Lois de Comportement aux Petites Echelles en Elasticité / Plasticité

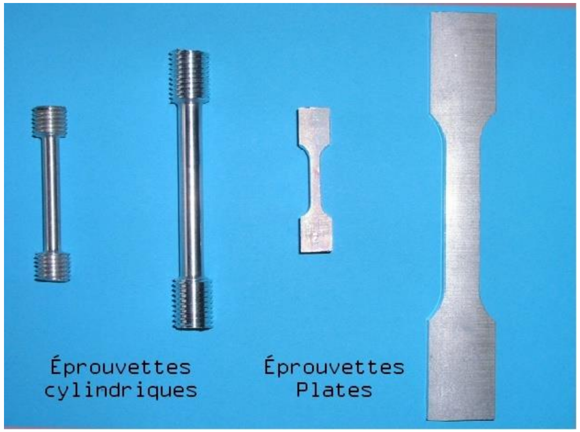
Ecole d'été du GDR MODMAT

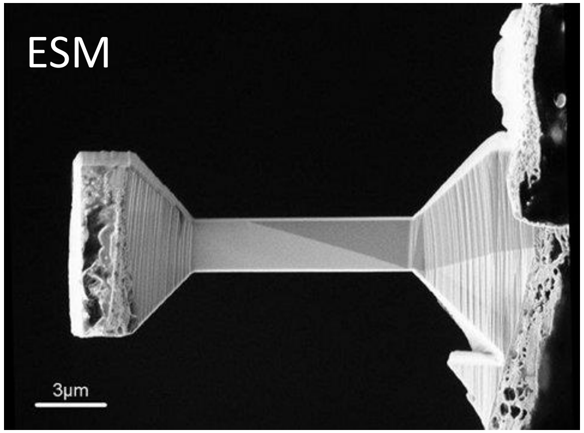
Anne.Tanguy@insa-lyon.fr

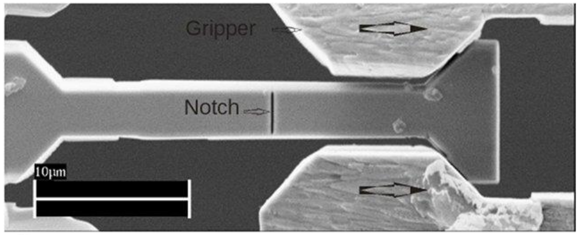
18 juillet 2019

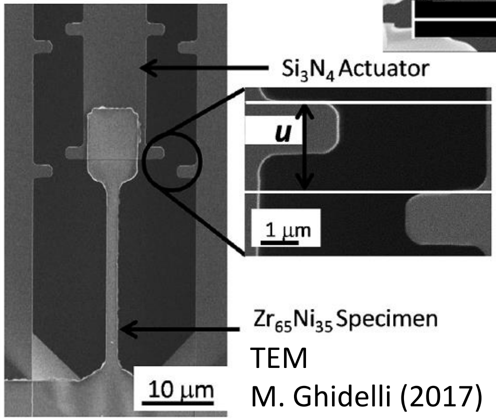
Mesures Mécaniques à **différentes échelles** dans un solide

Machines de Traction:

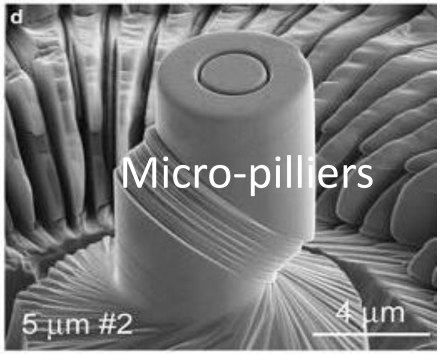


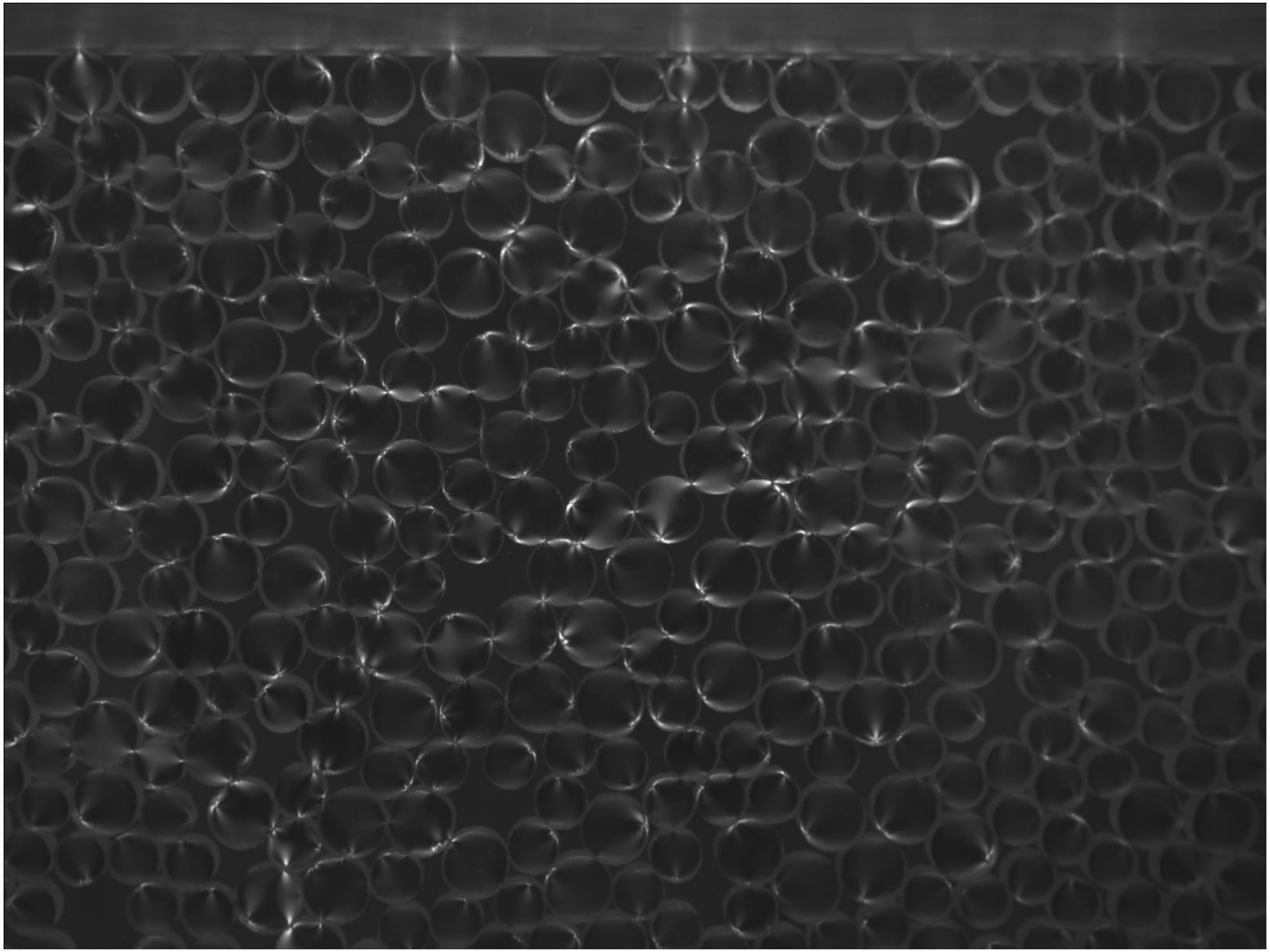






TEM
M. Ghidelli (2017)



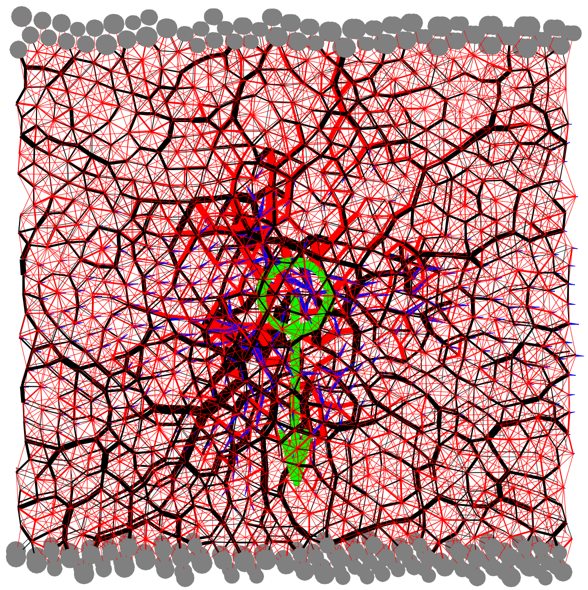


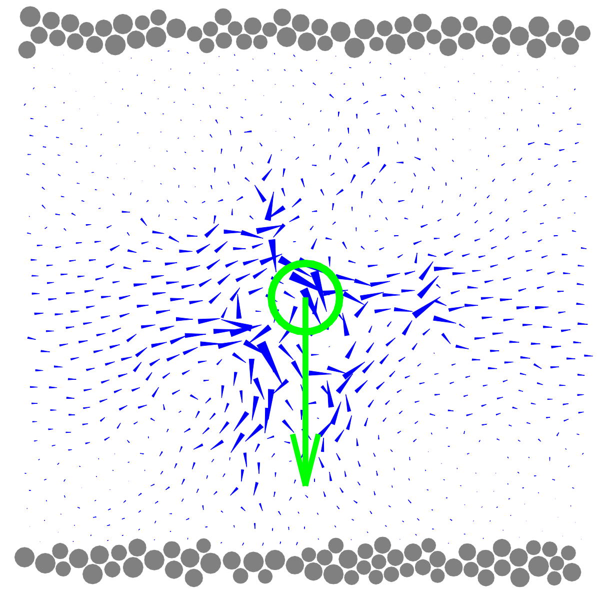
PMMH beads, E. Kolb (2006)

Simulations Atomistiques de particules type Lennard-Jones

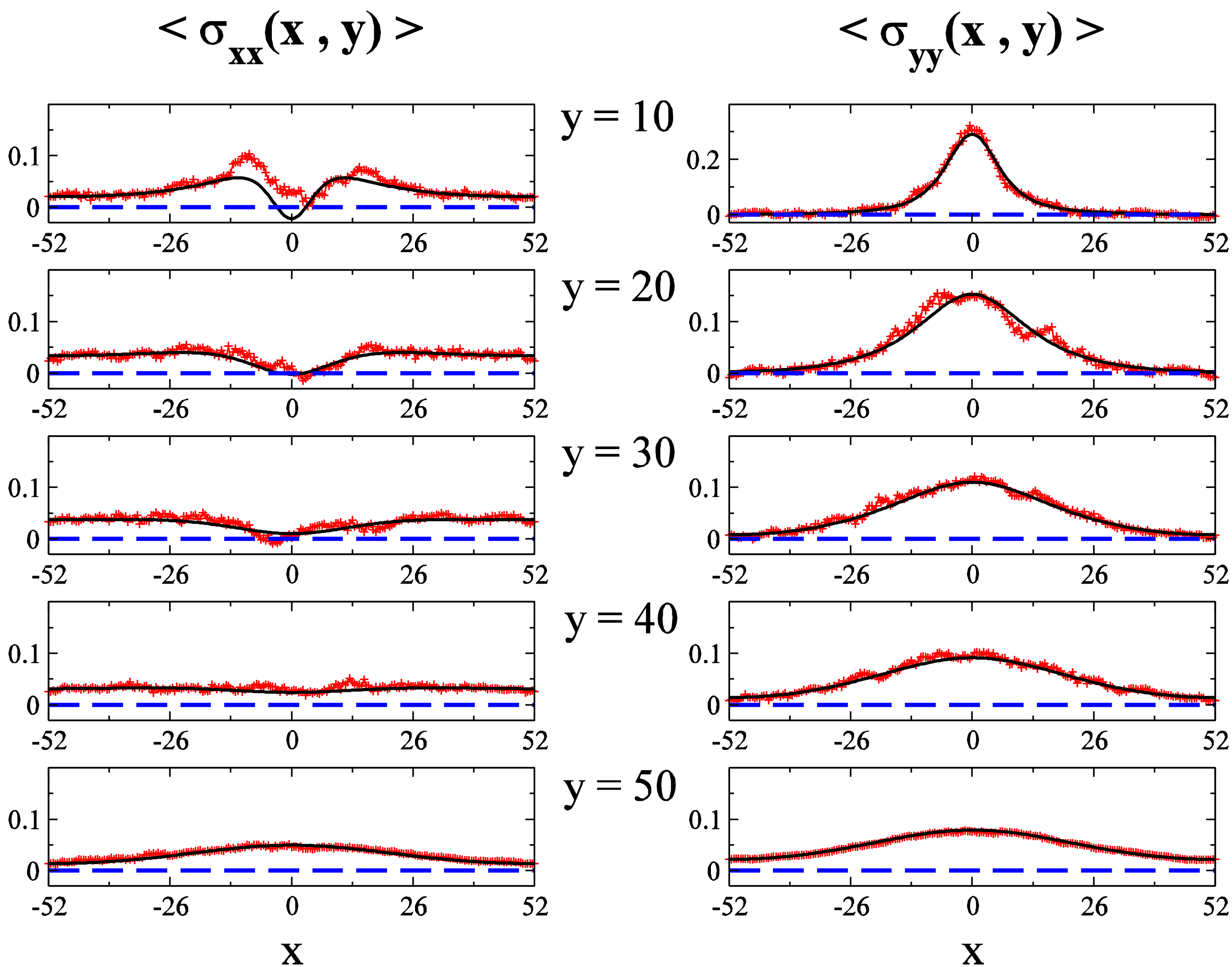
Exemple d'une assemblée désordonnées d'atomes

F. Léonforte et al. (2004)



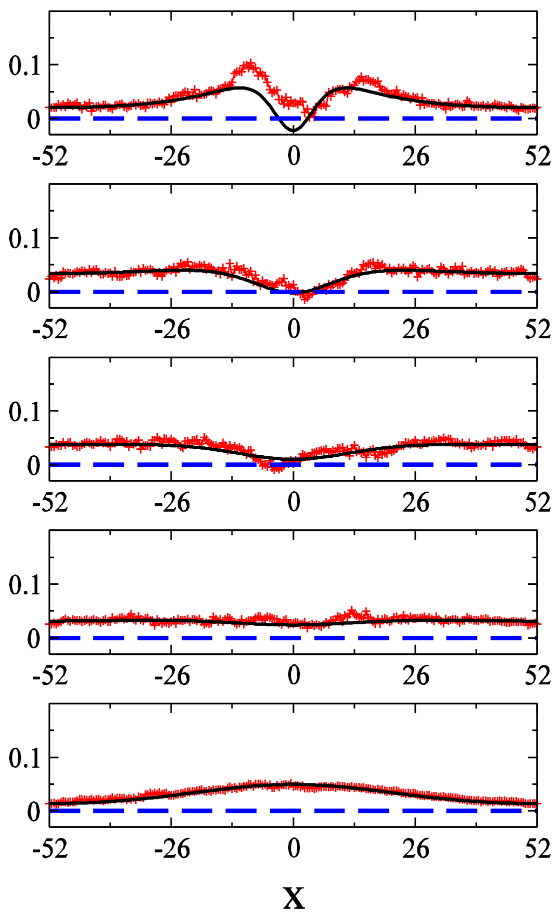


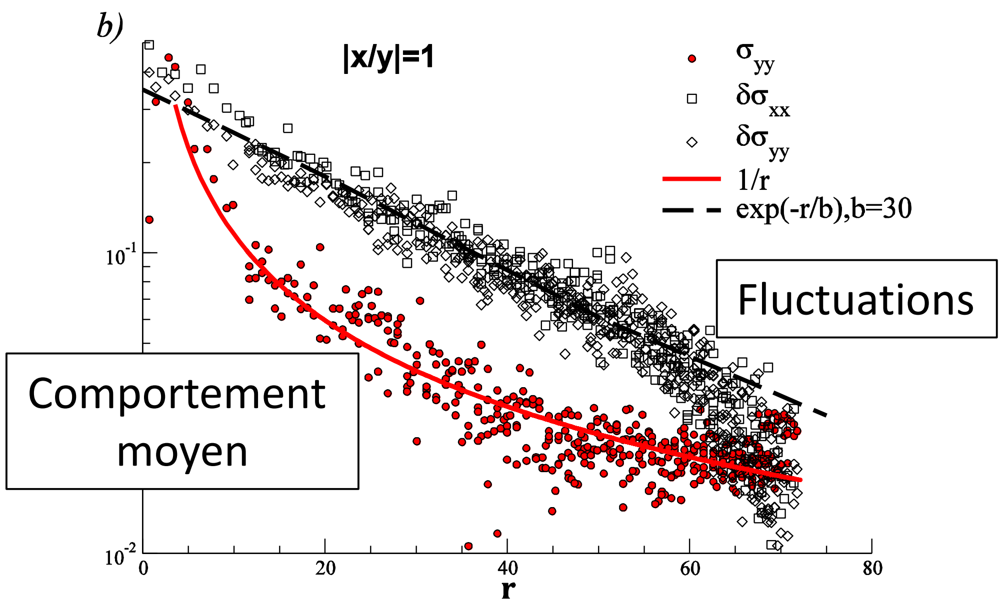
Réponse hétérogène, irrégulière. Comportement mécanique?


$< \sigma_{xx}(x, y) >$
$< \sigma_{yy}(x, y) >$
y = 10
y = 20
y = 30
y = 40
y = 50
0.1
0.2
0
-52
-26
0
26
52
x
x

Comparaison avec le comportement type Milieu Continu:

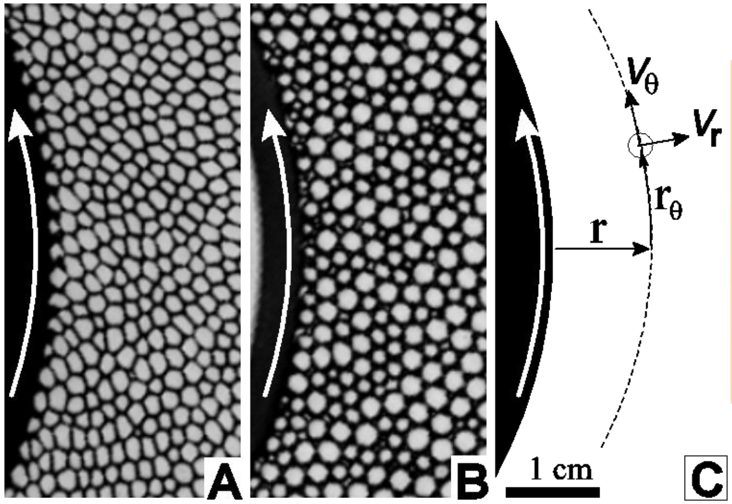
$< \sigma_{xx}(x , y) >$

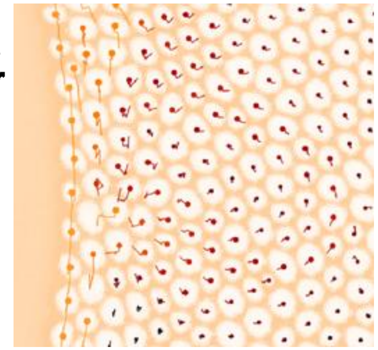




Comportement **moyen** comparable au milieu continu.
Fluctuations importantes sur des distances mésoscopiques

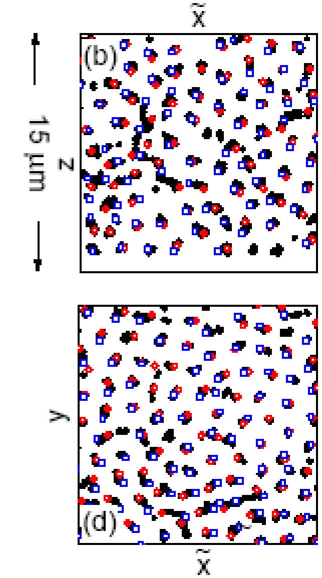
foams





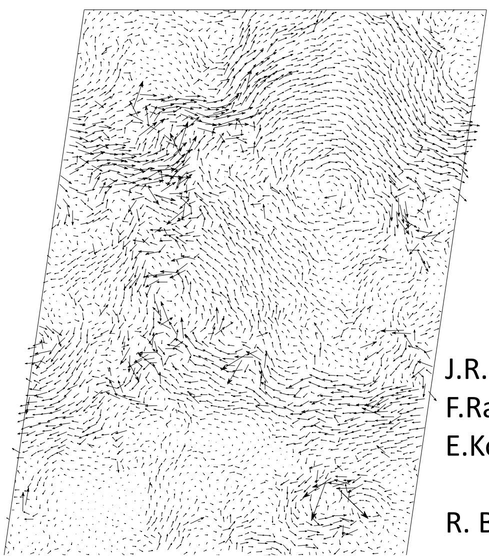
G.Debrégeas (2001)

colloids



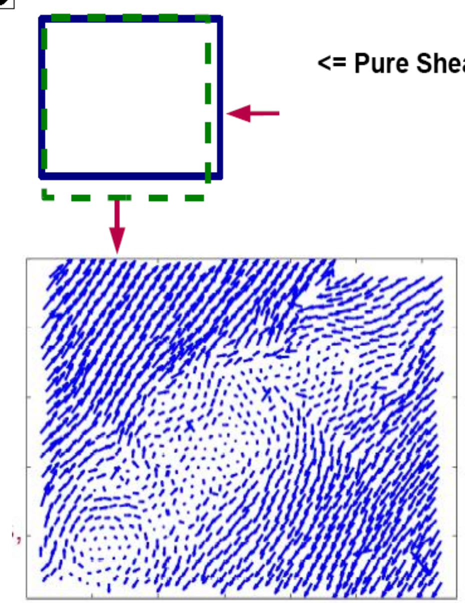
Weeks (2006)

Granular materials



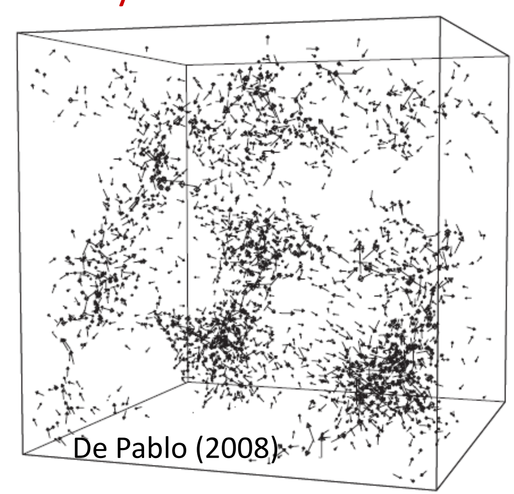
J.R. Williams et al. (1997)
F.Radjai, S.Roux (2002)
E.Kolb et al. (2003)

R. Behringer (2006)



<= Pure Shear

Polymers

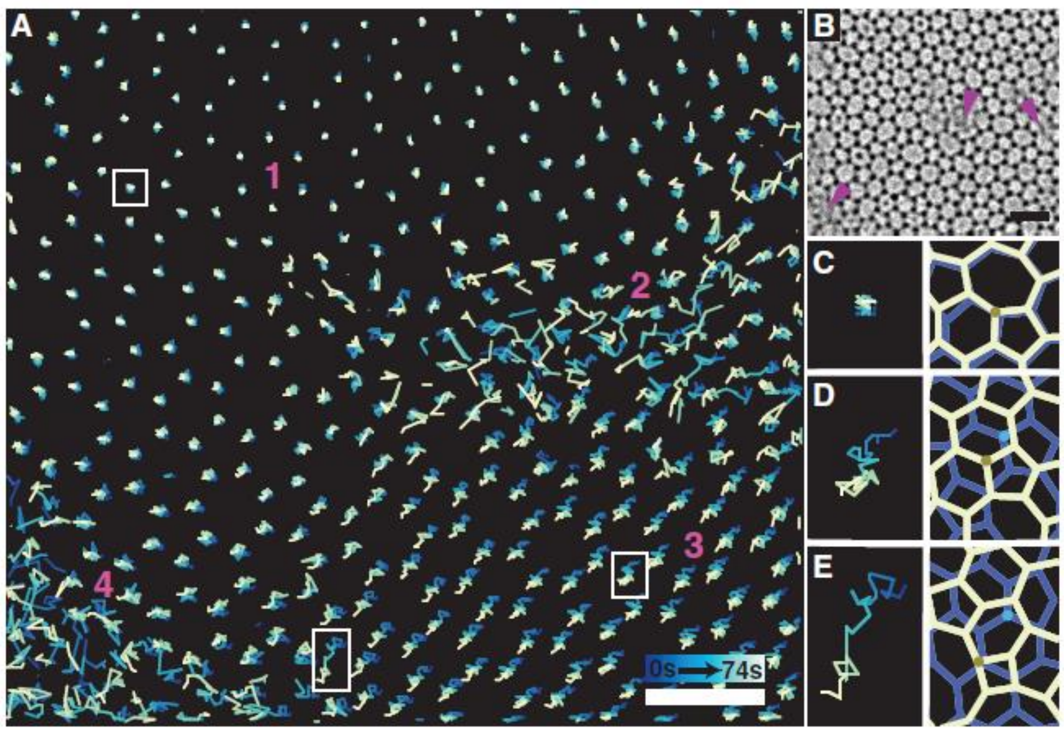


De Pablo (2008)

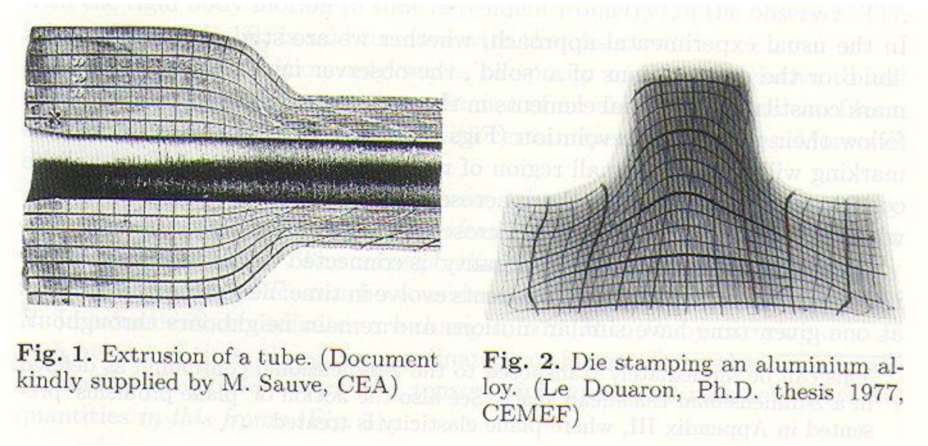
Imaging Atomic Rearrangements in Two-Dimensional Silica Glass: Watching Silica's Dance

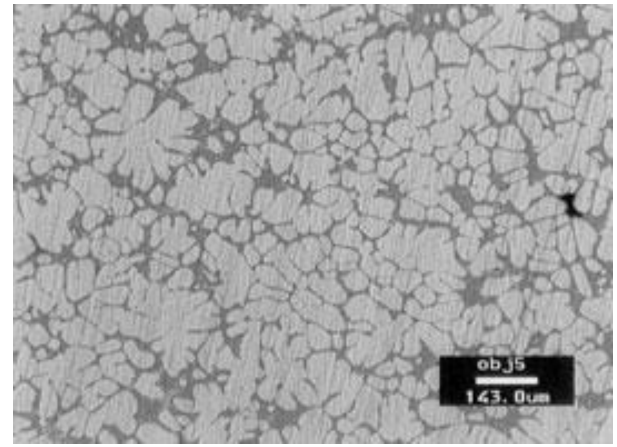
Science (October 2013)

Pinshane Y. Huang,[1] Simon Kurasch,[2]* Jonathan S. Alden,[1]* Ashivni Shekhawat,[3]
Alexander A. Alemi,[3] Paul L. McEuen,[3,4] James P. Sethna,[3] Ute Kaiser,[2] David A. Muller[1,4]†



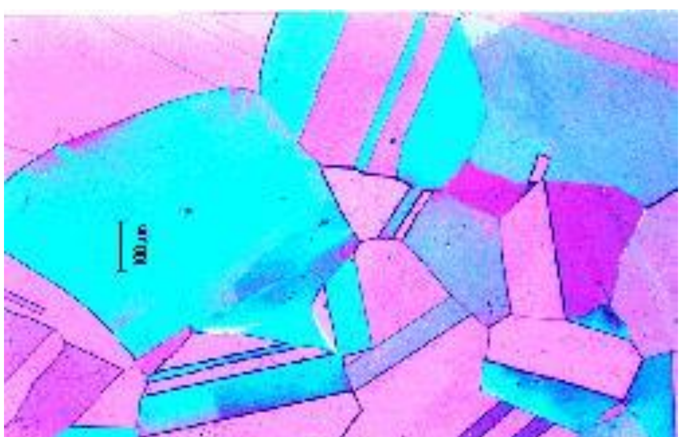
Exemples de microstructures



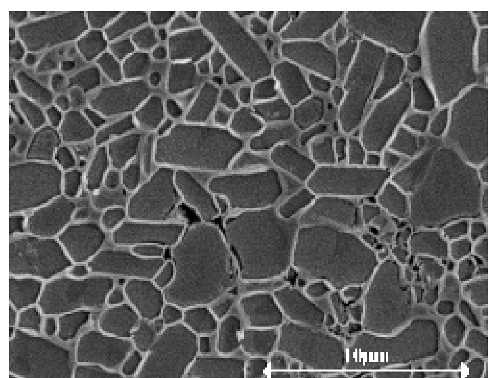


Dendritic growth in Al

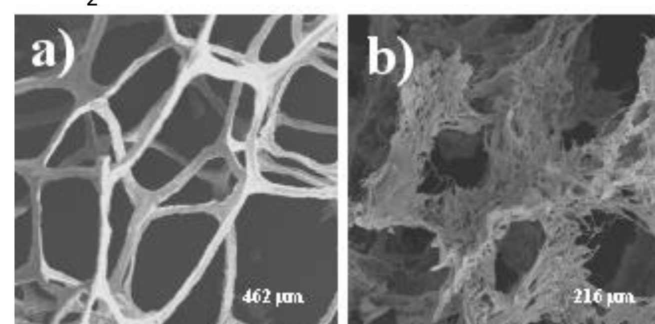
Al polycristal
(Electron Back Scattering Diffraction)



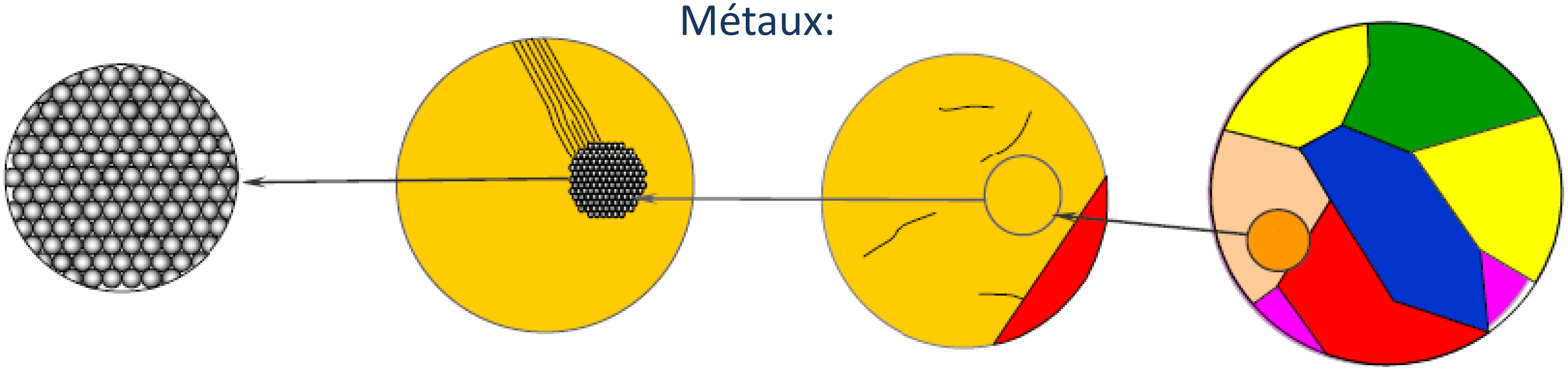
SiC dense



TiO_2 metallic foams



Métaux:



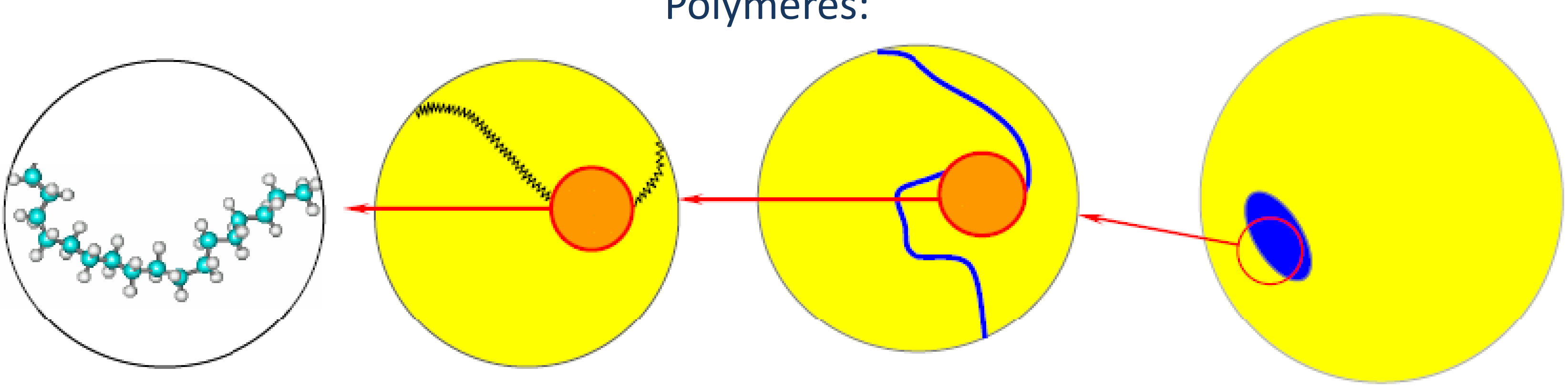
L = 0,1nm – 0,3 nm
t = 10^{-13} s

L = 1 nm – 100 nm
t = 10^{-12} s - 10^{-9} s

L = 100 nm – 1000 nm
t = 10^{-6} s - 10^{-2} s

L = 1 μm – 100 μm
t = 0,1 s – 1 s

Polymères:



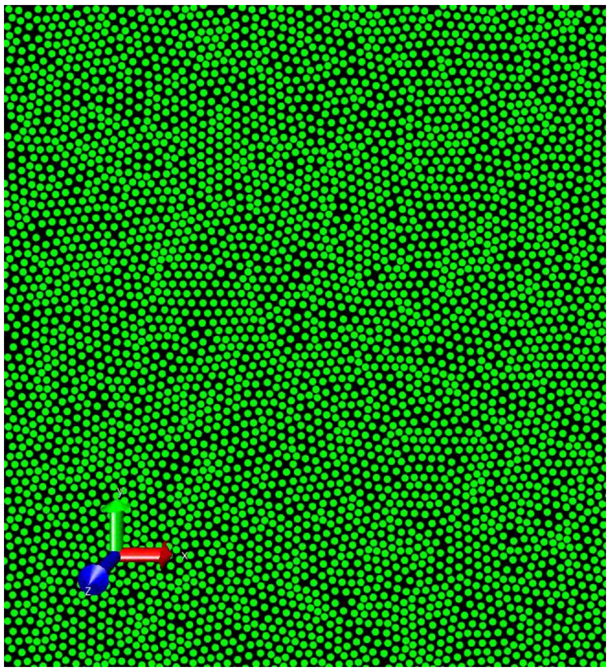
L = 0,1nm – 0,3 nm
t = 10^{-14} s

L = 0,5 nm – 2 nm
t = 10^{-11} s - 10^{-10} s

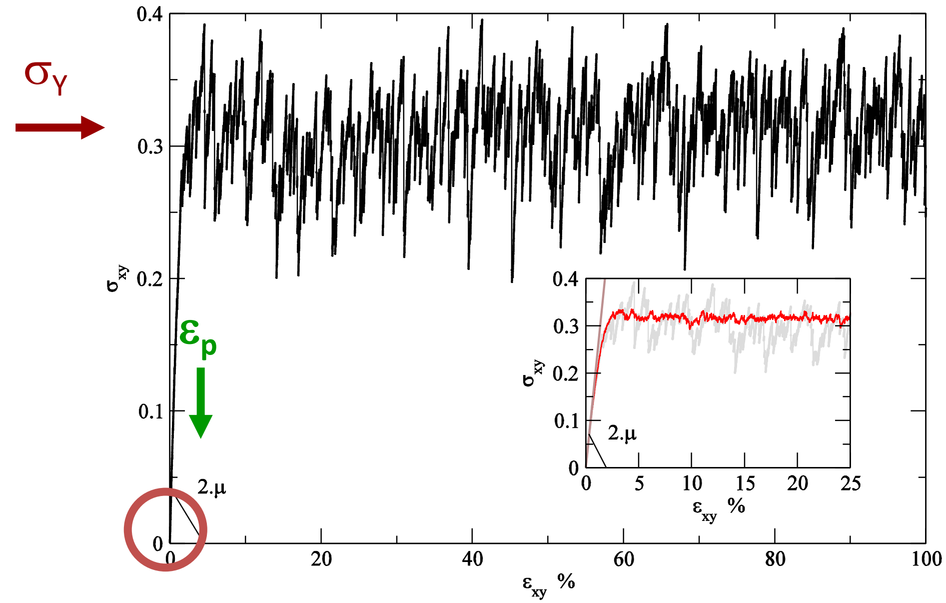
L = 1 nm – 5 nm
t = 10^{-8} s - 10^{-4} s

