



HAL
open science

Comportement des monocristaux en AMF. Application au comportement des polycristaux :

Christophe Niclaeys

► **To cite this version:**

Christophe Niclaeys. Comportement des monocristaux en AMF. Application au comportement des polycristaux :. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université Paul Verlaine - Metz, 2002. Français. NNT : 2002METZ011S . tel-01749747

HAL Id: tel-01749747

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01749747v1>

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

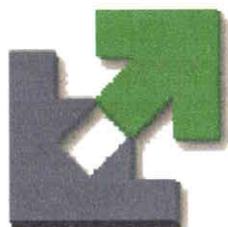
<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



INSTITUT SUPERIEUR DE GENIE MECANIQUE
ET PRODUCTIQUE

THESE

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv	20020345
Date	S/MZ 02/11
Loc	



Université
de METZ

Soutenue à
l'ENSAM Metz

Le 18 juin 2002



LABORATOIRE DE
PHYSIQUE ET
MECANIQUE DES
MATERIAUX

Par

Christophe NICLAEYS

Pour l'obtention du grade de :
DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE METZ

SPECIALITE : Sciences de l'Ingénieur

Option : Génie Mécanique

Comportement des monocristaux en AMF. Application au comportement des polycristaux

C. L'excellent	rapporteur	ENSMM, Besançon
G. Cailletaud	rapporteur	Ecole des Mines, Paris
E. Gautier	examinateur	CNRS, Ecole des Mines, Nancy
M. Morin	examinateur	INSA de Lyon
P. Lipinski	examinateur	ENIM, Metz
E. Patoor	directeur de thèse	ENSAM, Metz
T. Ben Zineb	co-directeur de thèse	ENSAM, Metz

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



031 465863 4

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM) à l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (ENSAM) de Metz.

Je tiens tout d'abord à remercier vivement le Professeur Etienne Patoor pour m'avoir accueilli et encadré durant ce travail de thèse. Ses connaissances, sa disponibilité, son amabilité, ainsi que la confiance qu'il m'a témoignée m'ont permis de mener à bien ce projet.

J'aimerais également remercier Mr Ben Zineb Tarak qui a co-encadré ce travail en m'apportant un soutien permanent.

Je remercie aussi tous mes amis collègues pour la bonne ambiance qu'ils ont su entretenir durant cette thèse (Stéphane Berbenni, Régis Kubler, Carol Rouff, Jean-Paul Lorrain, Bertrand Peultier, Mourad Elhadrouz ...).

Je remercie également Messieurs Georges Cailletaud et Christian Lexcellent pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'être rapporteurs de ce travail, ainsi que Mme Elisabeth Gautier et Mr Michel Morin pour leur aimable participation au jury.

Je tiens tout particulièrement à remercier Mr Paul Lipinski qui fut le premier à m'initier à la recherche lors de mon DEA, qui a su me faire rencontrer les bonnes personnes pour continuer en thèse dans de bonnes conditions et pour m'avoir fait le plaisir d'être dans mon jury de thèse.

Je tiens également à remercier ma mère et ma marraine Patricia pour avoir fait le déplacement jusqu'à Metz afin de m'apporter leur soutien le jour de la soutenance.

Evidemment tout ceci n'aurait pas eu lieu sans mes parents qui m'ont toujours soutenu et entièrement fait confiance. Pour tout ceci, je les remercie sincèrement.

Mes plus tendres remerciements seront pour mon épouse Géraldine qui m'a soutenu tout au long de ma thèse (et même supporté les dernières semaines), et pour mon tout jeune fils Tom (5 mois et demi) qui a su me remonter le moral et me re-motiver dans les moments difficiles d'un simple aaareuuuh !

SOMMAIRE

INTRODUCTION	page 6
---------------------	-----------

CHAPITRE I

COMPORTEMENT ET APPLICATIONS INDUSTRIELLES DES AMF

I.1 Introduction	page 10
I.2 Transformation martensitique	11
I.2.1 Introduction	11
I.2.2 Définition	12
I.2.3 Températures de transformation	13
I.2.4 Hystérésis	13
I.2.5 Déformation de transformation	15
I.2.6 Transformations thermoélastiques	19
I.3 Comportement thermomécanique des A.M.F.	22
I.3.1 La superélasticité	23
I.3.2 La superthermoélasticité	24
I.3.3 L'effet mémoire simple sens	25
I.3.4 L'effet mémoire double sens	27
I.4 Les différentes classes d'A.M.F.	28
I.5 Exemples d'applications industrielles	30
I.6 Conclusion	33

CHAPITRE II

COMPORTEMENT DES MONO ET DES POLYCRISTAUX

	page
II.1 Introduction	35
II.2 Approches phénoménologiques et approches par transition d'échelle	36
II.2.1 Le modèle de Leclerc et L'excellent (1996)	37
II.2.2 Le modèle de Brinson et al. (2000)	39
II.2.3 Le modèle autocohérent	42
II.3 Loi de comportement du monocristal	45
II.3.1 Déformation de transformation	45
II.3.2 Aspect thermodynamique	48
II.3.3 Modules tangents thermomécaniques	52
II.4 Loi de comportement du polycristal	54
II.5 Quelques problèmes en suspens	57
II.6 Conclusion	59

CHAPITRE III

MATRICES D'INTERACTIONS

	page
III.1 Introduction	61
III.2 Matrice d'interaction pour les AMF à base cuivre	62
III.2.1 Matrice d'interaction	62
III.2.2 Interface entre les plaquettes de martensite	67
III.3 Nouvelle formulation	75
III.3.1 Problème du fluage anisotherme à faible contrainte	75
III.3.2 Nouvelle matrice d'interaction pour les AMF à base cuivre	77
III.3.3 Influence sur l'énergie d'interaction	82

III.4 Matrice d'interaction pour les NiTi	84
III.4.1 Morphologie des HPV de NiTi	84
III.4.2 Calcul classique de la matrice d'interaction	89
III.4.3 Nouvelle matrice d'interaction pour les alliages NiTi	96
III.5 Conclusion	101

CHAPITRE IV

MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

	page
IV.1 Introduction	104
IV.2 Fluage anisotherme d'un monocristal	105
IV.2.1 Introduction	105
IV.2.2 Solution énergétiquement voisine	106
IV.2.3 Critère de sélection des variantes	109
IV.2.4 Application	111
IV.2.5 Résultats	117
IV.2.6 Conclusion	128
IV.3 Fluage anisotherme d'un polycristal	129
IV.3.1 Rappel des équations de base pour la modélisation d'un polycristal	129
IV.3.2 Résultats obtenus avec la formulation classique	130
IV.3.3 Résultats obtenus avec la nouvelle formulation	135
IV.3.3 Conclusion	138

CHAPITRE V

SIMULATION DE MICRO-SYSTEME PAR E.F.

	page
V.1 Introduction	140
V.2 Implémentation du modèle dans le code ABAQUS	142
V.2.1 Traction uniaxiale sur un élément	144
V.2.2 Résultats d'un essai de traction-compression sur un monocristal d'AMF	146
V.2.3 Conclusion	157
V.3 Application : cas d'un film mince multicristallin	158
V.3.1 Caractérisation géométrique et données de la simulation	159
V.3.2 Résultats	161
V.3 Conclusion	171

CONCLUSION GENERALE

	page
	172

ANNEXES

	page
Annexe 1	175
Annexe 2	176
Annexe 3	177
Annexe 3	178

REFERENCES

	page
	179

INTRODUCTION

INTRODUCTION

INTRODUCTION

INTRODUCTION

Les Alliages à Mémoire de Forme (A.M.F.) ont été découverts il y a une soixantaine d'années, mais leur étude n'a été effective que dans les années 60 avec la découverte des propriétés des alliages Nickel-Titane (NiTi) par l'US Navy. La première application industrielle fut réalisée par la société RAYCHEM en 1969 par la conception et la réalisation de manchon de raccordement en A.M.F.

L'étude de ces alliages est importante depuis le début des années quatre-vingt. Plusieurs travaux (Gobin et al., 1978) (Nishiyama, 1978) ont montré que les différentes propriétés de ces alliages sont essentiellement dues à la transformation martensitique, en particulier par la formation et la croissance des variantes de martensite.

Afin de déterminer les différentes interactions entre ces variantes de martensite, beaucoup de chercheurs ont déterminé les conditions d'existence d'une interface plane compatible entre deux variantes. Ces conditions mènent à la définition d'une matrice d'interaction H^{mn} qui donne des informations sur la compatibilité ou l'incompatibilité entre deux variantes de martensite. Cette matrice a été calculée de différentes façons : Fassi-Fehri et al. (1987) proposent d'utiliser le problème à deux inclusions, El Amrani (1994) considère les compatibilités de déformation, Bensalah (1992) utilise le tenseur d'Eshelby et minimise l'énergie d'interaction entre deux variantes. Plus récemment, Siredey et al. (1999) ont utilisé un modèle où l'énergie d'interaction entre deux variantes est obtenue par minimisation de l'énergie d'interaction en utilisant les opérateurs interfaciaux.

