

ENSMP 1ère année, Mécanique des matériaux solides, mars 2011

Comportement d'un nanocomposite ; un élastomère renforcé par des nanotubes de carbone.

1 Introduction du sujet et des outils

Présentation

Les matériaux macromoléculaires mous tels que les élastomères ou les gels présentent une élasticité en grande déformation unique et sont au coeur d'une longue liste applications telles que les adhésifs, textiles, amortisseurs, pneumatiques, additifs agroalimentaires et cosmétiques ou matériaux à usage biomédical. Le but de ce mini-projet est de caractériser le comportement d'un matériau hydrogel biocompatible en développement pour le remplacement de tissus mous endommagés. Nous considérerons le cas particulier du remplacement de disques intervertébraux pour lesquels le comportement en compression est fondamental. Ce projet explore le concept d'hyperélasticité des réseaux macromoléculaires par une approche combinant théorie, expérience et simulation numérique.

Objectifs

Avec ce travail, vous vous intéresserez dans un premier temps à l'origine physique de l'élasticité des élastomères et des gels. En vous appuyant sur un cours et sur votre propre recherche bibliographique vous chercherez à comprendre et à décrire comment les propriétés moléculaires de ces matériaux gouvernent leur comportement mécanique et comment ce comportement mécanique peut être modélisé dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Dans un second temps, vous étudierez au travers de calculs analytiques le comportement en compression du nanocomposites.

En parallèle ou à la suite de ce travail théorique, vous caractériserez expérimentalement le comportement en compression du nanocomposite. Vous étudierez comment vos mesures peuvent être décrites par les modèles théoriques.

Enfin, vous utiliserez vos mesures et/ou des données de la littérature pour simuler numériquement un essai de compression et vous optimiserez les paramètres matériau.

Matériel, logiciels, et documents

Pour la partie analytique, vous suivrez un cours spécialisé dédié à la physique et à la mécanique de l'élasticité caoutchoutique. Plusieurs documents bibliographiques seront également fournis et il est fortement recommandé d'effectuer votre propre recherche bibliographique pour approfondir votre compréhension et connaissance de ces systèmes.

Pour la partie expérimentale, les essais seront effectués sur la machine d'essais mécanique équipée des plateaux de compression. Les matériaux nanocomposites vous seront fournis au début du projet. L'analyse et l'interprétation des mesures se fera sur des logiciels type tableur de votre préférence.

Pour la partie simulation, les résultats seront obtenus à l'aide de simulations par élément finis. Les instructions pour lancer ces simulations et en extraire les résultats sont données dans la suite du texte.

2 Description du projet

L'étude de l'effet des nanotubes de carbone sur le comportement mécanique des matériaux élastomères, nous permet de développer de nouveaux outils de modélisation permettant de prendre en compte l'anisotropie induite sous déformation du matériaux. Selon le choix de la définition de la déformation d'une fibre [?], le nombre de familles de fibre représenté et leur orientation, nous pouvons générer un comportement initialement isotrope et qui reste isotrope quelque soit le chargement appliqué.

Elasticité caoutchoutique et Modélisation hyperélastique

Voici ci-dessous une description très condensée du cadre théorique qui vous permettra de mieux comprendre l'origine de l'élasticité caoutchoutique et sa modélisation mécanique. L'élasticité caoutchoutique doit son origine à sa composition de macromolécules. L'origine physique de cette élasticité est différente de l'élasticité provenant des interactions entre atomes dans un réseau cristallin par exemple. La description de l'origine de l'élasticité caoutchoutique peut être faite de la façon suivante :

1. Conformation statistique d'une chaîne idéale et en particulier statistique gaussienne du vecteur entre extrémités.
2. Entropie d'une chaîne ayant une elongation donnée.
3. Energie libre de cette chaîne et la force qui en dérive.
4. Description d'un réseau fait de chaînes idéales dont les configurations obéissent à une statistique gaussienne.
5. Variation de l'entropie d'une chaîne dans un volume élémentaire soumis à une déformation $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$.
6. Variation de l'entropie et de l'énergie libre de l'ensemble du volume élémentaire.
7. Dérivation du tenseur des contraintes (Loi de Treloar).

Pour la modélisation du comportement mécanique, l'élasticité des réseaux macromoléculaires présentent trois particularités importantes :

1. Les niveaux de déformation élastique sont généralement de grande amplitude. Typiquement, un élastomère peut subir des déformations de plus de 100% et retrouver quasi-parfaitement sa forme initiale.
2. Comme pour un ressort, les contraintes générées par l'élasticité caoutchoutique sont définies par rapport à la position initiale.
3. La relation contrainte-déformation dérive directement de l'énergie libre du système et plus particulièrement de son entropie.

Les aspects (1) et (2) indiquent que les approximations faites dans le formalisme en petite déformation ne sont généralement pas vérifiées. Il est donc nécessaire de se placer dans le cadre plus général des "grandes" déformations.

La particularité (3) suggère par ailleurs que les élastomères peuvent être modélisés par une loi de comportement *hyperélastique*. En effet, les mécanismes d'élasticité caoutchoutique suggèrent que la contrainte dérive de l'énergie libre de la façon suivante :

$$\Pi = \rho \frac{\partial \psi(\mathbf{E}, T)}{\partial \mathbf{E}}$$

où Π est le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff II, \mathbf{E} est le tenseur de déformation de Green-Lagrange, T la température, ρ la densité et ψ la densité d'énergie libre.

En première approximation, il est raisonnable de considérer le matériau comme isotrope. Dans ce cas, le théorème de Rivlin et Ericksen (cf. cours MMC) indique

que l'énergie libre peut s'exprimer comme une fonction des invariants principaux I_1 , I_2 et I_3 du tenseur des déformations \mathbf{E} .

