

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

où C_1 et C_2 sont des paramètres matériau déterminés empiriquement.

3 Programme détaillé

Séance 1 - Cours élasticité caoutchoutique et hyperélasticité.

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

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

Q2 Quel phénomène anticipez-vous pour de fortes élongations ?

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

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

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

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

Q7 Retrouvez la définition d'un matériau hyperélastique.

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

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

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

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

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

Séance 3 - Essais de compression sur nanocomposites.

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

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

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

La réalisation des essais comportera les étapes suivantes :

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

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

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

Q14 Mettez en place des essais permettant d'étudier :

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

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

Q16 Décrivez et commentez la forme de la réponse mécanique.

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

Séance 4 - Analyse des résultats de la compression

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

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

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

Q20 Analyser les résultats obtenus et conclure

Séance 5 - Essais de compression sur nanocomposites

Séance 6 - Simulation numérique de la compression

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

Séance 7 - Cours d'homogénéisation.

Séance 8 - Rédaction du rapport et préparation de la soutenance

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

4 Bibliographie

Elasticité caoutchoutique et hyperélasticité

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

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