Depuis la première publication, où une matrice d'interaction a été employée pour décrire l'interaction entre variantes (Patoor et al., 1987), la forme de cette matrice n'a pas changé et elle est maintenant largement utilisée pour modéliser le comportement superélastique des alliages à base cuivre (Entemeyer et al., 2000) et NiTi (Gao et al., 2000) (Gall et al., 1999) des AMF. Cette matrice est donc très bien adaptée pour décrire le comportement superélastique, mais Entemeyer, dans sa thèse, prouve que son utilisation est limitée et qu'elle surestime l'énergie d'interaction (Entemeyer, 1996). En effet, cette matrice est bien adaptée pour modéliser le comportement superélastique mais donne de mauvais résultats lorsque le chargement est un refroidissement sous faible contrainte (moins de 100 MPa).

C'est dans ce cadre qu'intervient ma thèse. L'objectif est de comprendre les différents mécanismes du comportement thermomécanique afin d'améliorer la loi de comportement qui

INTRODUCTION

a montré ses limites pour l'étude du fluage anisotherme sous faible contrainte. Plusieurs étapes sont nécessaires à ce travail :

Une première partie est consacrée à une étude conséquente des AMF, où l'on détaillera la transformation martensitique, les différents effets ou comportements de ces alliages, ainsi que leur cinétique, cinématique et thermodynamique. Nous verrons également dans ce chapitre, les différentes microstructures des variantes de martensite selon le type d'alliage (ferreux, cuivreux ou NiTi).

Le second chapitre portera essentiellement sur le comportement de ces alliages. Nous verrons les principales approches existantes : les approches phénoménologiques et les approches dites par transition d'échelle. Nous expliciterons également dans ce chapitre toutes les équations nécessaires à la modélisation du comportement des mono et des polycristaux en AMF qui sera faite au chapitre IV.

Dans le troisième chapitre, une nouvelle formulation, basée sur une meilleure description de la microstructure et qui fait intervenir la notion de groupe de variantes, est proposée. Cette approche donne naissance à une nouvelle matrice d'interaction qui prend en compte l'interaction entre quatre variantes au lieu de deux lorsque l'on utilise la matrice classique. Cette nouvelle formulation sera également appliquée aux alliages NiTi, où là encore, une nouvelle matrice d'interaction sera proposée.

Le chapitre IV concerne la modélisation du fluage anisotherme aussi bien pour les monocristaux que pour les polycristaux à l'aide de la nouvelle approche. Les résultats obtenus sont très satisfaisants pour les monocristaux et les résultats obtenus pour les polycristaux sont encore à améliorer.

Le cinquième et dernier chapitre se différencie des précédents, car nous allons faire des simulations de l'effet superélastique (et non du fluage) sur des monocristaux et sur un multicristal de quelques grains. Ces simulations se feront par l'intermédiaire du code d'éléments finis ABAQUS en utilisant la routine User Material (UMAT).

CHAPITRE I

COMPORTEMENT ET APPLICATIONS

INDUSTRIELLES DES AMF

I.1 Introduction

Dans les matériaux métalliques plusieurs mécanismes élémentaires de déformation sont généralement observés. Il y a la thermoélasticité qui est indépendante du temps et qui donne des déformations complètement réversibles. Cette déformation est liée à la variation des distances inter-atomiques sous l'action d'une force mécanique ou d'une modification de température. Il y a la plasticité qui est également indépendante du temps et qui donne, contrairement à la thermoélasticité, des déformations irréversibles. Cette déformation appelée déformation plastique est associée aux mouvements de défauts du réseau cristallin : les dislocations. Nous avons ensuite l'effet visqueux qui dépend très largement du temps et qui interdit les déformations plastiques instantanées : c'est le temps qui pilote la déformation inélastique qui devient dépendante de la vitesse de chargement.

Ces mécanismes sont la plupart du temps combinés pour donner naissance à des comportements plus complexes tels que la viscoélasticité, la viscoplasticité, l'élastoplasticité, ou encore l'élastoviscoplasticité.

D'autres mécanismes, souvent liés aux mouvements de frontières mobiles, sont également observés : la recristallisation où les joints de grains coalescent pour former des grains de dimensions supérieures, l'endommagement où la croissance de cavités devance la formation de fissures.

En ce qui concerne les alliages à mémoire de forme (A.M.F.), le mécanisme de déformation est associé à une transformation de phases : la transformation martensitique. Une représentation schématique de ce mécanisme est donnée en Fig. I.1.

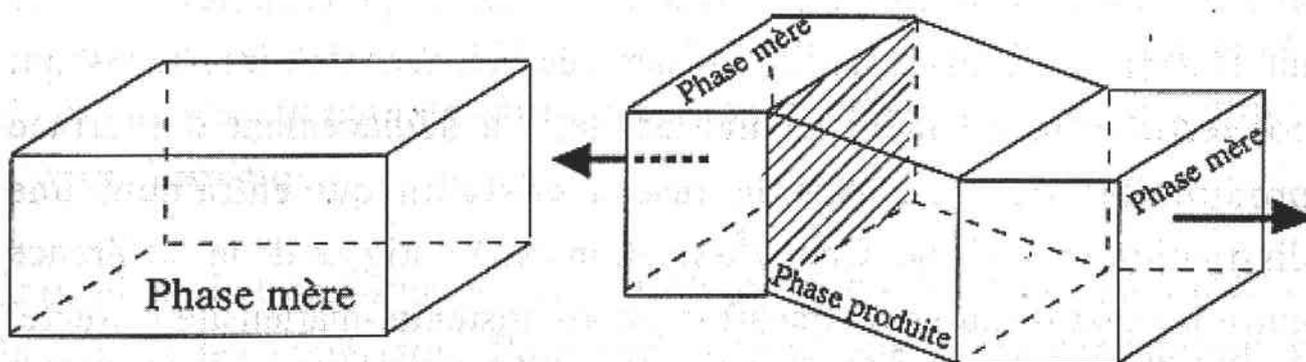


Fig. I.1 : Représentation schématique du changement de forme macroscopique associé à l'apparition d'une variante ou plaque de martensite.

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

La transformation martensitique correspond à une transformation réversible entre l'état AUSTENITIQUE (phase mère stable à haute température) et l'état MARTENSITIQUE (phase produit stable à basse température) (Bain, 1924).

I.2 Transformation martensitique

I.2.1 Introduction

La transformation martensitique désigne à l'origine la transformation de phase obtenue dans les alliages fer-carbone lors d'un refroidissement rapide après une phase d'austénisation à haute température. La phase stable à haute température se nomme austénite et la phase stable à basse température se nomme martensite (ce nom provient d'un métallurgiste allemand Adolf MARTENS, un des pionniers de la métallographie qui, le premier, observe et décrit cette microstructure dans les aciers trempés). On passe donc de l'austénite à la martensite à l'aide d'une transformation martensitique.

Aujourd'hui une transformation structurale est considérée comme martensitique si elle répond à plusieurs critères (Aeby-Gautier, 2001) :

- Le passage de la structure cristalline de la phase parente à celle de la nouvelle phase produite s'effectue par une déformation homogène de réseau. Ce mécanisme correspond à un déplacement coopératif de tous les atomes basé principalement mais non exclusivement sur un cisaillement qui amène les atomes de leurs positions primitives au sein du réseau initial en leurs nouvelles positions au sein du réseau produit de transformation.
- La transformation est effectuée sans diffusion.

On utilise également ce terme pour des métaux purs tels que Co, Ti, Cr, ..., pour certaines céramiques (Cohen et al., 1979), ainsi que pour certains polymères (Contardo, 1988). Cohen et al. ont proposé en 1979 une classification suivant les différentes caractéristiques de cette transformation (tableau I.1).

