Vers le développement d'approches continualisées pour l'étude novatrice du comportement dynamique de plaques de graphène

F. HACHE[a]

a. Institut Ingénierie Mécanique I2M, CNRS Université de Bordeaux florian.hache@u-bordeaux.fr

Résumé :

Avec l'émergence récente des nanomatériaux, l'étude de leur comportement statique et dynamique apparaît plus que prioritaire. La particularité des nanomatériaux est que l'échelle considérée est différente de celle utilisée pour les matériaux classiquement utilisés en ingénierie. Ainsi, il est nécessaire d'adapter les théories traditionnelles afin de permettre la capture de ces effets d'échelle. Les approches phénoménologiques traditionnelles introduisent un coefficient de facteur d'échelle supposé constant mais paradoxalement dépendant de paramètres tels que la géométrie lorsqu'il est calibré à partir de la solution du modèle discrète. Il est proposé une présentation succincte d'un modèle continualisé, construit à partir de la représentation discrète de la structure et en utilisant les approximants de Padé ou le développement de Taylor du déplacement. Le coefficient de facteur d'échelle introduit dans cette approche est intrinsèquement constant. Même si de nombreux progrès peuvent être faits dans un proche futur, ces modèles, particulièrement novateurs, représentent l'avenir de l'étude des nanomatériaux.

Abstract :

With the growing scientific interest in nanomaterials, the understanding of their static and dynamic mechanical behavior is a priority. The specificity of nanomaterials is that the considered scale is different from for other materials in engineering. Thus, there is a need to adapt the traditional theories in order to be able to take into account the small scale effects. The traditional phenomenological approaches introduce a small length scale coefficient that is supposed constant. Yet, it is showed, when it is calibrated from the solution of the lattice model, that it depends on some parameters such as the geometry. A presentation of continualized models is proposed. They are built from the lattice model and by using Padé approximants or Taylor approximations. In this approach, the small length scale coefficient is constant by definition. Even if further progresses can be done in a near future, these models are promising.

Mots clefs : Modèle discret, continualisé, approximants de Padé, Eringen

1 Introduction

Depuis quelques années, les nanomatériaux tels que les nanoplaques de graphène, dont la découverte en 2004 a notamment été récompensée par le prix Nobel en 2010, suscitent l'intérêt de la communauté scientifique de par leurs propriétés extraordinaires : résistance à la rupture 200 fois plus importante que l'acier mais 6 fois plus léger que ce dernier, extrêmement conducteurs, … Les applications possibles sont extrêmement variées et ils représentent sans nul doute un des futurs de l'ingénierie marine. En raison de leur coût de production jusqu'ici trop important, leur étude était négligée mais avec l'émergence de nouvelles techniques, l'étude et la maîtrise de leur comportement mécanique est devenu un enjeu crucial et prioritaire pour l'industrie.

A l'échelle nanoscopique, les matériaux ne peuvent être considérés homogènes et certains effets microstructuraux tels que les interactions interatomiques doivent être pris en compte. Il est ainsi important d'adapter les théories traditionnelles et développer de nouveaux modèles qui prennent en compte ces effets. Ces dernières décennies, de nombreuses théories élastiques non locales [1] ont été proposées pour caractériser ces effets et sont basées sur l'hypothèse formulée par Eringen [2] que la contrainte ne dépend pas seulement de la déformation en ce point mais également de celle des points aux alentours. Il en résulte une loi constitutive phénoménologique entre la contrainte, le laplacien de cette dernière et la déformation en ce point :

$$[1-(e_0 a)^2 \nabla^2]\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{D}:\boldsymbol{\varepsilon}$$

où a est la longueur caractéristique, typiquement la distance interatomique, et e_0 un coefficient, indépendant de la sollicitation ou de la géométrie. En se basant sur le modèle de Von-Karman, Eringen proposa une valeur de 0.239. L'objectif de cette étude est de présenter très succinctement une méthode conduisant à une expression de ce coefficient en considérant un modèle discret de référence. Il s'agit ensuite de développer des approches particulièrement novatrices dites continualisées [3-9]. On conclura en montrant les différentes pistes de réflexion possibles pour décrire au mieux le comportement de plaques de graphène.

