HAL open science

Expansion thermique des argiles depuis l'échelle moléculaire

Laurent Brochard, Tulio Honorio, Matthieu Vandamme, Ioannis Stefanou, Siavash Ghabezloo, Michel Bornert

To cite this version:

Laurent Brochard, Tulio Honorio, Matthieu Vandamme, Ioannis Stefanou, Siavash Ghabezloo, et al.. Expansion thermique des argiles depuis l'échelle moléculaire. 14ème colloque du Groupe Français des Argiles, May 2016, Poitiers, France. . hal-03995501

HAL Id: hal-03995501

https://hal.science/hal-03995501v1

Submitted on 18 Feb 2023

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.

Expansion thermique des argiles depuis l'échelle moléculaire

L. Brochard[1], T. Honorio de Faria[1], M. Vandamme[1], I. Stefanou[1], S. Ghabezloo[1], M. Bornert[1]
E-mail : laurent.brochard@enpc.fr
1: Laboratoire Navier (UMR 8205), CNRS, ENPC, IFSTTAR, 6-8 avenue Blaise Pascal, 77455, Marne-la-Vallée, France

ABSTRACT

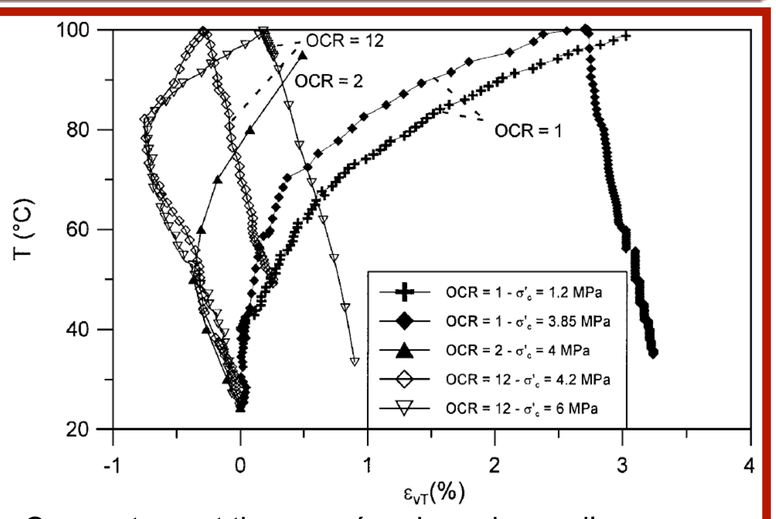
Les argiles ont un comportement thermo-mécanique atypique qui dépend de l'état de consolidation : les argiles normalement consolidées présentent une contraction thermique non linéaire irréversible tandis que des argiles sur-consolidées présentent une expansion thermique réversible suivie d'une contraction thermique irréversible. Afin de mieux comprendre ce comportement et les rôles de la microstructure et de l'eau adsorbée, nous menons dans ce travail une étude théorique par simulations moléculaires et homogénéisation mécanique de systèmes modèles 2D représentant des solides microporeux lamellaires avec fluide interstitiel. Le comportement à l'échelle des feuillets est décrit par des isothermes de pression de disjonction 'oscillants' en raison de la structuration en couche du fluide interfoliaire. Une augmentation de température entraine un écrêtages des pics de pressions de disjonction et leur glissement vers des distances basales plus élevées. Ces deux phénomènes offrent une lecture possible du comportement thermo-mécanique des argiles (expansion réversible / contraction irréversible).

CONTEXTE

Un comportement atypique

Comportement thermomécanique drainé :

- Argile normalement consolidée : contraction non-linéaire irréversible
- Argile pré-consolidée : expansion thermique à basse température partiellement réversible, et contraction thermique irréversible à haute température.



Comportement thermomécanique des argiles en fonction du degré de sur-consolidation (OCR).
Source : Sultan, N., Delage, P., & Cui, Y. J. (2002) Temperature effects on the volume change behaviour of Boom clay. Engineering Geology, 64(2-3), 135-145