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

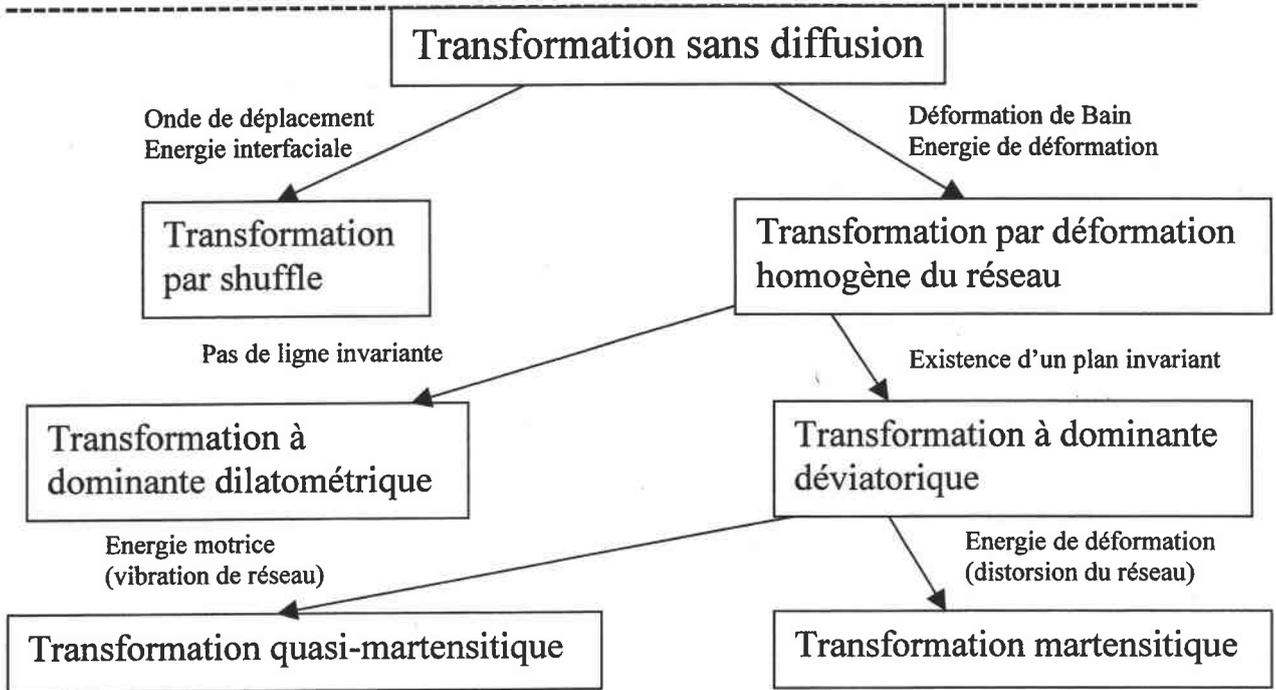


Tableau I.1 : Classification des transformations de phase displacives (Cohen et al.,1979).

I.2.2 Définition

La transformation martensitique est un changement de phase sans diffusion du premier ordre à l'état solide, produisant une déformation inélastique du réseau cristallin (déformation de BAIN) (Bain, 1924). Cette transformation s'accompagne d'une faible variation de volume dans les A.M.F. et se caractérise par un cisaillement important selon un plan et une direction bien définis. L'absence de diffusion rend la transformation martensitique quasiment instantanée (quelques 10^3 m/s). On observe une coexistence des phases austénitique et martensitique qui sont séparées par une interface nette. On est en présence d'une transformation displacive : déplacement atomique sur des distances inférieures aux distances interatomiques (pas de modification chimique). La transformation austénite-martensite est exothermique, tandis que la transformation inverse est endothermique (voir Fig. I.2).

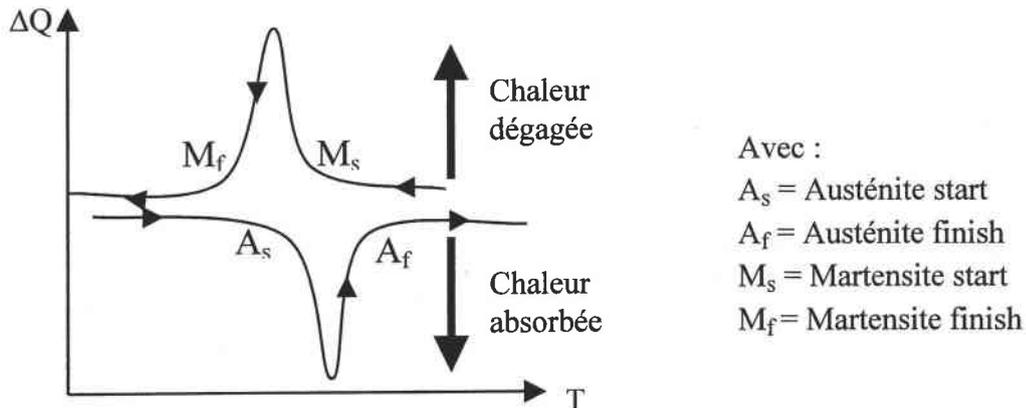


Fig. I.2 : Détermination de A_s , A_f , M_s et M_f par calorimétrie différentielle.

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

I.2.3 Températures de transformation

Le changement de phase austénite-martensite est caractérisé au refroidissement par une température M_s où la première plaquette de martensite se forme dans le réseau austénitique, et par une température M_f où la transformation est complète. L'échantillon est alors complètement martensitique.

Au réchauffement, la transformation est caractérisée par une température de début de transformation inverse A_s pour laquelle disparaît une première plaquette de martensite et une température de fin de transformation inverse A_f . (voir figure I.3)

Les valeurs M_s , M_f , A_s et A_f peuvent être mesurées par calorimétrie (mesure de la chaleur latente de transformation) ou par résistivité.

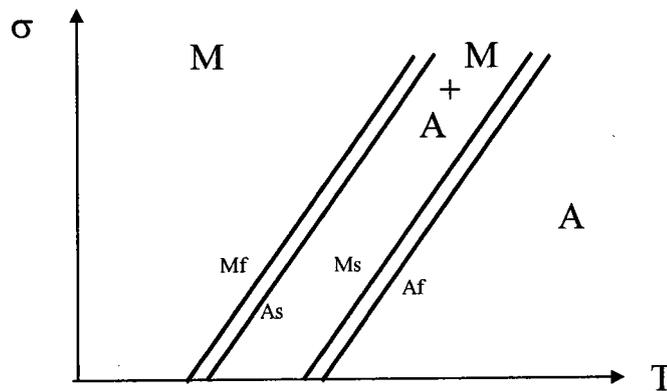


Fig. I.3 : Droites de début et de fin de transformation Martensite/Austénite.

Les droites M_f et A_s ainsi que les droites M_s et A_f ne coïncident pas. C'est à dire que la fin de la transformation austénite-martensite lors d'un chargement ou d'un refroidissement ne correspond pas au début de la transformation martensite-austénite lors du déchargement ou du réchauffement. Ceci donne donc naissance à une hystérésis plus ou moins importante suivant les valeurs de début et de fin de transformation.

I.2.4 Hystérésis

L'hystérésis H_T (resp. H_σ), d'une grande importance d'un point de vue technologique, est définie comme le décalage de température entre le chauffage et le refroidissement (resp. décalage de contrainte entre la charge et la décharge). Elle est en général mesurée pour 50%

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

de fraction transformée. Cette hystérésis se traduit par des décalages entre M_s et A_f et entre M_f et A_s (voir figure I.4 et I.5).

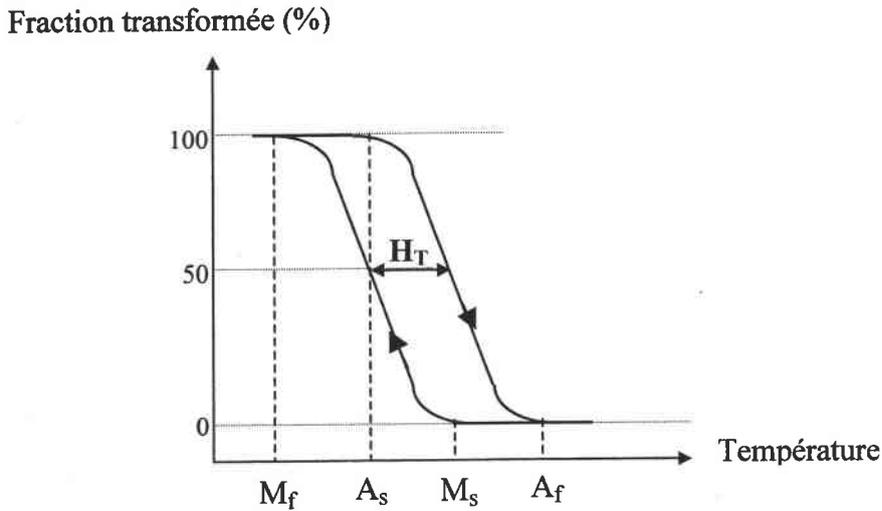


Fig. I.4. : Evolution de la fraction de martensite transformée en fonction de la température du matériau. L'hystérésis est mesurée pour 50% de transformation.

