

Elaboration d'un programme pour simuler numériquement l'énergie stockée dans un bimatériau nanométrique Cu/(001) Fe

Lahreche Mohamed Radouane, Benatia Abd elouahab et Rafik Makhloufi (1)

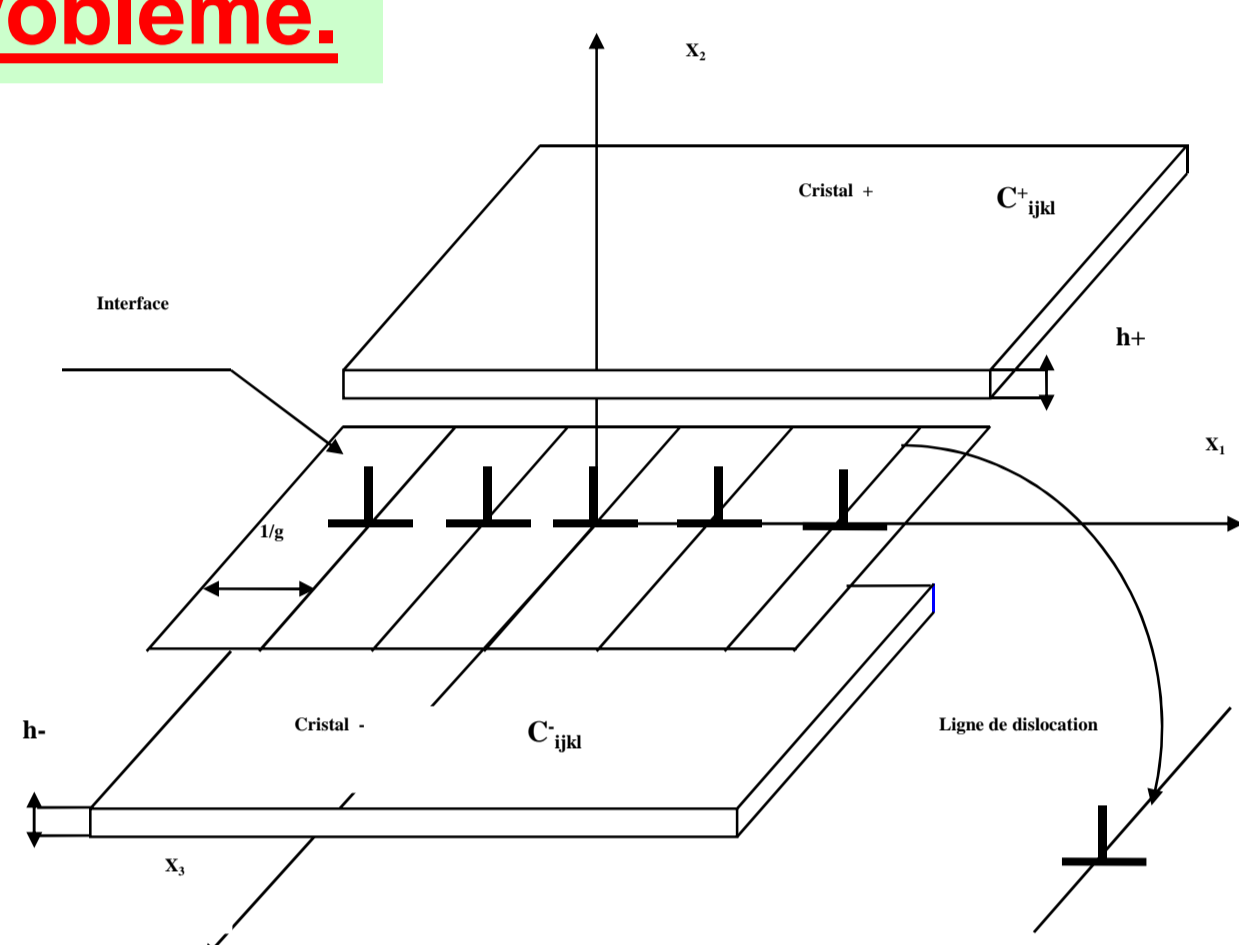
Département de Génie Mécanique, Faculté des Sciences Appliquées, Université Kasdi Merbah Route de Ghardaïa, 30 000 Ouargla, Algérie
(1) : rafik.makhloufi07@gmail.com

Résumé

Les différents matériaux exigés par l'industrie sont le fruit d'association de plusieurs matériaux pour surmonter les problèmes difficiles à résoudre avec un seul ou deux matériaux et dont le but d'acquiescer un surplus de propriétés. Le but du travail est la simulation avec un logiciel, appelé « code MATHEMATICA », permettant la modélisation de l'énergie stockée dans un bimatériau nanométrique Cu/(001)Fe pour répondre à des besoins industriels.

La simulation numérique est une « représentation » du réel, fondée sur des modèles mathématiques. Les codes issus de ces travaux sont validés par confrontation à des résultats expérimentaux.