L = 20 nm – 500 nm
t = 0,1 s – 1 s

Simulations Atomistiques de particules type Lennard-Jones

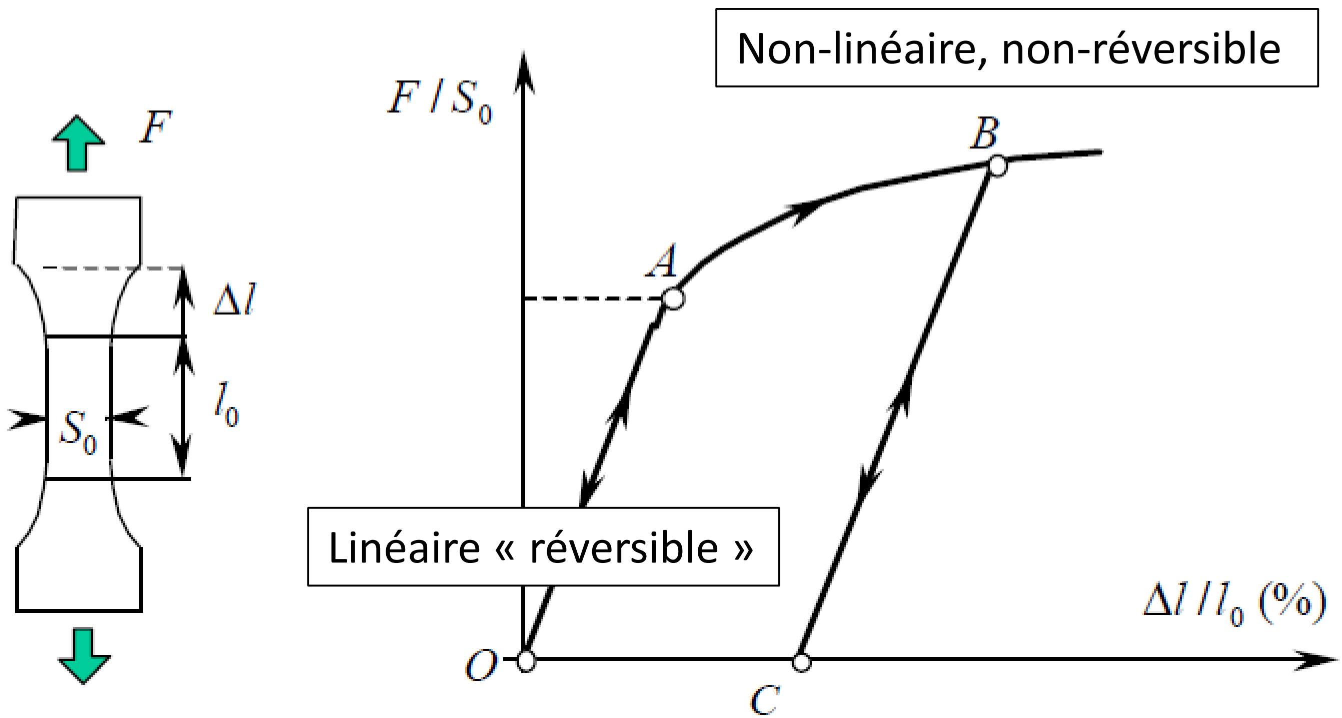


Relation Contraintes / Déformations

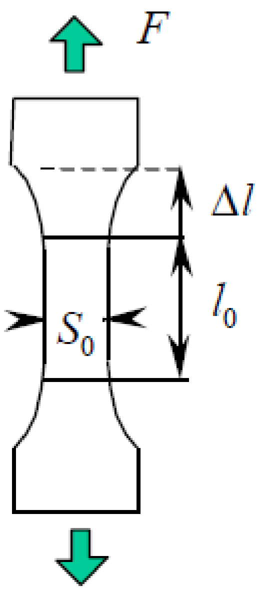


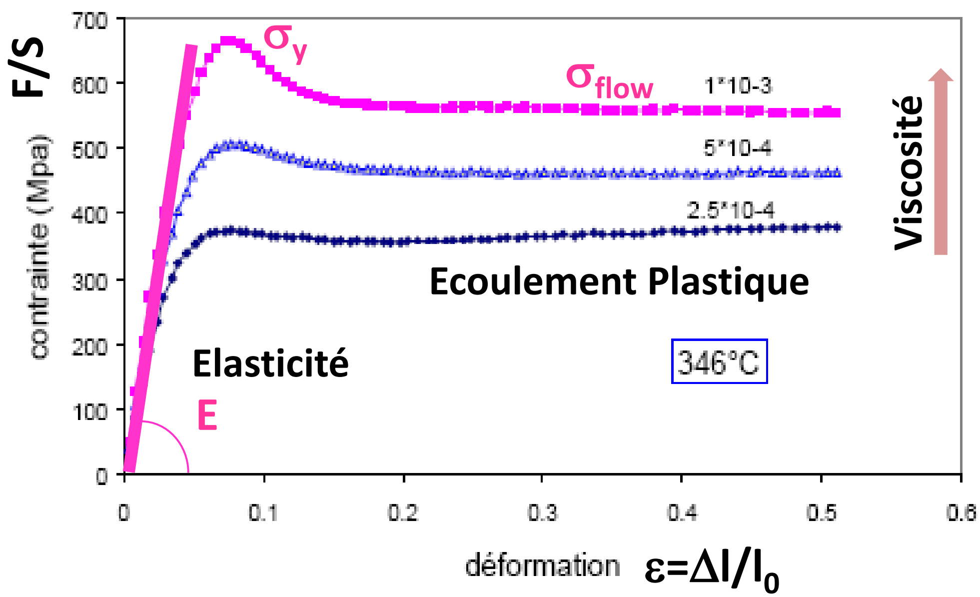
- Rôle des **fluctuations** sur la loi de comportement globale?
- Quelles sont les **grandeurs** pertinentes à petite échelle?
- **Loi de comportement** à différentes échelles?

Comportement Elasto-Visco-Plastique des solides:



Comportement Elasto-Visco-Plastique des solides:





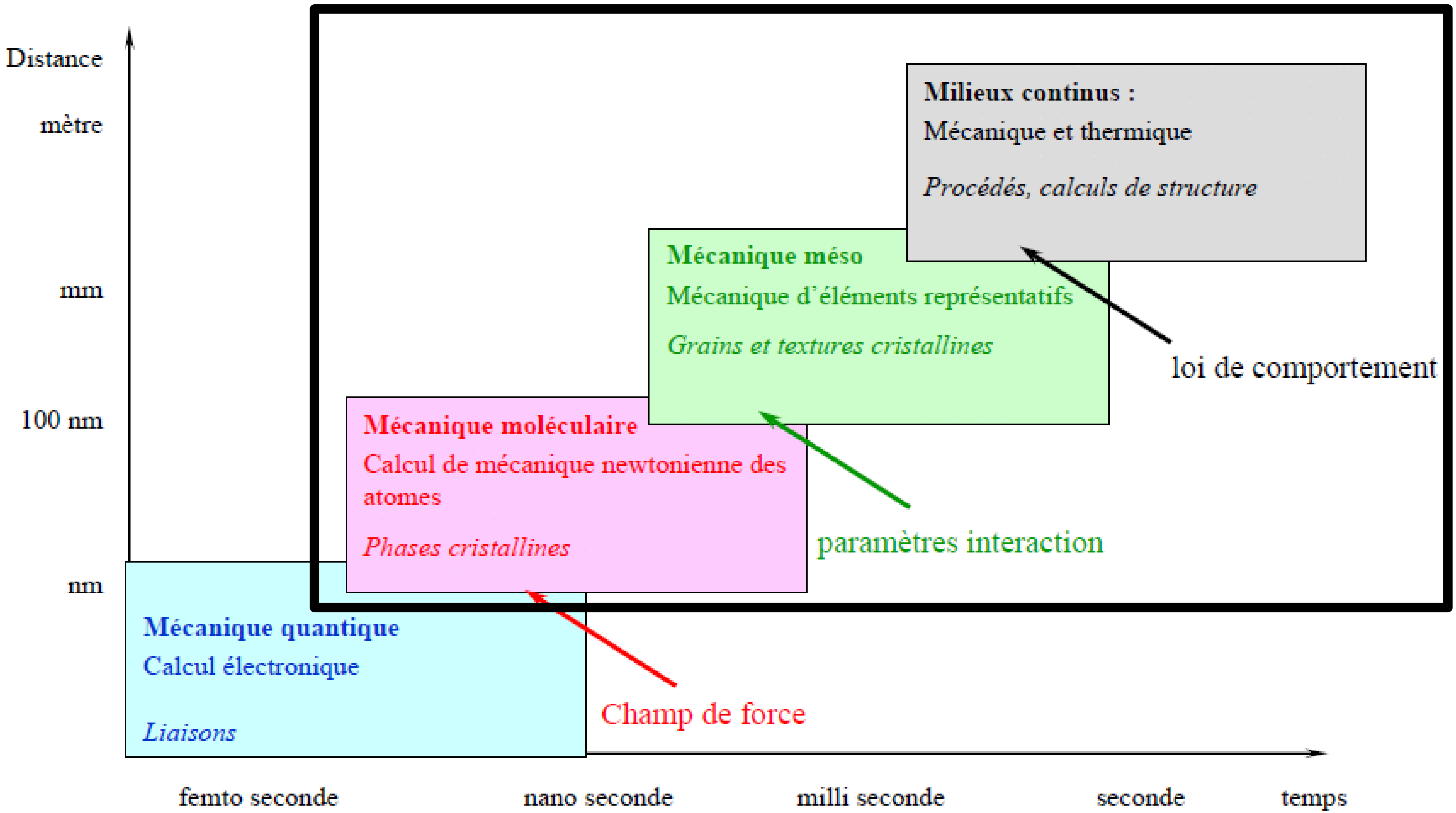
Quelles **tailles** caractéristiques?

Rôle des **fluctuations** à l'échelle atomique sur le comportement à grande échelle?

Quel lien entre les grandeurs mesurables aux petites échelles et les **grandeurs mécaniques**?

Réversibilité et **Irréversibilité** à différentes échelles?

Description à différentes échelles



Outline

Introduction: le comportement des matériaux à différentes échelles

I. Comment définir des **grandeurs mécaniques** aux petites échelles?

II. Exemple des **lois de comportement linéaires**

III. Plasticité à l’échelle atomique

Conclusion et Perspectives

Outline

Introduction: le comportement des matériaux à différentes échelles

I. Comment définir des **grandeurs mécaniques** aux petites échelles?

II. Exemple des **lois de comportement linéaires**

III. Plasticité à l'échelle atomique

Conclusion et Perspectives

Grandeurs mécaniques aux petites échelles

1) Rappel: description classique continue

2)Théorie atomistique de Cauchy-Born (1915)

3)Théorie Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

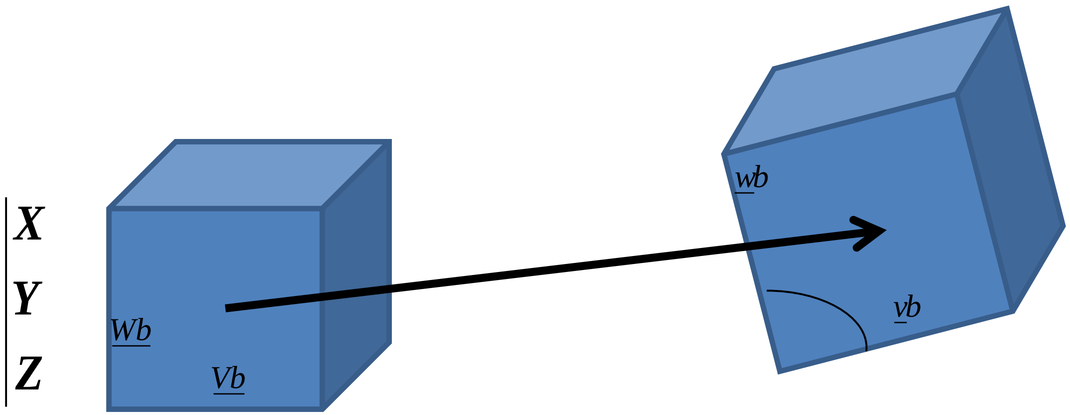
Grandeurs mécaniques aux petites échelles

1) Rappel: description classique continue

2)Théorie atomistique de Cauchy-Born (1915)

3)Théorie Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

Grandeur mécanique fondamentale: le **champ de déplacement** $\underline{u}(\underline{r},t)$ ou de vitesse $\underline{V}(\underline{r},t)$.



$$\left|\begin{array}{l} x \\ y \\ z \end{array}\right. \qquad \underline{U}\left|\begin{array}{l} u_x \equiv x - X \\ u_y \equiv y - Y \\ u_z \equiv z - Z \end{array}\right. \qquad \underline{V} = \frac{\partial \underline{U}}{\partial t}$$

Puissance mécanique: expression générale de la puissance des **forces internes**

$$\mathrm{P} = \int_{Vol} \left(\underline{A}(\underline{r},t).\underline{V}(\underline{r},t) - \underline{\underline{t}}(\underline{r},t) : \underline{\underline{\nabla}}\underline{V}(\underline{r},t) \right) \; dxdydz$$

$\underline{\underline{t}} = \underline{\underline{\alpha}} + \underline{\underline{\sigma}}$ $\quad$ $\underline{\underline{\alpha}}$ antisymétrique , $\underline{\underline{\sigma}}$ symétrique , $\underline{\underline{d}}$ partie sym. de $\underline{\underline{\nabla}}\underline{V}$

Invariance par translation $\Longrightarrow \underline{\boldsymbol{A}} = 0$ $\quad$ Invariance par rotation $\Longrightarrow \underline{\underline{\alpha}} = 0$

$$\Longrightarrow \mathrm{P} = \int_{Vol} \left(-\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t) : \underline{\underline{d}}(\underline{r},t) \right) dxdydz$$

$\boxed{\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \text{ représente les } \textbf{efforts internes} \text{ (Pa)}}$

Equations du mouvement:

$$\iiint \rho(\underline{r},t).\underline{a}(\underline{r},t).\hat{\underline{V}}(\underline{r})dV = \iiint -\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t):\underline{\underline{\nabla \hat{V}}}(\underline{r})dV + \iiint \rho(\underline{r},t).\underline{f}(\underline{r},t).\hat{\underline{V}}(\underline{r})dV + \iint \underline{T}(\underline{r},t).\hat{\underline{V}}(\underline{r})dS$$

accéleration — forces internes — forces externes (volume) — forces externes (de surface)

avec

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t):\underline{\underline{\nabla \hat{V}}}(\underline{r}) = \hat{\underline{V}}.\underline{div}^{\,t}\underline{\underline{\sigma}} - div(\underline{\underline{\sigma}}.\hat{\underline{V}})$$

$$\Rightarrow \iiint (\underline{div}^{\,t}\underline{\underline{\sigma}} + \rho.(\underline{f}-\underline{a})).\hat{\underline{V}}dV + \iint (\underline{T}-\underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\hat{\underline{V}}dS = 0,$$ pour tout sous-système

Conservation des moments (équation du mouvement)

$$\forall \underline{r} \in V \qquad \underline{div}\,\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t) + \rho(\underline{r},t).\underline{f}(\underline{r},t) = \rho(\underline{r},t).\underline{a}(\underline{r},t)$$

Conditions aux limites:

$$\forall \underline{r} \in S \qquad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t).\underline{n} = \underline{T}(\underline{r},t)$$

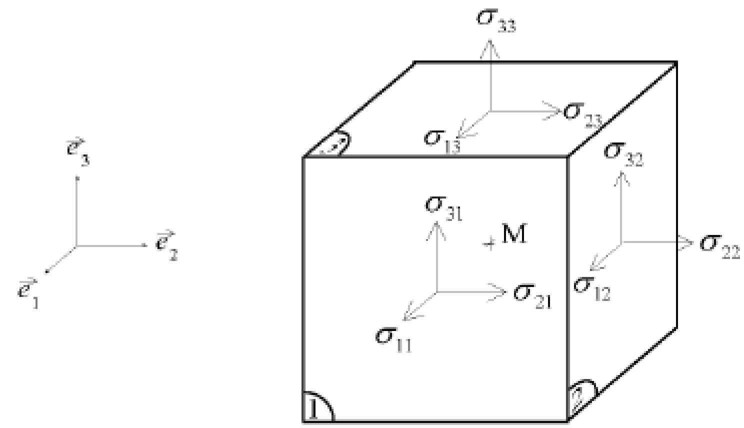
$\Rightarrow$ Définition d'un champ de contraintes « ***statiquement admissible*** »

Tenseur des **contraintes** de Cauchy:

(formulation Eulérienne)

Force par unité de surface exercée le long de la direction x, sur la face normale à la direction y.

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$



Expression des forces: $\underline{F} = \underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}\ dS$

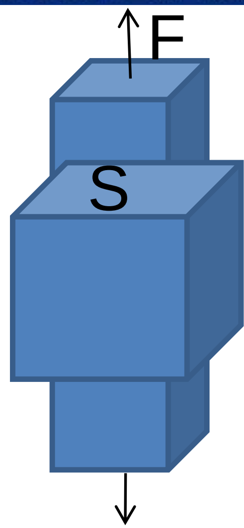
surface

vecteur normal

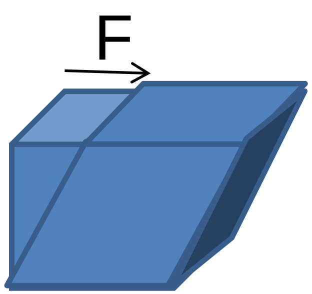
Unités: Pa (1atm = 10^5 Pa)

Ordre de grandeur: MPa =10^6 Pa

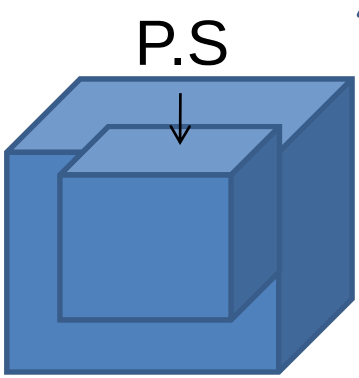
Contraintes de Cauchy:
Exemples



$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{\mathbf{F}}{\mathbf{S}} \end{pmatrix}$$



$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dfrac{\mathbf{F}}{\mathbf{S}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \dfrac{\mathbf{F}}{\mathbf{S}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} -\mathbf{P} & 0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{P} & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{P} \end{pmatrix}$$

Par définition, pression $\boldsymbol{P} = -\dfrac{\boldsymbol{tr}(\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}})}{3}$

Rappel: Equations du mouvement:

$$\iiint \rho(\underline{r},t).\underline{a}(\underline{r},t).\hat{\underline{V}}(\underline{r})dV = \iiint -\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t):\underline{\underline{\nabla \hat{V}}}(\underline{r})dV + \iiint \rho(\underline{r},t).\underline{f}(\underline{r},t).\hat{\underline{V}}(\underline{r})dV + \iint \underline{T}(\underline{r},t).\hat{\underline{V}}(\underline{r})dS$$

accéleration | forces internes | forces externes (volume) | forces externes (de surface)

avec

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t):\underline{\underline{\nabla \hat{V}}}(\underline{r}) = \hat{\underline{V}}.\underline{div}^t\,\underline{\underline{\sigma}} - div(\underline{\underline{\sigma}}.\hat{\underline{V}})$$

$$\iiint (\underline{div}^t\,\underline{\underline{\sigma}} + \rho.(\underline{f} - \underline{a})).\hat{\underline{V}}dV + \iint (\underline{T} - \underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\hat{\underline{V}}dS = 0$$, pour tout sous-système.

Conservation des moments (équation du mouvement)

$$\forall \underline{r} \in V \qquad \underline{div}\,\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t) + \rho(\underline{r},t).\underline{f}(\underline{r},t) = \rho(\underline{r},t).\underline{a}(\underline{r},t)$$

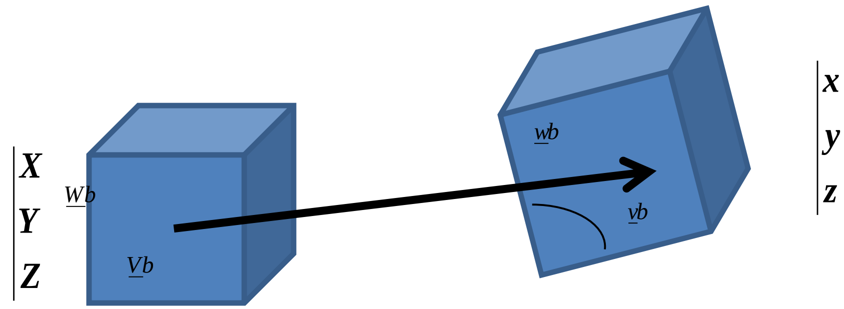
Conditions aux limites:

$$\forall \underline{r} \in S \qquad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t).\underline{n} = \underline{T}(\underline{r},t)$$

Tenseur de **déformations** de Green - Lagrange $\underline{\underline{e}}$:

si $\quad \underline{Vb} \rightarrow \underline{vb}$

et $\underline{Wb} \rightarrow \underline{wb} \quad$ alors $\underline{vb}.\underline{wb} = \underline{Vb}.\underline{Wb} + 2\underline{Vb}.\underline{\underline{e}}.\underline{Wb}$



$$\underline{\underline{e}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u} + {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u} + {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u}.\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u}\right)$$ "tenseur de déformations de Green - Lagrange"

(*plaques, grandes transformations…*)

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u} + {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u}\right)$$ "tenseur (local) des déformations linéarisées"

$\Longrightarrow$ Champ « ***cinématiquement admissible*** »

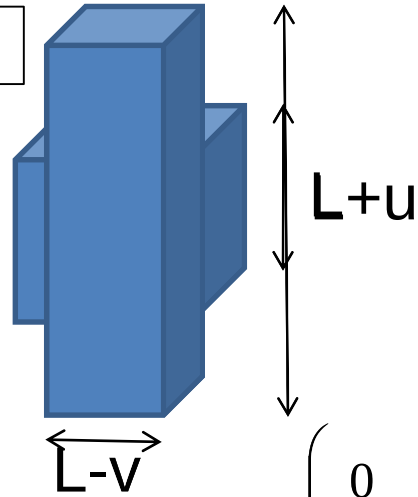
$$\underline{\underline{\Omega}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\,\underline{u}\right)$$ "tenseur de rotations"

Comportement ***élastique***: indépendant du temps, et réversible, dépend de $\underline{\underline{e}}$

Comportement ***visqueux***: dépend de $\underline{\underline{\dot{e}}}$

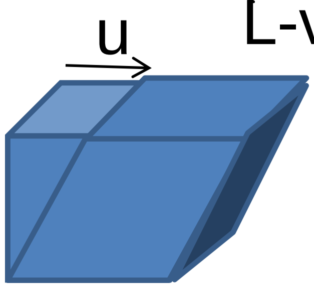
Exemple de déf. Linéarisées:

Traction:



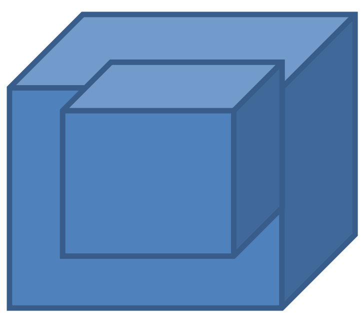
$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \frac{-\mathbf{v_x}}{\mathbf{L}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-\mathbf{v_y}}{\mathbf{L}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mathbf{u}}{\mathbf{L}} \end{pmatrix}$$

Shear:



$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\mathbf{u}}{2\mathbf{L}} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\mathbf{u}}{2\mathbf{L}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Compression isotrope:



$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \frac{-u}{L} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-u}{L} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-u}{L} \end{pmatrix}$$

Unités: %. **Ordre de grandeur:** dans un solide, élasticité OK si $\varepsilon < 0.1\%$ (métal)

$\varepsilon < 1\%$ (polymères, amorphes)

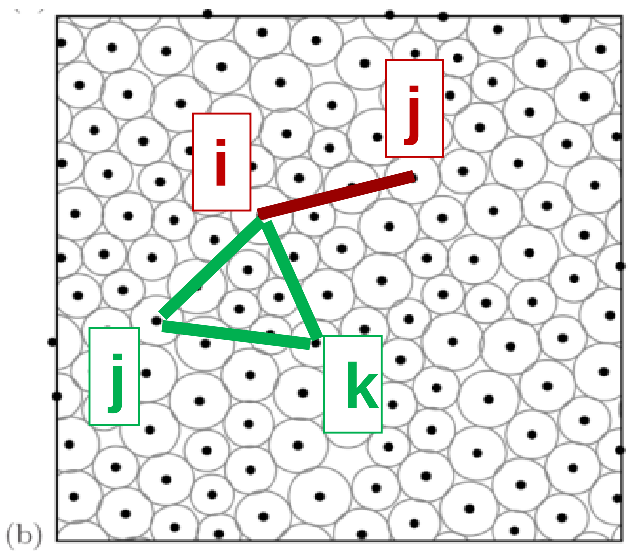
Grandeurs mécaniques aux petites échelles

1) Rappel: description classique continue

2)Théorie atomistique de Cauchy-Born (1915)

3)Théorie Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

Modélisation microscopique des grandeurs mécaniques:



Expression de l'énergie à plusieurs particules:
The Cauchy-Born Theory of Solids (1915)

$$E_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r_i}\right\}\right) = \sum_{(i,j)} E_{\text{ij}}\left(\underline{r_{ij}}\right) + \sum_{(i,j,k)} E_{\text{ijk}}\left(\underline{r_{ij}}, \underline{r_{jk}}, \underline{r_{ik}}\right) + \ldots$$

$$= E_{\text{total}}\left(\left\{r_{ij}\right\}\right)$$

N particules
D dimensions

N.D paramètres
-D(D+1)/2 translations et rotations rigides

N.D –D(D+1)/2 distances indépendantes

Interactions 2-corps
(Modèle de Cauchy)
Ex. Lennard-Jones
Mousses
Modèle BKS pour Silice

Int. 3-corps
Ex. Silicium

Classical Theory of Elasticity:

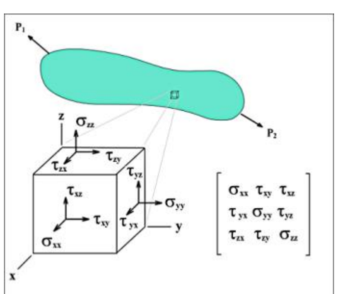
$$\delta E = \underline{\underline{\sigma}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \ldots.$$

linearized strain tensor $\varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}\right)$

stress tensor $\boxed{\sigma_{ij} \equiv \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ij}} \approx \sigma_{ij}^0 + \sum_{k,l} C_{ijkl}.\varepsilon_{kl}}$

Equations du mouvement:

$$\boxed{\rho \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial t^2}(\underline{r}) = \nabla.\underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{f}}$$



Atomic Scale Description:

$$E\left(\left\{\underline{r}_{ij}\right\}\right) = \sum_{(i,j)} E_{ij}(\underline{r}_{ij}) + \sum_{(i,j,k)} E_{ijk}(\underline{r}_{ij}, \underline{r}_{jk}, \underline{r}_{ik}) + \ldots$$

2-body interactions
(Cauchy model)
Ex. Lennard-Jones
Foams
BKS model for Silica

3-body inter.
Ex. Silicon

Equations du mouvement sur chaque particule:

$$\boxed{m_i.\frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2}(\underline{r}_i) = -\frac{\partial E_{total}}{\partial r_{i\alpha}} \approx -\sum_j M_{ij}^{\alpha\beta}.u_\beta(\underline{r}_j) + f_\alpha(\underline{r}_i)}$$

$$\underline{u}(\underline{r}_i) \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_i^0$$ déplacement

Modélisation microscopique des grandeurs mécaniques:

Expression des forces locales

Force interne exercée sur l'atome i: $\underline{f}_i(\{\underline{r}\}) \equiv -\dfrac{\partial \mathrm{E}_{\mathrm{total}}(\{\underline{r}\})}{\partial \underline{r}_i} = \sum_j \underline{f}_{ij}(\{\underline{r}\})$

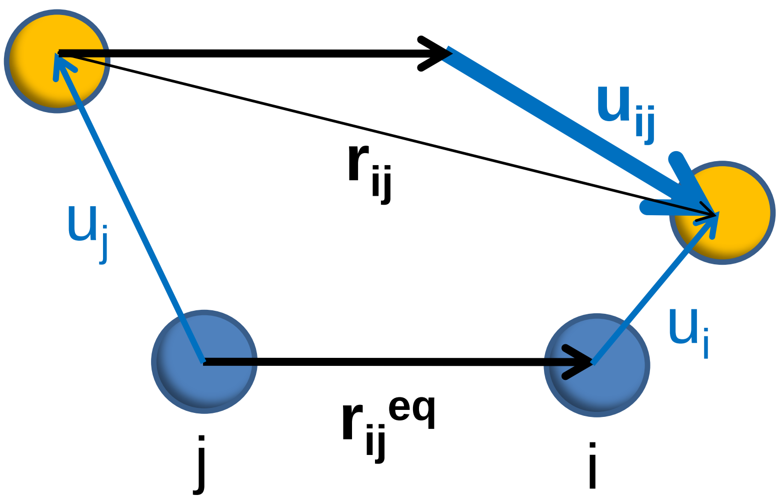
Force de l'atome j sur l'at. i: $\underline{f}_{ij}(\{\underline{r}\}) \equiv -\dfrac{\partial \mathrm{E}_{\mathrm{total}}(\{\underline{r}\})}{\partial \underline{r}_{ij}}$ avec $\underline{r}_{ij} \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_j$

$$= -T_{ij}(\{\underline{r}\})\frac{\underline{r}_{ij}}{r_{ij}} \text{ et } T_{ij}(\{\underline{r}\}) \equiv \frac{\partial \mathrm{E}_{\mathrm{total}}(\{\underline{r}\})}{\partial r_{ij}}$$

Tension de la liaison (i,j) dans la configuration {$\underline{r}$}

Modélisation microscopique des grandeurs mécaniques:

Déplacements et déformations:



$$\underline{r}_{ij}^{\,eq} \equiv \underline{r}_i^{\,eq} - \underline{r}_j^{\,eq}$$

$$\underline{u}_i = \underline{u}\left(\underline{r}_i^{\,eq}\right) = \underline{u}\left(\underline{r}_j^{\,eq} + \underline{r}_{ij}^{\,eq}\right)$$

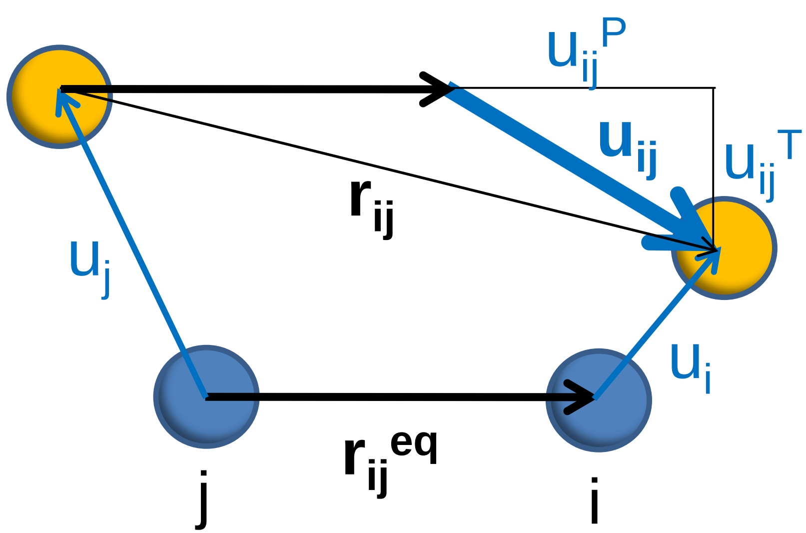
$$\approx \underline{u}\left(\underline{r}_j^{\,eq}\right) + \left(\underline{r}_{ij}^{\,eq}.\underline{\nabla}\right)\underline{u}\left(\underline{r}_j^{\,eq}\right)$$

$$\approx \underline{u}\left(\underline{r}_j^{\,eq}\right) + \left(\underline{r}_{ij}^{\,eq}.\underline{\nabla}\right)\underline{u}\left(\frac{\underline{r}_i^{\,eq} + \underline{r}_j^{\,eq}}{2}\right)$$

Modélisation microscopique des grandeurs mécaniques:

Déplacements et déformations:

$$\underline{u}_{ij} \equiv \underline{u}_i - \underline{u}_j \approx \left(\underline{r}_{ij}^{eq}.\underline{\nabla}\right)\underline{u}\left(\frac{\underline{r}_i^{eq}+\underline{r}_j^{eq}}{2}\right) \approx \left(\sum_\alpha r_{ij}^{eq,\alpha}\partial_\alpha\right)\underline{u}(\underline{r})$$



$$\underline{u}_{ij} = \underline{u}_{ij}^P + \underline{u}_{ij}^T$$

$$u_{ij}^P = \underline{u}_{ij}.\frac{\underline{r}_{ij}^{eq}}{r_{ij}^{eq}} = \left(\underline{r}_{ij}^{eq}.\underline{\nabla}\right)\underline{u}.\frac{\underline{r}_{ij}^{eq}}{r_{ij}^{eq}}$$

$$= \sum_\alpha\sum_\beta \frac{r_{ij}^{eq,\alpha}\, r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}}\,\partial_\alpha u^\beta(\underline{r}^{eq})$$

$$\boxed{u_{ij}^P = \sum_\alpha\sum_\beta \frac{r_{ij}^{eq,\alpha}\, r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}}\,\varepsilon_{\alpha\beta}\left(\frac{\underline{r}_i^{eq}+\underline{r}_j^{eq}}{2}\right)}$$

Développement au 1er ordre de l'énergie, contraintes locales:

$$E_{total}\left(\left\{\underline{r}_i\right\}\right) = E_{total}\left(\left\{\underline{r}_i^{eq}\right\}\right) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_j \frac{\partial E_{total}}{\partial \underline{r}_{ij}}.\underline{u}_{ij} + \dots$$

$$= E_{total}\left(\left\{\underline{r}_i^{eq}\right\}\right) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_j \frac{\partial E_{total}}{\partial r_{ij}}\frac{\underline{r}_{ij}}{r_{ij}}.\underline{u}_{ij} + \dots$$

$$= E_{total}\left(\left\{\underline{r}_i^{eq}\right\}\right) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_j T_{ij} u_{ij}^{P} + \dots$$

$$= E_{total}\left(\left\{\underline{r}_i^{eq}\right\}\right) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_j T_{ij}\sum_\alpha\sum_\beta \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}}\varepsilon_{\alpha\beta} + \dots$$

A comparer avec: $E_{total} = \iiint dV \; \underline{\underline{\sigma}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{1}{2}\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \dots$

Développement au 1^er^ ordre de l'énergie, contraintes locales:

$$\mathrm{E}_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r}_i\right\}\right)=\mathrm{E}_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r}_i^{\,eq}\right\}\right)+\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\sum_{i}\sum_{j}\frac{1}{2}T_{ij}\,\frac{r_{ij}^{\,eq,\alpha}\,r_{ij}^{\,eq,\beta}}{r_{ij}^{\,eq}}\,\varepsilon_{\alpha\beta}+\ldots$$

A comparer avec: $\mathrm{E}_{\text{total}}=\iiint dV\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\sigma^{0}{}_{\alpha\beta}\,\varepsilon_{\alpha\beta}+\ldots.$

$$\Rightarrow\sum_{i}\iiint_{V_i}\sigma^{0}{}_{\alpha\beta}(\underline{r})\,dV=\sum_{i}\sigma^{0}{}_{\alpha\beta}(i).V_i=\sum_{i}\frac{1}{2}T_{ij}\,\frac{r_{ij}^{\,eq,\alpha}\,r_{ij}^{\,eq,\beta}}{r_{ij}^{\,eq}}$$

Contrainte locale: $\boxed{\sigma^{0}{}_{\alpha\beta}(i)\equiv\frac{1}{V_i}\sum_{j}\frac{1}{2}T_{ij}\,\frac{r_{ij}^{\,eq,\alpha}\,r_{ij}^{\,eq,\beta}}{r_{ij}^{\,eq}}}\quad(Pa)$

