

**Titre :** Modélisation électro-mécanique multi-échelle des nanocomposites graphène/polymère

**Mots clés :** nanocomposites polymères-graphènes, interphase, multi-échelle, méthode des éléments finis, méthode de dynamique moléculaire, Procédure Murdoch-Hardy, homogénéisation non-linéaire, effet tunnel

**Résumé :** Cette étude porte sur le développement de modèles et de méthodes numériques pour prédire les propriétés électriques et mécaniques des nanocomposites polymères/graphènes.

Dans une première partie, un modèle non-linéaire de conduction électrique prenant en compte l'effet tunnel est introduit pour déterminer la conductivité effective de ces nanocomposites au travers d'une procédure d'homogénéisation numérique. Celle-ci, basée sur une formulation éléments finis a mis en évidence l'influence des paramètres microstructuraux sur la conductivité effective au travers d'une étude statistique.

Ensuite, un modèle atomistique de l'interface polymère/graphène a été proposé pour valuer les propriétés de l'interface et de l'interphase. Les champs de contrainte et de déplacement

ont été identifiés par une extension de la procédure d'Hardy-Murdoch à partir des simulations de mécanique moléculaire. À l'aide de ces champs, un modèle élastique continue avec des interfaces imparfaites a été identifié et comparé aux résultats des simulations de mécanique moléculaire.

Finalement, le modèle atomistique a permis d'identifier un modèle de zone cohésive non-linéaire pour modéliser la décohésion à l'interface polymère/graphène. Une procédure d'homogénéisation numérique par la méthode des éléments finis a été introduite pour estimer les propriétés mécaniques effectives dans le cadre des transformations finies. Les microstructures déformées ont été utilisées dans le modèle électrocinétique pour déterminer l'impact de la décohésion interfaciale sur la conductivité effective.

**Title :** Multi-scale electro-mechanical modeling of graphene/polymer nanocomposites

**Keywords :** Graphene-polymer nanocomposites, interphase, multi-scale, finite element method, molecular dynamics method, Murdoch-Hardy procedure, nonlinear homogenization, tunneling effect

**Abstract :** This work contributes to developing numerical methodologies for predicting the electrical and mechanical properties of graphene/polymer nanocomposites, which can provide a better view for the design of new materials.

First, a nonlinear electrical conduction model taking into account the tunneling effect is introduced to determine the effective conductivity of the graphene/polymer nanocomposites through a numerical homogenization procedure. The influences of barrier height and microstructural parameters on the conductivity were demonstrated.

Then, to characterize the properties of interphases and interfaces, we employed the Murdoch-Hardy procedure combined with the molecular dynamics method to study the mechanical properties of the graphene/polymer

nanocomposites. The stiffness tensor components of the interphase, interface and bulk polymer region are identified. Based on these fields, a continuous elastic model with imperfect interface has been identified and compared with the results of molecular dynamics simulations.

Finally, the atomistic model was used to identify a nonlinear cohesive zone model to simulate the decohesion at the interface of polymer and graphene. A numerical homogenization procedure by finite element method was introduced to estimate the effective mechanical properties in the framework of the finite strains. The proposed mechanical modeling is finally extended to the finite strain problem to predict the evolution of percolation threshold under tension within the proposed electrical model.