2 Modèle discret et calibration du coefficient de facteur d'échelle

Le modèle discret sert par la suite de référence pour la calibration du coefficient de facteur d'échelle. Une plaque à appuis simples est discrétisée en considérant un assemblage de poutres rigides connectées entre elles par différents ressorts (rotationnels, de cisaillement, …) représentant les liens entre les atomes de la plaque et introduisant ainsi les effets d'inertie rotatoire et de cisaillement (voir Fig. 1). Pour une plaque isotrope, tous les éléments poutre sont égaux, $\Delta x = \Delta y = a$

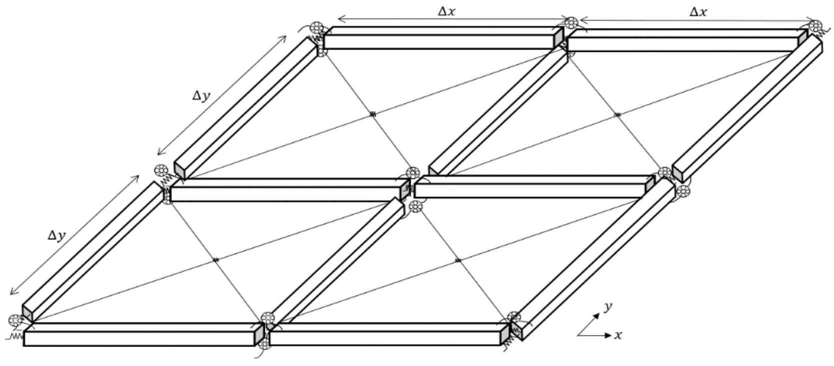

Figure 1: Modèle de plaque discret

Considérant les énergies de torsion et de déformation induites par les différents éléments du système ainsi que l'énergie cinétique associée, cela aboutit à une équation aux différences finies régissant le mouvement de la plaque, correspondant au schéma centré aux différences finies de l'équation continue aux dérivées partielles de Kirchhoff pour les plaques minces et de Mindlin pour les plaques épaisses avec prise en compte des effets de cisaillement. Il est alors possible de déterminer les fréquences propres discrètes du système en considérant ces conditions limites spécifiques.

Le modèle discret étant asymptotiquement équivalent au modèle continu, les fréquences propres de ces derniers $\Omega_{discret}$ et $\Omega_{continues}$ sont considérées égales pour un nombre suffisamment grand d'éléments. Pour une plaque mince, on obtient ainsi :

$$e_0 = \frac{\sqrt{n^4 + m^4\chi^4}}{\sqrt{6}(m^2\chi^2 + n^2)}$$

où n et m sont les modes de vibration et χ est le ratio entre la largeur de la plaque et sa longueur. L'évolution du coefficient de facteur d'échelle calibré en fonction de χ pour différents modes m en considérant n égal à un est donné en figure 2.

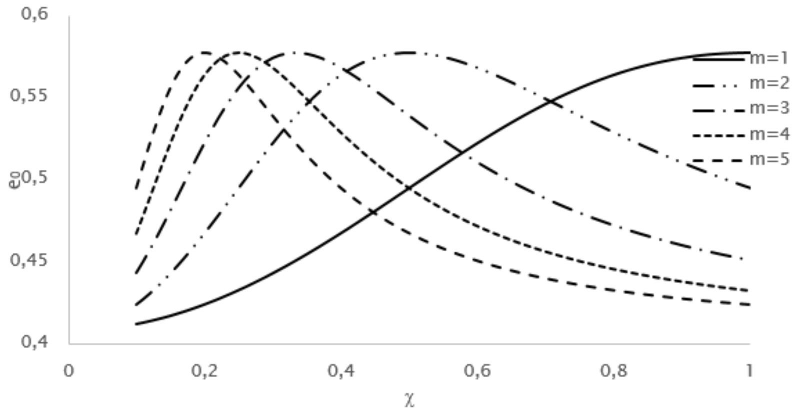

Figure 2. Coefficient de facteur d'échelle calibré pour différents modes de vibration et géométries (n=1)

e_0, initialement supposé constant, dépend donc paradoxalement de la géométrie et de la sollicitation. Par conséquent, le modèle phénoménologique Eringen n'est pas pertinent et il convient d'en développer de nouveaux.

2 Modèle continualisés

2.1 Présentation succincte du modèle

Les modèles continualisés consistent à établir des équations continues à partir de celles du modèle discret [3-9.]. En introduisant un opérateur semi-différentiel et en appliquant le développement en séries de Taylor aux équations aux différences finies, on montre que pour le déplacement w :

$$\frac{w_{i+1,j}-2w_{i,j}+w_{i-1,j}}{a^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[1+\frac{a^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]w(x,y)+o(a^2)$$

En utilisant les approximants de Padé, cela peut également s'exprimer comme suit:

$$\frac{w_{i+1,j}-2w_{i,j}+w_{i-1,j}}{a^2}=\frac{\frac{\partial^2}{\partial x^2}}{1-\frac{a^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}w(x,y)+o(a^2)$$

En substituant cette équation dans celle régissant le mouvement de la plaque discrète, on obtient une équation aux dérivées partielles continue. Cette dernière dépend du processus de continualisation appliqué via un développement en séries de Taylor ou les approximants de Padé. On peut cependant montrer que les équations aboutissent à des solutions équivalentes.