Volume de Voronoï

Grandeurs mécaniques aux petites échelles

1) Rappel: description classique continue

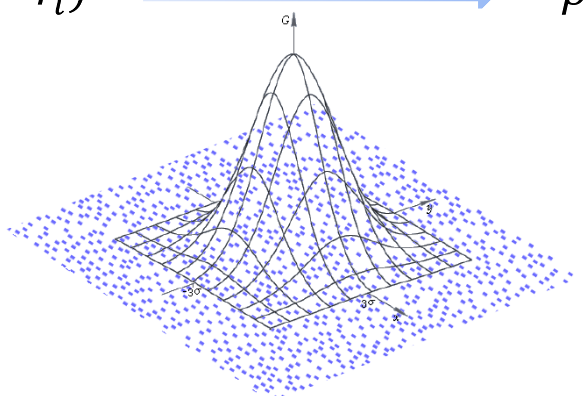
2)Théorie atomistique de Cauchy-Born (1915)

3)Théorie Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

Théorie Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

$$\rho^{mic}(\vec{r},t) = \sum_i m_i \delta(\vec{r}-\vec{r}_i) \longrightarrow \rho_{CG}(\vec{r},t) = \sum_i m_i \varphi(\vec{r}-\vec{r}_i(t))$$

Coarse-Graining
« lissage gros grains »
à l'échelle ω



fonction de Coarse-Graining:

$$\varphi(\vec{r}-\vec{r}_i) = \frac{1}{(2\pi\omega)^{D/2}} e^{-\frac{\|\vec{r}-\vec{r}_i\|^2}{2\omega^2}}$$

Conservation de la masse $\frac{\partial \rho_{CG}}{\partial t} + div(\rho_{CG}\vec{v}_{CG}) = 0 \Rightarrow \vec{v}_{CG}(\vec{r},t) = \frac{\sum_i m_i \vec{v}_i(t)\varphi(\vec{r}-\vec{r}_i)}{\sum_i m_i \varphi(\vec{r}-\vec{r}_i)}$

$$\Rightarrow \vec{u}_{CG}(\vec{r},t) = \int_{to}^{t} \vec{v}_{CG}(\vec{r},t')dt' = \cdots \quad \Rightarrow \bar{\bar{\varepsilon}}_{CG}(\vec{r},t)$$

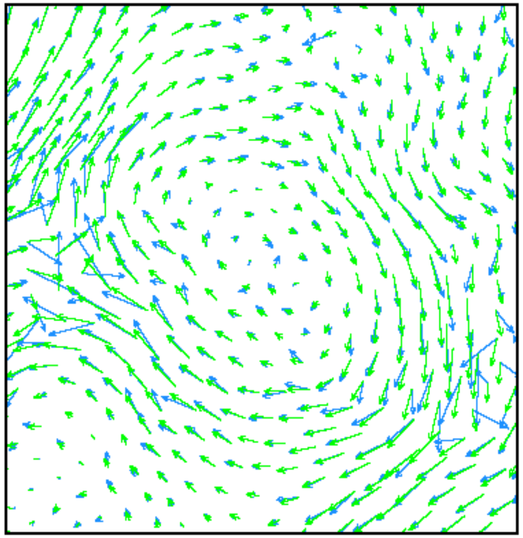
Champ de déformations, continu

Conservation du moment $\frac{\partial\left(\rho_{CG} v^{\alpha}{}_{CG}(\vec{r},t)\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r_\beta}\sigma_{\alpha\beta}(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial r_\beta}\left(\rho_{CG} v^{\alpha}{}_{CG} v^{\beta}{}_{CG}\right)$

$$\Rightarrow \sigma_{CG}^{\alpha\beta}(\vec{r},t) \approx -\frac{1}{2}\sum_{i,j} f_{ij\alpha}(t) r_{ij\beta}(t) \int_0^1 ds\, \varphi(\vec{r}-\vec{r}_i - s\vec{r}_{ij})$$

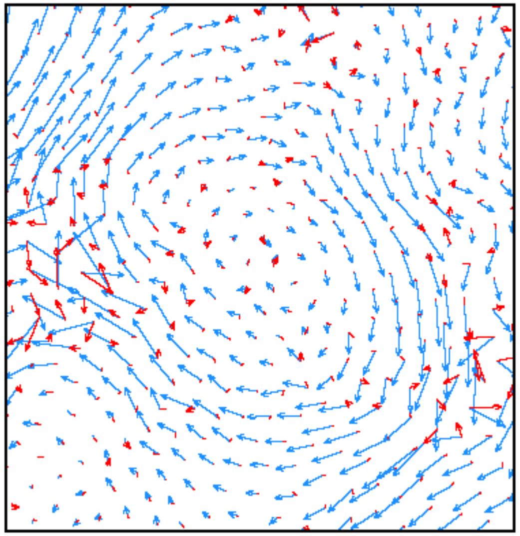
Champ de contraintes, continu

Comparaison des déplacements atomiques et coarse-grained dans un verre de Lennard-Jones 2D



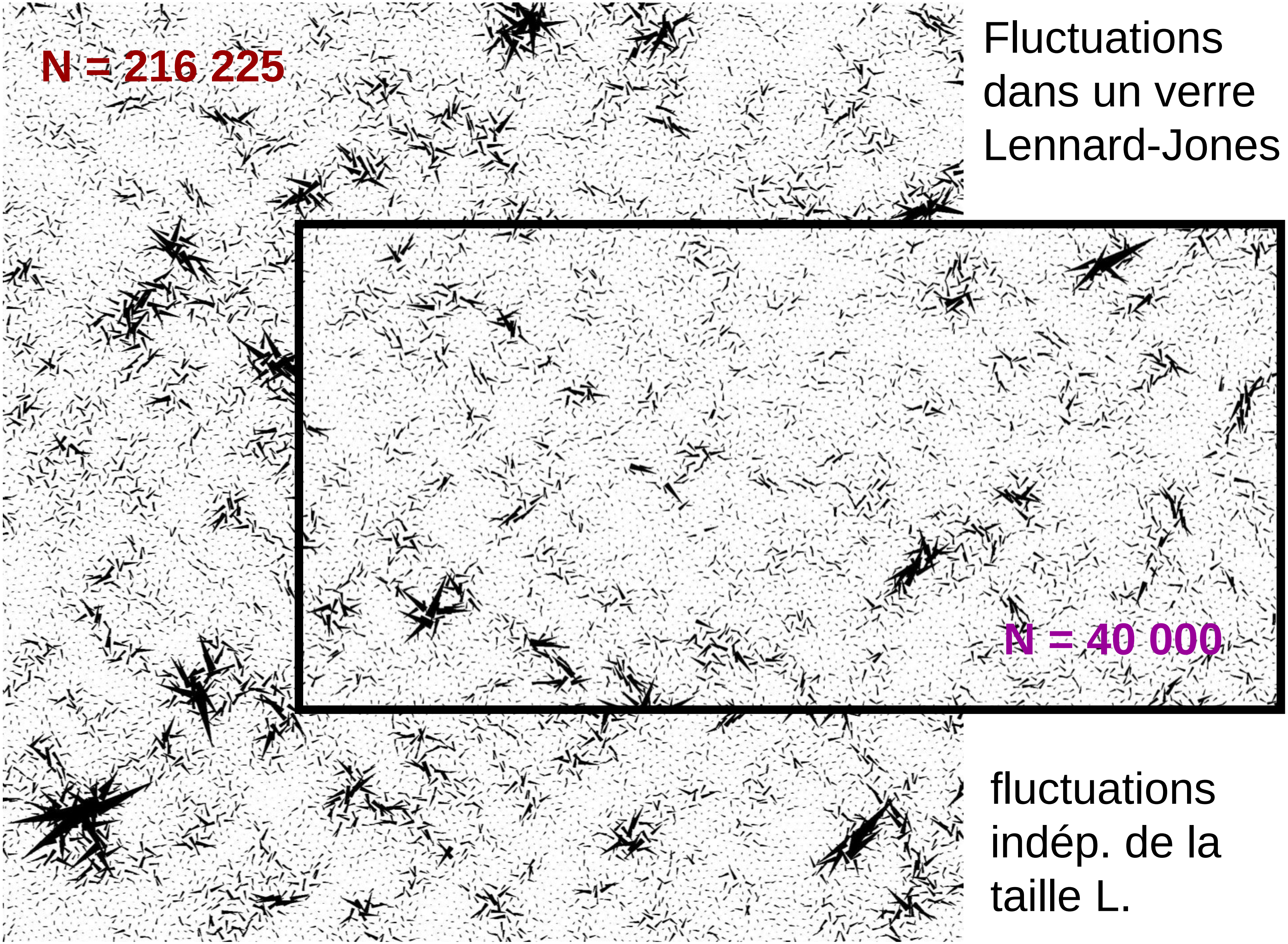
$\vec{u}_{CG}(\vec{r}_i)$ et $\vec{u}_i$

Déplacements coarse-grained



$\vec{u}'(\vec{r}_i) = (\vec{u}_{CG}(\vec{r}_i) - \vec{u}_i)$ et $\vec{u}_i$

Fluctuations

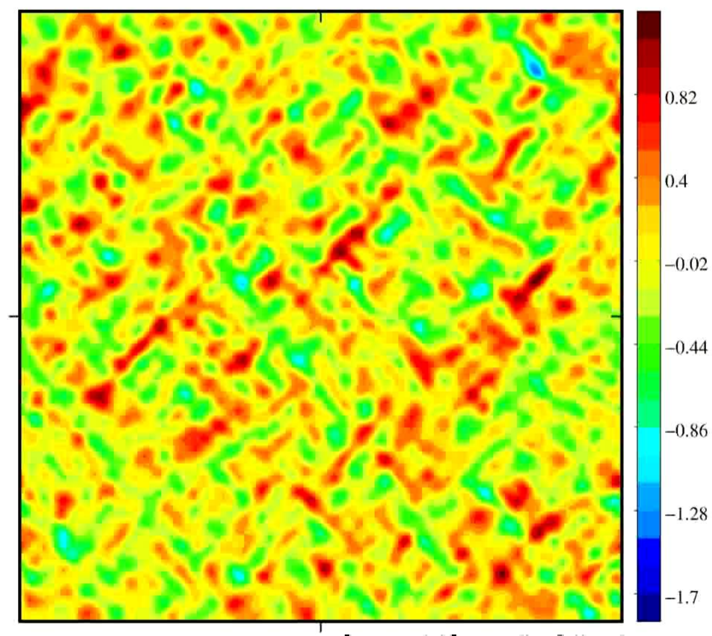


Fluctuations dans un verre Lennard-Jones

fluctuations indép. de la taille L.

Cartographie des contraintes de cisaillement coarse-grained dans un verre de Lennard-Jones 2D sous cisaillement macroscopique

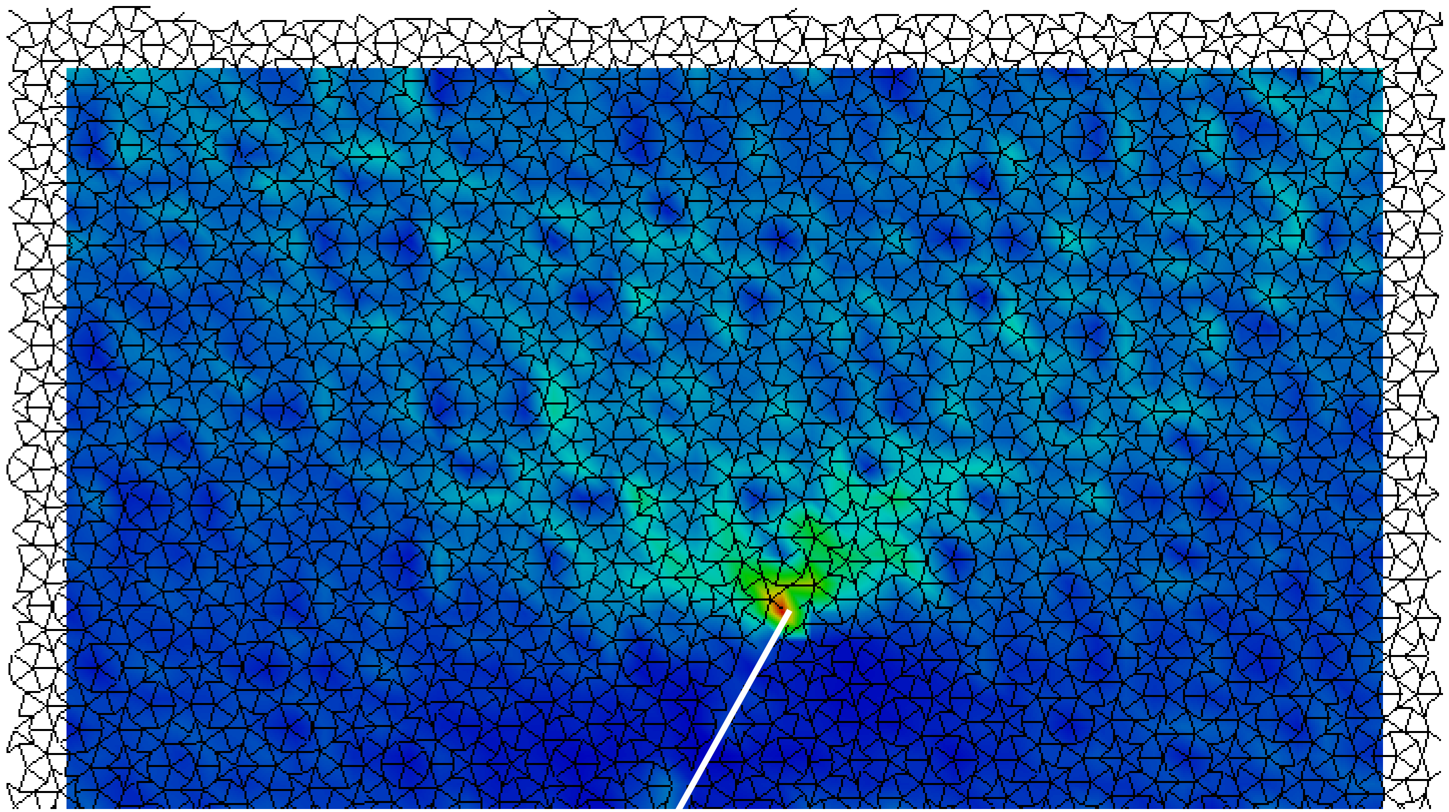
Step= 2



$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{2}\sum_{ij;i\neq j} f_{ij\alpha} r_{ij\beta} \overbrace{\int_0^1 ds\,\phi[\mathbf{r}-\mathbf{r}_i(t)+s\mathbf{r}_{ij}(t)]}$$ “contact stress”

$$-\sum_i m_i\, v'_{i\alpha}(\mathbf{r},t)\, v'_{i\beta}(\mathbf{r},t)\phi[\mathbf{r}-\mathbf{r}_i(t)]$$ “kinetic stress”

Energie mécanique Coarse-Grained dans un **Réseau de poutres type Penrose** avec une fissure



$$l_{cg} = l$$

A. Glacet (2018)

Outline

Introduction: le comportement des matériaux à différentes échelles

I. Comment définir des **grandeurs mécaniques** aux petites échelles?

II. Exemple des **lois de comportement linéaires**

III. Plasticité à l'échelle atomique

Conclusion et Perspectives

Lois de comportement Linéaires

1) Rappel: visco-élasticité linéaire

2)Modules d’Elasticité de Cauchy-Born (1915)

3)Identification Multi-échelle des paramètres, I. Goldhirsch (2003)

Lois de comportement Linéaires

1) Rappel: visco-élasticité linéaire

2) Modules d'Elasticité de Cauchy-Born (1915)

3) Paramètres Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

Rappel: Equations du mouvement

$$\iiint \rho(\underline{r},t).\underline{a}(\underline{r},t).\overset{\wedge}{\underline{V}}(\underline{r})dV = \iiint -\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t):\underline{\underline{\nabla \hat{V}}}(\underline{r})dV + \iiint \rho(\underline{r},t).\underline{f}(\underline{r},t).\overset{\wedge}{\underline{V}}(\underline{r})dV + \iint \underline{T}(\underline{r},t).\overset{\wedge}{\underline{V}}(\underline{r})dS$$

accéleration — forces internes — forces externes (volume) — forces externes (de surface)

avec

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t):\underline{\underline{\nabla \hat{V}}}(\underline{r}) = \overset{\wedge}{\underline{V}}.\underline{div}^t\,\underline{\underline{\sigma}} - div(\underline{\underline{\sigma}}.\overset{\wedge}{\underline{V}})$$

$$\iiint (\underline{div}^t\,\underline{\underline{\sigma}} + \rho.(\underline{f} - \underline{a})).\overset{\wedge}{\underline{V}}dV + \iint (\underline{T} - \underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}).\overset{\wedge}{\underline{V}}dS = 0$$

, pour tout sous-système.

Conservation des moments (équation du mouvement)

$$\forall \underline{r} \in V \qquad \underline{div}\,\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t) + \rho(\underline{r},t).\underline{f}(\underline{r},t) = \rho(\underline{r},t).\underline{a}(\underline{r},t)$$

Conditions aux limites:

$$\forall \underline{r} \in S \qquad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t).\underline{n} = \underline{T}(\underline{r},t)$$

Les 3 équations du mouvement ont **9 inconnues** $(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{u})$

Il est donc nécessaire d'y ajouter des **équations de comportement**

$$\underline{\underline{\sigma}}(\vec{r}, t) = f\left(\vec{R}, \vec{R}', \vec{r}(t'), \vec{r}'(t'), t, \ldots\right)$$

Ces 6 équations de comportement doivent respecter les symétries matériaux et les symétries induites par les principes de la thermodynamique.
De plus, on peut faire des hypothèses simplificatrices:

Principe de ***localité***:
ne dépend que de l'environnement de $\vec{r}$

Hypothèse **de *simplicité matérielle***:
dépendance dans le premier gradient de la transformation

Energie mécanique

Travail des forces internes

pour un champ de déplacement cinématiquement admissible,
ou un champ de contraintes statiquement admissible, « travail de déformation »:

$$W = \int_{Vol} \vec{f}.\vec{u}dV + \int_{Surf} \vec{T}.\vec{u}dS = \int_{Vol} \left(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{r},t) \right) \, dV = \int_{Vol} Tr\left(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r},t) .{}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{r},t) \right) \, dV$$

Densité volumique de potentiel d'élasticité:
Pour un passage d'un état (σ,ε) *à* ($\sigma+d\sigma,\varepsilon+d\varepsilon$)

$$d\pi = Tr\left(\underline{\underline{\sigma}}.d\,{}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}} \right) = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}$$

d'où $$\boxed{\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\partial^2 \pi}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}}}$$

Energie interne volumique: $du = d\pi + Tds$ *s*, entropie par unité de volume

En régime *adiabatique*, π est l'énergie interne volumique ($du=d\pi$)
En conditions *isothermes*, π est aussi l'énergie libre volumique ($df=du-Tds-sdT=d\pi+0$)

Lois de comportement Linéaires en Visco-Elasticité Classique

Loi de Hooke (Elasticité Linéaire)

$$\sigma_{ij}^{E} = \sigma_{ij}^{0} + \sum_{k,l} C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$$

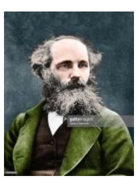
$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}$$

cas d'un milieu isotrope: $\sigma_{ij}^{E} = \sigma_{ij}^{0} + 2\mu\varepsilon_{ij} + \lambda\delta_{ij}tr\bar{\bar{\varepsilon}}$

Loi de Newton (Viscosité Linéaire)

$$\sigma_{ij}^{V} = \sum_{k,l} H_{ijkl}D_{kl} \;\; avec\; \bar{\bar{D}} = {}^{S}\bar{\bar{\nabla}}\,\vec{v}$$

cas d'un milieu isotrope: $\sigma_{ij}^{V} = \eta D_{ij} + (\xi - \frac{2}{3}\eta)\delta_{ij}tr\bar{\bar{D}}$



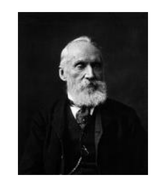
Solide de Maxwell

$$\bar{\bar{\varepsilon}} = \bar{\bar{\varepsilon}}_{E} + \bar{\bar{\varepsilon}}_{V}$$

(après dérivation et intégration)

$$\boxed{\bar{\bar{\sigma}}_{E} = \bar{\bar{\sigma}}_{H} = \bar{\bar{\sigma}} = \bar{\bar{\bar{\bar{A}}}} * \bar{\bar{D}}}$$

Solide de Kelvin-Voigt



$$\bar{\bar{\varepsilon}} = \bar{\bar{\varepsilon}}_{E} = \bar{\bar{\varepsilon}}_{V}$$

$$\boxed{\bar{\bar{\sigma}} = \bar{\bar{\sigma}}_{E} + \bar{\bar{\sigma}}_{V} = \bar{\bar{\sigma}}^{0} + \bar{\bar{\bar{\bar{C}}}}:\bar{\bar{\varepsilon}} + \bar{\bar{\bar{\bar{H}}}}:\bar{\bar{D}}}$$

Loi de Hooke

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1131} & C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2231} & C_{2212} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3331} & C_{3312} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2323} & C_{2331} & C_{2312} \\ C_{3111} & C_{3122} & C_{3133} & C_{3123} & C_{3131} & C_{3112} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1223} & C_{1231} & C_{1212} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\,\varepsilon_{23} \\ 2\,\varepsilon_{31} \\ 2\,\varepsilon_{12} \end{bmatrix}$$

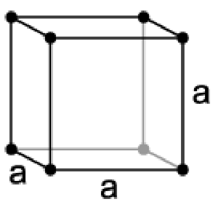
$$(11) \leftrightarrow 1$$
$$(22) \leftrightarrow 2$$
$$(33) \leftrightarrow 3$$
$$(23) \leftrightarrow 4$$
$$(31) \leftrightarrow 5$$
$$(12) \leftrightarrow 6$$

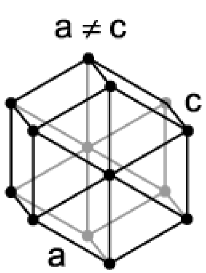
Notation de Voigt

$$\begin{bmatrix} \sigma_{1} \\ \sigma_{2} \\ \sigma_{3} \\ \sigma_{4} \\ \sigma_{5} \\ \sigma_{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{1} \\ \varepsilon_{2} \\ \varepsilon_{3} \\ 2\,\varepsilon_{4} \\ 2\,\varepsilon_{5} \\ 2\,\varepsilon_{6} \end{bmatrix}$$

Loi de Hooke: rôle des symétries matériau

$$\forall \bar{\bar{\varepsilon}} \quad \bar{\bar{S}}.\bar{\bar{\sigma}}.\bar{\bar{S}}^{-1} = \bar{\bar{S}}.\bar{\bar{\bar{\bar{C}}}}.\bar{\bar{\varepsilon}}.\bar{\bar{S}}^{-1} = \bar{\bar{\bar{\bar{C}}}}.\bar{\bar{S}}.\bar{\bar{\varepsilon}}.\bar{\bar{S}}^{-1}$$

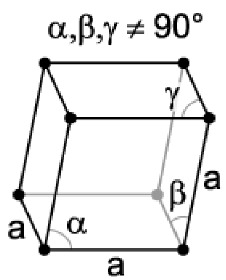




Système cristallin	Grp ponctuel de symétrie	Tenseur de raideur
Cubique **3 modules** (3 axes équivalents)	23 $m\bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ $m\bar{3}m$	$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{bmatrix}$
Hexagonal **6 modules** (invariance par rotation autour d'un axe)	6 $\bar{6}$ 6/m 622 6mm $\bar{6}2m$ 6/mmm	$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}$

Loi de Hooke: rôle des symétries matériau

$$\forall \overline{\overline{\varepsilon}} \quad \overline{\overline{S}}.\overline{\overline{\sigma}}.\overline{\overline{S}}^{-1} = \overline{\overline{S}}.\overline{\overline{\overline{\overline{C}}}}.\overline{\overline{\varepsilon}}.\overline{\overline{S}}^{-1} = \overline{\overline{\overline{\overline{C}}}}.\overline{\overline{S}}.\overline{\overline{\varepsilon}}.\overline{\overline{S}}^{-1}$$



Trigonal

(rhomboédrique)

6 modules

32, 3m, $\overline{3}$m

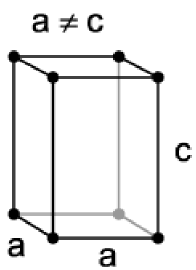
$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & C_{14} \\ & & & & & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{bmatrix}$$

3, $\overline{3}$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & -C_{15} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & -C_{15} \\ & & & & C_{44} & C_{14} \\ & & & & & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{bmatrix}$$

Loi de Hooke: rôle des symétries matériau

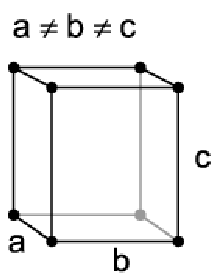
$$\forall \overline{\overline{\varepsilon}} \quad \overline{\overline{S}}.\overline{\overline{\sigma}}.\overline{\overline{S}}^{-1} = \overline{\overline{S}}.\overline{\overline{\overline{\overline{C}}}}.\overline{\overline{\varepsilon}}.\overline{\overline{S}}^{-1} = \overline{\overline{\overline{\overline{C}}}}.\overline{\overline{S}}.\overline{\overline{\varepsilon}}.\overline{\overline{S}}^{-1}$$



Système cristallin	Groupe ponctuel de symétrie	Tenseur de raideur
Tétragonal	422 4mm $\overline{4}$2m 4/mmm	$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}$
(quadratique)	4 $\overline{4}$ 4/m	$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\ & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & -C_{16} \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}$

6 modules

(2 axes de symétrie équivalents)

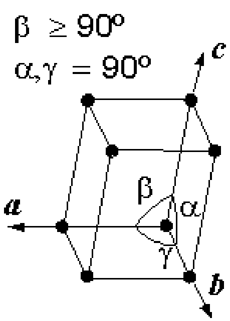


Orthorhombique — 222, mm2, mmm

9 modules

(2 axes de symétrie orthogonaux)

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}$$

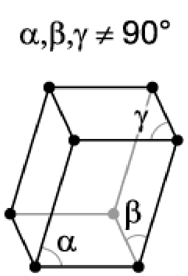


Monoclinique — 2, m, 2/m

13 modules

(1 plan de symétrie)

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & C_{15} & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & C_{25} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & C_{35} & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & C_{46} \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}$$

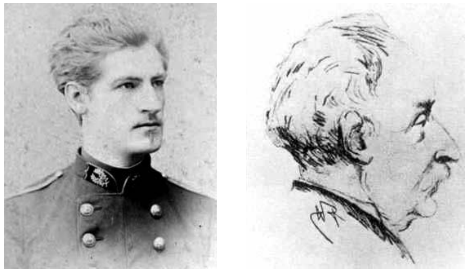


Triclinique — 1, $\bar{1}$

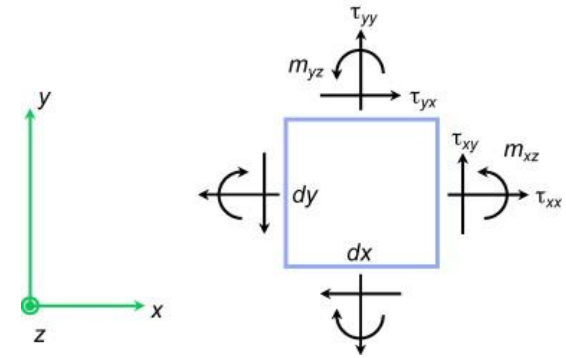
21 modules

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix}$$

Modèle Linéaire de Cosserat



François et Eugène Cosserat



$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \qquad \epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}. \quad \epsilon_{xy} = \frac{\partial u_y}{\partial x} - \omega_z, \qquad \epsilon_{yx} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \omega_z.$$

Micro-courbures $\kappa_{xz} = \frac{\partial \omega_z}{\partial x}, \qquad \kappa_{yz} = \frac{\partial \omega_z}{\partial y}$

$$\epsilon = [\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}, \epsilon_{xy}, \epsilon_{yx}, \kappa_{xz} l, \kappa_{yz} l],$$

$$\sigma = [\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yx}, \boxed{m_{xz}/l, m_{yz}/l],}$$

Couples

$$\sigma = \mathrm{D}^e \epsilon, \qquad \mathrm{D}^e = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu + \mu_c & \mu - \mu_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu - \mu_c & \mu + \mu_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu^* \end{bmatrix}$$

Module de Flexion

Lois de comportement Linéaires

1) Rappel: visco-élasticité linéaire

2) Modules d'Elasticité de Cauchy-Born (1915)

3) Paramètres Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

Classical Theory of Elasticity:

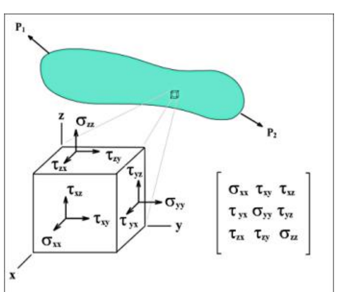
$$\delta \mathrm{E} = \underline{\underline{\sigma}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \ldots.$$

linearized strain tensor $\varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right)$

stress tensor $\boxed{\sigma_{ij} \equiv \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ij}} \approx \sigma_{ij}^0 + \sum_{k,l} C_{ijkl} . \varepsilon_{kl}}$

Equations du mouvement:

$$\boxed{\rho \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial t^2}(\underline{r}) = \nabla . \underline{\underline{\sigma}} + \underline{f}}$$



Atomic Scale Description:

$$\mathrm{E}\left(\left\{ \underline{r}_{ij} \right\}\right) = \sum_{(i,j)} \mathrm{E}_{ij}(\underline{r}_{ij}) + \sum_{(i,j,k)} \mathrm{E}_{ijk}(\underline{r}_{ij}, \underline{r}_{jk}, \underline{r}_{ik}) + \ldots$$

2-body interactions
(Cauchy model)
Ex. Lennard-Jones
Foams
BKS model for Silica

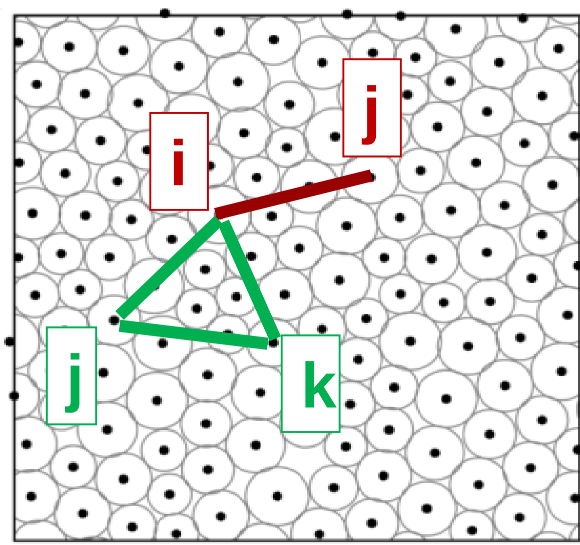
3-body inter.
Ex. Silicon

Equations du mouvement sur chaque particule:

$$\boxed{m_i . \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2}\left(\underline{r}_i\right) = -\frac{\partial E_{total}}{\partial r_{i\alpha}} \approx -\sum_j M_{ij}^{\alpha\beta} . u_\beta\left(\underline{r}_j\right) + f_\alpha\left(\underline{r}_i\right)}$$

$\underline{u}\left(\underline{r}_i\right) \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_i^{\,0}$ déplacement

Modélisation microscopique des grandeurs mécaniques:



(b)

N particules
D dimensions

N.D paramètres
-D(D+1)/2 mouvements de corps rigide
(translation, rotations)

N.D –D(D+1)/2 distances indépendantes

The Cauchy-Born Theory of Solids (1915)

Expression de l'énergie d'interaction:

$$E_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r}_i\right\}\right) = \sum_{(i,j)} E_{\text{ij}}\left(\underline{r}_{ij}\right) + \sum_{(i,j,k)} E_{\text{ijk}}\left(\underline{r}_{ij}, \underline{r}_{jk}, \underline{r}_{ik}\right) + \ldots$$

$$= E_{\text{total}}\left(\left\{r_{ij}\right\}\right)$$

interactions à 2-corps
(modèle de Cauchy)
Ex. solides ioniques,
mousses

inter. à 3-corps
Ex. sol. covalents

Développement au 2ème ordre de l'énergie, modules d'élasticité:

$$\mathrm{E}_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r_i}\right\}\right) = \mathrm{E}_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r_i}^{eq}\right\}\right) + \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \frac{\partial \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial \underline{r_{ij}}} . \underline{u_{ij}} + \boxed{\frac{1}{2!}\sum_{(i,j)(k,l)} \underline{u_{ij}} . \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial \underline{r_{ij}} \partial \underline{r_{kl}}} . \underline{u_{kl}}} + \ldots$$

avec

$$\underline{u_{ij}} . \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial \underline{r_{ij}} \partial \underline{r_{kl}}} . \underline{u_{kl}} = \sum_\alpha \sum_\beta \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial r_{ij}{}^\alpha \partial r_{kl}{}^\beta} . u_{ij}{}^\alpha . u_{kl}{}^\beta = \sum_\alpha \sum_\beta \frac{\partial}{\partial r_{kl}{}^\beta}\left(\frac{\partial \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial r_{ij}} . \frac{r_{ij}{}^\alpha}{r_{ij}}\right) . u_{ij}{}^\alpha . u_{kl}{}^\beta$$

$$= \sum_\alpha \sum_\beta \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} . \frac{r_{kl}{}^\beta}{r_{kl}} . \frac{r_{ij}{}^\alpha}{r_{ij}} . u_{ij}{}^\alpha . u_{kl}{}^\beta + \sum_\alpha \sum_\beta \frac{\partial \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial r_{ij}} . \delta_{(ij),(kl)} . u_{ij}{}^\alpha . u_{kl}{}^\beta . \left(\frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_{ij}} - \frac{r_{ij}{}^\alpha . r_{ij}{}^\beta}{r_{ij}{}^3}\right)$$

$$= \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\text{total}}}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} . u_{ij}{}^P . u_{kl}{}^P + T_{ij} . \delta_{(ij),(kl)} . \frac{\left(u_{ij}{}^T\right)^2}{r_{ij}}$$

Rotation

Elongation de la liaison

Raideurs locales

Développement au 2ème ordre de l'énergie, modules d'élasticité:

Approximation de Born-Huang pour les modules d'élasticité:

$T_{ij}=0$ soit: absence de contraintes « gelées ».

$$E_{total}^{Q}\left(\left\{\underline{r_i}\right\}\right)\approx\frac{1}{2!}\sum_{(ij),(kl)}\frac{\partial^2 E_{total}}{\partial r_{ij}\partial r_{kl}}.u_{ij}{}^{P}.u_{kl}{}^{P}$$

$$=\frac{1}{2!}\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\sum_{\gamma}\sum_{\delta}\sum_{(ij),(kl)}\frac{\partial^2 E_{total}}{\partial r_{ij}\partial r_{kl}}\cdot\frac{r_{ij}{}^{eq,\alpha}.r_{ij}{}^{eq,\beta}.r_{kl}{}^{eq,\gamma}.r_{kl}{}^{eq,\delta}}{r_{ij}{}^{eq}.r_{kl}{}^{eq}}.\varepsilon_{\alpha\beta}.\varepsilon_{\gamma\delta}$$

Développement au 2ème ordre de l'énergie, modules d'élasticité:

$$E^{Q}_{\text{total}}\left(\left\{\underline{r_i}\right\}\right) \approx \frac{1}{2!}\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\sum_{\gamma}\sum_{\delta}\sum_{(ij),(kl)} \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial r_{ij}\partial r_{kl}} \cdot \frac{r_{ij}^{\;eq,\alpha}.r_{ij}^{\;eq,\beta}.r_{kl}^{\;eq,\gamma}.r_{kl}^{\;eq,\delta}}{r_{ij}^{\;eq}.r_{kl}^{\;eq}}.\varepsilon_{\alpha\beta}.\varepsilon_{\gamma\delta}$$

A comparer avec:

$$E^{Q}_{\text{total}} = \iiint dV \; \frac{1}{2}\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$$

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(i) = \boxed{\frac{1}{V_i}\sum_{(i_1i_2i_3i_4)} \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial r_{i_1i_2}\partial r_{i_3i_4}} \cdot \frac{r_{i_1i_2}^{\;eq,\alpha}.r_{i_1i_2}^{\;eq,\beta}.r_{i_3i_4}^{\;eq,\gamma}.r_{i_3i_4}^{\;eq,\delta}}{r_{i_1i_2}^{\;eq}.r_{i_3i_4}^{\;eq}}.n_{(i_1i_2i_3i_4)}} \quad i \in (i_1i_2i_3i_4)$$

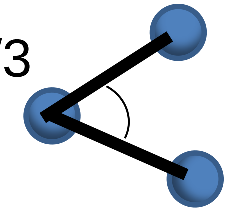
Développement au 2ème ordre de l'énergie, modules d'élasticité:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(i) = \frac{1}{V_i} \sum_{(i_1 i_2 i_3 i_4)} \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\mathrm{total}}}{\partial r_{i_1 i_2}\, \partial r_{i_3 i_4}} \cdot \frac{r_{i_1 i_2}^{eq,\alpha} . r_{i_1 i_2}^{eq,\beta} . r_{i_3 i_4}^{eq,\gamma} . r_{i_3 i_4}^{eq,\delta}}{r_{i_1 i_2}^{eq} . r_{i_3 i_4}^{eq}} . n$$

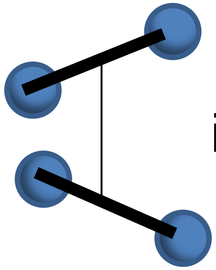
Contribution termes à 2-corps (forces centrales): $(i_1 i_2)=(i_3 i_4) \rightarrow n=1/2$


i

Contribution 3-corps (flexion angulaire): $i=i_1$ and $i=i_3$ or $i=i_4 \rightarrow n=2/3$


i

Interactions 4-body (twists): $(i_1 i_2) \neq (i_3 i_4) \rightarrow n=1/2$


i

Développement au 2ème ordre de l'énergie, modules d'élasticité:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(i)=\frac{1}{V_i}\sum_{(i_1i_2i_3i_4)}\frac{\partial^2 E_{\mathrm{total}}}{\partial r_{i_1i_2}\,\partial r_{i_3i_4}}\cdot\frac{r_{i_1i_2}^{eq,\alpha}.r_{i_1i_2}^{eq,\beta}.r_{i_3i_4}^{eq,\gamma}.r_{i_3i_4}^{eq,\delta}}{r_{i_1i_2}^{eq}.r_{i_3i_4}^{eq}}.n$$

$\mathbf{C}_{\alpha\beta\gamma\delta}=\mathbf{C}_{\beta\alpha\gamma\delta}$ et $\mathbf{C}_{\alpha\beta\gamma\delta}=\mathbf{C}_{\alpha\beta\delta\gamma}$ → 36 modules

$\mathbf{C}_{\alpha\beta\gamma\delta}=\mathbf{C}_{\gamma\delta\alpha\beta}$ → **21 modules**

Symétries supplémentaires, si **interactions à 2-corps** (Modèle de Cauchy):

Permutations de tous les indices: $\mathbf{C}_{\alpha\alpha\beta\beta}=\mathbf{C}_{\alpha\beta\alpha\beta}$ et $\mathbf{C}_{\alpha\beta\gamma\gamma}=\mathbf{C}_{\alpha\gamma\beta\gamma}$
(Relations de Cauchy pour les interactions à 2-corps)

→ 3 $\mathbf{C}_{\alpha\alpha\alpha\alpha}$ + 6 $\mathbf{C}_{\alpha\alpha\alpha\beta}$ + 3 $\mathbf{C}_{\alpha\alpha\beta\beta}$ + 3 $\mathbf{C}_{\alpha\beta\gamma\gamma}$ → **15 modules**

Modules d'Elasticité **effectifs** à l'échelle **macroscopique**?

$$\mathrm{E}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{total}}\left(\left\{\underline{r_i}\right\}\right) \approx \frac{1}{2!}\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\sum_{\gamma}\sum_{\delta}\sum_{(ij),(kl)} \frac{\partial^2 \mathrm{E}_{\mathrm{total}}}{\partial r_{ij}\partial r_{kl}} \cdot \frac{r_{ij}^{\;eq,\alpha}.r_{ij}^{\;eq,\beta}.r_{kl}^{\;eq,\gamma}.r_{kl}^{\;eq,\delta}}{r_{ij}^{\;eq}.r_{kl}^{\;eq}} .\varepsilon_{\alpha\beta}.\varepsilon_{\gamma\delta}\left(\vec{r}\right)$$

Déformations **locales**
(inhomogènes)

$$\mathrm{E}^{\mathrm{Q}}_{\mathrm{total}}\left(\left\{\underline{r_i}\right\}\right) \approx \frac{1}{2}\left\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{eff} : \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle$$

$$\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{eff} = ?$$

Méthode d'Homogénéisation ?