Plusieurs modèles hyperélastiques existent pour modéliser le comportement des réseaux macromoléculaires. Un modèle plus général que le modèle microscopique obtenu dans la section précédente (modèle de Treloar) est le modèle de Mooney-Rivlin (MR) proposé par Mooney et Rivlin en 1952 pour un matériau hyperélastique et incompressible. Dans ce modèle, la densité d'énergie libre s'exprime :

$$\psi(\mathbf{E}, T) = C_1(T)(I_1 - 3) + C_2(T)(I_2 - 3)$$

où C_1 et C_2 sont des paramètres matériau déterminés empiriquement.

3 Programme détaillé

Séance 1 - Cours élasticité caoutchoutique et hyperélasticité.

Séance 2 - Calcul analytique de la compression d'un élastomère

Q1 Discuter les effets de la température et de la longueur de la chaîne sur son comportement élastique.

Q2 Quel phénomène anticipez-vous pour de fortes elongations ?

Q3 Dans le cas d'une déformation uniaxiale selon l'axe 1, exprimez la contrainte vraie σ_{11} et la contrainte ingénieur $\tilde{\sigma}_{11}$.

Q4 Qu'en concluez sur la représentation classique σ en fonction de ϵ ?

Q5 Pour un réseau où les chaînes ont par exemple 10^3 monomères entre points de réticulation, quels sont les niveaux de déformation élastique maximum envisageables ?

Q6 Qu'en concluez vous sur la pertinence du formalisme "petite déformation" pour la modélisation du comportement des gels et des élastomères ?

Q7 Retrouvez la définition d'un matériau hyperélastique.

Q8 Retrouvez l'expression des invariants I_1 , I_2 et I_3 en fonction des elongations principales λ_1 , λ_2 et λ_3 .

Q9 Calculez les invariants pour la compression uniaxiale d'un solide incompressible.

Q10 Retrouvez le tenseur des contraintes pour une compression uniaxiale d'un matériau incompressible obéissant à l'hyperélasticité de Rivlin.

Q11 A partir de ces résultats, quelle serait une représentation du comportement en compression qui soit plus pertinente que σ en fonction de λ ? (On parle de représentation de Rivlin). **Modèle de RIVLIN**

$$W(I_1) = C_{10}(I_1 - 3) + C_{20}(I_1 - 3)^2 + C_{30}(I_1 - 3)^3 + \dots \quad (1)$$

Séance 3 - Essais de compression sur nanocomposites.

Pour caractériser ce matériau en compression, vous disposez d'une machine INSTRON® 3300. Un dispositif simple utilisant des mors de compression et un bac comme illustré par le schéma de la figure ??.

FIG. 1: Schéma de principe d'un essai de compression sur hydrogel en milieu aqueux.



La manipulation d'une machine de traction implique des risques pour vous et pour ceux qui vous entourent. Respectez les consignes de sécurité et ne manipulez jamais en l'absence du personnel encadrant.

La réalisation des essais comportera les étapes suivantes :

- Créer le programme qui servira à réaliser les essais de compression à l'aide du logiciel BlueHill®.
- Mesurer les dimensions de l'échantillon.
- Mettre en place le bac et l'échantillon.
- Positionner les limites des canaux *déplacement de la traverse* et *charge*, ainsi que la limite mécanique pour protéger l'échantillon et la cellule de force.
- Tarer la charge.
- Définir la position zéro de la traverse.
- Réaliser l'essai de compression.
- Démontez le dispositif en fin d'essai.

Q12 Décrivez brièvement par des schémas le montage de l'essai, la nature et position des capteurs.

Q13 Pour un essai de compression, observez comment l'échantillon se déforme ? Que pouvez vous conclure sur les conditions de glissement à la paroi ?

Q14 Mettez en place des essais permettant d'étudier :

- Le caractère élastique du matériau.
- Le comportement sous des chargements cycliques.

Q15 Pour chaque essai, tracez la force en fonction du déplacement et la contrainte nominale en fonction du taux de compression.

Q16 Décrivez et commentez la forme de la réponse mécanique.

Q17 Tracez les résultats en utilisant la représentation de Rivlin. Commentez.

Séance 4 - Analyse des résultats de la compression

Le but de cette séance est d'analyser la contribution de des MWNT de l'énergie de déformation du composite.

Q18 calculez l'énergie de déformation totale à partir des essais

Q19 à partir d'une description affine décomposez l'énergie de déformation total en la somme de l'énergie de déformation de la matrice et de l'énergie de des MWNT. Celles ci seront pondérées par la fraction volumique de nanotubes de chaque mélanges. En déduire l'énergie de déformation des nanotubes pour chaque mélange

Q20 Analyser les résultats obtenus et conclure

Séance 5 - Essais de compression sur nanocomposites

Séance 6 - Simulation numérique de la compression

L'objectif de cette partie est d'exploiter les simulations numériques pour identifier les paramètres matériaux de la loi de comportement de rivlin modélisant l'élastomère sans nanotubes, et ensuite identifier les paramètres matériaux de l'énergie de déformation des nanotubes.

Séance 7 - Cours d'homogénéisation.

Séance 8 - Rédaction du rapport et préparation de la soutenance

Outre la présentation des travaux menés lors des séances précédentes, vous pourrez vous poser les questions suivantes pour votre préparation de la restitution.

4 Bibliographie

Elasticité caoutchoutique et hyperélasticité

Cours de MMC et MMS de Mines-ParisTech.
de Gennes P.G. *Scaling Concepts in Polymer Physics*, Cornell Univ. Press, 1979.

Doi M. *Introduction to Polymer Physics*, Oxford Science Pub., 1996.