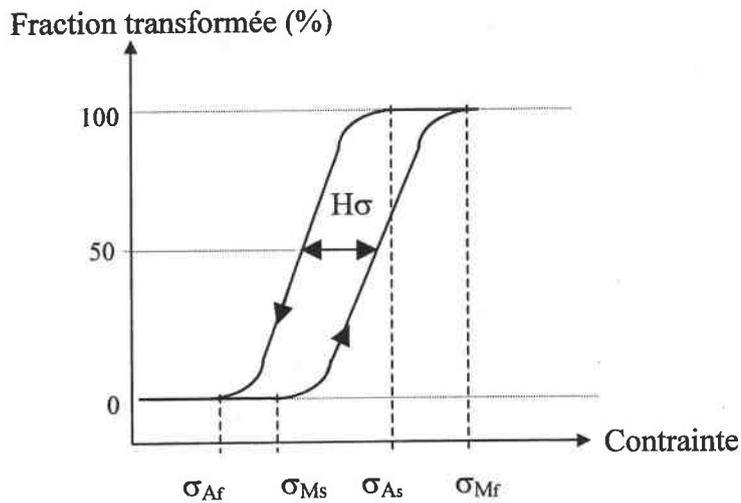


Fig. I.5. : Evolution de la fraction de martensite transformée en fonction de la contrainte du matériau. L'hystérésis est mesurée pour 50% de transformation.

I.2.5 Déformation de transformation

D'un point de vue phénoménologique et cristallographique, la déformation de transformation est le résultat de la composition d'une déformation inélastique du réseau cristallin appelée déformation de BAIN, du nom d'Edgar Bain qui, le premier, établit en 1924 la correspondance de réseau entre la phase austénitique (CFC) et la martensite (QC) dans les aciers (Bain, 1924), d'une transformation à réseau invariant (caractérisée par un glissement dans le cas des ferreux, par un maclage pour les alliages Nickel-Titane ou par des fautes d'empilement pour les alliages à base cuivre) et d'une rotation pour accoler la partie transformée (la martensite) à la partie non transformée (l'austénite). Cette transformation donne naissance à un plan d'accrolement (ou d'habitat) entre les deux phases (voir figure I.7). On peut observer sur la Fig. I.6 a, b et c l'évolution de la transformation martensitique (i.e. des plaquettes de martensite) dans un alliage à base fer lors d'un fluage anisotherme pour différentes valeurs de la contrainte. On observe, au cours du chargement, la naissance de nouvelles plaquettes, ainsi que la croissance des plaquettes déjà formées.



Fig. I.6 : Micrographie optique de la martensite formée lors du refroidissement d'un alliage Fe-25Ni-0.66C sous différentes contraintes : (a) 0 MPa, (b) 500 MPa, (c) 600 MPa. (Li, 1998).

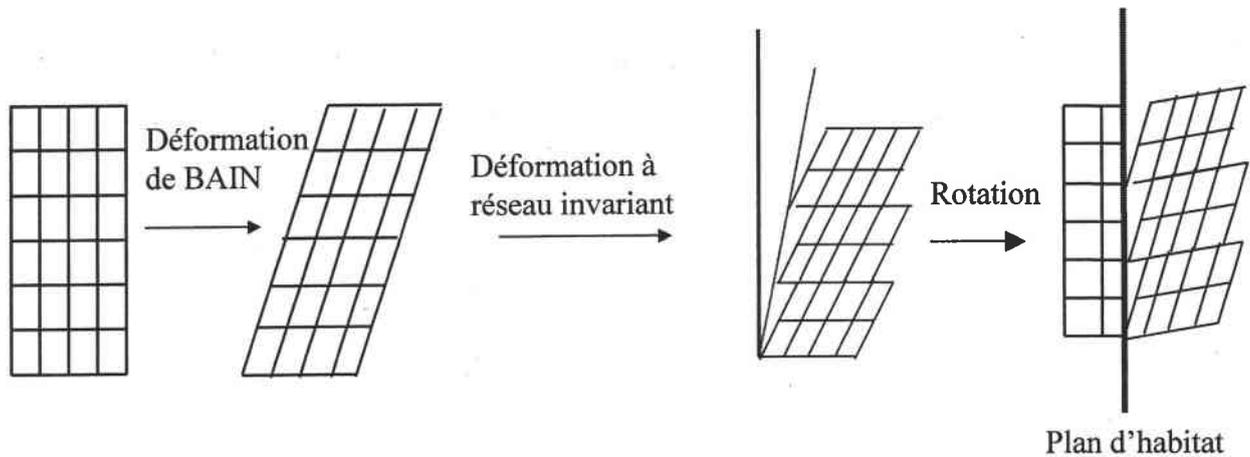


Fig. I.7 : Schéma de la décomposition d'une transformation martensitique en trois étapes, déformation de Bain, déformation à réseau invariant et rotation

La transformation d'un volume élémentaire d'austénite en martensite peut aussi se schématiser comme sur la figure I.8. La théorie de Weschler, Lieberman et Read (WLR) (Weschler et al., 1953) permet de déterminer, à partir des mesures cristallographiques effectuées sur les deux phases et la donnée de la déformation à réseau invariant, les caractéristiques de la transformation : on note \mathbf{n} la normale au plan d'habitat, \mathbf{m} la direction de transformation et g l'amplitude du glissement dans la direction \mathbf{m} .

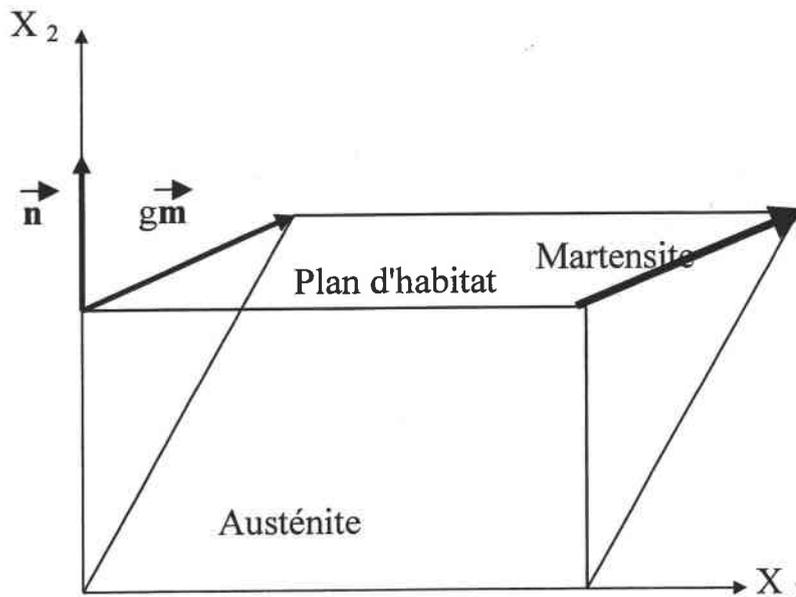


Fig. I.8 : Transformation d'un élément de volume d'austénite en martensite

La faible variation de volume, lors de cette transformation, est représentée par la non orthogonalité des vecteurs \mathbf{n} et \mathbf{m} .

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

Du fait de la symétrie cristalline de la phase mère, plusieurs plans d'habitat peuvent coexister dans un monocristal d'austénite en cours de transformation. L'ensemble des plaquettes ayant même plan d'habitat (ou plan d'accolement) de normale \mathbf{n} et même direction de transformation \mathbf{m} est appelé variante de martensite. Chaque variante possède donc une orientation (\mathbf{m}, \mathbf{n}) distincte : il en existe 24 dans les AMF base cuivre et dans les nickel-titane.

Le comportement des AMF est fortement affecté par la microstructure de la martensite. Par exemple, dans un monocristal, un essai de traction occasionne l'apparition d'une variante unique (les plaquettes formées ont la même orientation) qui entraîne une déformation réversible pouvant atteindre 10 % (Fig. I.9). Au contraire, dans un polycristal, plusieurs variantes apparaissent dans chaque grain, entraînant une déformation de transformation plus faible ne pouvant excéder 6 % (Fig. I.10).