Des modules **Microscopiques** aux modules Effectifs **Macroscopiques**

W. Voigt (1889): Les hétérogénéités de déformation contribuent à **réduire** les modules d'élasticité effectifs

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(i) = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle + \delta\underline{\underline{\varepsilon}}(i)$$

Hétérogénéités Spatiales

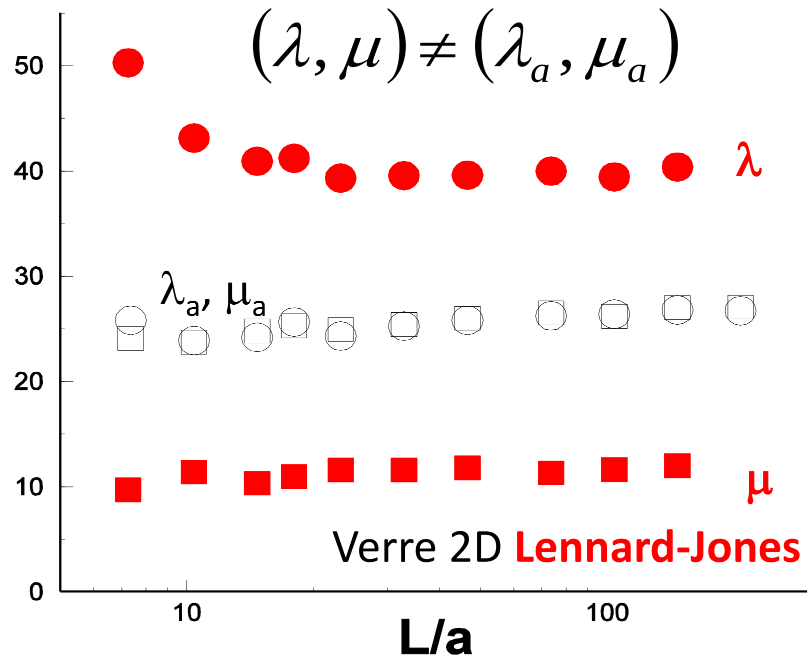
MACRO

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{eff} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle$$

MICRO

$$= \langle (\underline{\underline{\varepsilon}} + \delta\underline{\underline{\varepsilon}}) : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} + \delta\underline{\underline{\varepsilon}}) \rangle$$

$$= \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle : \langle \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} \rangle : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle - \langle \delta\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\delta\varepsilon}} \rangle + \cdots$$

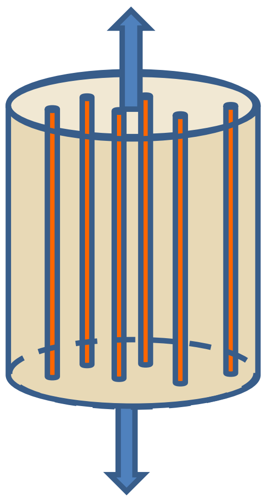


$$\boxed{\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{eff} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle \leq \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle : \langle \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} \rangle : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle}$$

Moyenne
= Borne Supérieure

A. Tanguy et al. (2002)

Modules d'Elasticité **Effectifs**
Exemple: **fibres** dans une matrice



$$\sigma_L = E_L.\varepsilon_L$$

$$\varepsilon_f = \varepsilon_m = \varepsilon_L = \langle \varepsilon \rangle$$

$$\sigma_f = E_f \langle \varepsilon \rangle \quad ; \quad \sigma_m = E_m \langle \varepsilon \rangle$$

$$\begin{aligned} F_L &= F_f + F_m = \sigma_f.S_f + \sigma_m.S_m \\ &= E_f.\varepsilon_f.S_f + E_m.\varepsilon_m.S_m \\ &= (E_f.S_f + E_m.S_m).\langle \varepsilon \rangle \end{aligned}$$

$$\sigma_L = \frac{F_L}{S_f + S_m} = \langle \sigma \rangle = \frac{(E_f.S_f + E_m.S_m)}{S_f + S_m}.\langle \varepsilon \rangle$$

$$\boxed{\Rightarrow E_L = E_f.\frac{V_f}{V} + E_m.\frac{V_m}{V}}$$ Voigt (1889)

$E_{L,T}$ Module d'Young *effectif*

E_f Module des fibres

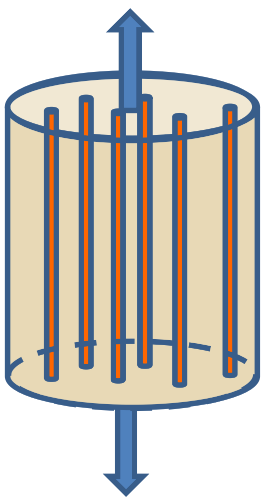
E_m , Module de la matrice

Cas de déformation Homogènes:

Module Effectif = Moyenne arithmétique

(Homogénéisation exacte)

Modules d'Elasticité **Effectifs**
Exemple: **fibres** dans une matrice



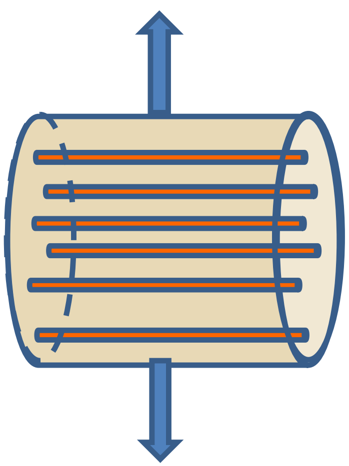
$$\sigma_L = \frac{F_L}{S_f + S_m} = \langle \sigma \rangle = \frac{(E_f.S_f + E_m.S_m)}{S_f + S_m}.\langle \varepsilon \rangle$$

$$\boxed{E_L = E_f.\frac{V_f}{V} + E_m.\frac{V_m}{V}}$$ Voigt (1889)

$E_{L,T}$ Module d'Young ***effectif***

E_f Module des fibres

E_m , Module de la matrice



$$\sigma_T = E_T.\varepsilon_T$$

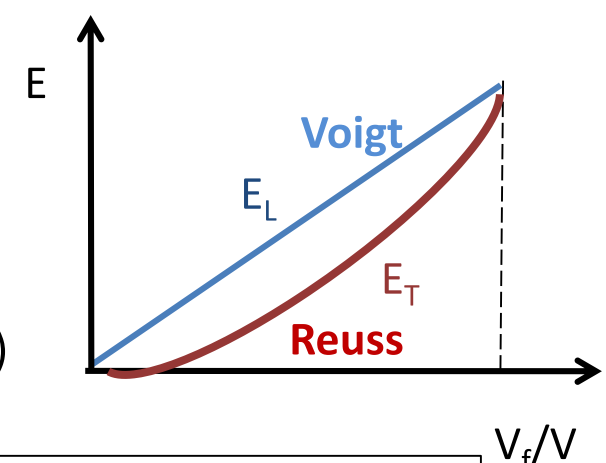
$$\sigma_f = \sigma_m = \sigma_T = \langle \sigma \rangle$$

$$\pi_{total} \approx \pi_f + \pi_m$$

$$\frac{1}{2}V.\varepsilon_T.\sigma_T \approx \frac{1}{2}V_f.\varepsilon_f.\sigma_f + \frac{1}{2}V_m.\varepsilon_m.\sigma_m$$

$$\varepsilon_T \approx \frac{V_f}{V}.\varepsilon_f + \frac{V_m}{V}.\varepsilon_m = \frac{\langle \sigma \rangle}{E_T}$$

$$\boxed{\Rightarrow \frac{1}{E_T} \approx \frac{V_f}{V}.\frac{1}{E_f} + \frac{V_m}{V}.\frac{1}{E_m}}$$ Reuss (1929)



A **contraintes uniformes**: Module Effectif résultant de la **moyenne des inverses**

Lois de comportement Linéaires

1) Rappel: visco-élasticité linéaire

2) Modules d'Elasticité de Cauchy-Born (1915)

3) Paramètres Multi-échelle de I. Goldhirsch (2003)

Exemple de la loi de Hooke

$$\begin{bmatrix}\sigma_{11}\\ \sigma_{22}\\ \sigma_{33}\\ \sigma_{23}\\ \sigma_{31}\\ \sigma_{12}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1131} & C_{1112}\\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2231} & C_{2212}\\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3331} & C_{3312}\\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2323} & C_{2331} & C_{2312}\\ C_{3111} & C_{3122} & C_{3133} & C_{3123} & C_{3131} & C_{3112}\\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1223} & C_{1231} & C_{1212}\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}\varepsilon_{11}\\ \varepsilon_{22}\\ \varepsilon_{33}\\ 2\,\varepsilon_{23}\\ 2\,\varepsilon_{31}\\ 2\,\varepsilon_{12}\end{bmatrix}$$

21 paramètres à identifier (approximation linéaire de fonction)

6 équations locales par déformation imposée

4 déformations imposées permettent d’obtenir **24** équations linéaires à inverser

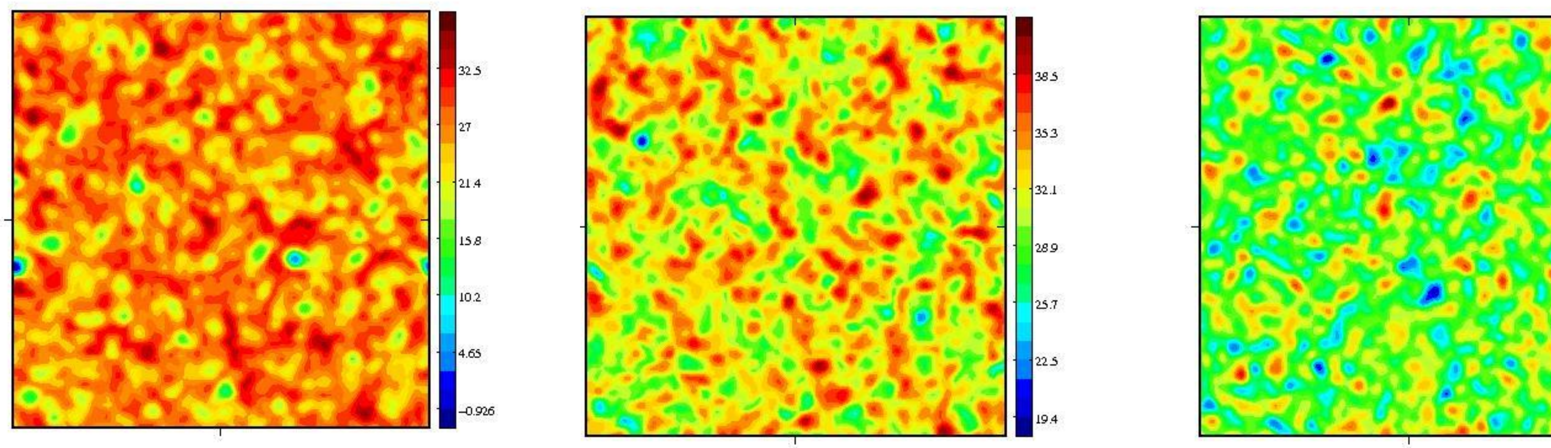
$$\begin{bmatrix}\sigma_{11}^{(1)}\\ \dots\\ \sigma_{12}^{(4)}\end{bmatrix} = \left[f\left(\varepsilon_{11}^{(1)}, \dots, \varepsilon_{12}^{(4)}\right)\right] \cdot \begin{bmatrix}C_{1111}\\ \dots\\ C_{1212}\end{bmatrix} \qquad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix}C_{1111}\\ \dots\\ C_{1212}\end{bmatrix} = \dots$$

$$\Delta = \min_{\{C_{1111},\dots,C_{1212}\}} \left(\left\| \sigma_{11}^{(1)} - \sum_{kl} C_{11kl}\varepsilon_{kl}^{(1)} \right\|^2 + \cdots + \left\| \sigma_{12}^{(4)} - \sum_{kl} C_{12kl}\varepsilon_{kl}^{(4)} \right\|^2 \right) / norm$$

Cas d'un verre de Lennard-Jones 2D

$$\begin{bmatrix} \delta\sigma_{xx} \\ \delta\sigma_{yy} \\ \delta\sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix}$$

$$C_1 = 2\mu, C_2 = 2\mu, C_3 = 2(\lambda + \mu)$$

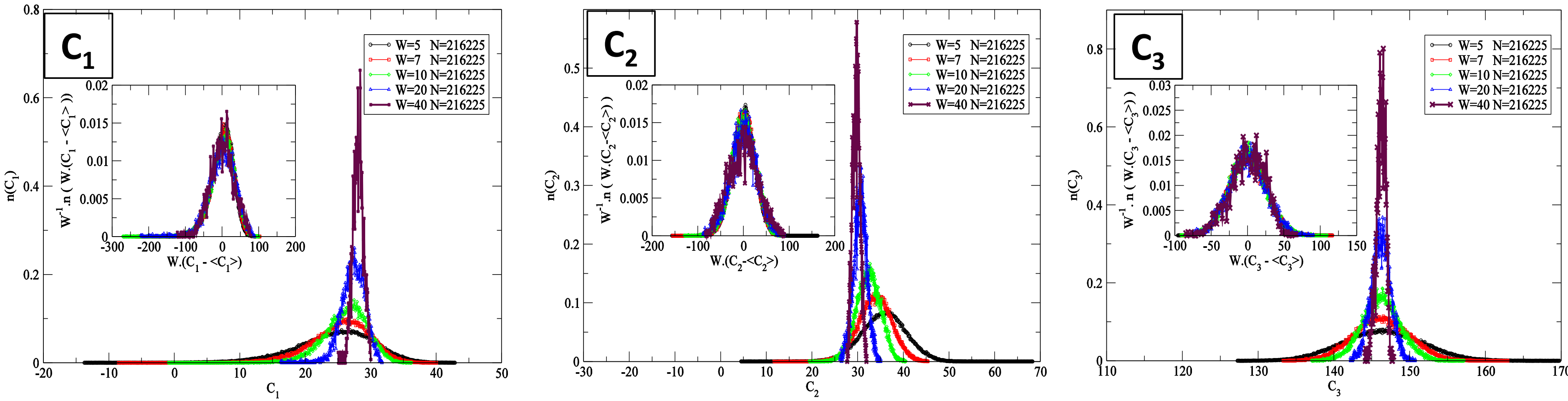


$C_1 \sim 2\,\mu_1$ $C_2 \sim 2\,\mu_2$ $C_3 \sim 2\,(\lambda+\mu)$

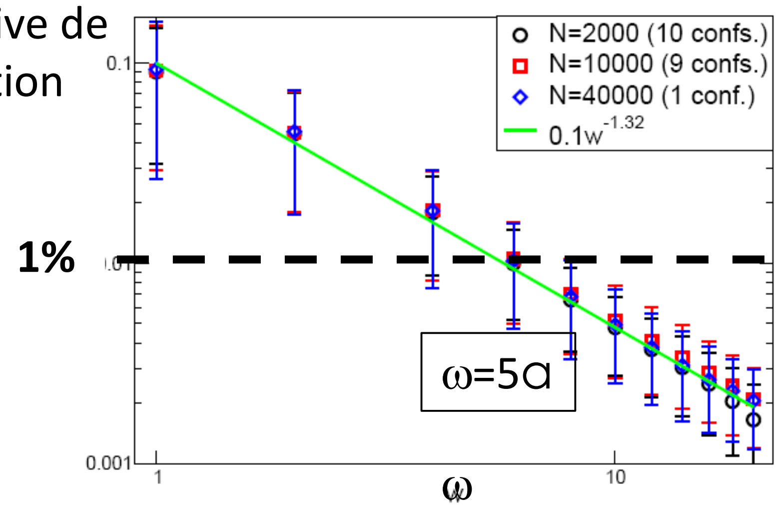
2D Jennard-Jones $\omega=5a$ $N = 216\,225$ $L = 483\,a$

M. Tsamados et al. (2009)

Cas d'un verre de Lennard-Jones 2D



Erreur Relative de l'approximation linéaire :



M. Tsamados et al. (2009)

Cas d'un verre de Lennard-Jones 2D

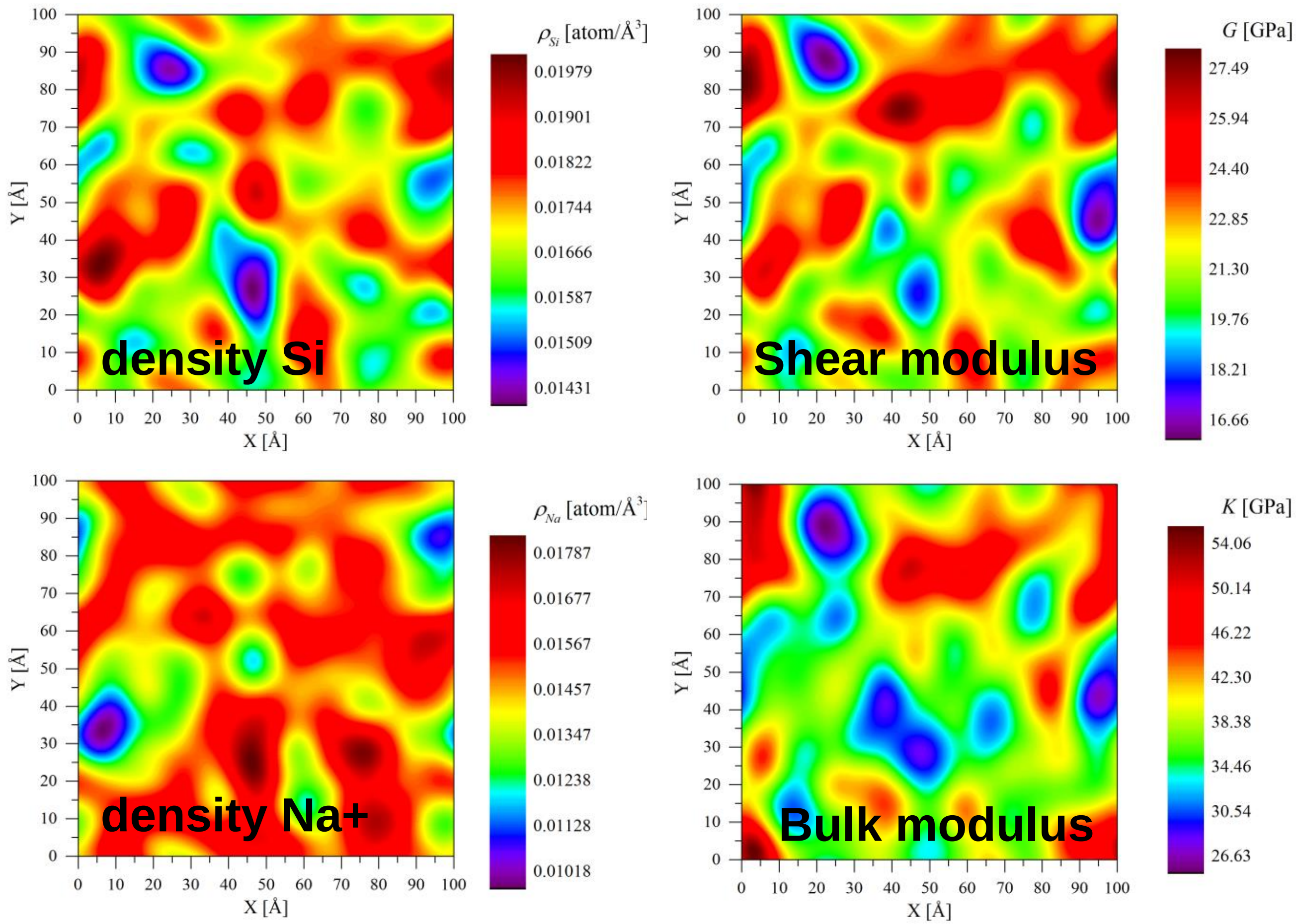
Linear Elasticity

Coarse Graining ω	0	5	10	15	20 a
Hooke's law	NO	YES	YES	YES	YES
Homogeneity $\frac{<\bar{c}>(W)-2\mu}{2\mu}<10\%$	NO	NO	YES	YES	YES
$\frac{\Delta C}{<\bar{c}>}<10\%$	NO	NO	NO	YES	YES
Isotropy $\frac{c_2-c_1}{2\mu}<10\%$	NO	NO	NO	NO	YES

Isotropic Elasticity

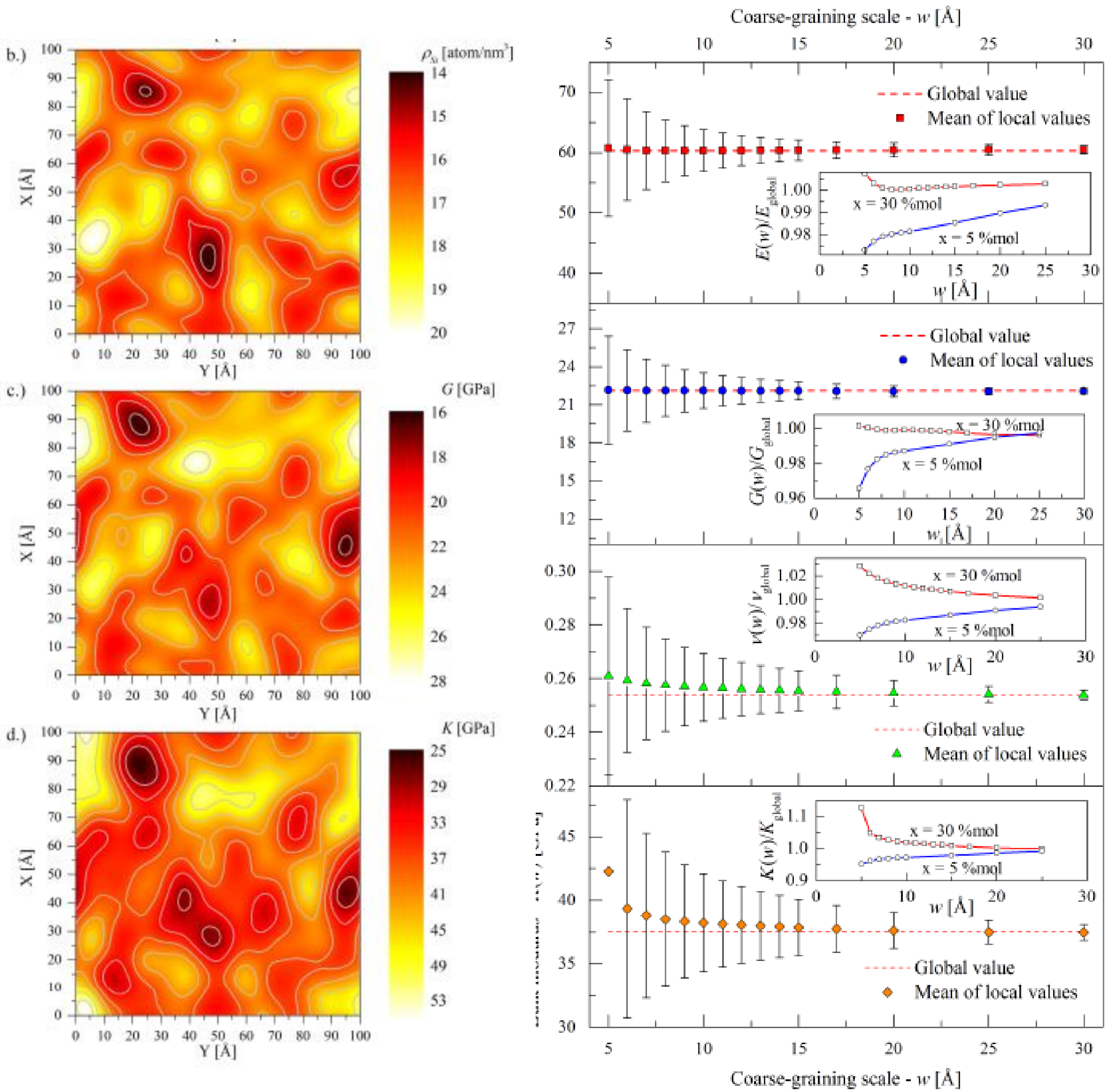
M. Tsamados et al. (2009)

Exemple d'un verre sodo-silicate $(1-x)SiO_2 + xNa_2O$:



High Na+ density ↔ Low Elastic Moduli

G. Molnar et al. (2016)



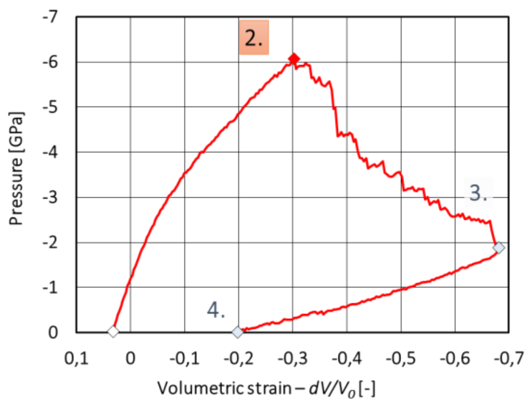
$(1\text{-}x)SiO_2 + xNa_2O$

Study of local coarse-grained Elastic Moduli:

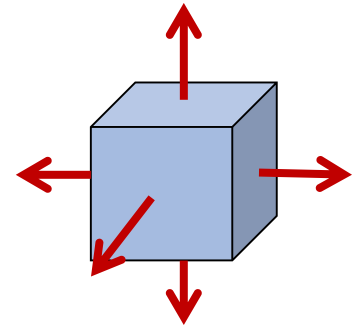
Low convergence to the macroscopic values.

Larger heterogeneities for 5% Na_2O than for 30% Na_2O.

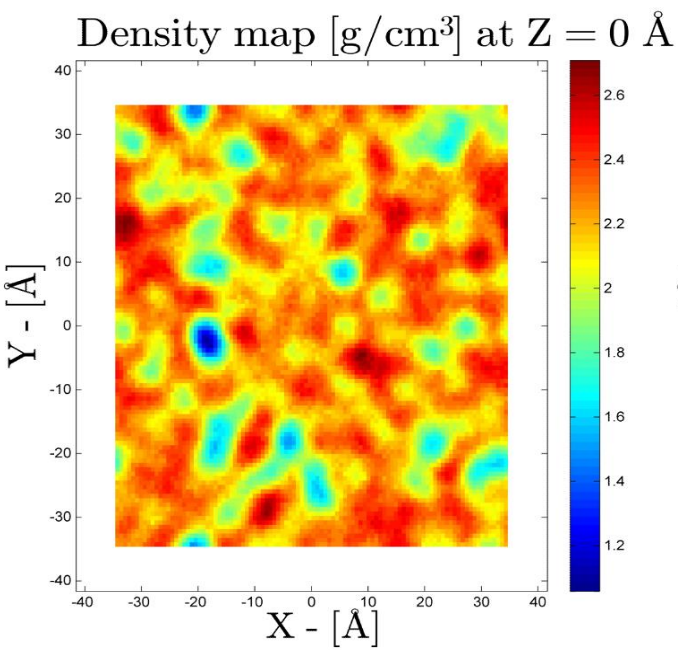
G. Molnar et al. (2016)



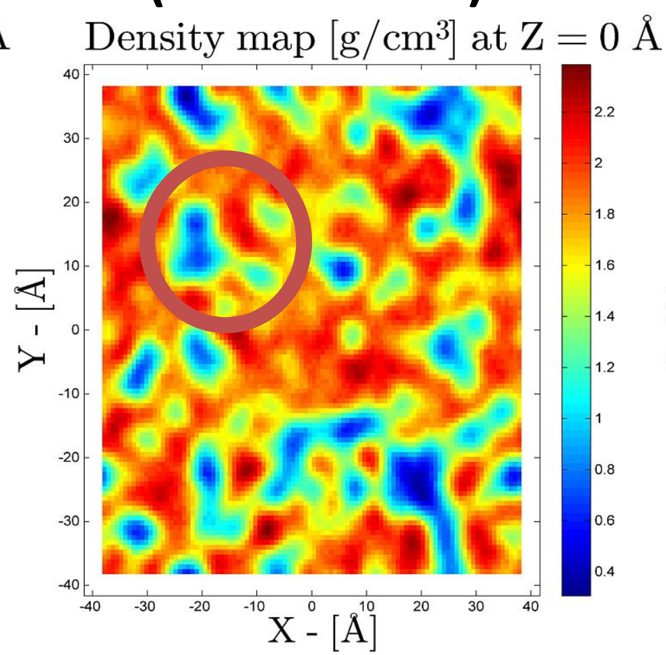
$(1\text{-}x)SiO_2 + xNa_2O$



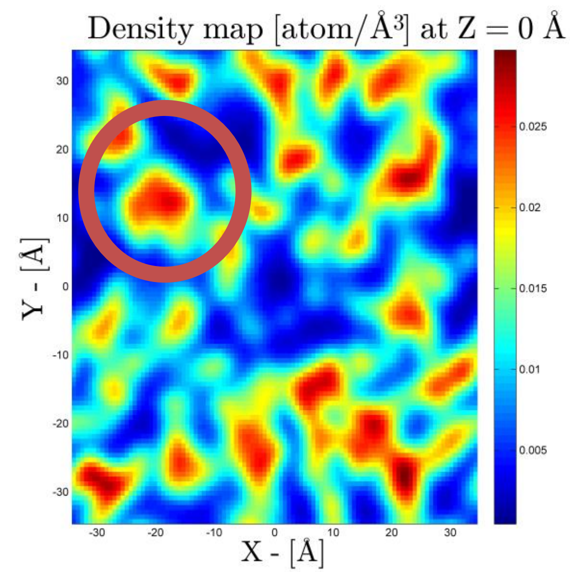
density at start



loosened density (initial cracks)

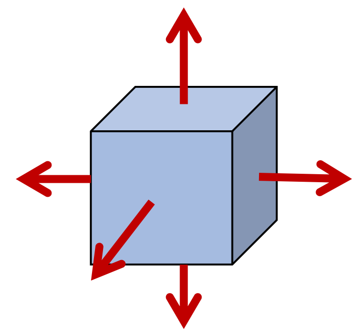


Na density distribution

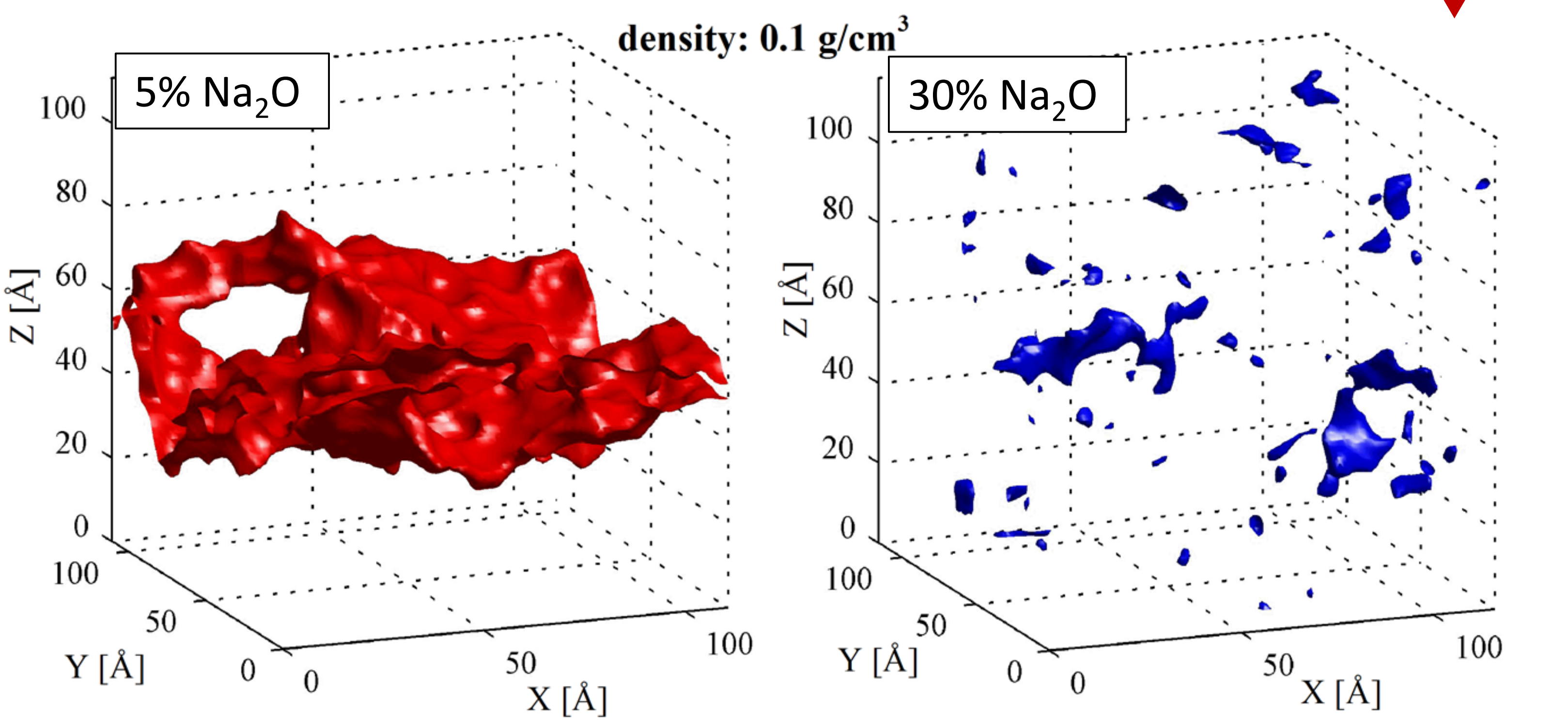


G. Molnar et al. (2016)

$(1-x)SiO_2 + xNa_2O$



Effet de la composition: profil de densité à la traction max



G. Molnar et al. (2016)

Effet de la vitesse de Trempe sur les modules d'Elasticité
Cas du **Silicium amorphe** a-Si

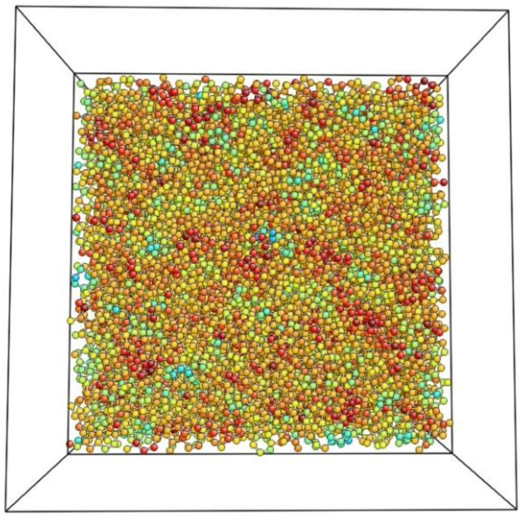
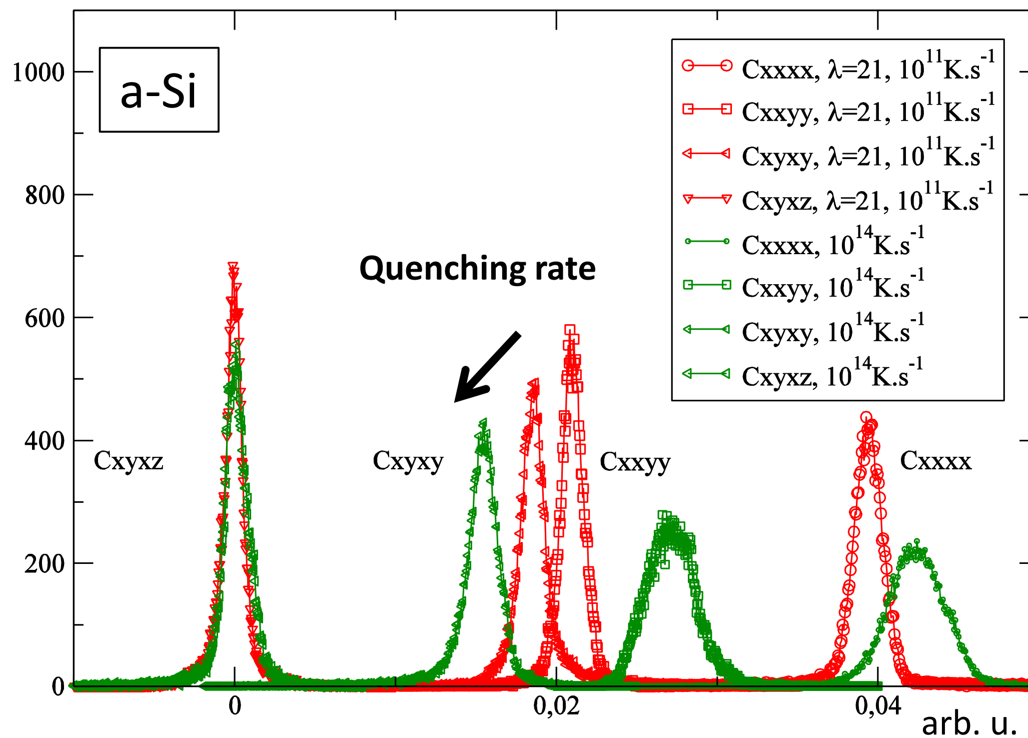
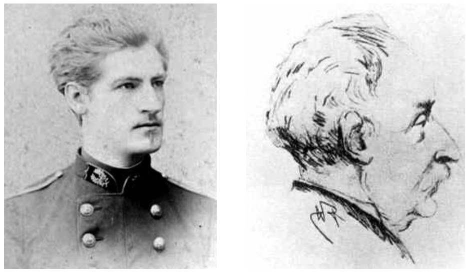


TABLE II. Comparison of structural properties for A-Si for different quenching rates with $\lambda=21$.

