



Assessing the plastic response of amorphous silica, a multiscale approach

Guillaume Kermouche, Boris Mantsi, Anne Tanguy, Etienne Barthel, Gaylord Guillonnet, Johann Michler

► To cite this version:

Guillaume Kermouche, Boris Mantsi, Anne Tanguy, Etienne Barthel, Gaylord Guillonnet, et al.. Assessing the plastic response of amorphous silica, a multiscale approach. CFM 2015 - 22ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2015, Lyon, France. hal-03444646

HAL Id: hal-03444646

<https://hal.science/hal-03444646>

Submitted on 23 Nov 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.

Assessing the plastic response of amorphous silica *a multiscale approach*

G. Kermouche¹, B. Mantisi², A. Tanguy², R. Lacroix³, J. Teisseire³, E. Barthel⁴, G. Guillonneau⁵, J. Michler⁵

¹ Ecole des Mines de Saint-Etienne, LGF UMR5307 CNRS, Saint-Etienne

² Université de Lyon, ILM UMR5306 CNRS, Villeurbanne

³ Saint-Gobain Recherche, SVI UMR125 CNRS, Aubervilliers

⁴ ESPCI ParisTech CNRS UPMC, Soft Matter Science and Engineering, Paris

⁵ EMPA, LMMN, Feuerwerkerstr. 39, CH-3602 Thun

Résumé :

En dépit de sa fragilité, la silice amorphe se déforme plastiquement aux échelles microscopiques. C'est ce qu'on observe par exemple en indentation. De façon remarquable, cette déformation irréversible de la silice amorphe mobilise deux processus : 1) l'écoulement en cisaillement ; 2) la densification ou compaction.

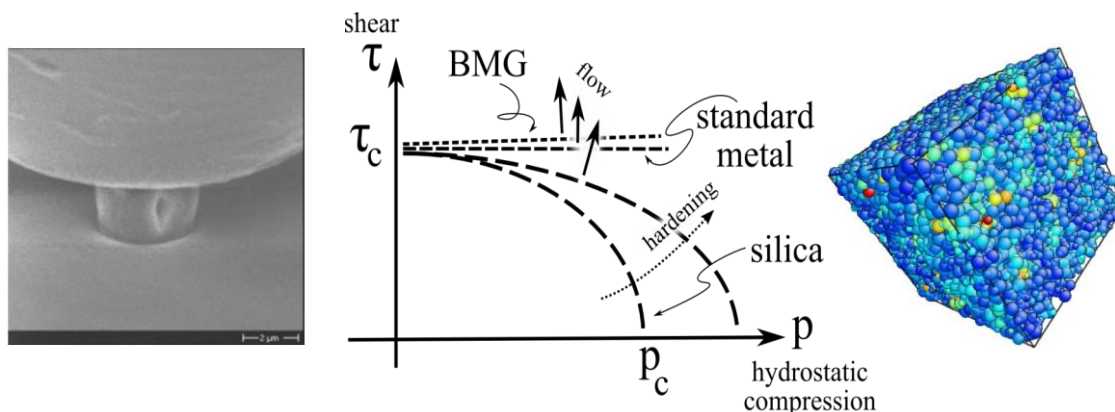


Figure : à gauche compression in situ de pilier de silice amorphe (diamètre 3 microns) – au centre : surface de charge de la silice amorphe tracée dans un plan pression hydrostatique - contrainte de von Mises, et comparée au critères classiques pour les métaux (standard metal), ainsi que pour les verres métalliques (BMG) ; à droite, volume représentatif dans le calcul de la réponse en compression hydrostatique de la silice amorphe par Dynamique Moléculaire

left :in situ compression of amorphous silica pillars (3 micron diameter) – middle: yield surface for amorphous silica, plotted in the hydrostatic compression – von Mises stress plane; also shown is the standard plastic yield criterions for respectively metals and Bulk Metallic Glasses. - right: representative volume for the calculation of the response in compression of amorphous silica by Molecular Dynamics simulations.

Pour déterminer phénoménologiquement une loi de comportement plastique de la silice amorphe, nous avons développé des expériences de mesure mécanique à l'échelle locale (Fig., gauche). En particulier, récemment, nous avons effectué des mesures de compression uniaxiale sur des piliers de

silice de petite taille [1]. Dans nos expériences les plus récentes, nous dépassons même le stade plastique et génèrons, de façon inattendue, de la fracture à ces échelles très réduites.

Tous nos résultats expérimentaux sont en très bon accord avec une loi de comportement qui couple pression hydrostatique et cisaillement selon un comportement compactant (Fig., centre), en introduisant un écrouissage paramétré par la densité. Afin de mieux comprendre les origines physiques de ce comportement, nous avons conduit des simulations par dynamique moléculaire [2] (Fig., droite). En utilisant des potentiels relativement classiques, nous retrouvons qualitativement une forme de surface de charge proche de celle que nous avons identifiée à partir des expériences. En outre l'approche locale permet de donner corps à l'hypothèse que c'est le comportement de flambement de la structure locale, initialement très ouverte, qui est à l'origine de ce comportement très caractéristique. Nous montrerons alors en quoi cette vision de la plasticité de la silice amorphes est cohérente avec les autres propriétés mécaniques et physiques remarquables de la silice amorphe comme la nonlinéarité élastique anormale, le faible coefficient de Poisson et le faible coefficient de dilataion.

Abstract :

Despite their brittleness, silicate glasses undergo plastic deformation at the micron scale. Mechanical contact and indentation are the most common situations of interest.

It is well known that the plastic deformation mechanisms of amorphous silica is characterized not only by shear flow but also by a permanent densification process, also called compaction. To accommodate this behaviour in our model, we have proposed a compacting yield surface, with hardening driven by density (Fig., center). In order to develop relevant constitutive models for amorphous silica, we have carried out a number of micromechanics experiments in the plastic deformation range [1]. Here we present novel observations of the deformation and fracture of silica glass micropillars of various sizes using in situ SEM micro-compression (Fig., left). We find that all our experimental results are adequately described by this constitutive relation.

In parallel to this experimental investigation, atomistic simulations [2] were set up to provide an atomic scale viewpoint (Fig. right) on the plastic deformation mechanisms. In particular, the mechanical response under coupled shear-pressure loading was scrutinized in detail. The results provide a picture of the plastic response which is consistent with the constitutive relation determined experimentally. We also demonstrate that a local mechanism of buckling is connected to the specific shape of the yield surface at lower density (or large free-volume) whereas a BMG-like response is observed when the sample density reaches saturation.

Thanks to this rich set of data, it seems now possible to define a constitutive model taking into account both nanomechanical results (i.e. nanopillars, nanoindentation, diamond anvil cell) and molecular dynamics simulations.

Mots clefs :

plasticité, silice amorphe, loi de comportement, mesures micromécaniques, dynamique moléculaire.

Références :

- [1] R. Lacroix, G. Kermouche, J. Teisseire, E. Barthel, "Plastic deformation and residual stresses in silica pillars under uniaxial loading", *Acta Materialia*, 60 (15), 2012, pp 5555 -
- [2] Mantsi, A. Tanguy, G. Kermouche, E. Barthel, "Detailed study of the Atomistic response of a Model Silica Glass under Shear and Pressure", *European Physical Journal B*, 85 (9), 2012, art No 34