

Modélisation mécanique des matériaux amorphes: De l'échelle atomique à la description continue

La déformation élastique d'un matériau correspond à une déformation réversible résultant d'un chargement mécanique, et pour laquelle la fin du chargement signifie le retour à l'état initial. La déformation plastique est en revanche une déformation irréversible et se traduit à l'échelle atomique par le réarrangement des positions relatives des atomes. Contrairement aux matériaux cristallins, la compréhension de l'élasticité et de la plasticité des matériaux amorphes reste encore relativement parcellaire aux échelles microscopiques. Cette situation provient à la fois de la complexité des phénomènes mis en jeu dans ce type de matériaux hétérogènes et désordonnés aux petites échelles mais également de la difficulté à étudier expérimentalement leur plasticité. Les matériaux amorphes, comme le verre, sont en effet le plus souvent fragiles ce qui restreint la gamme des essais mécaniques adéquats pour l'étude de la plasticité et confine cette dernière à de très petites échelles.

De plus, ces matériaux, bien qu'isotropes aux échelles continues, présentent des hétérogénéités élastiques aux échelles microscopiques. En outre, les mécanismes élémentaires de la plasticité des amorphes ne peuvent être décrits en termes de défauts bien caractérisés cristallographiquement comme les dislocations. Ils consistent plutôt en réarrangements atomiques locaux de tailles et de formes variées. Dans ce contexte, l'analyse par simulation numérique s'est donc révélée être un outil privilégié d'investigation des lois de comportement élastiques et plastiques des matériaux amorphes.

Les approches de type microscopiques s'appuient sur des observations numériques obtenues par dynamique et statique moléculaire. Ces simulations permettent une analyse fine des déformations élastiques et des réarrangements atomiques. C'est grâce à cette méthode que le concept de régions potentiellement réarrangeables sous cisaillement a pu être forgé. De nombreux travaux ont depuis étendu la description de l'élasticité [1-2] ainsi que celle des événements élémentaires de la plasticité des amorphes à l'échelle atomique [3-4]. Toutefois, le bilan des travaux précédents montre que malgré certaines réussites des problèmes méthodologiques doivent être encore levés. C'est notamment le cas pour la transition vers les échelles supérieures pour lesquels les approches par homogénéisation n'ont pas encore été employées. À ce jour, même la notion de volume élémentaire représentatif aux échelles microscopiques pose problème.

C'est ce qui justifie la proposition de ce stage de recherche qui vise à développer une approche rigoureuse de transition entre les échelles pour décrire les propriétés élastique et la plastiques des matériaux amorphes. Le but de cette étude consiste à passer à une description mécanique à l'échelle continue à partir des données obtenues à l'échelle atomique par des simulations atomistiques. Pour cela, on mettra en œuvre des méthodes d'homogénéisation, plus classiquement utilisées pour décrire des matériaux hétérogènes ou composites aux échelles continues, soit au moyen d'approches analytiques [5] soit à l'aide de calculs numériques à champs complets [6].

Ce stage, qui se déroulera à l'ESPCI, est orienté vers des problématiques scientifiques actuelles. Il est donc idéal pour un candidat souhaitant poursuivre sa carrière dans la recherche académique ou en recherche et développement dans une entreprise. Les outils numériques nécessaires sont déjà développés par nos équipes de recherche. L'essentiel du travail résidera par conséquent dans le traitement des données, leur interprétation physique et mécanique, ainsi que dans la modélisation théorique du problème. Les responsables directs du stage seront présent sur les lieux du stage durant toute la durée du stage de manière à encadrer et à interagir avec l'étudiant le mieux possible. Toute question est la bienvenue.