Property	10^{11} K/s	10^{12} K/s	10^{13} K/s	10^{14} K/s
Average coord.	4.08	4.12	4.19	4.39
Average angle	108.81	108.50	108.1	106.96
Angle Dev.	11.92	13.69	15.52	19.46
C44 (GPa)	34.24	32.04	29.98	27.66
B0 (GPa)	100.59	105.19	108.71	118.57
ν	0.347	0.362	0.374	0.392
Density (g/cm^3)	2.30277	2.32238	2.32238	2.32238
Pressure (GPa)	0.638	1.34	1.019	−0.8787

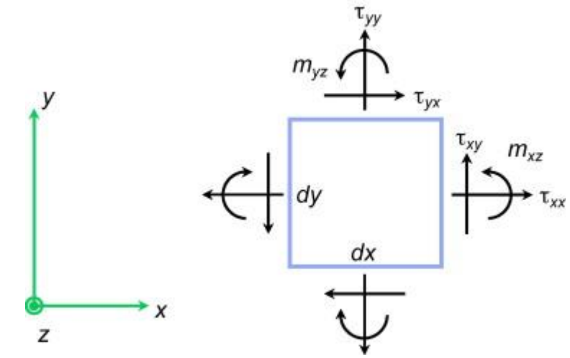


C. Fusco et al. (2010)



François et Eugène Cosserat

Modèle Linéaire de Cosserat



$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \qquad \epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}. \quad \epsilon_{xy} = \frac{\partial u_y}{\partial x} - \omega_z, \qquad \epsilon_{yx} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \omega_z.$$

Micro-courbures $\kappa_{xz} = \frac{\partial \omega_z}{\partial x}, \qquad \kappa_{yz} = \frac{\partial \omega_z}{\partial y}$

$$\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}, \epsilon_{xy}, \epsilon_{yx}, \kappa_{xz} l, \kappa_{yz} l],$$

$$\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yx}, \boxed{m_{xz}/l, m_{yz}/l],}$$

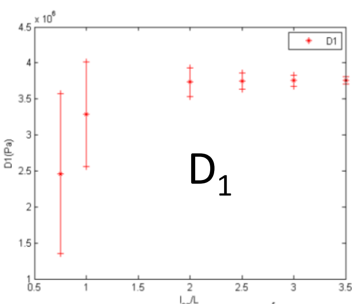
Couples

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}^e \boldsymbol{\epsilon}, \qquad \mathbf{D}^e = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu + \mu_c & \mu - \mu_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu - \mu_c & \mu + \mu_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu^* \end{bmatrix}$$

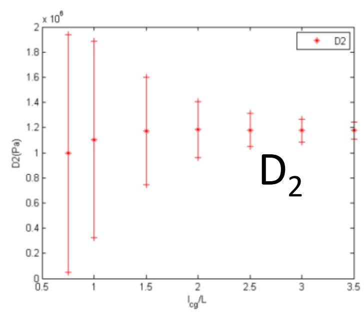
Module de Flexion

Modèle Linéaire de Cosserat appliqué au réseau de poutres Penrose Quasi-Périodique

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D1 & D2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & D1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & D3 & D4 & 0 & 0 \\ & Sym & & D3 & 0 & 0 \\ & & & & D5 & 0 \\ & & & & & D5 \end{bmatrix}$$



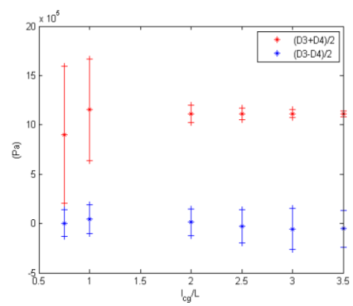
D_1



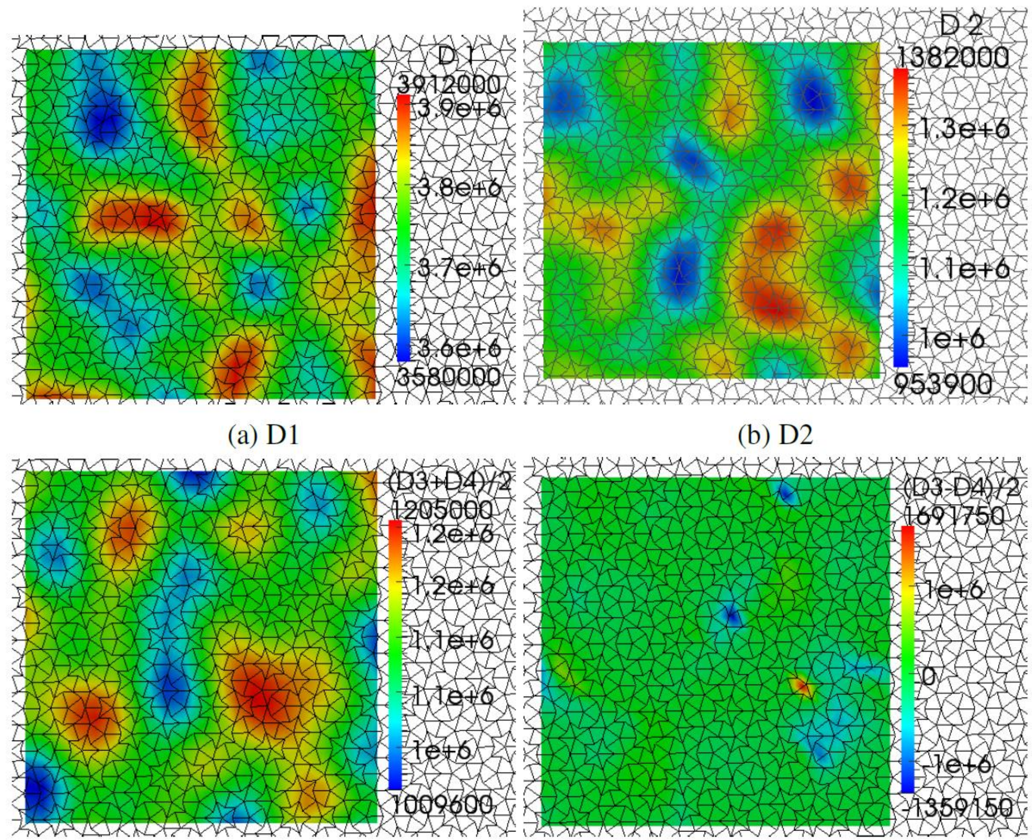
D_2

$(D_3+D_4)/2$

$(D_3-D_4)/2$



ω/L

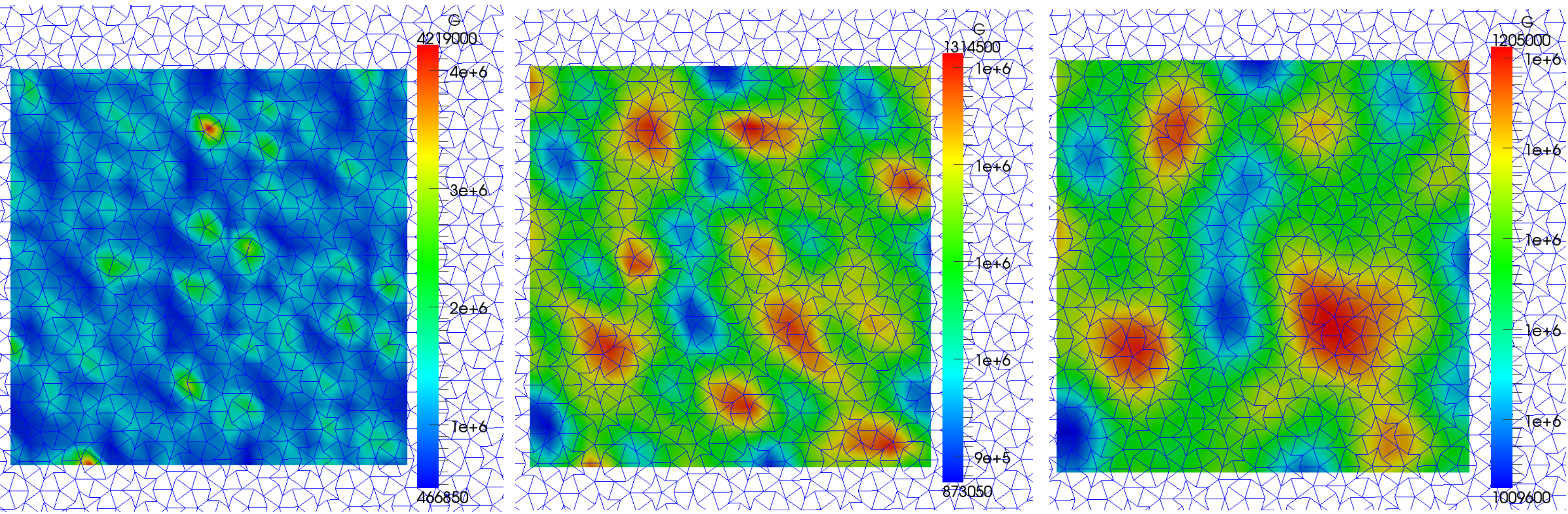


(a) D1 (b) D2

(c) (D3+D4)/2 (d) (D3-D4)/2

Modèle Linéaire de Cosserat appliqué au réseau de poutres Penrose Quasi-Périodique

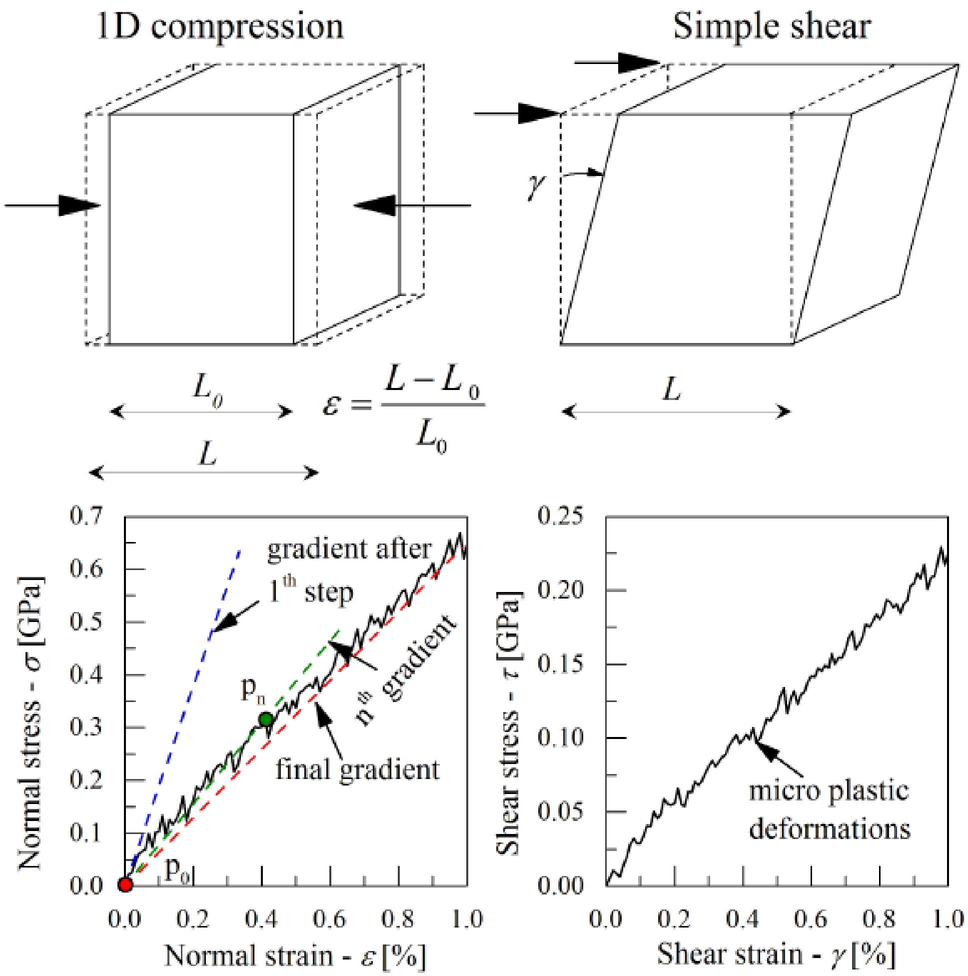
Module de cisaillement G



ω=L ω=2.5L ω=3.5L

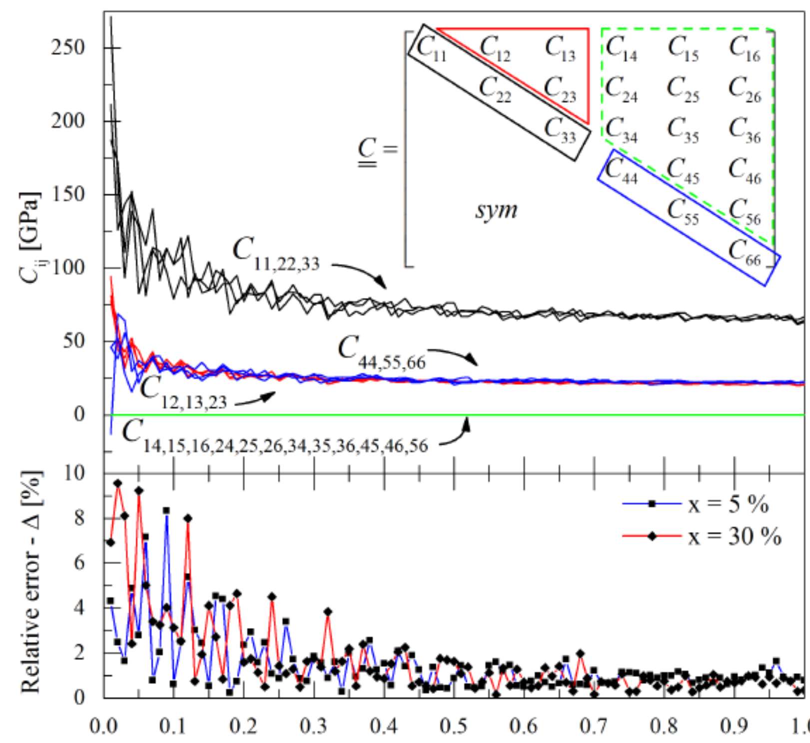
Perte progressive de la sensibilité au détail de la structure

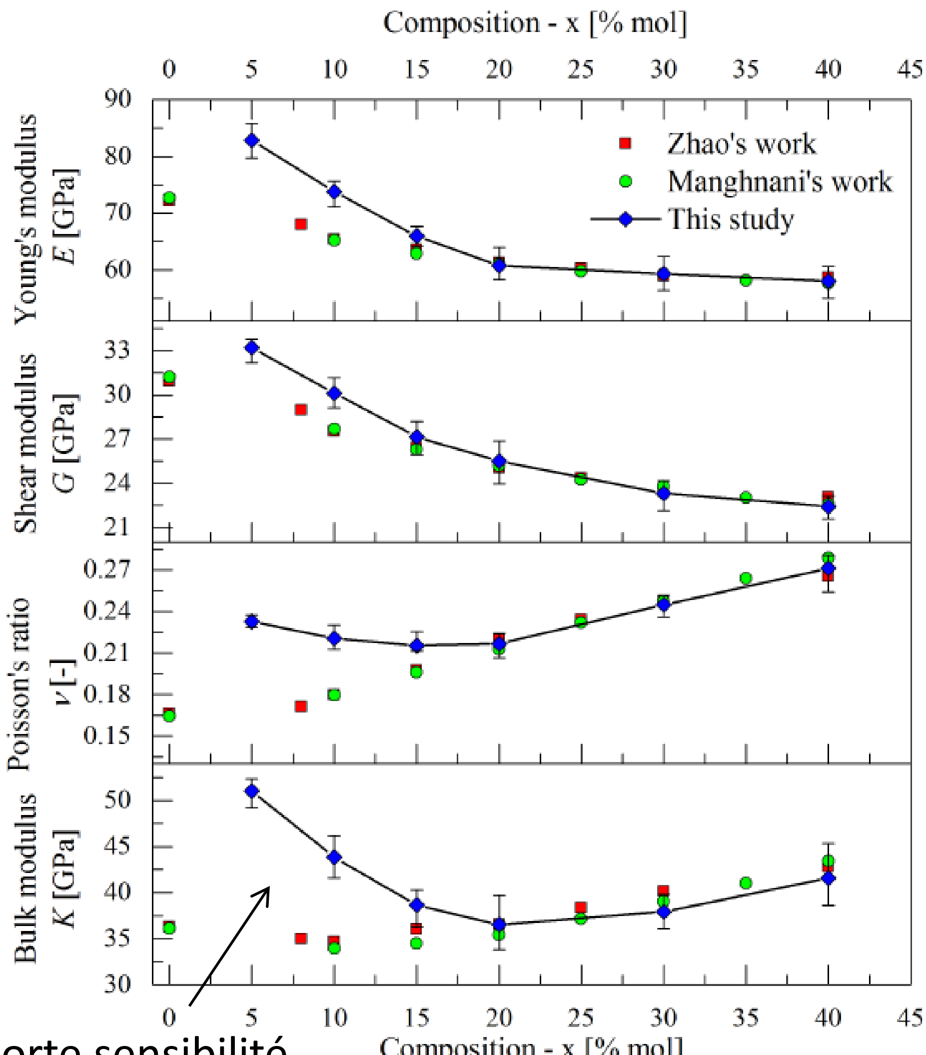
Retour sur les **fluctuations** de modules d'élasticité



Effet de l'**intervalle de déformation** $\Delta\gamma$

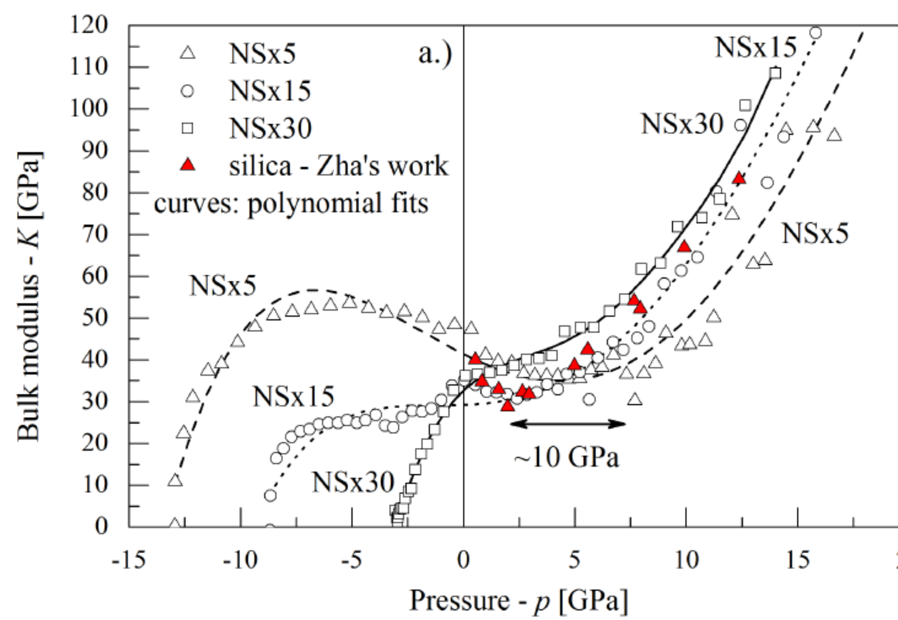
$(1\text{-}x)SiO_2 + xNa_2O$





$(1\text{-}x)SiO_2 + xNa_2O$

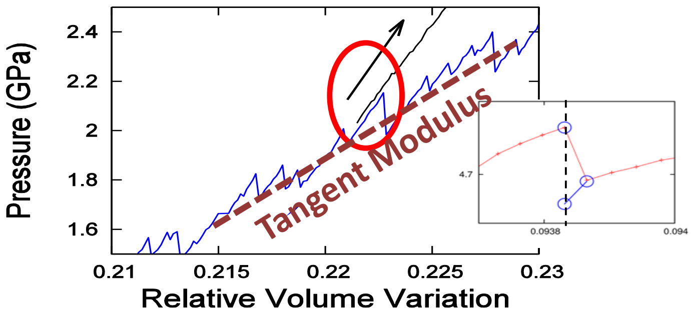
Les *micro-instabilités*
peuvent induire
une dépendance « anormale »
des modules avec la pression

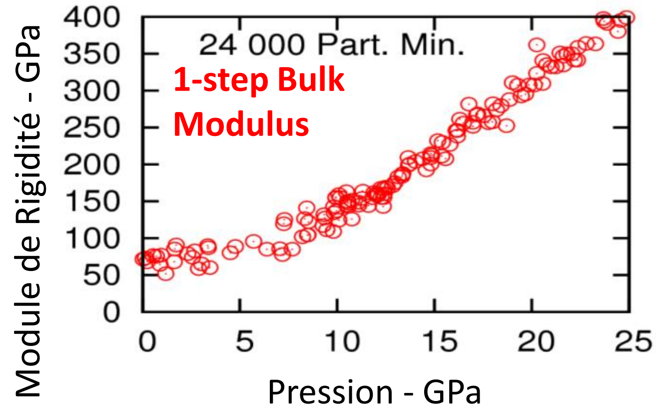


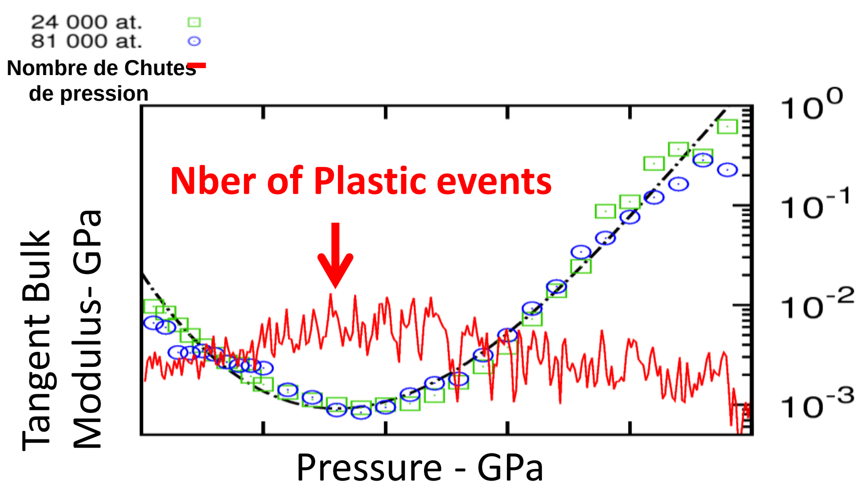
Forte sensibilité
en la préparation (*hétérogénéités*) – sous-estimation dans le calcul numérique.

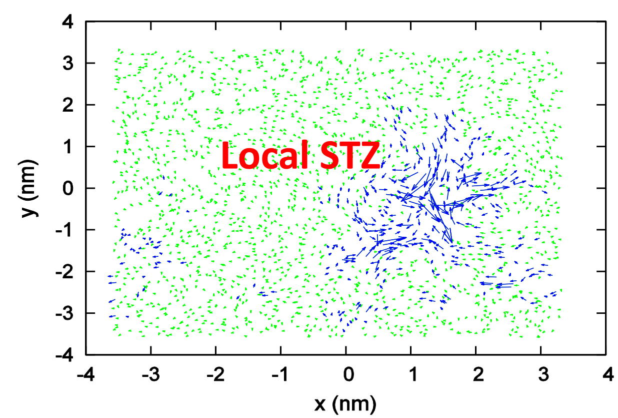
Anomalie Elastique » de la silice SiO_2

AQS MD simulations









The Elastic Anomaly is due to a **Microplastic behaviour**

B. Mantisi et al. (2012)

Anomalie Elastique » de la silice SiO_2

Brillouin Spectroscopy

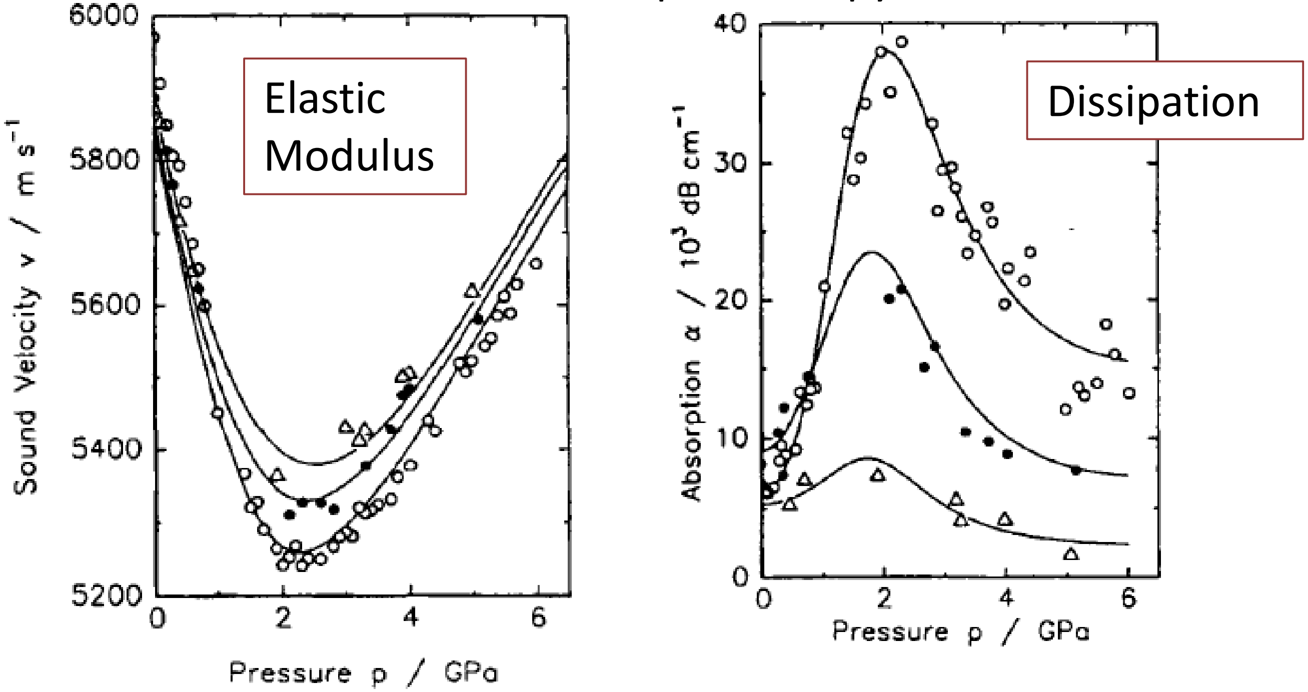


Fig. 2 **a)** Sound velocity in dependence of temperature at pressures of 0.1 MPa (○), 0.7 GPa (●), 2.3 GPa (△), 4.0 GPa (▲) and 5.1 GPa (◇), solid lines are fits with the same parameter set used in Fig. 1 a, b. **b)** Representation of the sound velocity versus pressure at temperatures of 50 K (△), 150 K (●) and 300 K (○), solid lines are guides for the eye.

S. Hunklinger & al., Annalen des Physik (1995)
B. Rufflé et al. (2011)

Outline

Introduction: le comportement des matériaux à différentes échelles

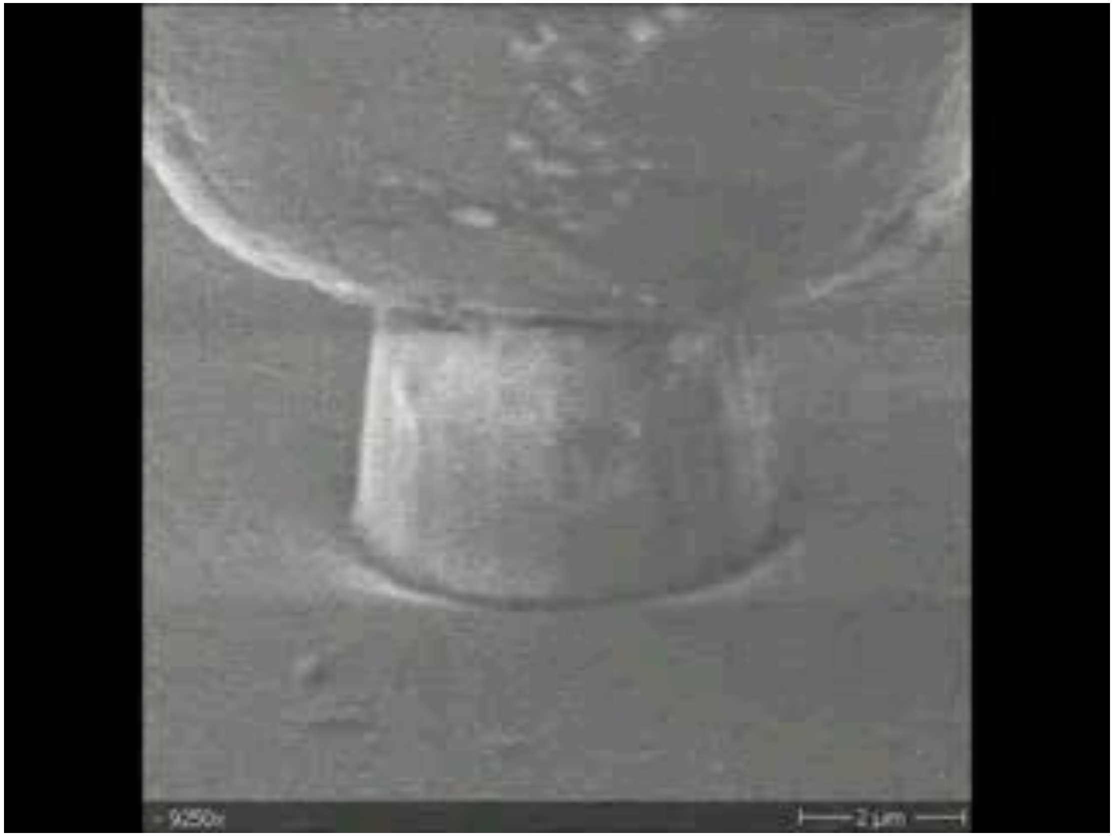
I. Comment définir des **grandeurs mécaniques** aux petites échelles?

II. Exemple des **lois de comportement linéaires**

III. Plasticité à l'échelle atomique

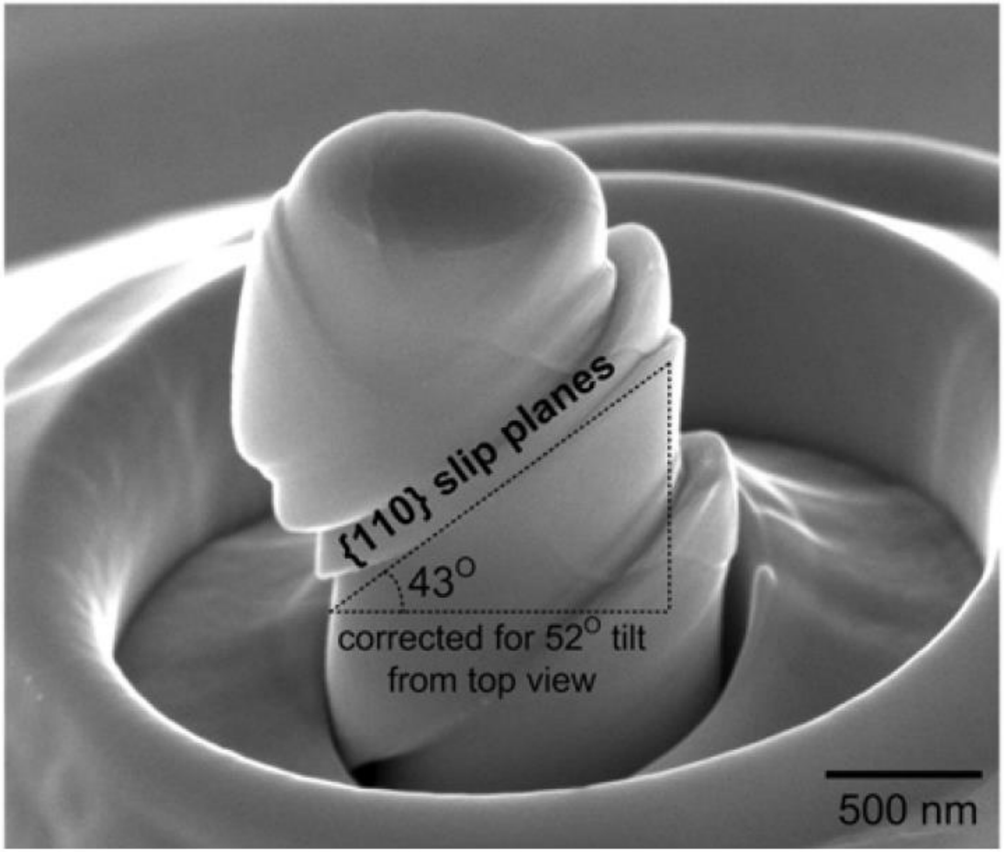
Conclusion et Perspectives

Plastification de la silice à l'échelle micrométrique:



G. Kermouche, E. Barthel (2015)

Plans de Glissement dans un mono-cristal

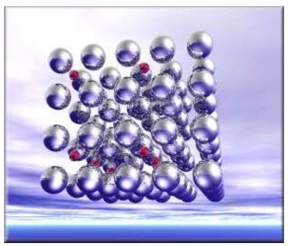


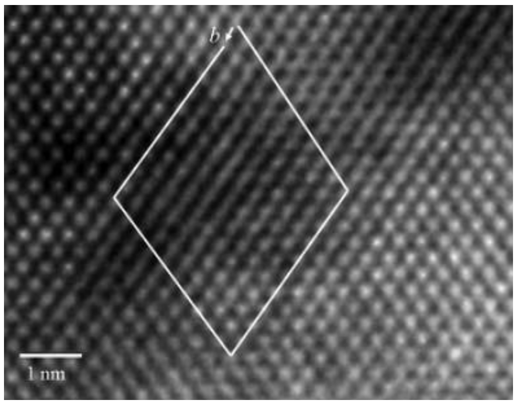
Compressed Nb BCC nano-pillar

J.R. Greer et al. (2009)

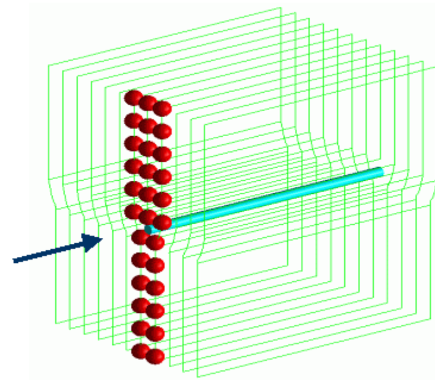
Origine microscopique de la plasticité ?