1. Géométrie du problème.



Géométrie du bilame mince Cu / (001) Fe avec un réseau de dislocations intrinsèques à l'interface $x_2=0$; $1/g$ est la période C_{ijkl}^+ et C_{ijkl}^- sont les constantes élastiques des deux milieux + et - ainsi que les épaisseurs h^+ et h^- .

2. Conditions aux limites.

* La linéarité du déplacement relatif à l'interface peut être exprimé par:

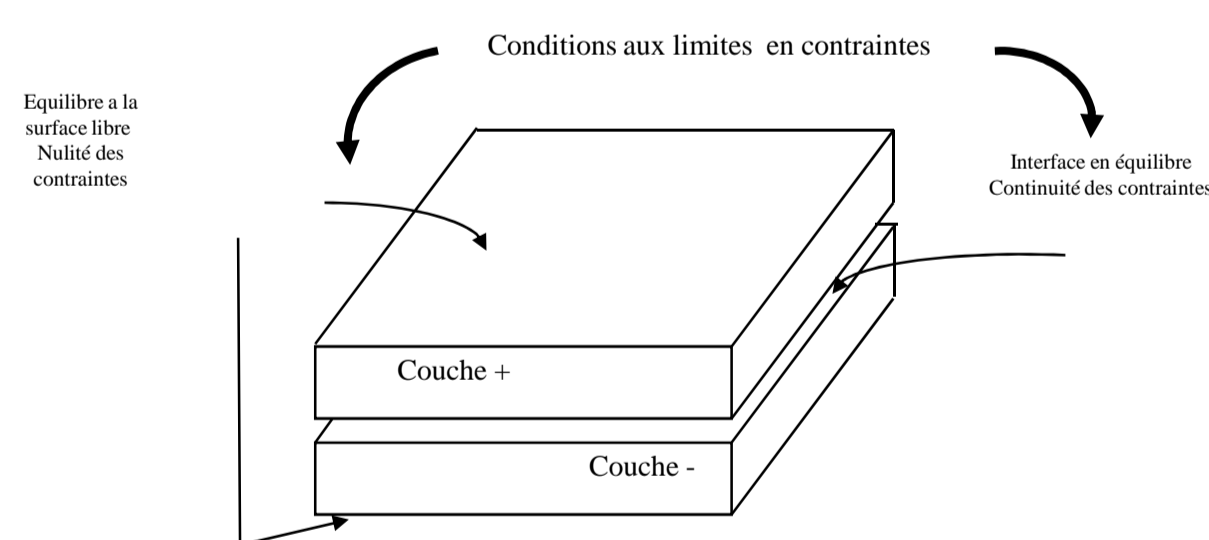
$$[U_k^+ - U_k^-]_{x_2=0} = -\frac{b_k}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} (1/n) \sin(n \cdot \omega \cdot x_1) \quad k = 1, 2, 3$$

* La continuité des contraintes normales à l'interface impose la relation suivante

$$[\sigma_{2k}^+]_{x_2=0} = [\sigma_{2k}^-]_{x_2=0}$$

* Les surfaces libres du bilame étant en équilibre.

$$[\sigma_{2k}^+]_{x_2=h^+} = 0 \quad [\sigma_{2k}^-]_{x_2=-h^-} = 0$$



Conditions aux limites en contraintes du bilame mince Cu / (001) Fe

3. Expressions finales des champs élastiques.

$$U_k = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\pi n} \right) \sum_{\alpha=1}^3 [\cos[n \cdot \omega (x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] \times \text{Re}[-i \cdot X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k} \cdot \exp(-n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2) + (-i \cdot Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2)] + \{\sin[n \cdot \omega (x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] \times \text{Re}[X_{\alpha}^{(n)} \cdot \lambda_{\alpha k} \cdot \exp(-n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2) + (Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{\lambda}_{\alpha k}) \cdot \exp(n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2)]\}]$$

$k=1,2,3$

$$\sigma_{ij} = 2 \cdot g \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^3 [\cos[n \cdot \omega (x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] + \text{Re}[X_{\alpha}^{(n)} \cdot L_{\alpha ij} \cdot \exp(-n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2) + Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{L}_{\alpha ij} \cdot \exp(n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2)] + \{\sin[n \cdot \omega (x_1 + r_{\alpha} \cdot x_2)] + \text{Re}[i \cdot X_{\alpha}^{(n)} \cdot L_{\alpha ij} \cdot \exp(-n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2) + i \cdot Y_{\alpha}^{(n)} \cdot \bar{L}_{\alpha ij} \cdot \exp(n \cdot \omega s_{\alpha} \cdot x_2)]\}]$$

avec $L_{\alpha kl} = \lambda_{\alpha ij} [C_{klj1} + p_{\alpha} C_{klj2}] \quad i, j=1,2,3 \quad l=1,2$