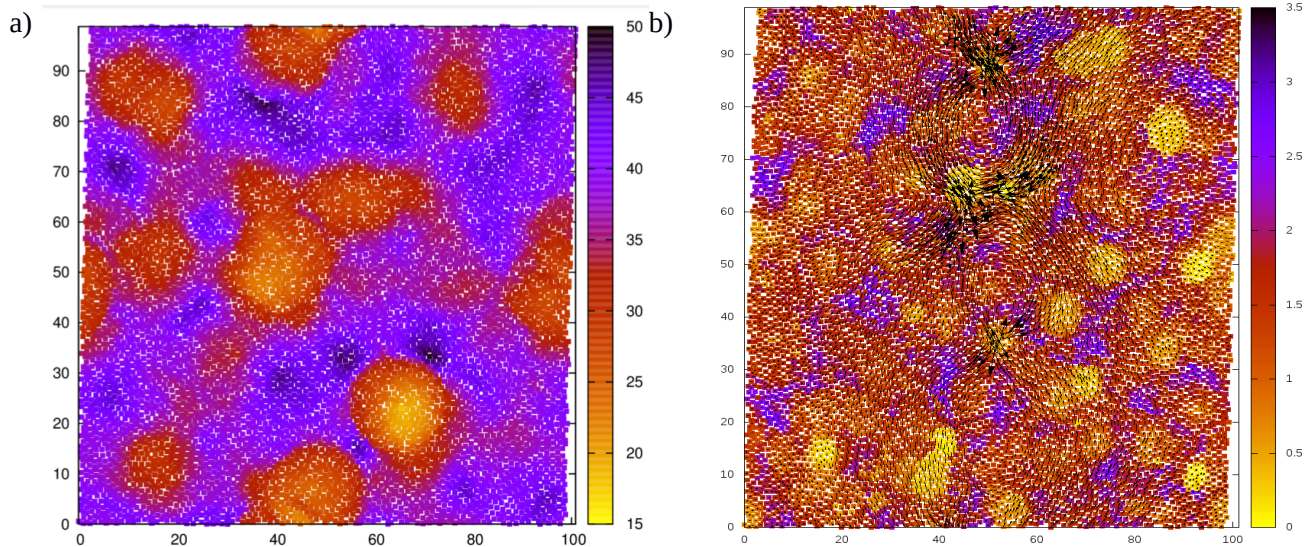


Figure : Propriétés mécaniques locales obtenues à partir de simulations à l'échelle atomique. (a) Modules d'élasticité C_{xyxy} locaux. (b) Limites d'élasticité locales. Les flèches correspondent au champ de déplacement dû à un réarrangement plastique sous cisaillement se produisant dans les zones molles.

Contacts :

sylvain.patinet@espci.psl.eu

Laboratoire PMMH, ESPCI

10, rue Vauquelin

75231 Paris Cedex 5 – FRANCE

et

francois.willot@mines-paristech.fr

Mines ParisTech, PSL Research University

Centre for Mathematical Morphology

35 rue St-Honoré, 77300 Fontainebleau, France

- [1] M. Tsamados, A. Tanguy, C. Goldenberg and J.-L. Barrat, *Local elasticity map and plasticity in a model Lennard-Jones glass*, Phys. Rev. E **80**, 026112 (2009)
- [2] C. Goldenberg, A. Tanguy and J.-L. Barrat, *Particle displacements in the elastic deformation of amorphous materials: Local fluctuations vs. non-affine field*, EPL **80**, 16003 (2007)
- [3] J. Ding, S. Patinet, M. L. Falk, Y. Cheng and E. Ma, *Soft spots and their structural signature in a metallic glass*. Proceedings of the National Academy of Sciences **111**, 14052 (2014)
- [4] S. Patinet, D. Vandembroucq and M. L. Falk, *Connecting Local Yield Stresses with Plastic Activity in Amorphous Solids*, Phys. Rev. Lett. **117**, 045501 (2016)
- [5] J.R. Willis. *Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites*. J. Mech. Phys. Sol. **25**, 185–202 (1977)
- [6] F. Willot, *Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields*, C. R. Acad. Sc. 343(3), 232-245 (2015).