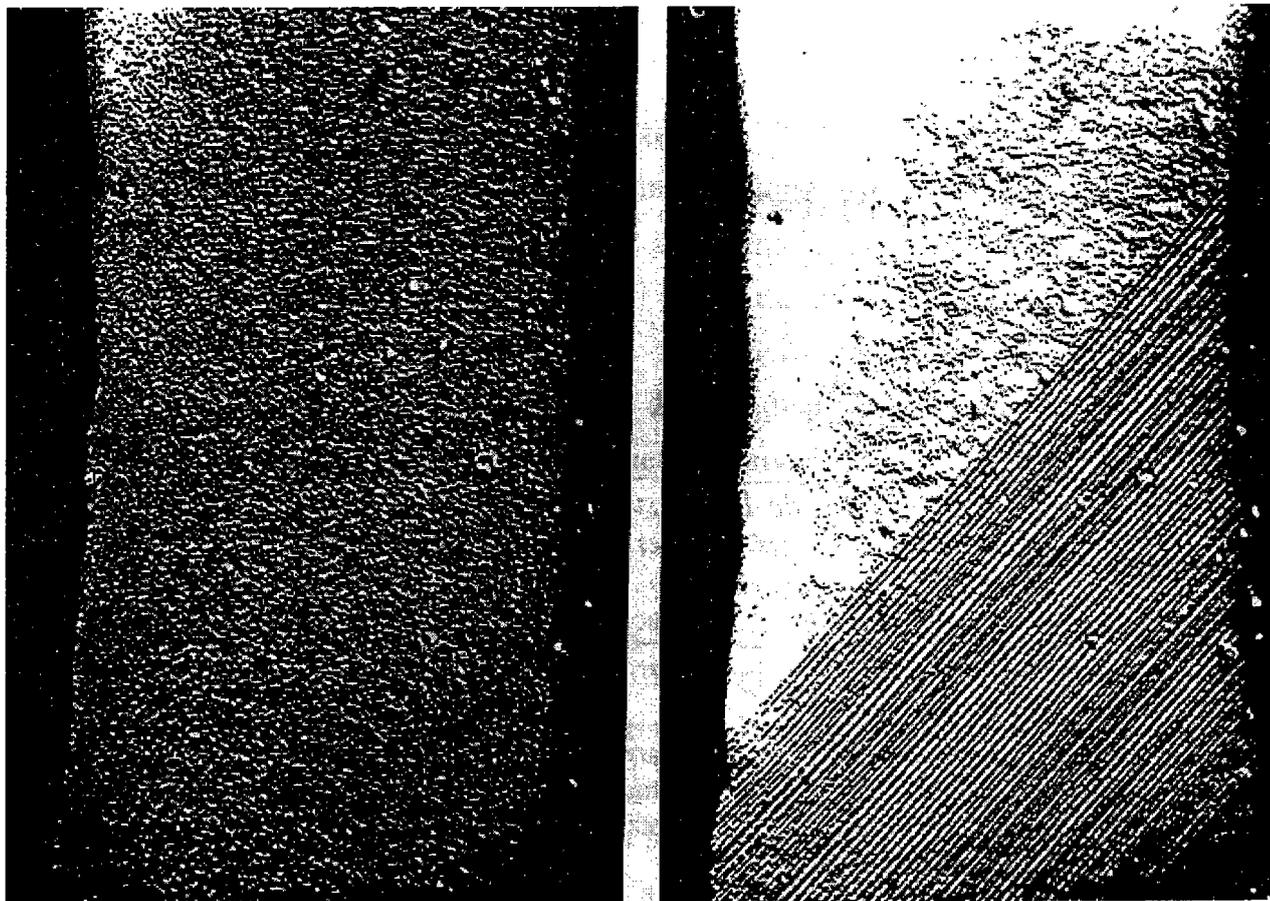


Fig. I.9 : Eprouvette monocristalline avant et après transformation partielle en martensite lors d'un essai de traction (d'après Dominiak S. - LPMM - Université de Metz).

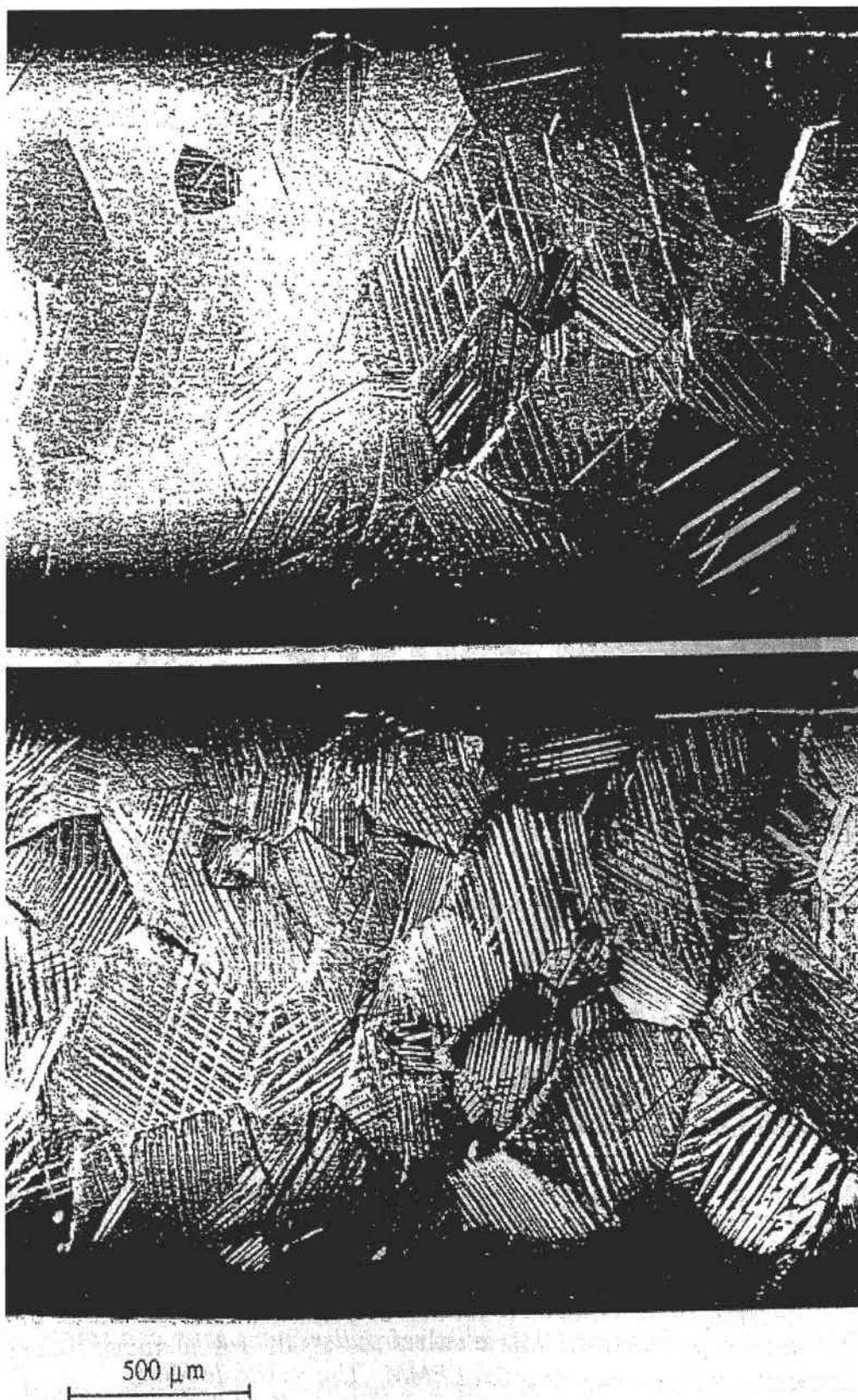


Fig. I.10 : Micrographie montrant l'évolution de la phase martensitique dans un polycristal CuAlBe (d'après A. Eberhardt - LPMM - Université de Metz).

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

On peut observer, à l'aide d'un microscope optique pourvu d'une polarisation, les différentes variantes de martensite formées dans un grain (Fig. I.11). Chaque variante a une couleur différente et la couleur noire correspond à l'austénite.



Fig. I.11 : Microscopie optique avec polarisation. On observe les différentes variantes formées dans un grain de CuAlBe.

I.2.6 Transformations thermoélastiques

L'existence d'une transformation martensitique dans un matériau n'est pas forcément synonyme d'effet mémoire de forme. Il faut, pour obtenir un effet mémoire, un faible écart des températures de transformation (M_s - M_f) et la réversibilité cristallographique de cette transformation. Sans ces conditions il n'y a pas d'effet mémoire de forme. Sur le diagramme d'état contrainte-température (Fig. I.12), on observe une compétition entre la formation de martensite par transformation martensitique et la plasticité classique. En dessous d'une température M_s^y le seuil de transformation est inférieur au seuil d'écoulement plastique de l'austénite, on formera donc de la martensite assistée par la contrainte appliquée. Au-dessus de la température M_s^y , c'est l'inverse, on plastifiera d'abord l'austénite.

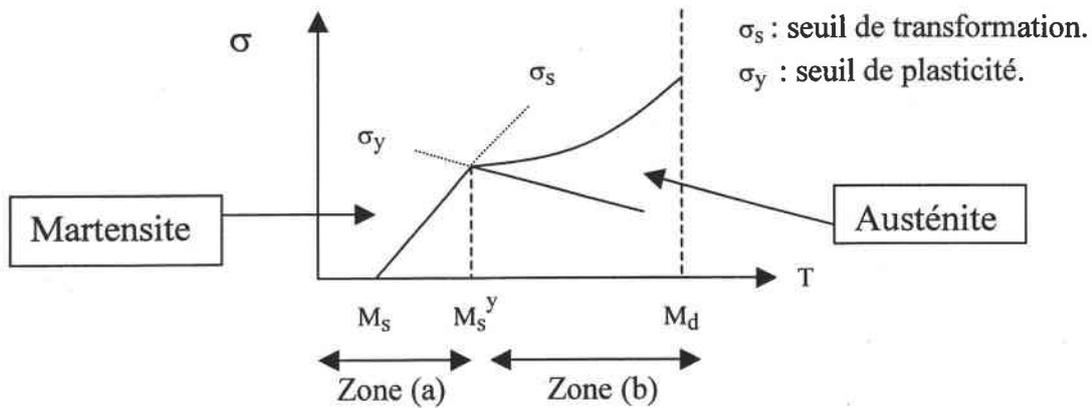


Fig. I.12 : Diagramme d'état contrainte-température.