Rôle central de l'eau adsorbée

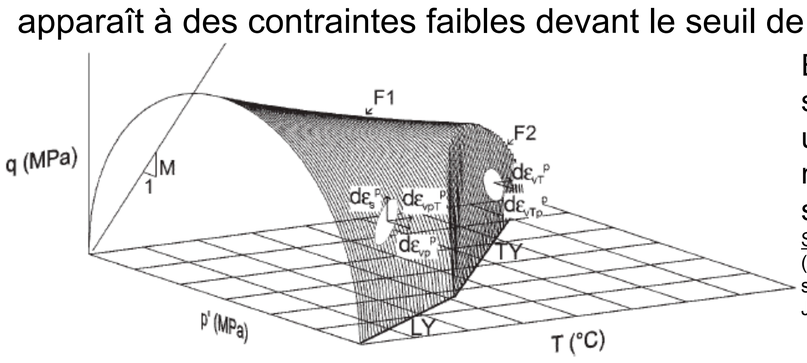
L'ordre de grandeur des déformations thermiques dépasse ce qui est habituellement observé pour un solide ⇒ rôle central de l'eau interfoliaire.

Etat de l'art

Expansion réversible : dilatation thermique des minéraux ? (mais l'ordre de grandeur semble excessif)

Contraction irréversible : phénomène mal compris attribué aux interactions eau-argile et à la désorption de l'eau.

Modélisation : recours à un nouveau type de plasticité 'thermique' car, pour les états sur-consolidés, le comportement irréversible en température apparaît à des contraintes faibles devant le seuil de consolidation.



Exemple de modèle de surface seuil correspondant à un modèle de type Cam-Clay modifié en introduisant un seuil de plastique 'thermique'
Source : Cui, Y. J., Sultan, N., & Delage, P. (2000). A thermomechanical model for saturated clays. Canadian Geotechnical Journal, 37, 607–620

Questions

Quels mécanismes physiques expliquent le comportement atypique ?

Quel sens donner à un seuil de plasticité 'thermique' ?

ETUDE D'UN MATÉRIAU MODÈLE 2D

Objectif et méthode

Etudier les mécanismes physiques du comportement atypique à partir de modèles aussi simple que possible tout en capturant le cœur du problème

1. Etude à partir de l'échelle moléculaire (prise en compte de l'adsorption)
2. Etude d'un matériau modèle 2D reprenant les caractéristiques essentielles du problème (milieu lamellaire avec fluide interstitiel)

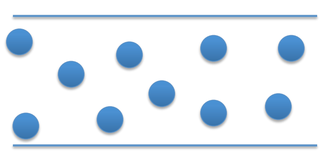
Simulations moléculaires à l'échelle du feuillet

Fluide de Lennard-Jones entre 2 surfaces solides rigides

Calcul de la contraintes transverse (pression de disjonction)

$$E = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \qquad r < r_c$$

$$E = \epsilon\left[\frac{2}{15}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{9} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{3}\right] \qquad r < r_c$$



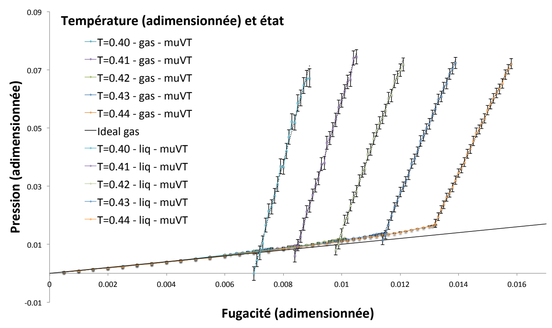
Homogénéisation mécanique à l'échelle de la matrice argileuse

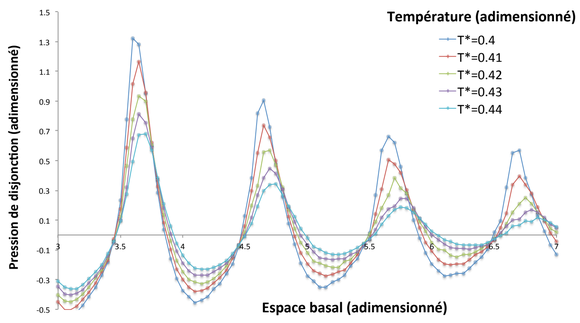
Les différences entre états sur-consolidé et normalement consolidé sont au cœur du comportement thermo-mécanique. Aussi, il est essentiel de tenir compte des évolutions de microstructure durant l'histoire de chargement.