4. Energie de déformation élastique.

Un milieu élastique contraint emmagasine de l'énergie. Cette énergie élastique E de déformation exprimée par unité de volume est donnée par :

$$E = \frac{1}{2} \sigma^T \cdot \epsilon^T = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sigma_{ij}^T \cdot \epsilon_{ij}^T$$

$$E = \frac{1}{2} \left[\sigma_{11} \cdot \epsilon_{11} + \sigma_{21} \cdot \epsilon_{21} + \sigma_{31} \cdot \epsilon_{31} + \sigma_{12} \cdot \epsilon_{12} + \sigma_{22} \cdot \epsilon_{22} + \sigma_{32} \cdot \epsilon_{32} + \sigma_{13} \cdot \epsilon_{13} + \sigma_{23} \cdot \epsilon_{23} + \sigma_{33} \cdot \epsilon_{33} \right]$$

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial u_i} \right)$$

5. Applications.

Designation	a (nm)	b (nm)	A (nm)	C_{ij} (Gpa)
Cu	0.361	0.253	15.10	$C_{11} = 168.4$ $C_{12} = 121.4$ $C_{44} = 75.4$
Fe	0.355			$C_{11} = 232$ $C_{12} = 136$ $C_{44} = 117$

Paramètres des matériaux .

6. Présentation du code MATHEMATICA.

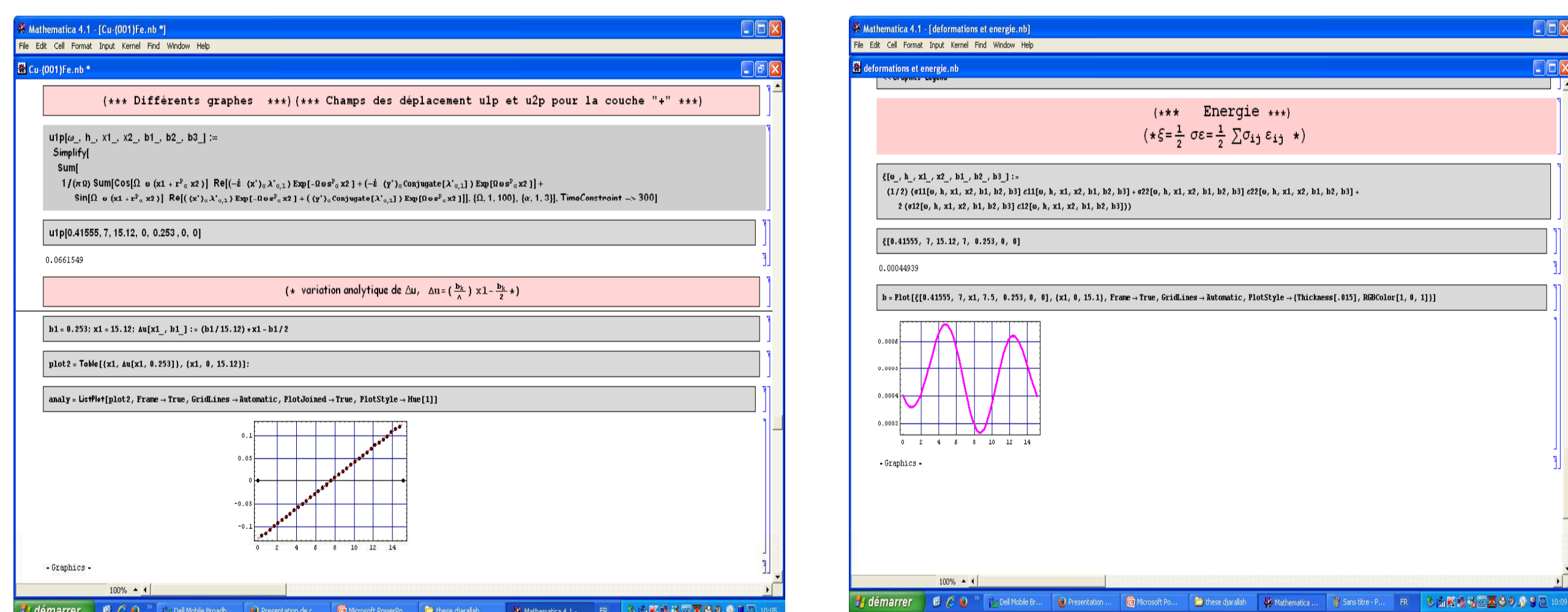
Mathematica est un logiciel

- de calcul numérique,
- de calcul symbolique,
- de programmation,
- d'édition de travaux scientifiques et techniques.

L'outil principal de programmation pour notre problème a été Mathematica, de l'éditeur Wolfram. L'avantage prédominant de ce logiciel est sa capacité à manipuler formellement les équations.

7. Programme élaboré.

Nous présentons une partie du programme élaboré ainsi que quelques résultats pour la simulation de l'énergie emmagasinée dans un bilame mince



Conclusion.

Ce travail nous a permis d'atteindre l'objectif principal qui est l'élaboration d'un programme numérique en code Mathématique pour simuler l'énergie emmagasinée dans un bimatériau dans le cas de l'élasticité anisotrope. La validité du programme original a été testée de manières diverses à chaque étape de calcul, après avoir établi les hypothèses du modèle choisi et les conditions aux limites relatives au problème posé. Le cas traité dans ce travail est celui du bilame mince Cu/(001)Fe.