Le diagramme d'état I.12 met en évidence plusieurs éléments :

- Deux modes de nucléation sont observés pour la transformation martensitique (nucléation assistée par les contraintes : zone (a), et nucléation assistée par les déformations : zone (b)).
- La limite d'écoulement plastique σ_y de l'austénite joue un rôle primordial dans cette distinction.
- Au-delà d'une température M_d , la martensite ne peut plus être formée.

On classe les transformations martensitiques en deux catégories : (Norme française, 1991)

- Les transformations martensitiques à forte hystérésis (zone (b)) (Figure I.12)

Ce type de transformation est aussi appelé transformation par « burst » (Fig. I.13) ; la plaquette de martensite croît très rapidement jusqu'à ce qu'elle soit bloquée par une autre plaquette, un précipité ou un joint de grain (Fig. I.14).

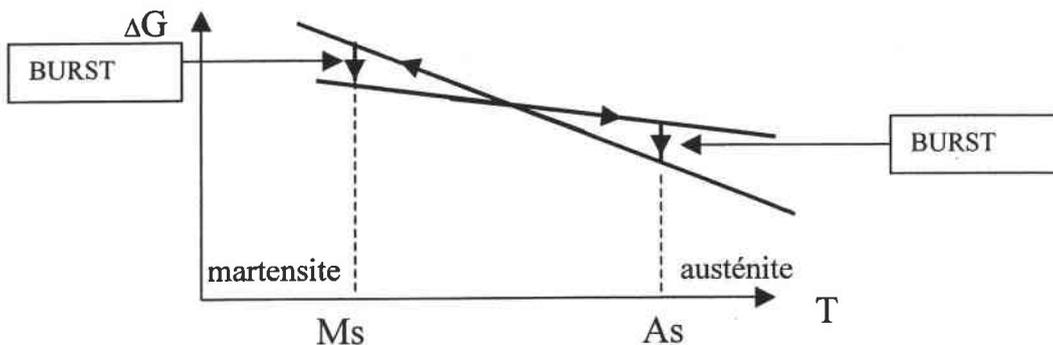


Fig. I.13 : Transformation martensitique par « burst »
 ΔG : Energie libre chimique

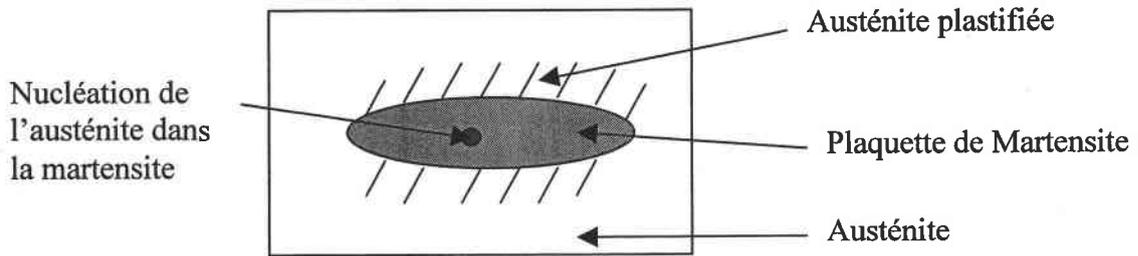


Fig. I.14 : Croissance d'une plaquette de martensite et nucléation de l'austénite.

De ce fait, même avec un refroidissement supplémentaire, la plaquette reste bloquée et lors de la transformation inverse les interfaces demeurent immobiles (l'austénite est plastifiée à l'interface). On constate alors une nucléation de la phase mère à l'intérieur des plaquettes de martensite.

Les alliages présentant une transformation martensitique à forte hystérésis présentent très peu voire aucun effet mémoire de forme car on obtient une déformation irréversible (il s'agit en général de la transformation martensitique dans les aciers).

- Les transformations martensitiques à faible hystérésis (Zone (a)) (Figure I.12)

Ce type de transformation est aussi appelé transformation martensitique thermoélastique. La croissance des plaquettes est directement liée à la variation de température ou de contrainte. Ce type de transformation est à l'origine de l'effet mémoire de forme.

La déformation de transformation est accommodée élastiquement ; la réversion de la martensite s'accompagne du retour à la forme initiale (cas des alliages à mémoire de forme).

Si un échantillon est à une température comprise entre M_s et M_f alors une faible variation de température, dans un sens ou dans l'autre, fera croître ou diminuer la (ou les) plaquette(s) de martensite formée(s).

Dans toute la suite de ce mémoire, les transformations martensitiques seront des transformations martensitiques de zone (a), car nous nous intéressons aux AMF et non aux aciers.

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

I.3 Comportement thermomécanique des A.M.F.

Un volume V monocristallin d'austénite est pris comme élément de référence dans l'état initial sous une contrainte σ et à une température T . Sous l'effet d'une variation de σ ou/et de T , un volume V_m de V se transforme en martensite.

La formation de cette variante de martensite produit un cisaillement égal à gR où g désigne l'amplitude (fixe) de la transformation et R le tenseur d'orientation de la variante (voir figure I.15). Le tenseur d'orientation R sera détaillé ultérieurement.

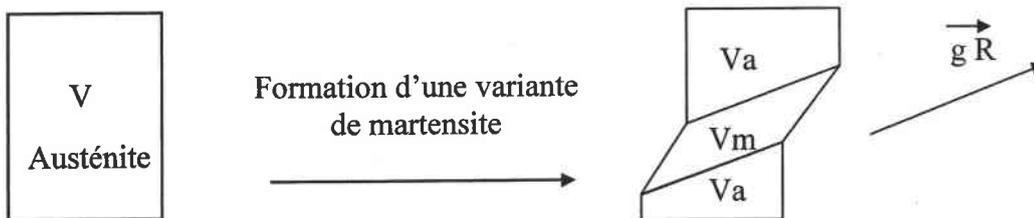


Fig. I.15 : Représentation 2D de la formation d'une variante de martensite.

Lors d'une transformation martensitique, les alliages à mémoire de forme peuvent se comporter de différentes manières. Il existe quatre classes de comportement dû aux différents trajets de chargement ainsi qu'aux différents traitements thermomécaniques (Patoor et al., 1990).

- L'effet superélastique
- L'effet super thermoélastique
- L'effet mémoire simple sens
- L'effet mémoire double sens

Ces différents chargements thermomécaniques peuvent être représentés sur le diagramme d'état (σ , T) en figure I.16. Pour des raisons de simplicité on ne tiendra pas compte de l'effet d'hystérésis, A_s et M_f sont confondus, de même pour A_f et M_s . On suppose donc dans cette partie que $A_s = M_f$ et que $A_f = M_s$.

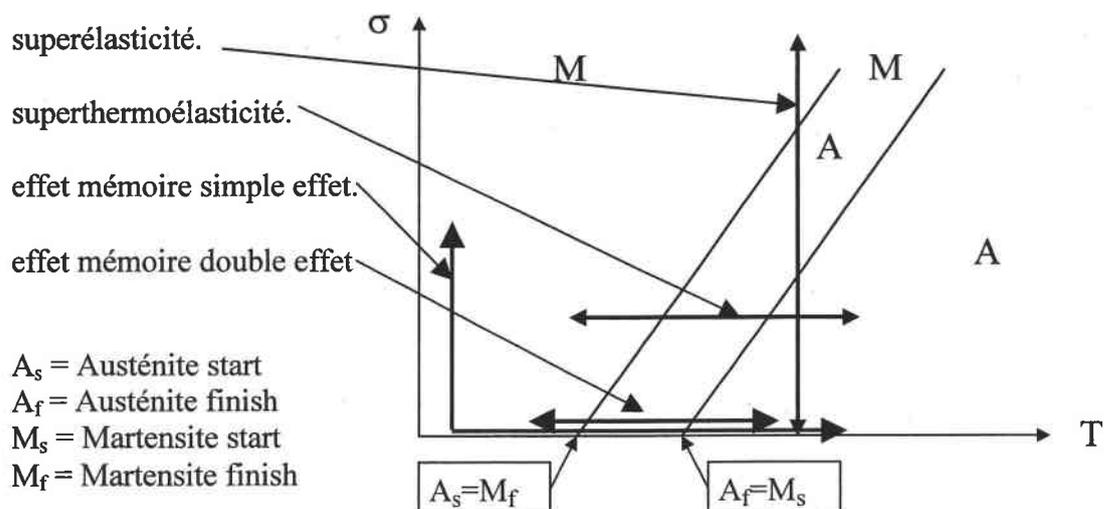


Fig. I.16 : Définition dans le diagramme d'état (σ, T) des chargements thermomécaniques associés aux différents comportements observés dans les alliages à mémoire de forme.