COMPORTEMENT À L'ÉCHELLE DU FEUILLET

Isothermes de pression de disjonction à différentes température

1. Comportement du fluide bulk
→ Relation entre potentiel chimique, pression et température
2. Simulation du matériau modèle
→ Fluide grand canonique (conditions drainées)
→ Solide canonique (confinement mécanique par déplacement imposé)
3. Calcul des isothermes de pression de disjonction à différentes températures
→ Isotherme oscillant typique d'une structuration en couches
→ Ecrêtages des pics avec la température
→ Déplacement des pic vers des distances basales plus importantes





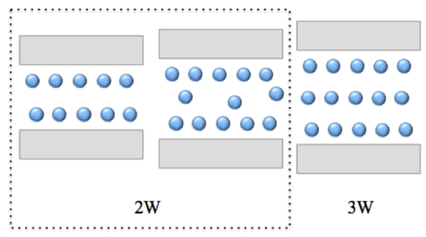
Interprétation possible du comportement thermo-mécanique

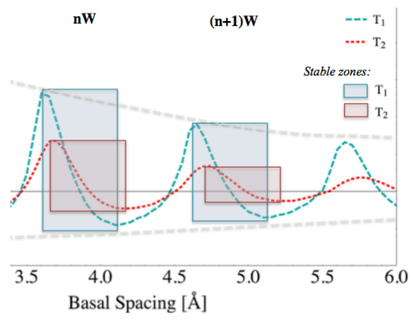
- Contraction irréversible : désorption spontanée de couches d'eau devenues instable en raison de l'écrêtage des pics
- Expansion réversible : expansion thermique des couches d'eau restées stables

COMPORTEMENT DE LA MATRICE ARGILEUSE

Homogénéisation

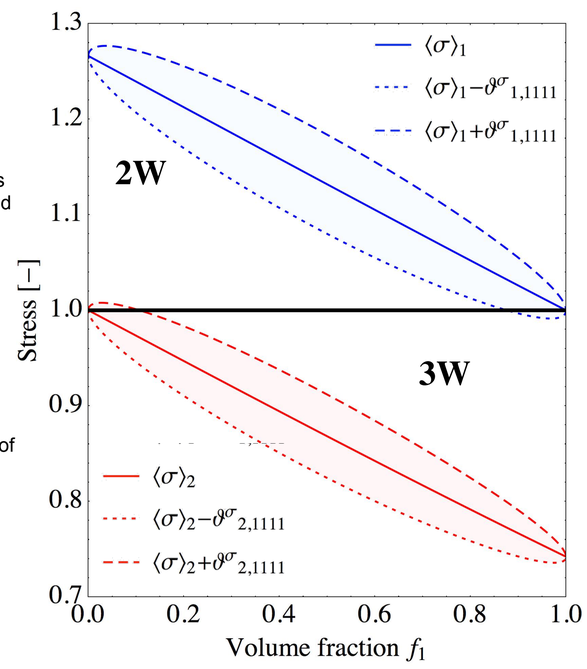
Prise en compte de changements de 'phase' (nb de couches de fluide interfoliaire) nW ↔ (n-1)W produisant des contraintes résiduelles.





Approche par "champs moyens"

- Estimation des champs mécaniques moyens interphase
- Estimation les fluctuations intraphase (Source : M. Bobeth and G. Diener. Field fluctuations in multicomponent mixtures. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 34(1):1–17, January 1986. & M. Bobeth and G. Diener. Static elastic and thermoelastic field fluctuations in multiphase composites. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 35(2) 137–149, January 1987.)
- Estimations en présence de contraintes résiduelles (Source : M. Bornert, R. Masson, P. Ponte Castañeda, and A. Zaoui. Second-order estimates for the effective behaviour of viscoplastic polycrystalline mate- rials. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 49(11):2737–2764, November 2001.)



Approche incrémentale

→ permet de décrire l'histoire de chargement (consolidation) et les distributions de phases et de contraintes résiduelles

CONCLUSIONS

L'étude d'un matériau modèle 2D nous permet d'identifier des pistes possibles d'explication du comportement thermo-mécanique atypique des argiles : contraction irréversible due à la désorption spontanée de couches d'eau devenues instables dans l'isotherme de pression de disjonction en raison de l'écrêtage des pics de pression de disjonction suite à une augmentation de température, expansion réversible due l'expansion thermique des couches d'eau interfoliaire stables. L'homogénéisation mécanique doit permettre de confirmer ces pistes en tenant compte des états de consolidations. L'application à des modèles d'argiles réalistes est envisagées par la suite.

Cette étude est financée dans le cadre du projet ANR TEAM2ClayDesicc (contrat ANR-14-CE05-0023-01).