Dans ces approches, le coefficient de facteur d'échelle e_0 est arbitrairement choisi égal à $1/\sqrt{12}$. Il est donc intrinsèquement constant. Ainsi, dès lors qu'un modèle discret a été établi pour décrire le comportement statique ou dynamique de la structure, il est possible de développer un modèle continualisé dans lequel le coefficient de facteur d'échelle est constant. Ces approches continualisées sont de ce fait bien plus pertinentes que les traditionnels modèles d'Eringen.

2.2 Pistes de réflexions pour de futures améliorations

Les approches continualisées sont extrêmement récentes et de ce fait, de nombreuses pistes de réflexion existent pour les améliorer et participer à une meilleure compréhension du comportement vibratoire de nanostructures. Tout d'abord, le modèle discret a été obtenu pour une plaque isotrope dont les cellules sont carrées. Il s'agira donc dans un proche futur d'établir les équations pour des plaques orthotropes, minces ou épaisses.
De plus, les plaques de graphène sont représentées par une structure hexagonale. Il est donc nécessaire d'adapter les cellules considérées afin de prendre en compte cette spécifité. Pour finir, les solutions ont été obtenues pour des plaques à appuis simples. D'autres sets de conditions limites (bords encastrés, libres, …) doivent être considérées.

3 Conclusion

Le modèle phénoménologique d'Eringen, pourtant largement utilisé dans la littérature n'est pas pertinent. En effet, il introduit un coefficient e_0, supposé constant mais qui dépend paradoxalement de nombreux paramètres tels que les modes de vibration, la géométrie ou encore l'épaisseur de la plaque

lorsque les effets d'inertie rotatoire et de cisaillements sont pris en compte. Il est donc alors nécessaire de développer de nouveaux modèles.
Les approches continualisées, particulièrement novatrices permettent d'établir des équations continues à partir d'une représentation discrète de la plaque. Elles introduisent notamment un coefficient de facteur d'échelle intrinsèquement constant. Elles ne sont toutefois pas parfaites et il serait possible dans un futur proche de grandement les améliorer, notamment en considérant une représentation de plaque discrète avec des cellules hexagonales ou en étudiant des plaques orthotropes.

Références

[1] F. Hache, N. Challamel, Elishakoff, Asymptotic derivation of nonlocal plate models from three-dimensional stress gradient elasticity, Continuum Mechanics and Thermodynamics 31 (2019) 47-70
[2] A.C. Eringen, On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, J. Appl. Phys. **54** (1983) 4703–4710
[3] Z. Zhang, C.M. Wang, N. Challamel, Eringen's length scale coefficient for vibration and buckling of nonlocal rectangular plates with simply supported edges, J. Eng. Mech. **141** (2015) 04014117
[4] N. Challamel, J. Lerbet, C.M. Wang, Z. Zhang, Analytical length scale calibration of nonlocal continuum from a microstructured buckling model, Z. Angew. Math. Mech. **94** (2014) 402–413
[5] Z. Zhang, C.M. Wang, N. Challamel, Eringen's length scale coefficient for buckling of nonlocal rectangular plates from microstructured beam-grid model, Int. J. Solids Struct. **51** (2014) 4307–4315
[6] F. Hache, N. Challamel, I. Elishakoff, Lattice and continualized models for the buckling study of nonlocal rectangular thick plates, International Journal of Mechanical Sciences 145 (2018) 221-230
[7] F. Hache, N. Challamel, I. Elishakoff, Nonlocal approaches for the vibration of lattice plates including both shear and bending interactions, IJSSD (2018) 1850094
[8] F. Hache, N. Challamel, I. Elishakoff, C.M. Wang, Comparison of nonlocal continualization schemes for lattice beams and plates, Arch. Appl. Mech. 87 (2017) 1105-1138
[9] N. Challamel, F. Hache, I. Elishakoff, C.M. Wang, Buckling and vibrations of microstructured rectangular plates considering phenomenological and lattice-based continuum models, Composite structures 149 (2016) 145-156