I.3.1 La superélasticité

Il s'agit d'un chargement à température constante. On démarre avec une contrainte nulle dans la zone austénitique et on augmente la contrainte pour traverser la zone biphasée et arriver dans la zone martensitique. La transformation commence (apparition de la première plaquette de martensite) lorsqu'on traverse la droite M_s et se termine (l'échantillon est complètement martensitique) lorsqu'on traverse la droite M_f .

Dans ce cas, la martensite formée est orientée par la contrainte appliquée à l'échantillon et seules les variantes de martensite bien orientées vont apparaître et croître.

Si on arrête le chargement entre les deux droites, on obtient un échantillon biphasé : matrice d'austénite avec des plaquettes de martensite.

S'il s'agit d'un monocristal, un essai de traction fait apparaître une variante unique, la mieux orientée, qui entraîne une déformation réversible pouvant atteindre 10 % (Fig. I.10). On peut observer l'influence de la température sur le comportement superélastique d'un AMF en Fig. I.17.

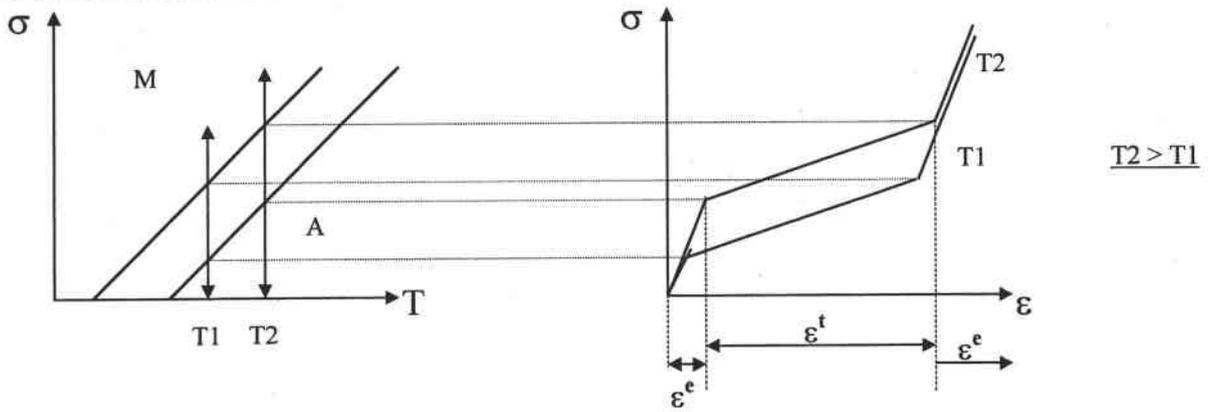


Fig. I.17 : Effet de la température sur le comportement superélastique.
L'hystérésis n'est pas prise en compte.

On observe plusieurs stades de déformation sur cette courbe :

- Le premier segment correspond au comportement élastique de l'austénite, il n'y a pas encore de martensite (on est en dessous de la droite M_s).
- Le deuxième segment correspond au comportement de transformation : l'austénite se transforme en martensite (on est dans la zone biphasée du diagramme (σ, T)).
- Le dernier segment correspond au comportement élastique de la martensite considéré, ici, comme identique à celui de l'austénite (on est au-dessus de la droite M_f).

I.3.2 La superthermoélasticité

Il s'agit d'un chargement thermique à contrainte constante ou fluage anisotherme. On démarre dans la zone austénitique et on refroidit. La transformation martensitique commence lorsqu'on traverse la droite M_s et se termine lorsqu'on traverse la droite M_f . On peut observer l'influence de la contrainte sur le comportement superthermoélastique en fig. I.18 .

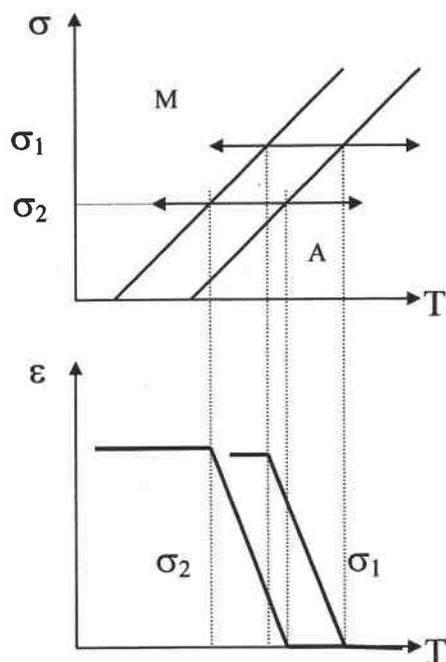


Fig. I.18 : Effet de la contrainte sur le comportement superthermoélastique. L'hystérésis est négligée

Comme pour l'effet superélastique, on observe plusieurs stades de déformation :

- Le premier segment correspond au comportement élastique (thermique) de l'austénite (négligeable), il n'y a pas encore de martensite (on est en dessous de la droite M_s).
- Le deuxième segment correspond au comportement de transformation : l'austénite se transforme en martensite (on est dans la zone biphasée du diagramme (σ, T)).
- Le dernier segment correspond au comportement élastique (thermique) de la martensite (on est au-dessus de la droite M_f). La dilatation thermique est supposée être identique dans l'austénite et dans la martensite, et donne des déformations négligeables devant la déformation de transformation.

I.3.3 L'effet mémoire simple sens

L'effet mémoire de forme résulte de l'application à un échantillon initialement à l'état austénitique, d'une séquence de chargement thermomécanique (Fig. I.19).

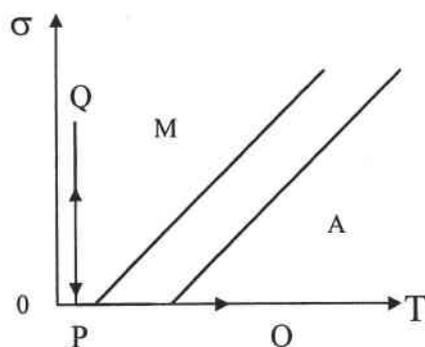
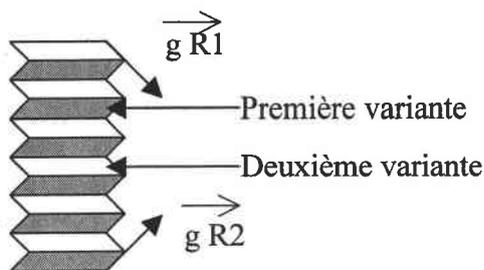


Fig. I.19 : L'effet mémoire est réalisé grâce au trajet OPQPO.

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

Trajet OP : Transformation martensitique complète (on traverse complètement la zone biphasée), mais sans déformation macroscopique (σ étant nulle, il n'y a pas d'orientation privilégiée pour les variantes). Plusieurs variantes sont activées, elles génèrent des déformations microscopiques qui se compensent pour donner une déformation macroscopique nulle : on dit que ces variantes sont auto-accommodantes (figure I.20).

Fig. I.20: Schématisation d'un groupe auto-accommodant constitué de 2 variantes.



Trajet PQP : On a une réorientation des variantes sous l'augmentation de la contrainte qui crée une déformation résiduelle à la décharge, on est en présence d'un état martensitique déformé par rapport à l'état austénitique initial.

Trajet PO : Ce trajet permet de visualiser l'effet mémoire simple sens. On a la transformation austénitique complète. La martensite a été "orientée" par la contrainte σ à l'étape précédente, la transformation austénitique provoque donc une déformation inverse de celle créée par σ et le corps recouvre donc sa forme initiale : c'est l'effet mémoire simple sens (car la recouvrance ne se fait que dans le sens PO).

Ces différentes étapes sont schématisées en figure I.21.