Cristaux:

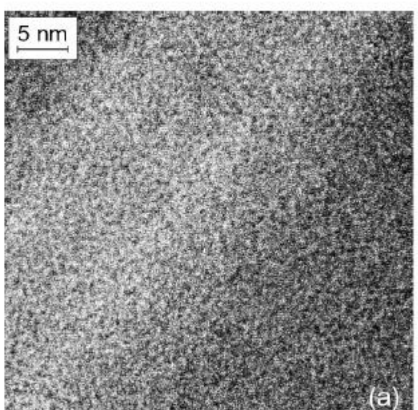


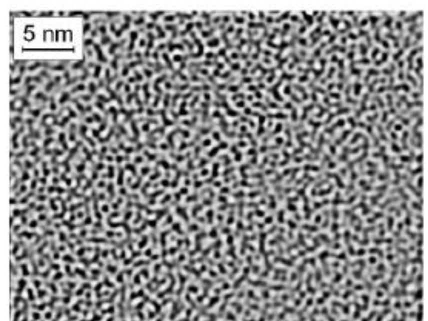


dislocations



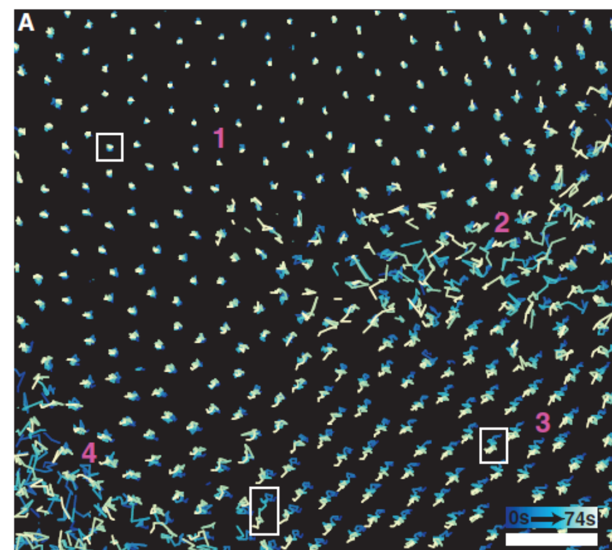
Matériaux Amorphes:





Fourier filtering 0.5-1.4 nm^{-1}

T. Hufnagel et l. (2002)



Y. Huang et al. (2013)

Plasticité à l'échelle atomique

1) Critère de nucléation et irréversibilité

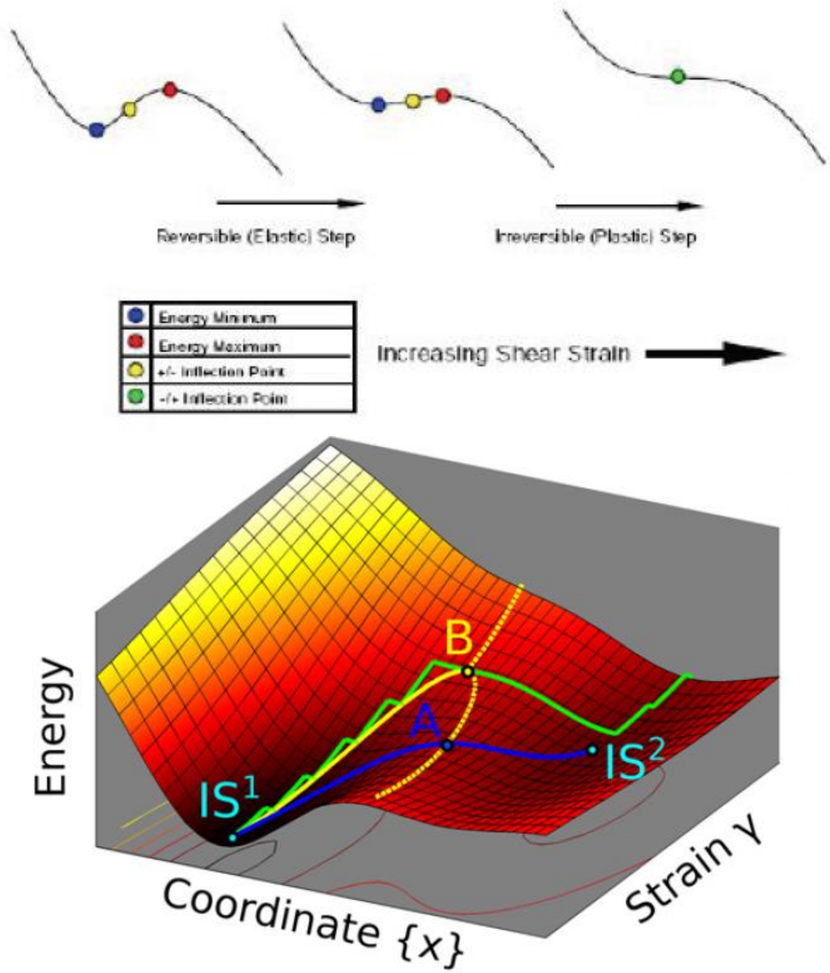
2) Surface de charge

Plasticité à l’échelle atomique

1) Critère de nucléation et irréversibilité

2) Surface de charge

Critère de Nucléation : Perte de Stabilité Mécanique



Argon (1994)

Stabilité d'un cristal

Critère de Hill (1962): Milieu continu

Energie Libre de Helmholtz $F(Y) \equiv F(X) + \Omega(X)\left\{ \tau_{ij}(X)\,\eta_{ij} + \frac{1}{2} C_{ijkl}(X)\,\eta_{ij}\,\eta_{kl} + \cdots \right\}$

Critère de stabilité $\boxed{\min_{\{\underline{w},\underline{k}\}} \left(C_{ijkl} w_i w_k k_j k_l \right) \geq 0}$

$\eta_{ij} = w_i k_j$

Plan de glissement

Vecteur de Burgers

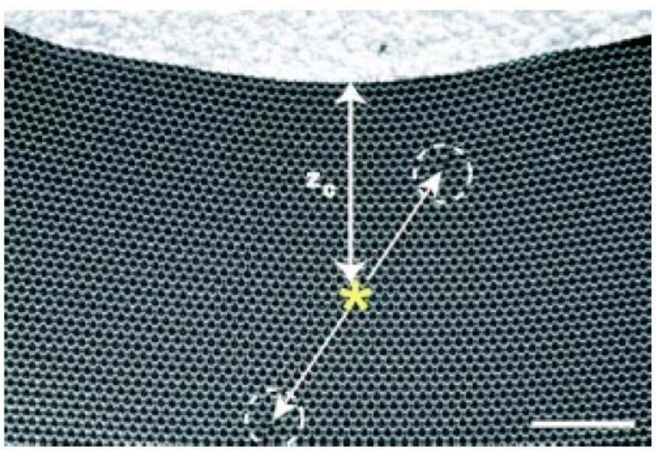
Généralisation à un milieu discret:

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = -\frac{\partial E_{total}}{\partial r_i^{\alpha} \partial r_j^{\beta}}$$

Matrice Dynamique (tenseur acoustique)

$$C_{ij}^{\alpha\beta} e_j^{\beta} = \Lambda e_i^{\alpha}$$

$$\boxed{\Lambda \geq 0}$$

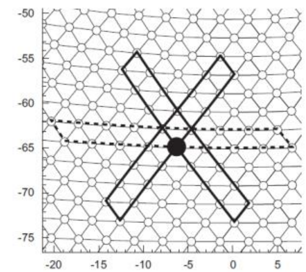


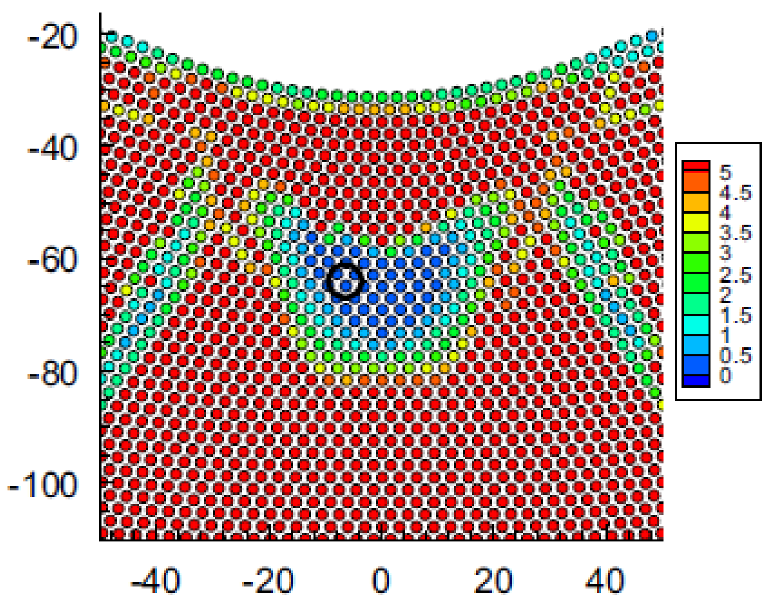
Bubble Raft A. Gouldstone et al. (2001)

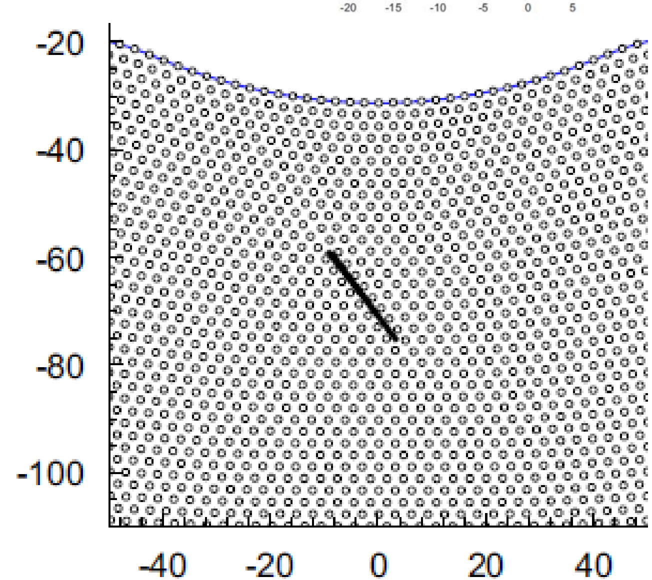
Nucléation de plasticité dans un cristal

En tenant compte de l'extension finie du défaut initial (boucle de dislocation):

Critère semi-local de nucléation $\Lambda^I = e_i^\alpha . C^{I\,\alpha\beta}_{\;ij} . e_j^\beta < 0$







R.E. Miller et al. (2008)

Stabilité d'un Matériau Amorphe

dans le cas de simulations athermales quasi-statiques

$$m_i \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2}(\underline{r}_i, t) = -\sum_{j,\beta} M_{ij}^{\alpha\beta} . u_\beta(\underline{r}_j, t)$$

avec $M_{ij}^{\alpha\beta} = -\dfrac{\partial^2 E_{total}}{\partial r_{i\alpha} \partial r_{j\beta}}$

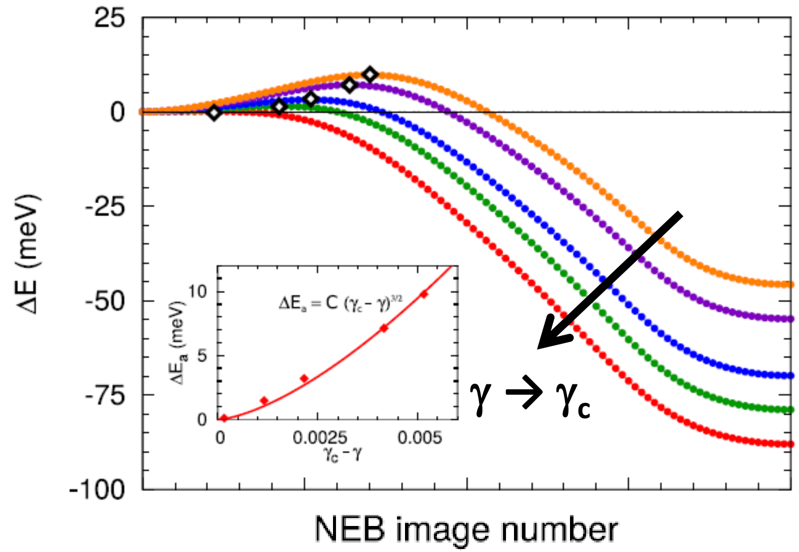
$$\underline{V}(\underline{r}_i) e^{i\omega t} = \sqrt{m_i}\, \underline{u}(\underline{r}_i, t)$$

$$D_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{M_{ij}^{\alpha\beta}}{\sqrt{m_i m_j}}$$ Matrice Dynamique

$\boxed{\omega^2 \underline{V} = \overline{\overline{D}} . \underline{V}}$ $\qquad \omega \rightarrow 0$

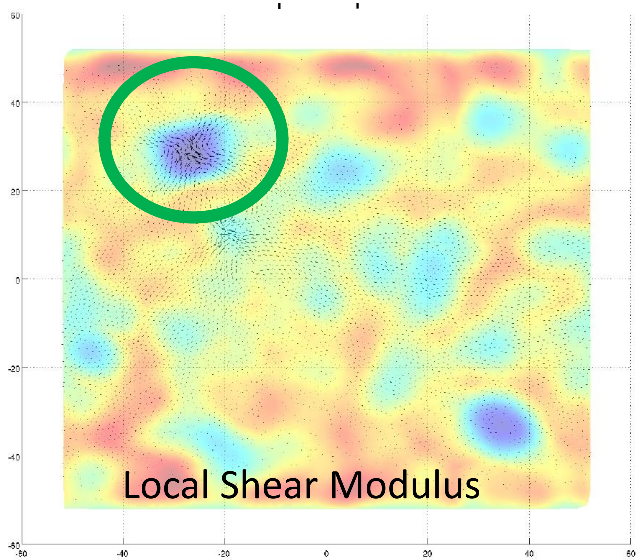
Problème aux valeurs propres

Barrières d'Energie

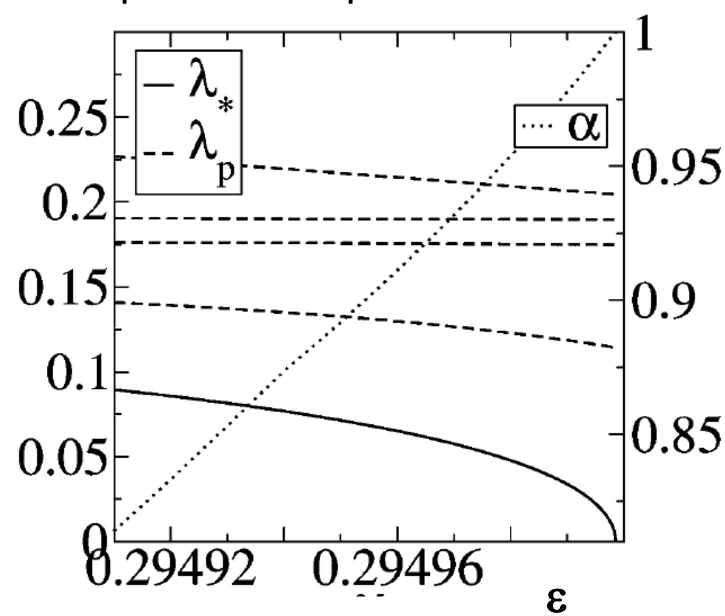


T. Albaret et al. (2018)

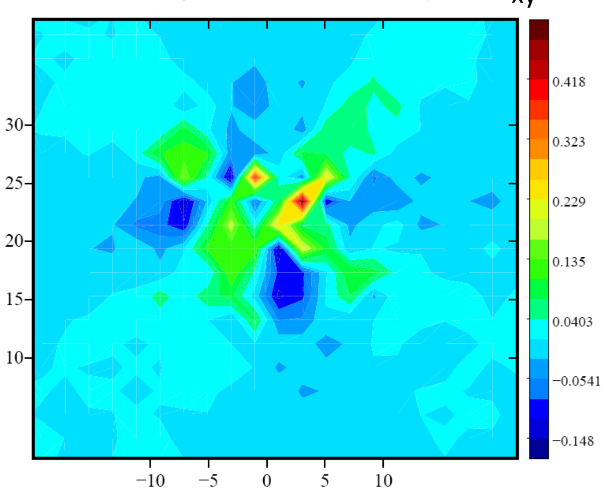
A. Lemaitre (2004)
A. Tanguy,
M. Tsamados
(2007, 2008)



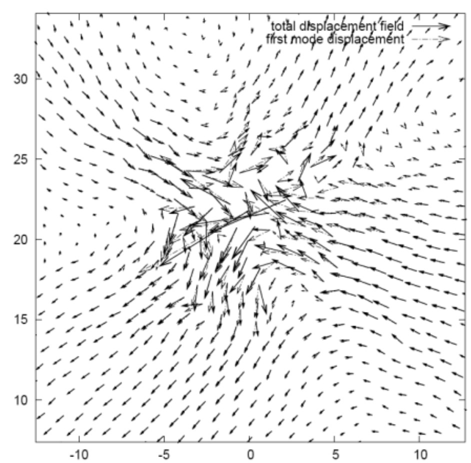
Fréquences Propres de Vibration:



Réarrangement Plastique σ_{xy}:



Mode mou de vibration:



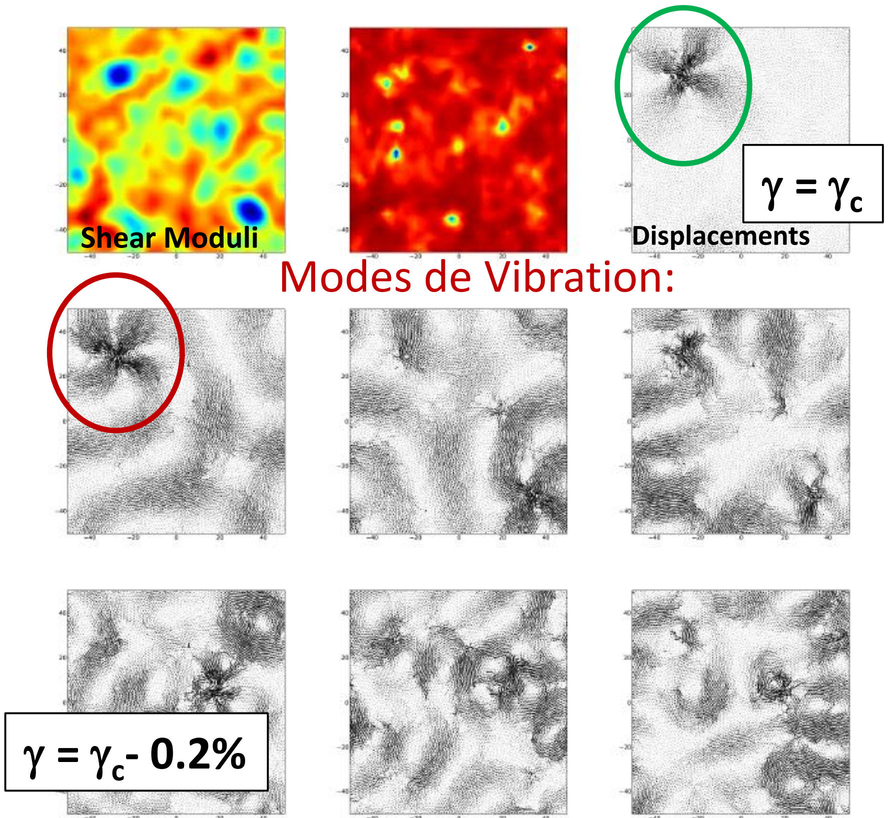
Localisation sur une zone *Molle*
de la vibration de plus *Basse* Fréquence

Juste avant
un réarrangement **plastique**.

B. Mantisi (2010)

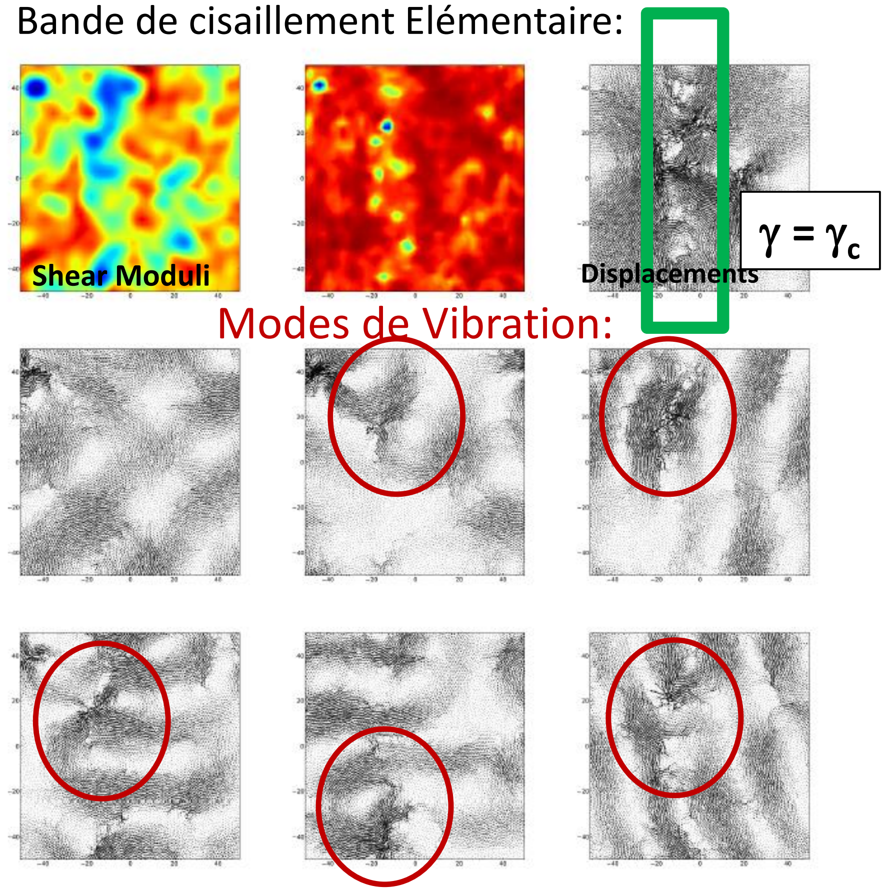
Prédiction des réarrangements plastiques par les
Modes *mous* de vibration dans un **verre Lennard-Jones 2D**:

Réarrangement quadrupolaire local (STZ):



Mode localisé *isolé*

Bande de cisaillement Elémentaire:



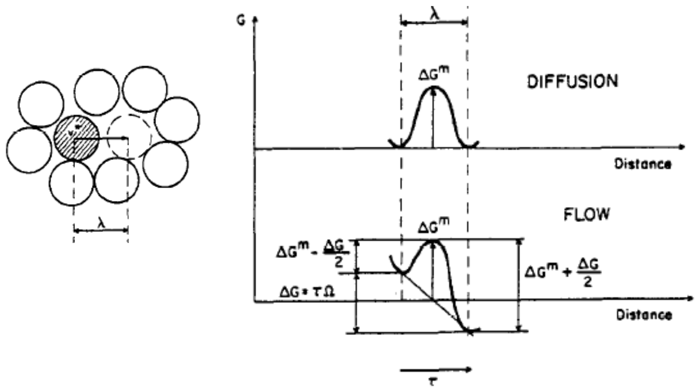
Superposition de modes localisés,
le long de zones molles percolantes

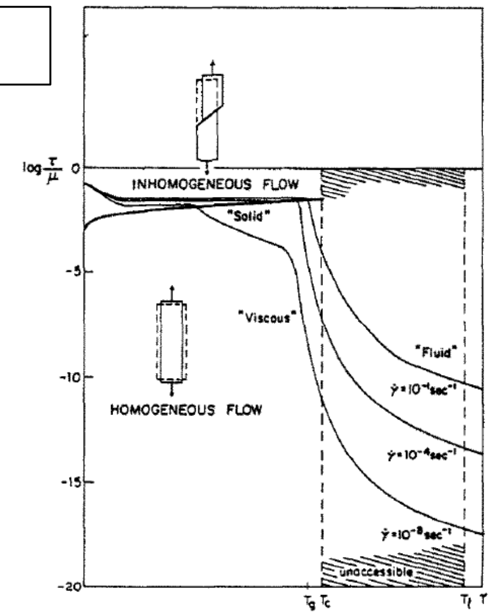
A. Lemaitre (2004)
A. Tanguy et al. (2010)

Nature des réarrangements plastiques dans un Amorphe?

Théorie du Volume Libre

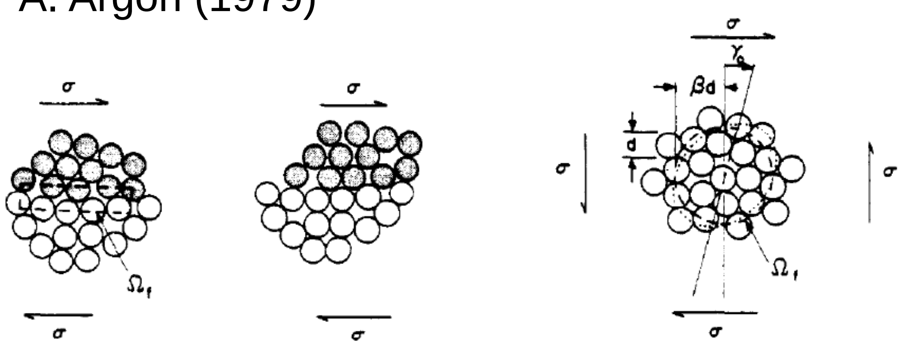
M. Cohen et D.Turnbull (1959), F. Spaepen (1977)





Théorie des Transformations de Cisaillement

A. Argon (1979)

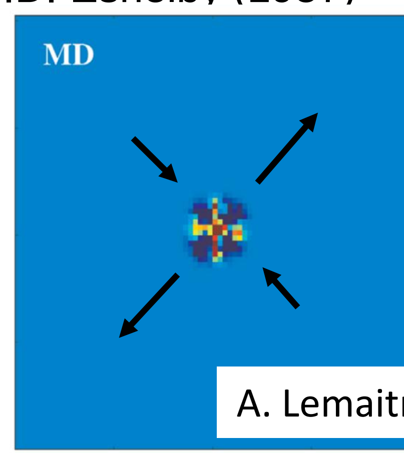


$0 < T \leq 0.6T_g$ dislocation loop

$0.6T_g \leq T \leq T_g$ isotropic

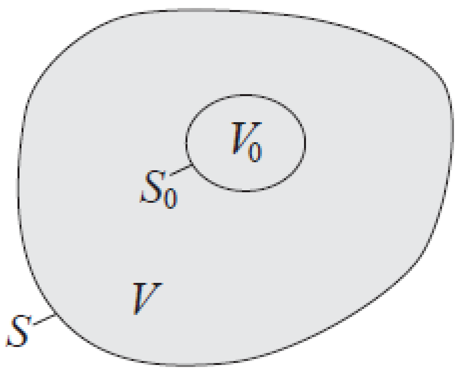
Inclusions de type Eshelby

J.D. Eshelby (1957)

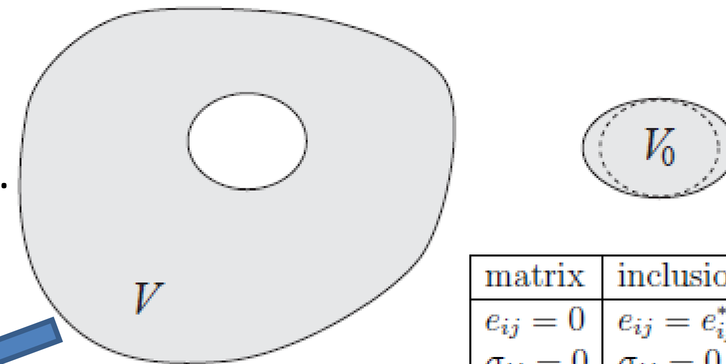


A. Lemaitre (2004)

Inclusion d'Eshelby (1957)

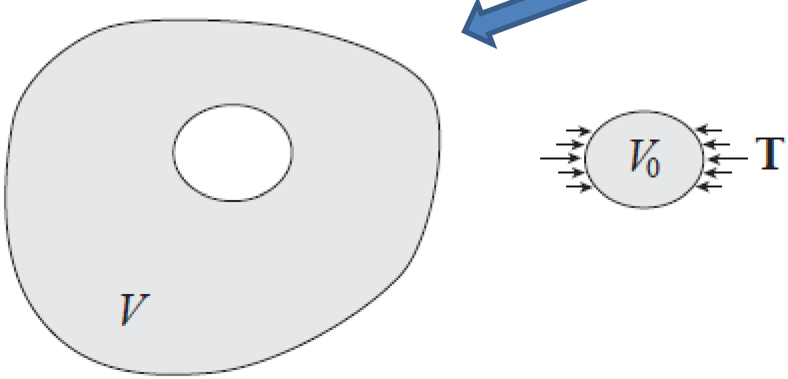


Hétérogénéité élastique localisée sur une ellipse dans une matrice élastique.

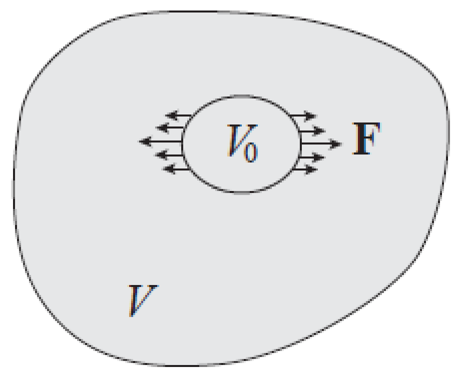


matrix	inclusion
$e_{ij} = 0$	$e_{ij} = e^*_{ij}$
$\sigma_{ij} = 0$	$\sigma_{ij} = 0$
$u_i = 0$	$u_i = e^*_{ij} x_j$

On notera ε* la déformation « libre » de l'inclusion.

