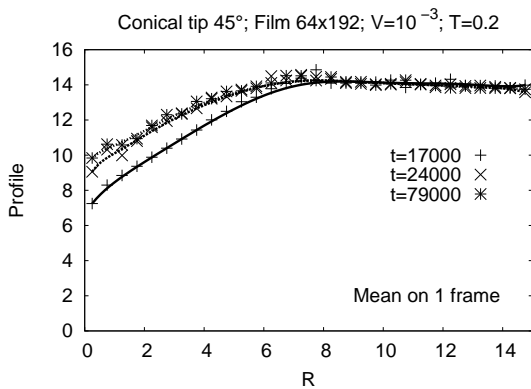


FIG. 8 – Test de recouvrance à $T = 0.2 (< T_g)$ en simulations de *DM*. Le graphe montre l'évolution du profil de la surface (coordonnée Y) en fonction de la distance radiale $R = \sqrt{X^2 + Z^2}$ (cf. Fig. 1). Une recouvrance partielle est observée (la viscoplasticité prédomine).

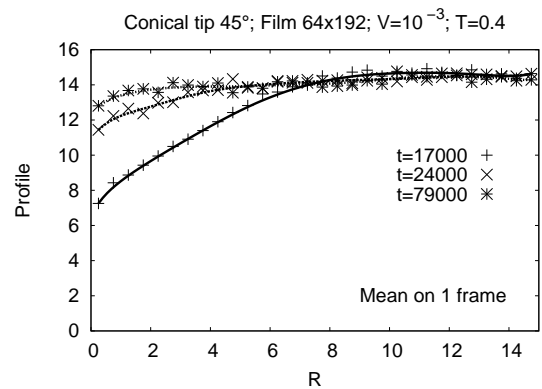


FIG. 9 – Test de recouvrance à $T = 0.4 (\approx T_g)$ en simulations de *DM*. Le graphe montre l'évolution du profil de la surface (coordonnée Y) en fonction de la distance radiale $R = \sqrt{X^2 + Z^2}$ (cf. Fig. 1). Une recouvrance quasi-totale est observée (la viscoélasticité prédomine).

Références

- [1] Charrault E. Analyse mécanique et physico - chimique de la relation entre le frottement et l'adhésion. PhD thesis, Université de Strasbourg (UdS), France.
- [2] Briscoe B. K. Friedrich, Composite materials series - Volume 1 : Friction and wear of polymer composites. Elsevier, Amsterdam, 1986.
- [3] Chen N., Maeda N., Tirrell M., and Israelachvili J. Adhesion and friction of polymer surfaces : The effect of chain ends. *Macromolecules*, 38, 3491–3503, 2005.
- [4] Léger L., Hervet H., and Bureau L. Friction mechanisms at polymer-solid interfaces. *C. R. Chimie*, 9, 80–89, 2006.
- [5] Bucaille J., Felder E., and Hochstetter G. Identification of the viscoplastic behavior of a polycarbonate based on experiments and numerical modeling of the nano-indentation test. *Journal of Materials Science*, 37, 3999–4011, 2002.
- [6] Bucaille J., Gauthier C., Felder E., and Schirrer R. The influence of strain hardening of polymers on the piling-up phenomenon in scratch tests : Experiments and numerical modelling. *Wear*, 260, 803–814, 2006.
- [7] Bucaille J., Felder E., and Hochstetter G. Mechanical analysis of the scratch test on elastic and perfectly plastic materials with the three-dimensional finite element modeling. *Wear*, 249, 422–432, 2001.
- [8] Lemaître J. and Chaboche J. *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, Paris, 1988.
- [9] Kermouche G., Loubet J., and Bergheau J. Cone indentation of time-dependent materials : The effects of the indentation strain rate. *Mechanics of Materials*, 39, 24–38, 2007.
- [10] Besson J., Cailletaud G., Chaboche J., and Forest S. *Mécanique non linéaire des matériaux*. Hermès, Paris, 2001.
- [11] Allen M. and Tildesley D. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications, USA, 1987.
- [12] Frenkel D. and Smit B. *Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Applications*. Academic Press, UK, 1996.
- [13] Pätzold G., Linke A., Hapke T., and Heermann D. Computer simulation of nanoindentation into polymer films. *Z. Phys. B*, 104, 513–521, 1997.
- [14] Schnell B. Etude par simulation numérique de la transition vitreuse et de l'état vitreux de polymères denses amorphes : propriétés mécaniques et phénomène de cavitation. PhD thesis, UdS, France.
- [15] Peter S., Meyer H., and Baschnagel J. Thickness - dependent reduction of the glass-transition temperature in thin polymer films with a free surface. *Journal of Polymer Science*, 44, 2951–2967, 2006.
- [16] Soddemann T., Dünweg B., and Kremer K. Dissipative particle dynamics : A useful thermostat for equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations. *Physical Review E*, 68, 046702–1 – 046702–8, 2003.
- [17] Bucaille J. Simulation numérique de l'indentation et de la rayure des verres organiques. Ph.d. thesis in materials science, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, France, 2001.
- [18] Johnson K. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, UK, 1985.