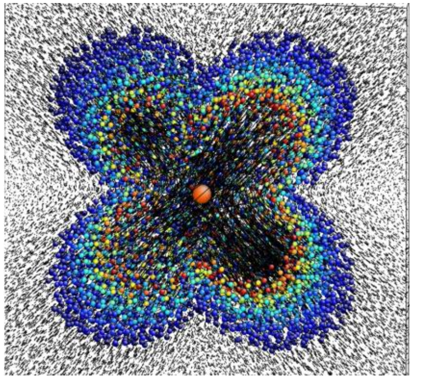


matrix	inclusion
$e_{ij} = 0$	$e_{ij} = e^{\mathrm{el}}_{ij} + e^*_{ij} = 0$
$\sigma_{ij} = 0$	$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e^{\mathrm{el}}_{ij} = -C_{ijkl} e^*_{ij} = -\sigma^*_{ij}$
$u_i = 0$	$u_i = 0$



matrix	inclusion
$e_{ij} = e^{\mathrm{c}}_{ij}$	$e_{ij} = e^{\mathrm{c}}_{ij}$
$\sigma_{ij} = \sigma^{\mathrm{c}}_{ij}$	$\sigma_{ij} = \sigma^{\mathrm{c}}_{ij} - \sigma^*_{ij} = C_{ijkl}(e^{\mathrm{c}}_{kl} - e^*_{kl})$
$u_i = u^{\mathrm{c}}_i$	$u_i = u^{\mathrm{c}}_i$

Champs Mécaniques générés par une **inclusion d'Eshelby** sphérique



$$p_{ij} = 2G\left\{\epsilon^{*}_{ij} + \nu\delta_{ij}\frac{\epsilon^{*}_{kk}}{(1-2\nu)}\right\}$$

$$\epsilon^{\text{in}}_{ij} = S_{ijkl}\epsilon^{*}_{kl}$$

$$\sigma^{\text{in}}_{ij} = C_{ijkl}\epsilon^{\text{in}}_{kl} - p_{ij} = C_{ijkl}\left(\epsilon^{\text{in}}_{kl} - \epsilon^{*}_{kl}\right)$$

$$u_i = \frac{a^3}{4(1-\nu)G}\left\{\frac{(2p_{ik}x_k + p_{kk}x_i)}{15R^5}(3a^2-5R^2) + \frac{p_{jk}x_jx_kx_i}{R^7}(R^2-a^2) + \frac{4(1-\nu)p_{ik}x_k}{3R^3}\right\}$$

$$\sigma^{\text{out}}_{ij} = \frac{a^3}{2(1-\nu)R^3}\left\{\frac{p_{ij}}{15}\left(10(1-2\nu)+6\frac{a^2}{R^2}\right) + \frac{p_{ik}x_kx_j + p_{jk}x_kx_i}{R^2}\left(2\nu - 2\frac{a^2}{R^2}\right)\right.$$

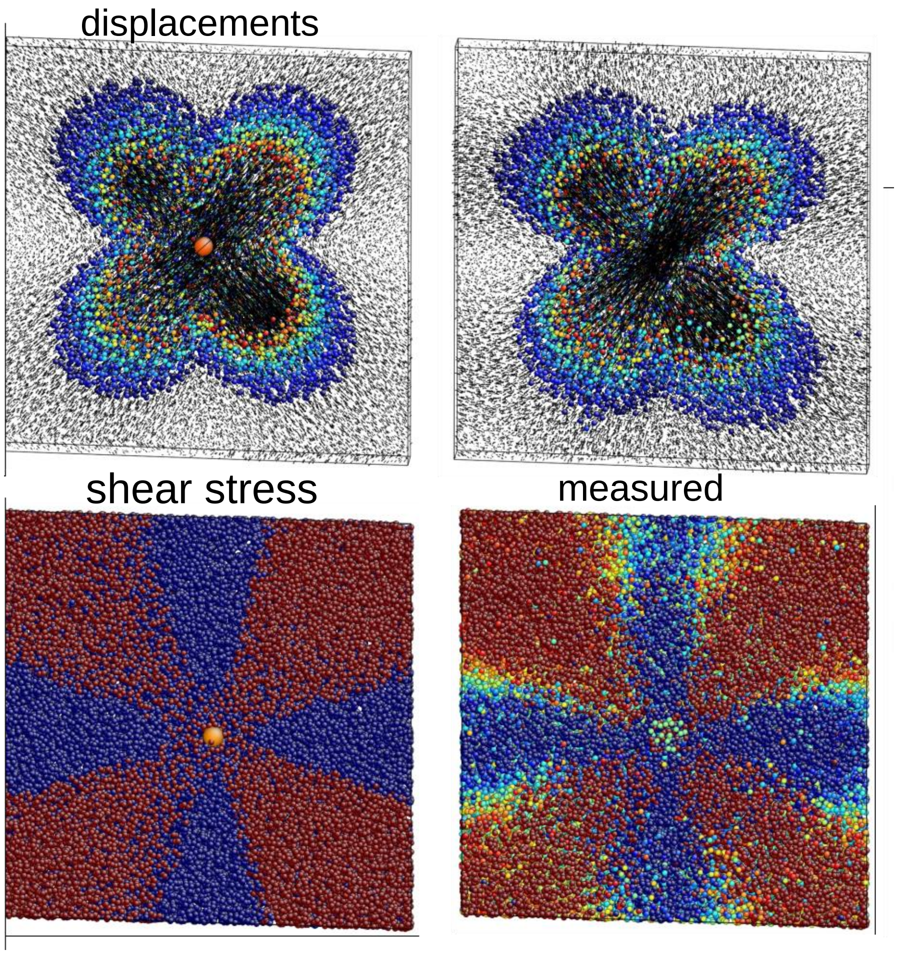
$$+\frac{\delta_{ij}p_{kk}}{15}\left(3\frac{a^2}{R^2} - 5(1-2\nu)\right) + \frac{\delta_{ij}p_{kl}x_kx_l}{R^2}\left((1-2\nu) - \frac{a^2}{R^2}\right)$$

$$\left. - \frac{x_ix_jp_{kl}x_kx_l}{R^4} \times \left(5 - 7\frac{a^2}{R^2}\right) + \frac{x_ix_jp_{kk}}{R^2}\left(1 - \frac{a^2}{R^2}\right)\right\}$$

Cas du **silicium amorphe** a-Si

Réarrangements plastiques irréversibles localisés

de type Inclusion de Eshebly



Eshelby Type (here with R=2Å)

T. Albaret et al. (2016)

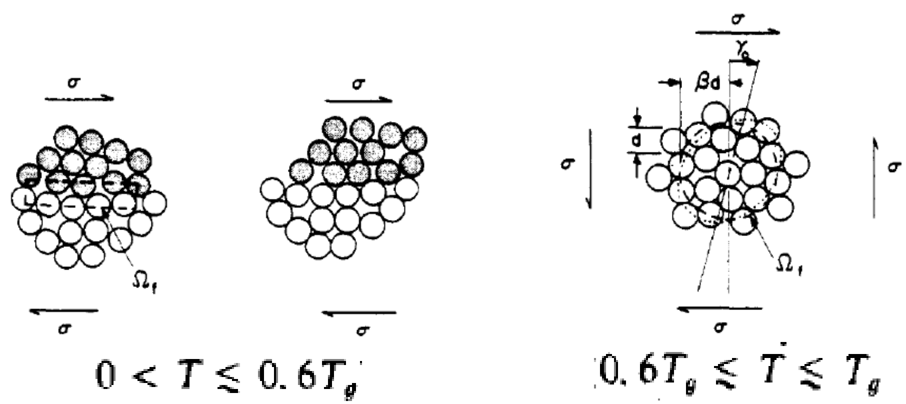
Energie Mécanique Globale en présence d'une **inclusion de Eshelby** :

Déformation plastique résiduelle (déformation *libre*) $\Longrightarrow$ Energie *bloquée*

$$W_{bl} = \frac{1}{2}\int_{Vol} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} dV = \frac{1}{2}\int_{Vol} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}} dV - \frac{1}{2}\int_{I} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* dV$$

$$= \frac{1}{2}\int_{S^{ext}} \underline{u}.\underline{\underline{\sigma}}.\underline{n}\, dS - \frac{1}{2} V_I \left\langle \underline{\underline{\sigma}} \right\rangle : \underline{\underline{\varepsilon}}^* = W_{ext} \boxed{- \frac{1}{2} V_I \left\langle \underline{\underline{\sigma}} \right\rangle : \underline{\underline{\varepsilon}}^*}$$

Energie « accrochée » dans le cœur des inclusions



dislocation loop

isotropic

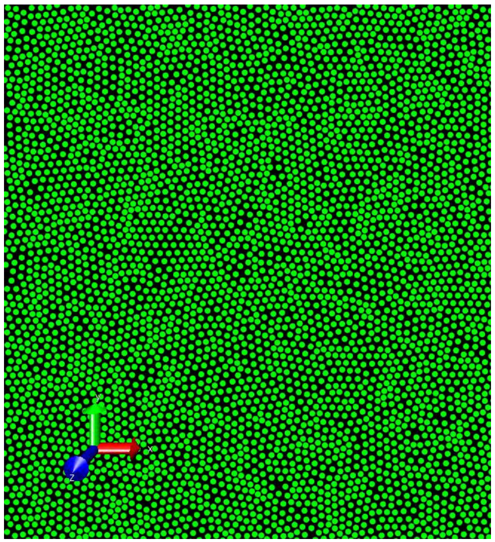
A. Argon (1979)

Plasticité à l'échelle atomique

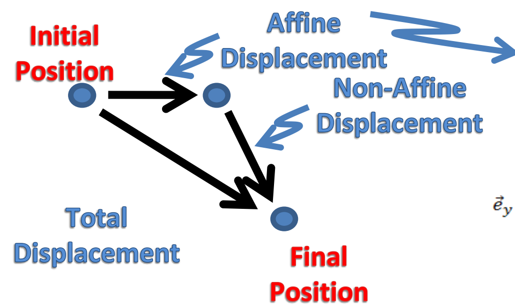
1) Critère de nucléation et irréversibilité

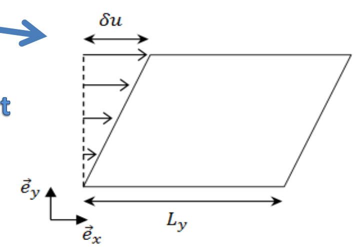
2) Surface de charge

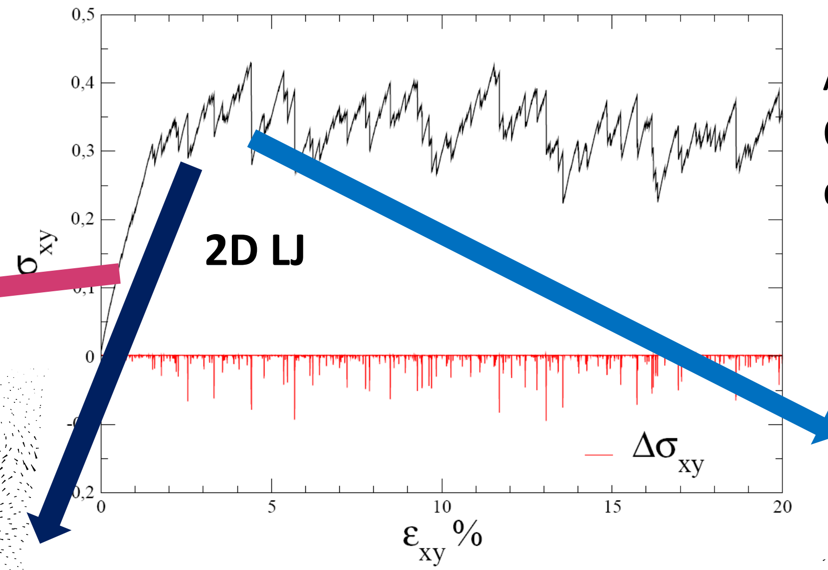
Cas d’un **verre de Lennard-Jones** 2D



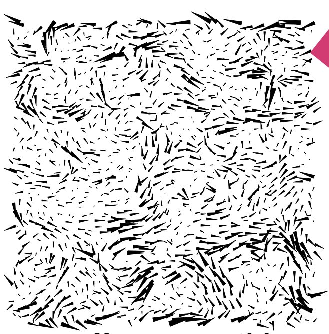
A.Tanguy et al. (2006)



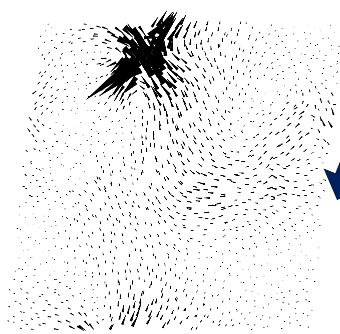




Athermal Quasi-static deformation

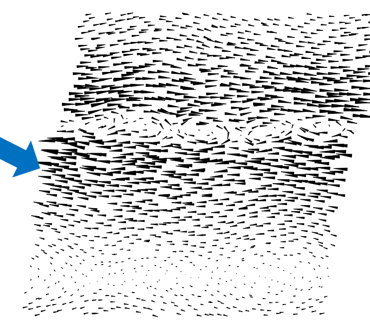


Non-affine **reversible** displacements (x10^3)



Local shear **irr**eversible (x40) quadrupolar event

T=0°K



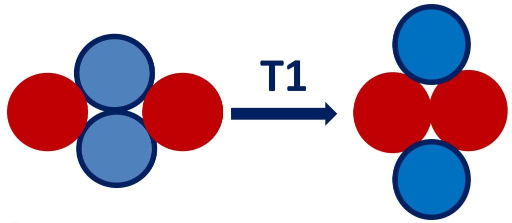
Elementary Shear band (x0.4)

Tanguy et al (2002)

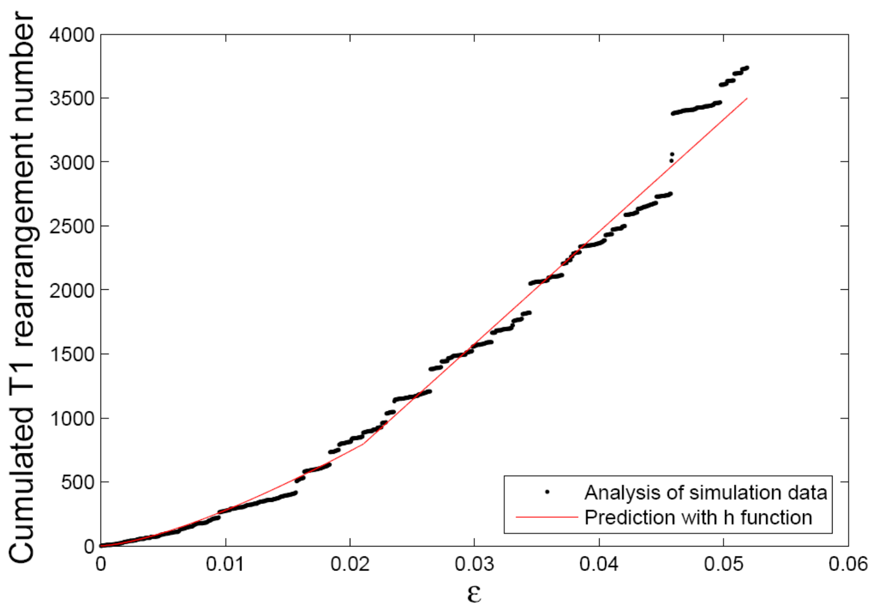
Cas d’un **verre de Lennard-Jones** 2D

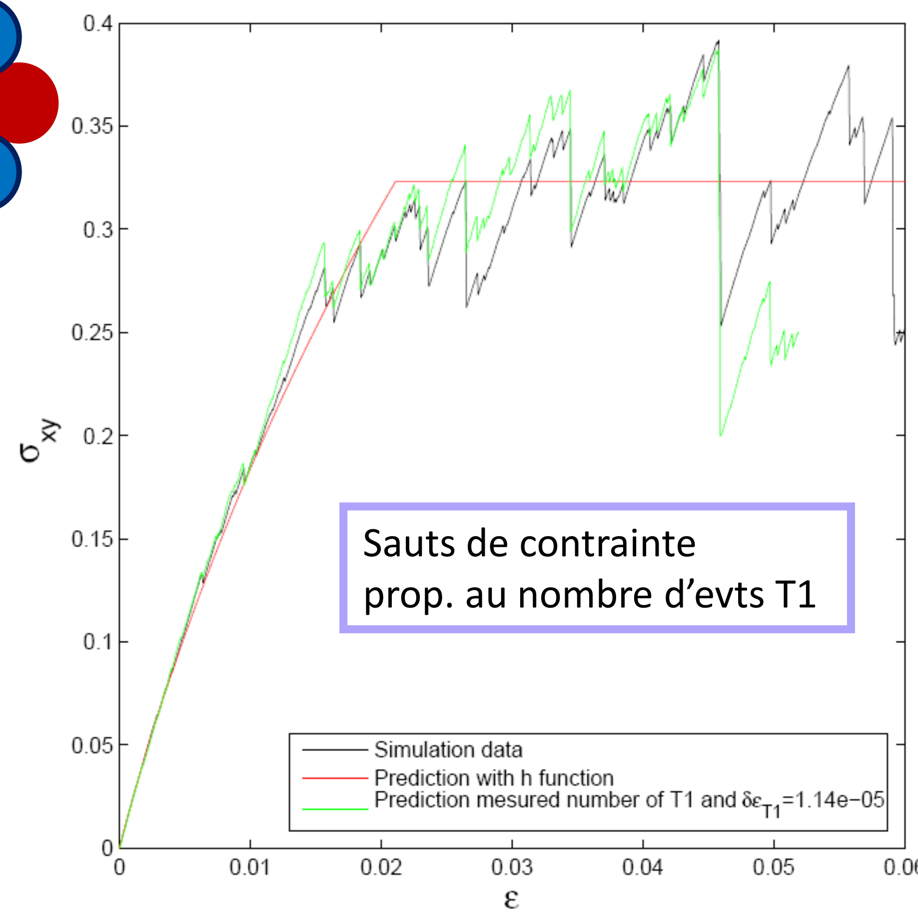
$$\dot{\varepsilon} = \overbrace{\dot{U}}^{\text{él.}} + \overbrace{\dot{\varepsilon}_p}^{\text{pl.}}$$

$$\varepsilon_p = N^{T1}\delta\varepsilon^{T1}$$



$$\sigma = \mu(\varepsilon - N^{T1}\delta\varepsilon^{T1})$$





P. Marmottant et al. (2007)

Réarrangement T1 dans un **verre de silice 2D**

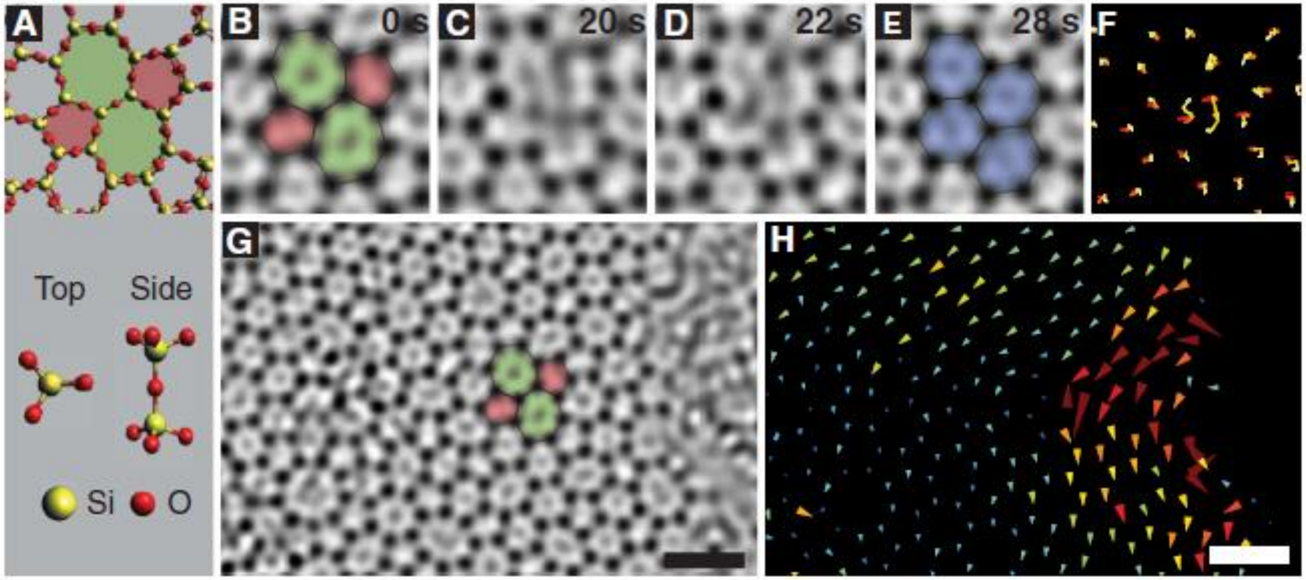
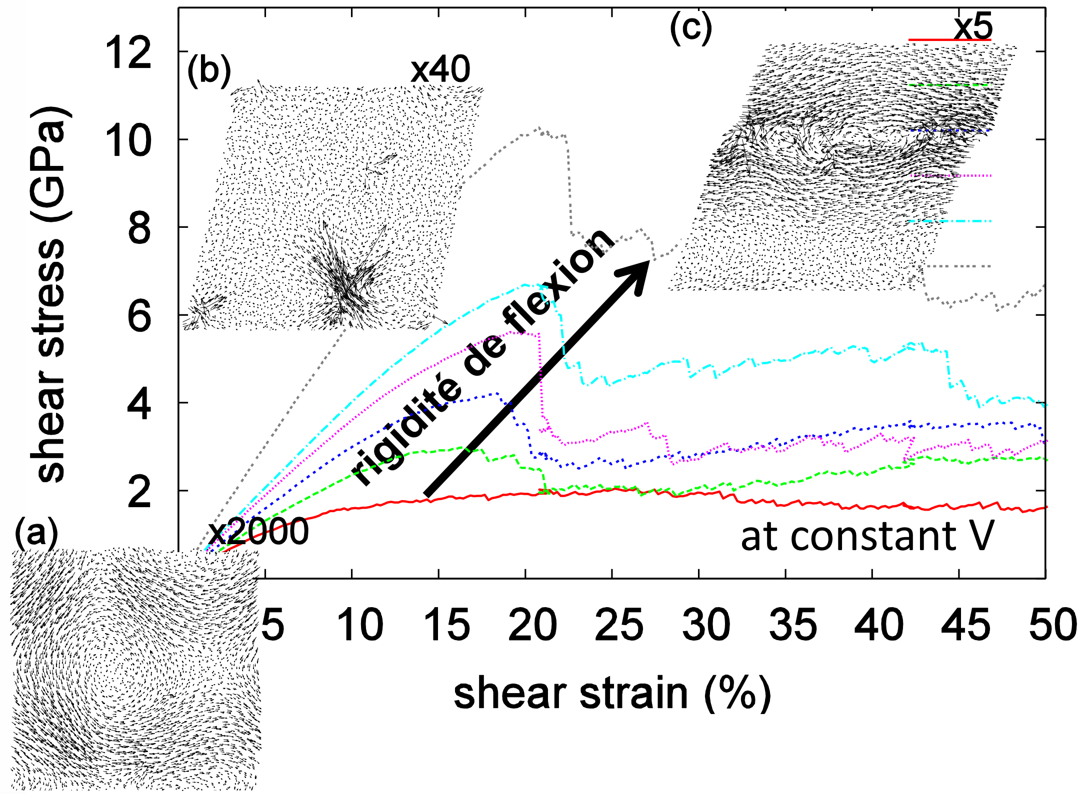
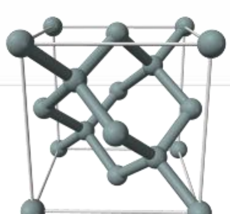


Fig. 1. Elastic and plastic deformation in ring exchange. (**A**) Cartoon models of the 2D silica structure. (**B** to **E**) TEM images showing a ring rearrangement that transforms a 5-7-5-7 cluster into a 6-6-6-6 cluster. The dark spots are Si-O-Si columns that correspond with the top and side views in (A). Images have been smoothed and Fourier-filtered to remove the graphene lattice background [see figs. S2 and S3 and (*17*)]. (**F**) A trajectory map of the atomic sites. Color (red to yellow) indicates time of motion. (**G**) Larger view of the region from (A), and (**H**) corresponding first-to-last frame displacement map. The arrows have been enlarged ×2 to increase visibility; color indicates size of displacement, from 0 (dark blue) to ≥1.3 Å (red). The region between the bond rearrangement and the edge of the sheet exhibits strong local rotation. Scale bars: 1 nm. See also movies S1 and S2.

Huang et al. Science (october 2013)

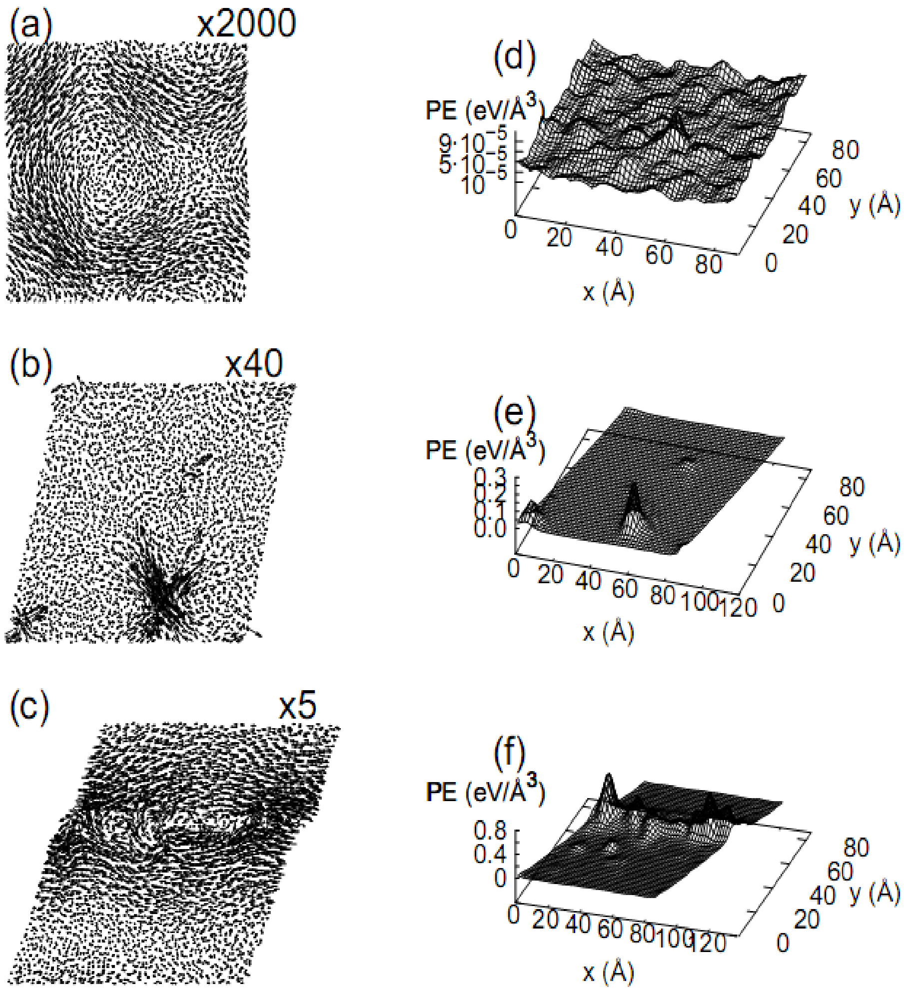
Cas du silicium amorphe a-Si

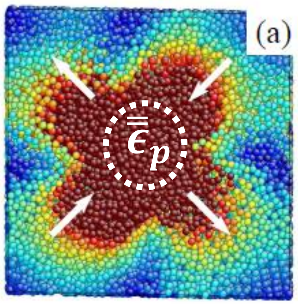




Energie d'interaction $E_{SW} = \Sigma_{(i,j)} f(r_{ij}) + \Sigma_{i,j,k} \Lambda..\left(\cos\theta_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2 .e^{\gamma.(r_{ij}-a)^{-1}+\gamma.(r_{ik}-a)^{-1}}$

Cas du **silicium amorphe** a-Si

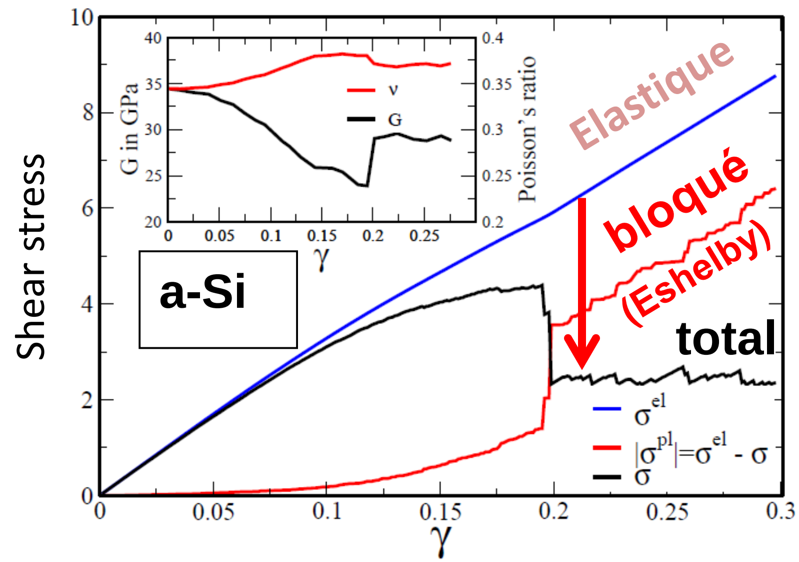




Déplacements irréversibles locaux

Eshelby (1953)

Contraintes de cisaillement

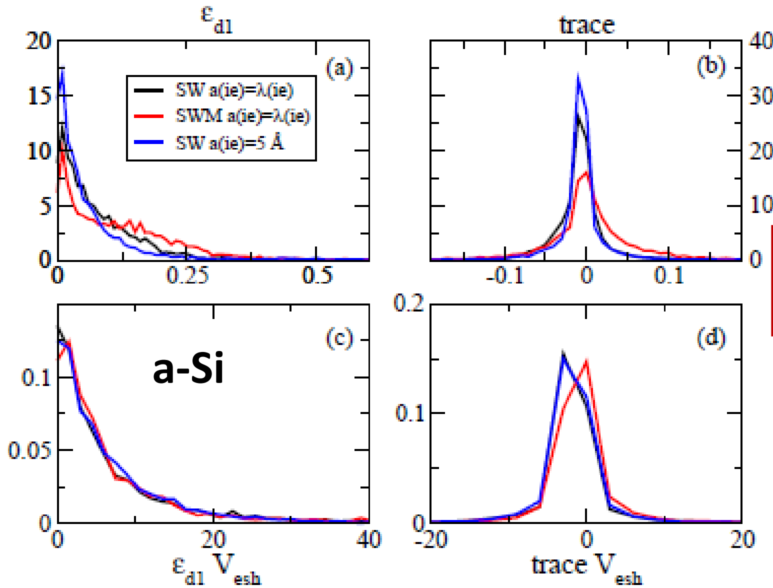


Tenseur de **Eshelby** vs. Lois de **Comportement**: le cas du **silicium amorphe** a-Si

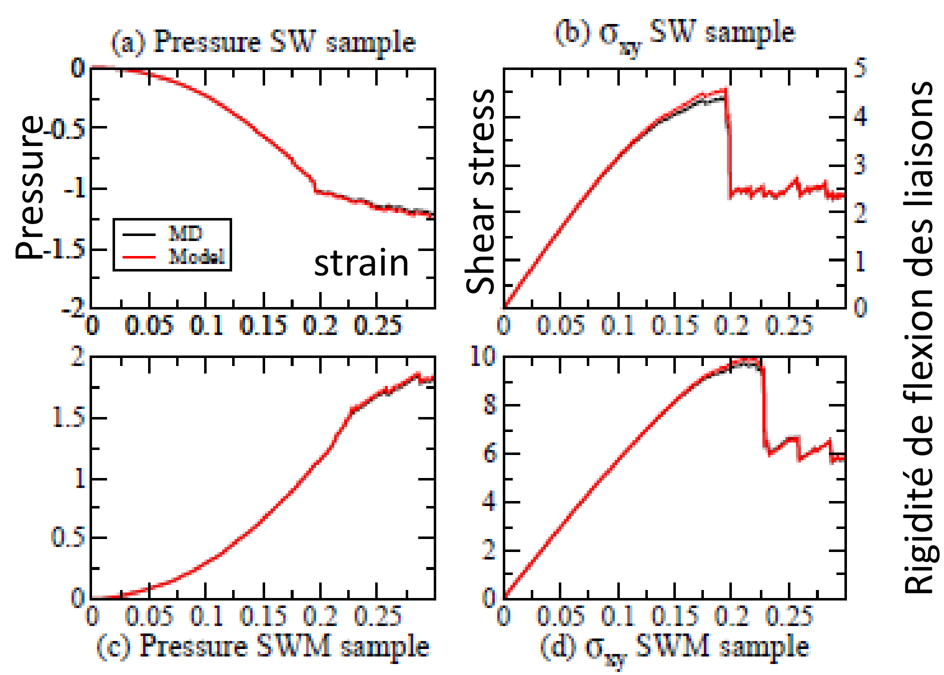
$$\delta_i \epsilon_{xy} = \delta_i \epsilon_{xy}^{\mathrm{el}} + \delta_i \epsilon_{xy}^{\mathrm{pl}}$$

$$\boxed{\delta_i \sigma_{xy} = 2G(\gamma_i)\delta_i \epsilon_{xy} - 2G(\gamma_i)\delta_i \epsilon_{xy}^{\mathrm{pl}} = \delta_i \sigma_{xy}^{*} - \delta_i \sigma_{xy}^{\mathrm{pl}}}$$

$$\delta \sigma_{xy}^{\mathrm{pl,esh+bc}}(e) = \frac{2G(\gamma_i) V_{\mathrm{esh}}(e)}{V_{\mathrm{cell}}} \epsilon_{xy}^{*}(e)$$

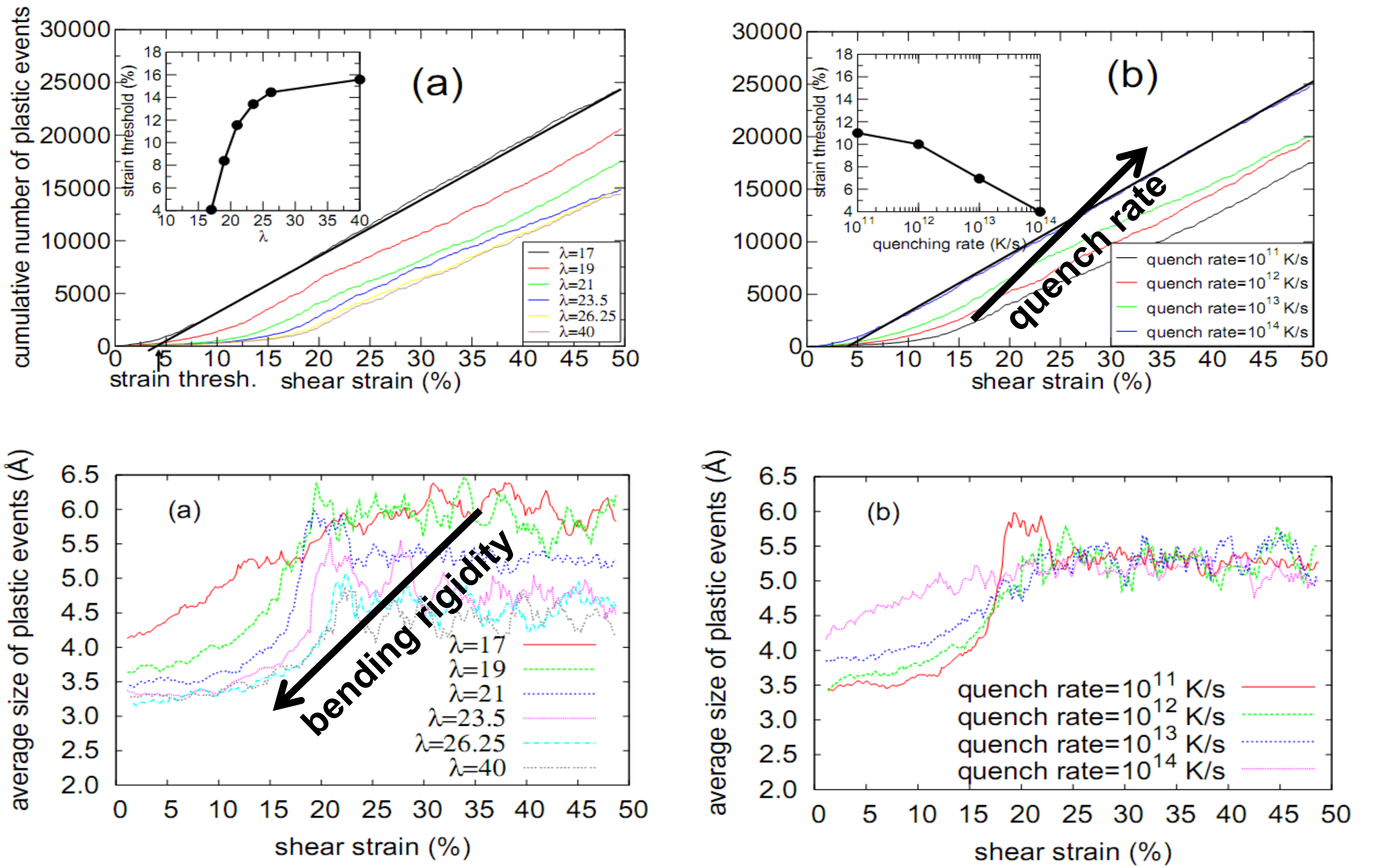


Loi de comportement



T. Albaret et al. (2015)

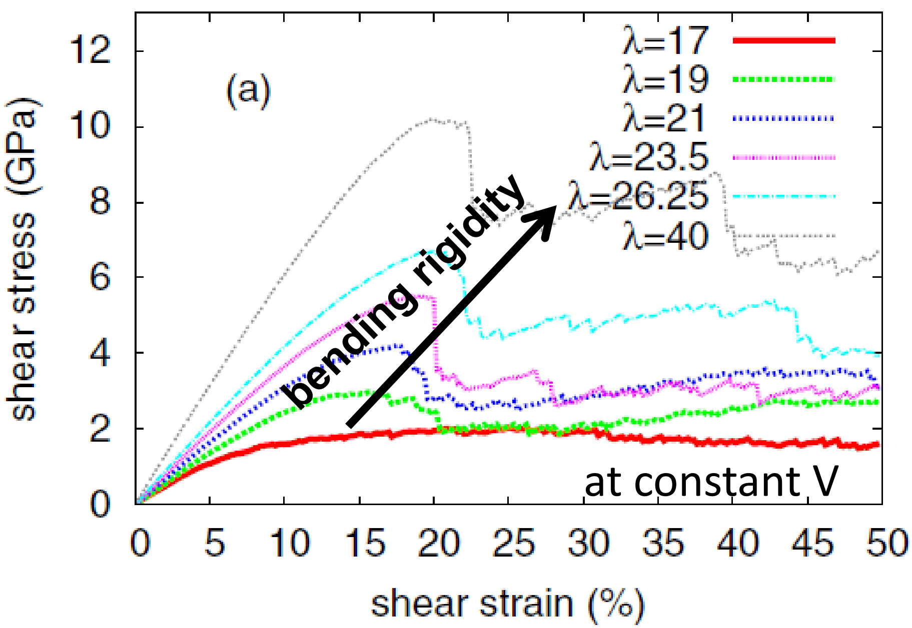
Evolution de la ***taille*** et du ***nombre*** des réarrangements plastiques dans les échantillons de type **a-Si**

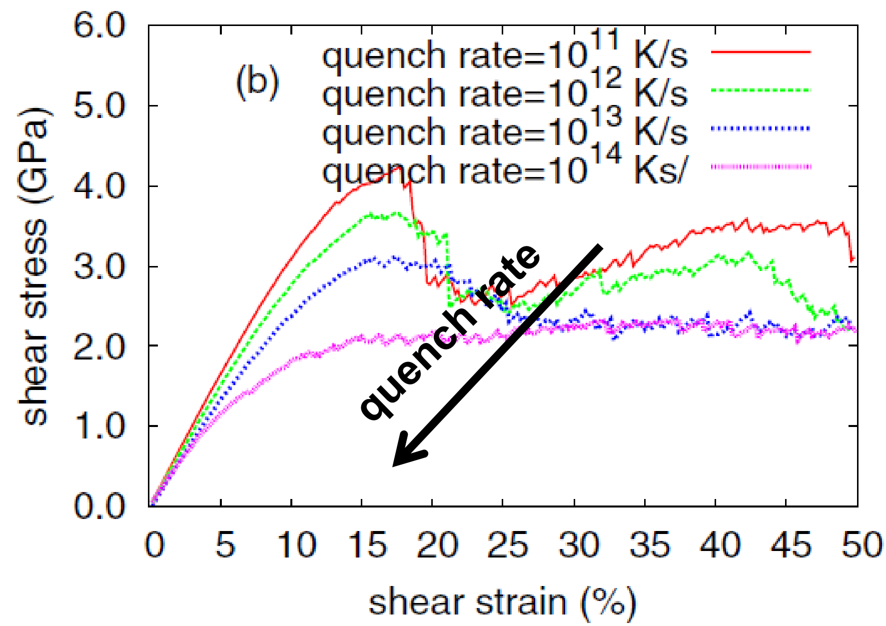


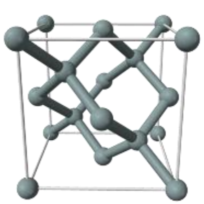
LaMCoS
Unité Mixte de Recherche 5259

Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures

Cisaillement à **volume constant** dans les échantillons de type **a-Si** :



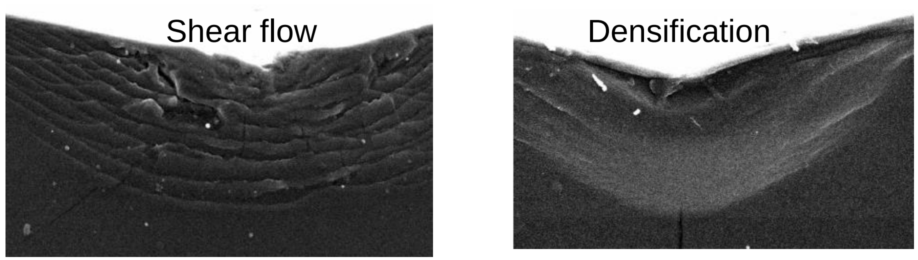




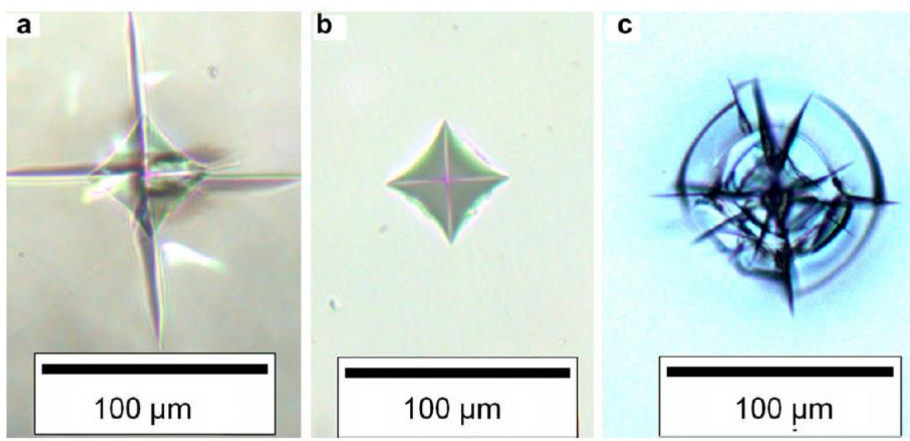
$$E_{SW} = \Sigma_{(i,j)} f(r_{ij}) + \Sigma_{i,j,k}\Lambda..\left(\cos\theta_{jik} + \frac{1}{3}\right)^2 .e^{\gamma.(r_{ij}-a)^{-1}+\gamma.(r_{ik}-a)^{-1}}$$

C. Fusco et al.PRE (2010)

Role de la **composition chimique** dans les verres **sodo-silicate**



Soda-lime glass **Anomalous glass**

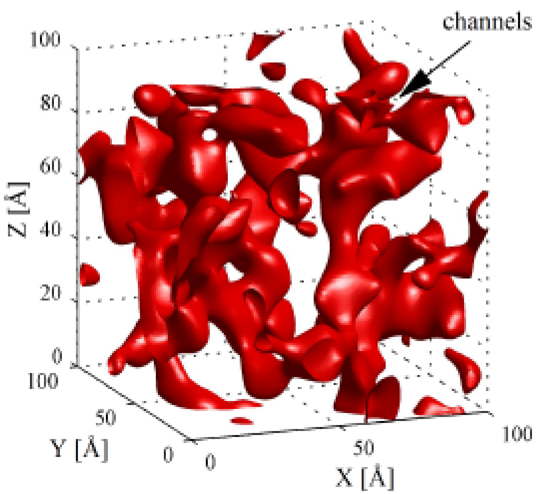


(a) 60% SiO_2 20% Al_2O_3 20% CaO; (b) 80% SiO_2 10% Al_2O_3 10% CaO; (c) 100% SiO_2

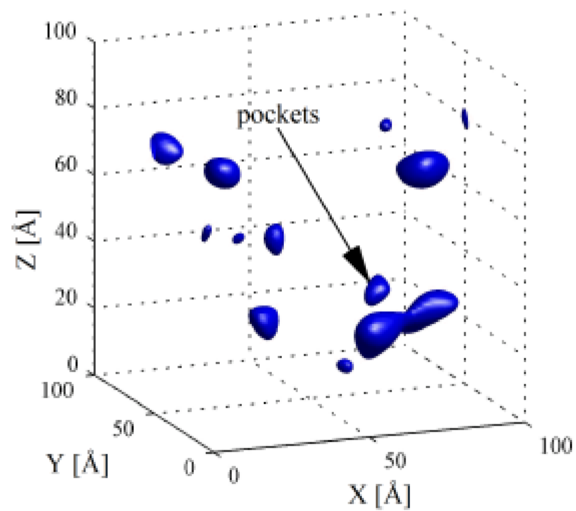
T.M. Gross et al. (2008, 2009)

Structure of **sodo-silicate** glasses:

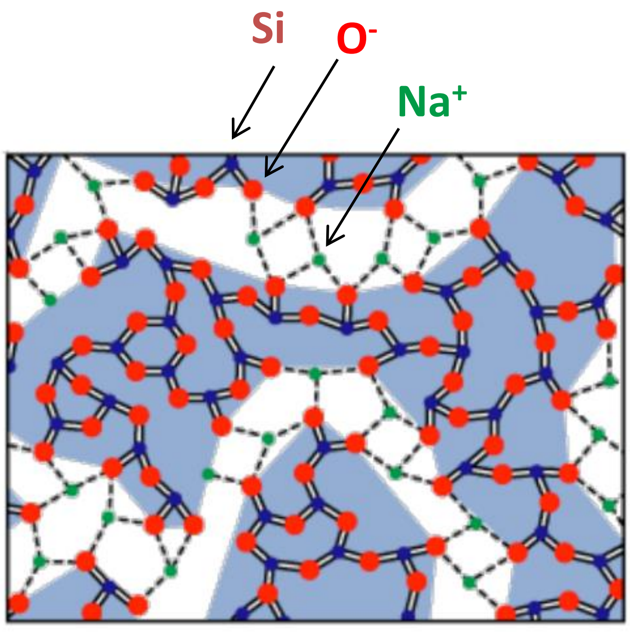
Pockets of Na ions along Channels



(a) $\rho_{Na} = 16.25 \text{ atom/nm}^3$.



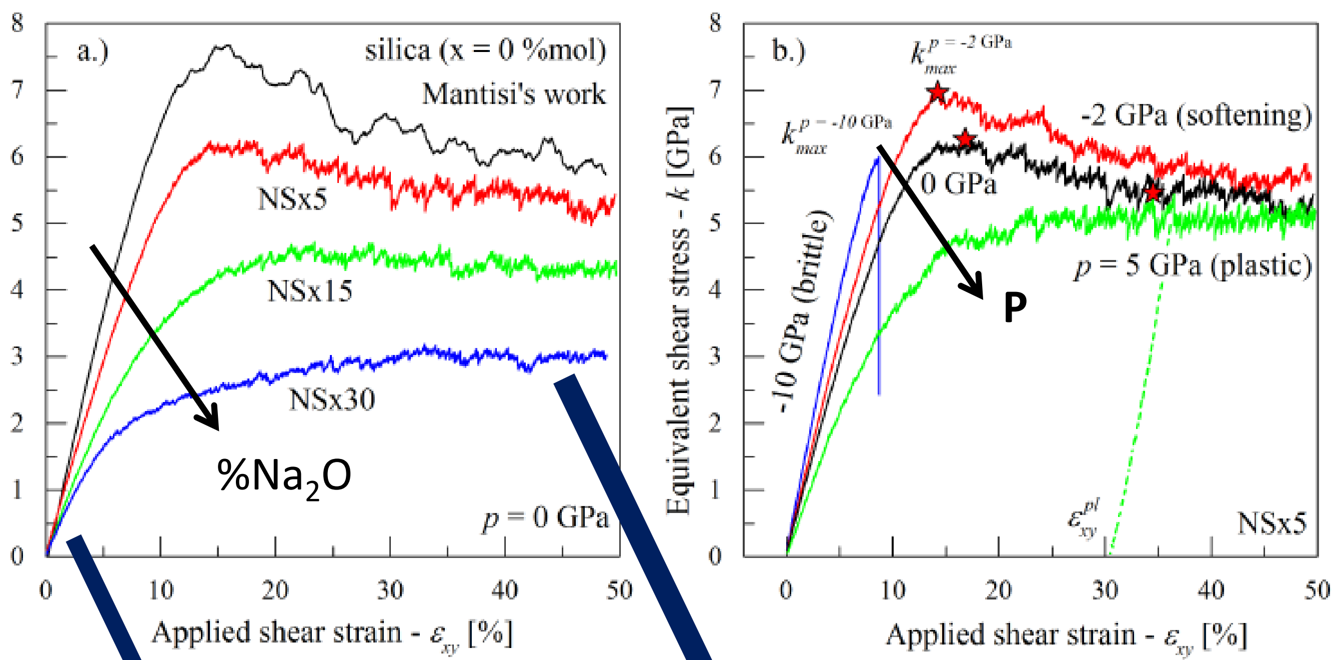
(b) $\rho_{Na} = 18.25 \text{ atom/nm}^3$.



Sodium Channels

Greaves (1985)
Meyer (2004)

Déformation mécanique quasi-statique d'un verre sodo-silicate

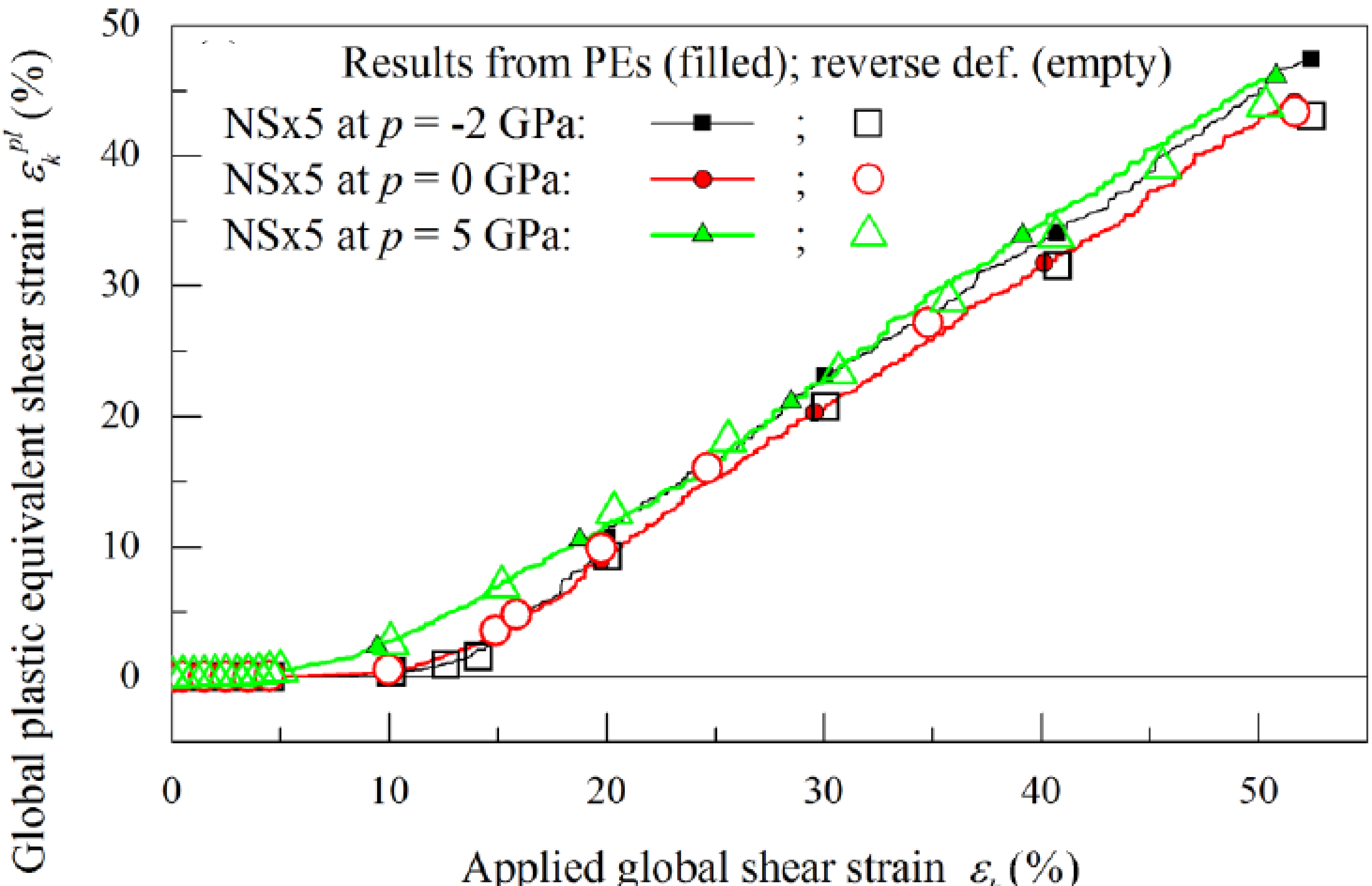


« Elasticité Linéaire »

Plateau Plastique

G. Molnar et al. (2016)

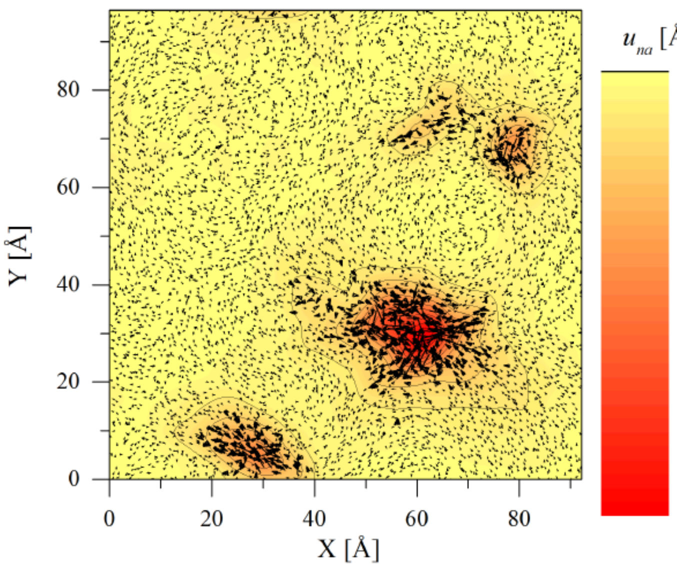
Déformation plastique irréversible totale = somme des événements localisés

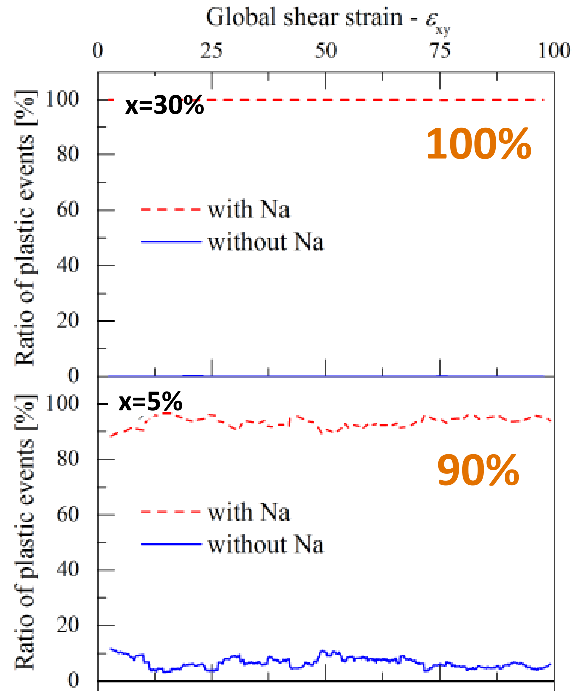


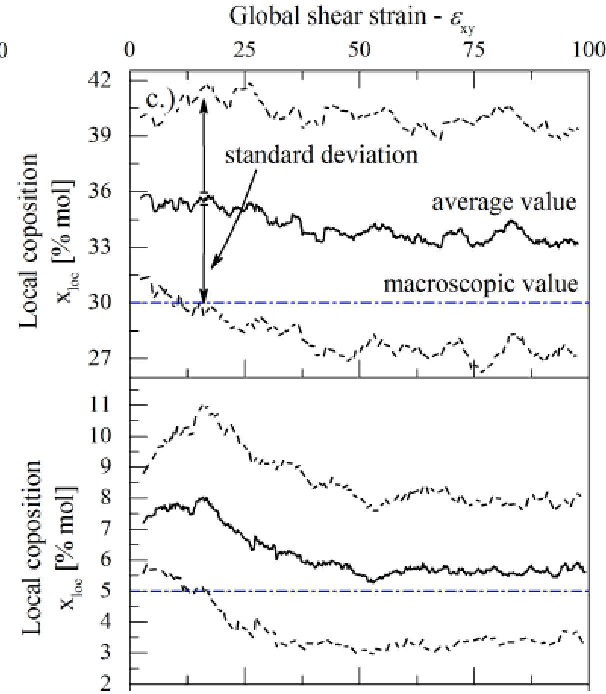
G. Molnar et al. (2017)

Déformation mécanique quasi-statique d'un verre sodo-silicate

Non-affine displacements







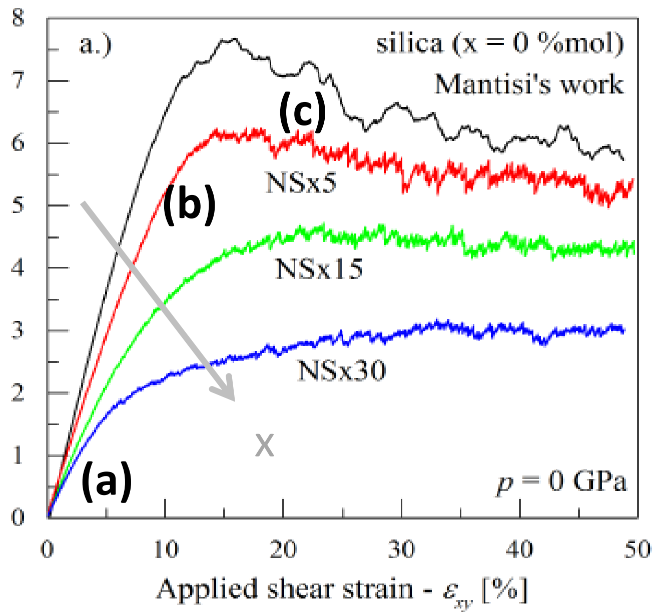
Na catalyse la déformation plastique (principalement de cisaillement)

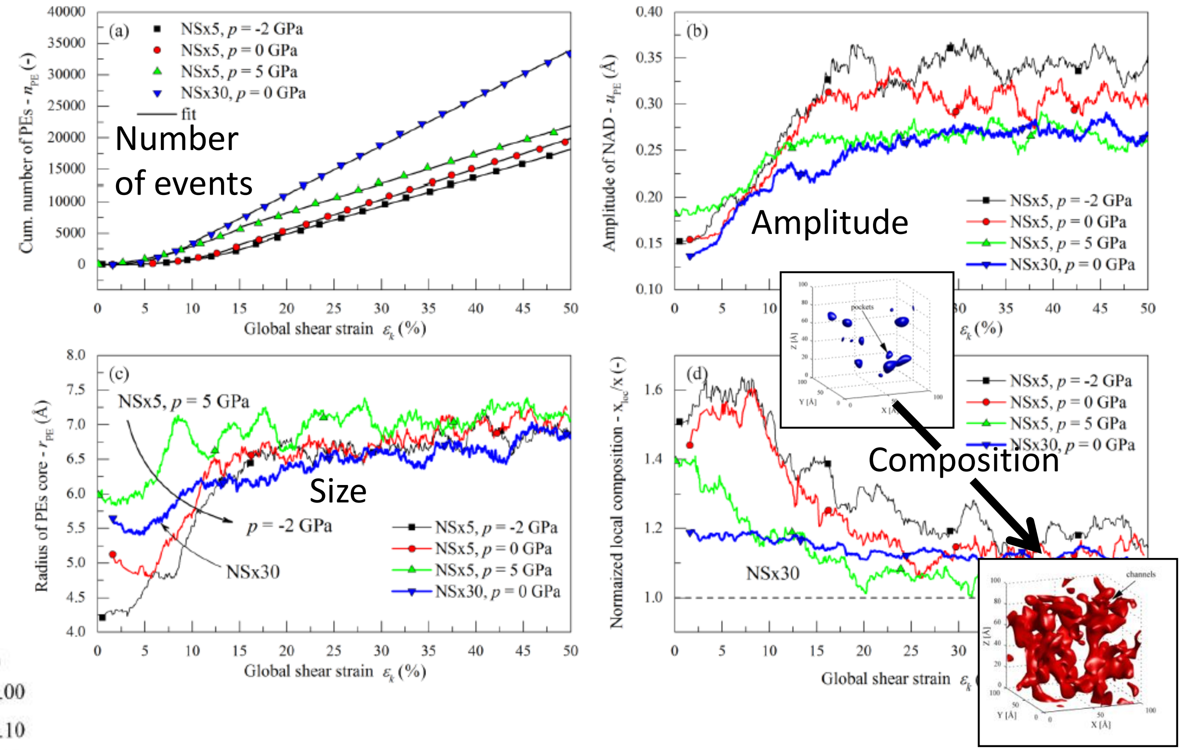
Le **nombre** de réarrangements ↗ avec **x.**

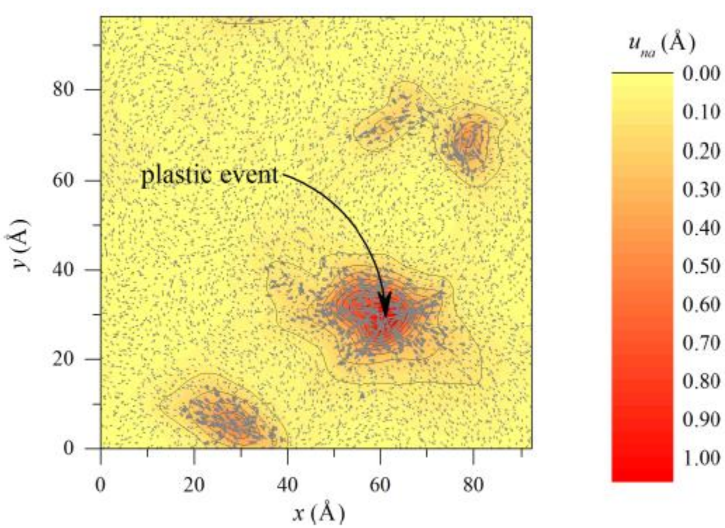
La large majorité des évéts plastiques est situé **proche de Na** (dans le cœur plastique)

Large densité Na dans le cœur plastique en particulier pour les premiers pas de déf.

G. Molnar et al. (2017)





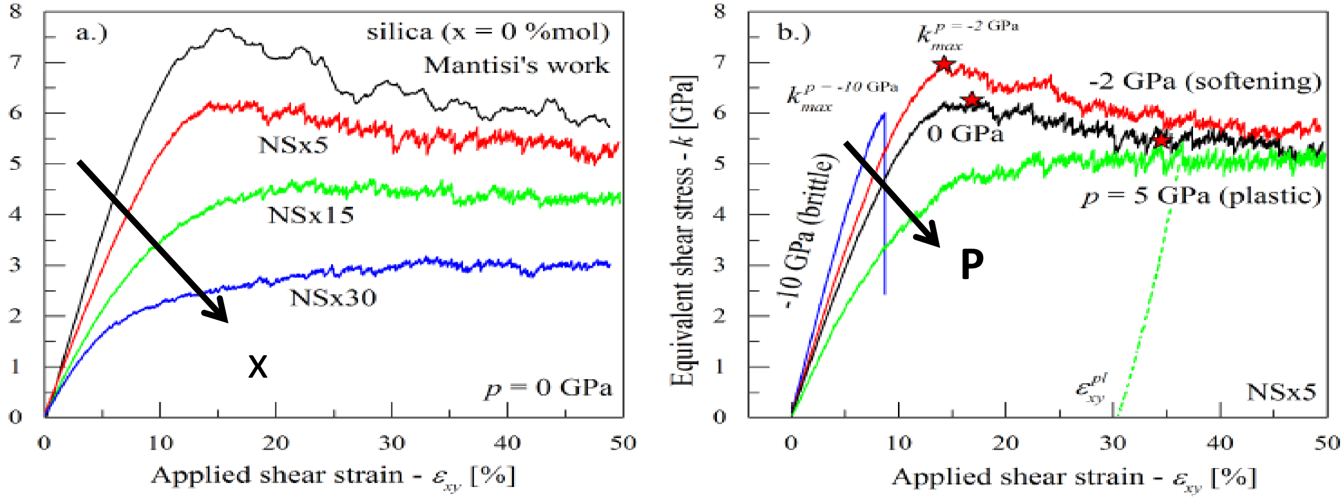


Réarrangements plastiques riches en Na

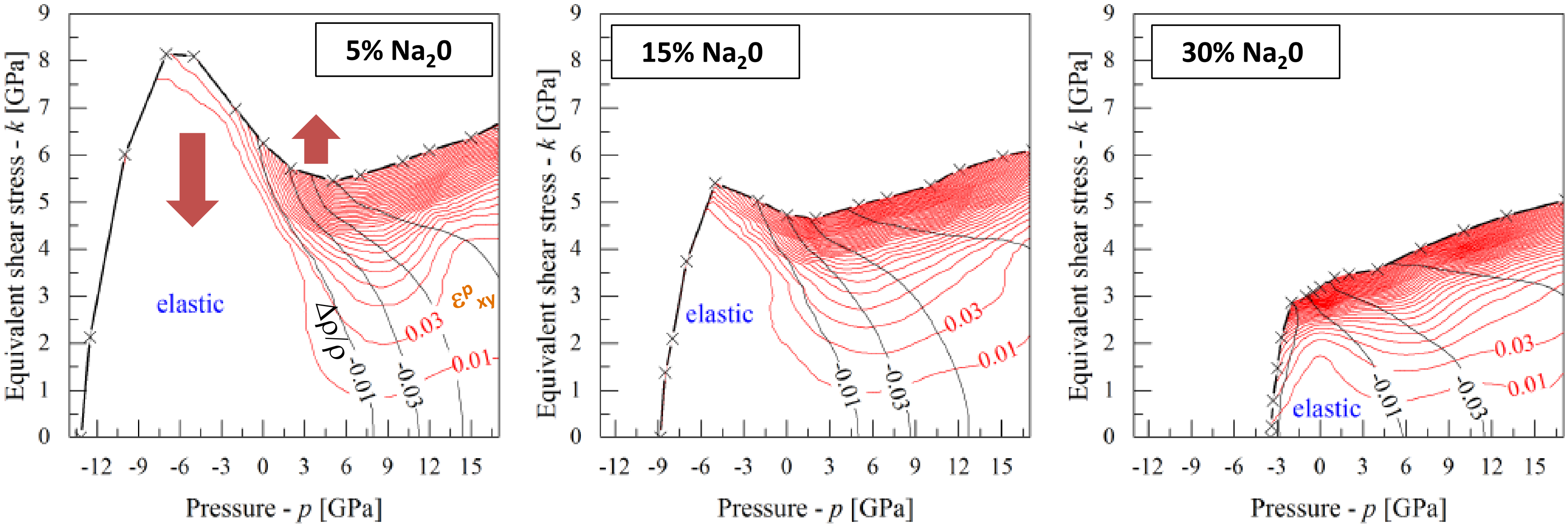
La composition contrôle le nombre de réarrangements

Dépendance en pression de leur taille, et amplitude

G. Molnar et al. (2017)



G. Molnar et al., PRE (2017)

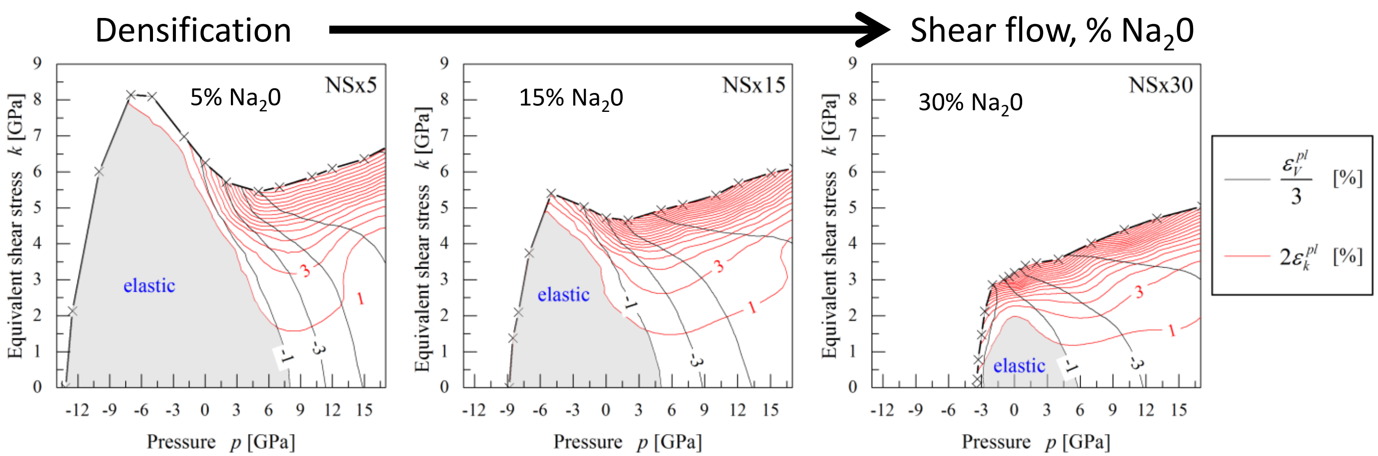


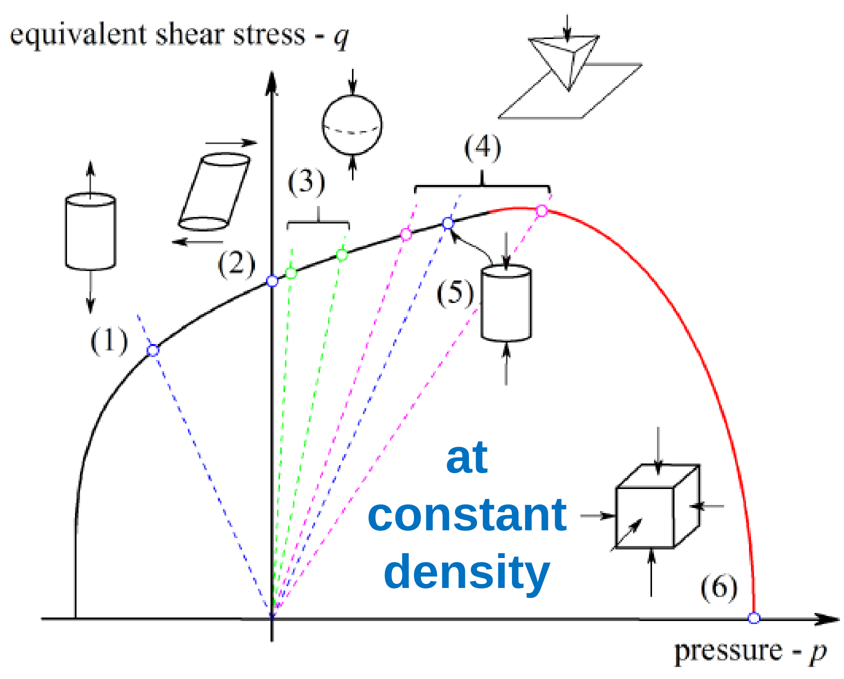
Surface de charge

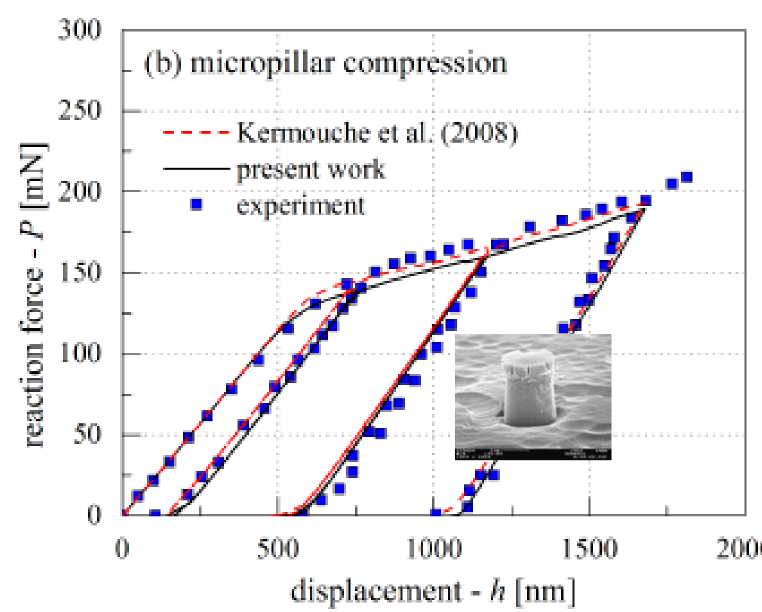
G. Molnar et al. Acta Mat (2017)

ANR PLASTIGLASS
ANR MECASIL
ANR MULTISIL

SAINT-GOBAIN





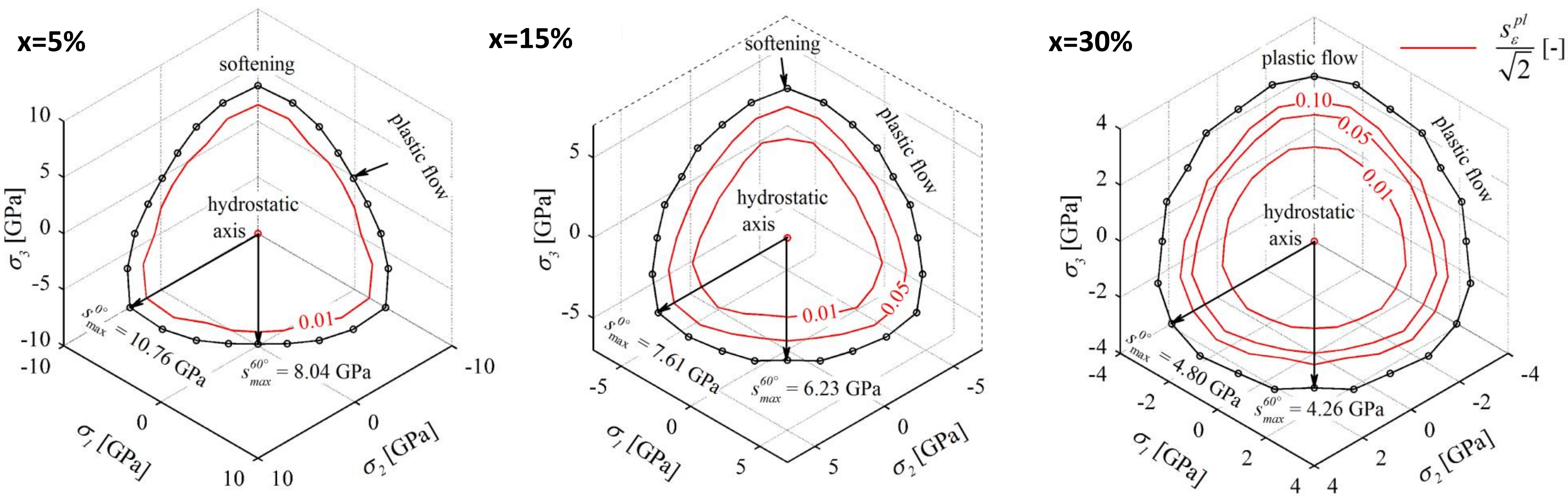


Sensibilité en la composition (1-**x**) SiO_2 + **x** $\mathbf{Na_2O}$

$$(\sigma_1 : \sigma_2 : \sigma_3)$$
$$\vartheta_\sigma = 0° : (1 : -0.5 : -0.5)$$
$$\vartheta_\sigma = 30° : (1 : 0 : -1)$$
$$\vartheta_\sigma = 60° : (0.5 : 0.5 : -1)$$

π-plane Haigh-Westergaard

Anisotropie



G. Molnar et al. (2017)

Conclusion

Quelles **tailles** caractéristiques?

Irrégularités sur des tailles $5a \rightarrow 30a$ en fonction de la *composition*

Rôle des **fluctuations** à l'échelle atomique sur le comportement à grande échelle?

Micro-plasticité affectant le comportement linéarisé

Quel lien entre les grandeurs mesurables aux petites échelles et les **grandeurs mécaniques**?

Méthodes de *coarse-graining* montrent le comportement discontinu aux très petites échelles.

Nécessité d'*homogénéiser* la réponse mécanique.

Réversibilité et **Irréversibilité** à différentes échelles?

Mécanisme collectif d'*instabilité*. La succession d'instabilités parfois très locales conduit à un écoulement plastique macroscopique

Bibliographie

S. Alexander: Physics Reports **296**, 65-236 (1998)
Amorphous Solids, their structure, lattice dynamics and Elasticity.

D. François, A. Pineau, A. Zaoui: *Comportement des Matériaux Vol.1 Elasticité et Plasticité*, Hermès (1995)

J. Besson, G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest: *Mécanique non linéaire des matériaux*, Hermès (2001)

J. Salençon: *Handbook of Continuum Mechanics*, Springer (2001)

E.B. Tadmor, R.E. Miller: *Modeling Materials*, Cambridge University Press (2011)

I. Goldhirsch, C. Goldenberg: Eur. Phys. J. E **9**, 245–251 (2002)
On the microscopic foundations of elasticity

D. Rodney, A. Tanguy and D. Vandembroucq: Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **19**, 083001 (2011)
Modeling the mechanics of amorphous solids at different length and time scales