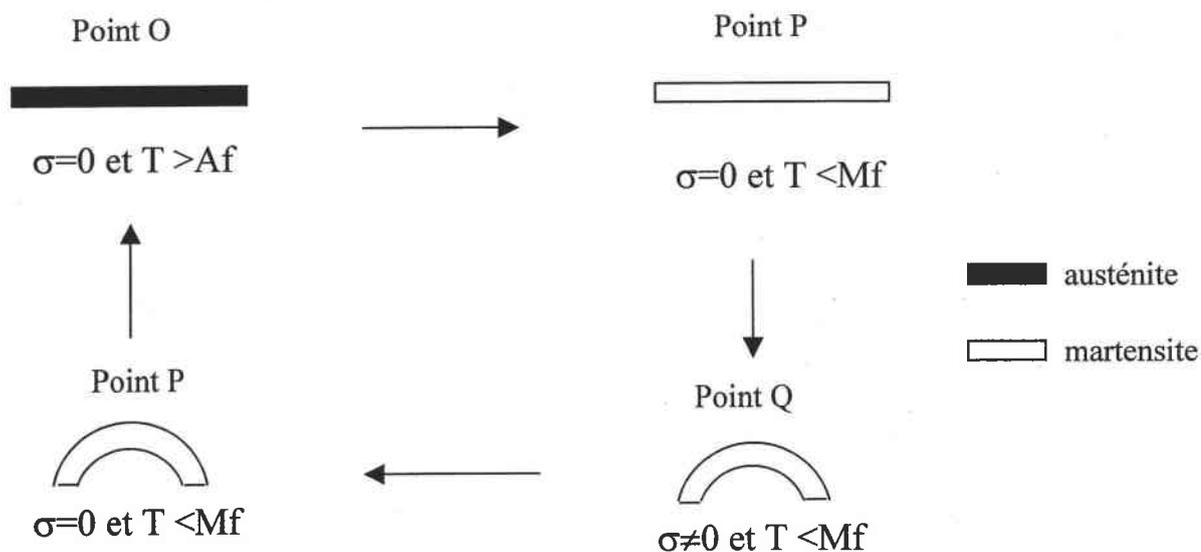


Fig. I.21 : Visualisation des différentes étapes de l'effet mémoire simple sens.

I.3.4 L'effet mémoire double sens:

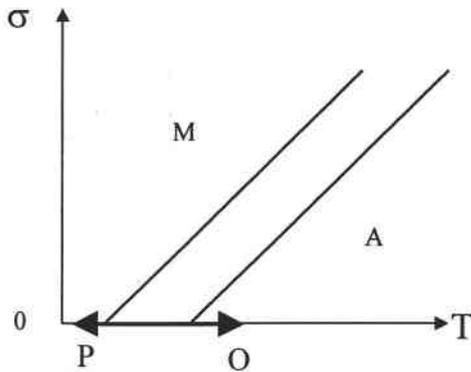


Fig. I.22 : Trajet où intervient l'effet mémoire double sens.

Pour obtenir l'effet mémoire double sens, il faut d'abord éduquer le matériau par une répétition de chargements thermomécaniques appelée éducation (Contardo, 1988) (Stalmans et al., 1995).

Le mécanisme élémentaire associé à l'éducation est la production d'une microstructure de défauts orientés (arrangement de dislocations, précipités, martensite résiduelle ...). Ces défauts orientés sont à l'origine de l'effet mémoire double sens. Ce traitement d'éducation provoque des effets secondaires :

- modification des températures de transformation
- évolution de la courbe contrainte-déformation
(contrainte de transformation, hystérésis, pente de transformation)
- diminution de la déformation macroscopique de transformation

Le solide possède, après éducation, 2 états stables (à haute et à basse température) et la recouvrance se fait dans les deux sens, de O à P et de P à O, à contrainte nulle (figure I.22).

Ces différentes étapes sont schématisées en figure I.23.

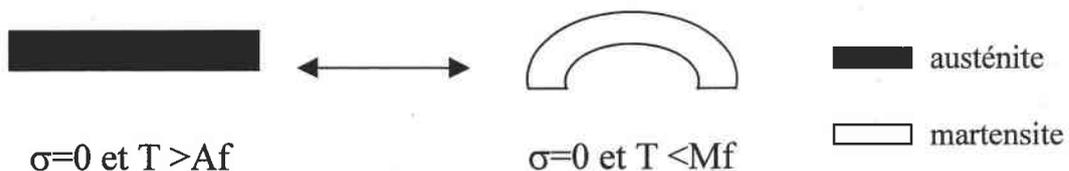


Fig. I.23 : Visualisation des différentes étapes de l'effet mémoire double sens.

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

I.4 Les différentes classes d'A.M.F.

Tous les alliages possédant une transformation martensitique ne sont pas des matériaux à mémoire de forme. Pour présenter un effet mémoire, il faut une transformation réversible et une faible hystérésis.

Les alliages à mémoire de forme ont été étudiés de façon importante à partir de 1962 avec la découverte des propriétés du Nickel-Titane dans les laboratoires de l'US NAVY.

Il existe de nombreux alliages à mémoire de forme et le tableau I.3 (Gillet, 1994) en présente un certain nombre.

Seuls quatre types d'alliage ont des applications industrielles :

- le Nickel-Titane (Ni-Ti)
- le Cuivre-Zinc-Aluminium (Cu-Zn-Al)
- le Cuivre-Aluminium-Nickel (Cu-Al-Ni)
- le Cuivre-Aluminium-Beryllium (Cu-Al-Be)

Les Ni-Ti ont l'avantage d'être biocompatibles, ce qui permet de les utiliser pour réaliser des implants dans le corps humain. Les cuivreux sont utilisés pour la simplicité de leur mise en oeuvre et leur faible coût.

Le tableau I.4 montre les différentes caractéristiques (Patoor et al., 1990) des principales classes d'alliages.

Alliage à base de fer	Fe-Pt Fe-Mn-Si
Alliage à base de cuivre	Cu-Zn Cu-Al-Ni Cu-Zn-Al Cu-Zn-Sn Cu-Zn-Si Cu-Al-Be
Alliage à base de nickel	Ni-Ti Ni-Al
Alliage à base de titane	Ti-Nb Ti-Pd-Ni

Tableau I.3 : Les différents alliages à mémoire de forme et leur composition

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

Propriétés physiques générales	Unité	alliage Cu-Zn-Al	alliage Cu-Al-Ni	alliage Ni-Ti
Masse volumique	kg/m ³	7800 à 8100	7100 à 7300	6500
Résistivité électrique	10 ⁻⁶ Ωm	0,08 à 0,13	0,1-0,15	0,6
Coefficient de dilatation thermique	10 ⁻⁶ °C ⁻¹	17	17	11
Conductivité thermique	W/m/°C	120	80	10
Module d'élasticité longitudinal	GPa	70-110	70-110	90-100
Propriétés liées à la transformation martensitique				
Chaleur de transformation	JKg ⁻¹	8000	8000	25000
Température de transformation	°C	-200 +130	-200 +200	-200 +120
Hystérésis	°C	10-20	20-30	20-40
Étalement	°C	15-30	15-30	20-40
Déformation maxi: effet mém. s.s. effet mém. d.s.	%	3 à 6 1 à 2	3 à 6 1 à 2	8 6
Température maxi	°C	140	250	300

Tableau I.4 : Caractéristiques et propriétés des A.M.F. courants.

I.5 Exemples d'applications industrielles

Les alliages à mémoire de forme trouvent des applications dans de nombreux domaines tels que l'automobile, les transports, l'aéronautique, le bâtiment, la robotique, l'électronique, l'agro-alimentaire, la lunetterie, le textile, le biomédical, l'électrotechnique,

Par exemple, l'effet superélastique (déformation importante et reprise de la forme initiale une fois la contrainte supprimée), on trouve plusieurs applications :

- Les branches de lunettes superélastiques.
- Les fils superélastiques en textile (sous-vêtements, chaussures, ...).
- Les fils dentaires (plus besoin d'aller régulièrement chez le dentiste pour resserrer son fil dentaire) (figure I.24).

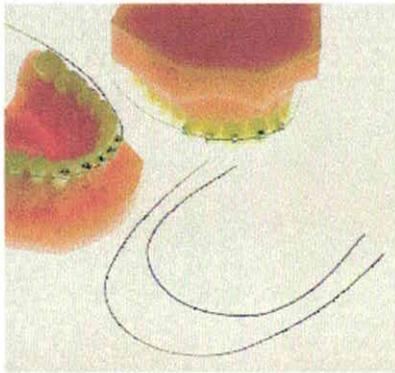


Fig. I.24 : Fils dentaire FlexMedics

- Les prothèses dentaires.
- Des stents permettant de dilater les artères obstruées (figure I.25).

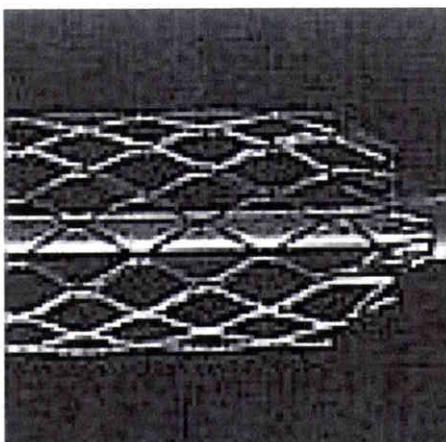


Fig. I.25 : Stent permettant de dilater les artères obstruées par des caillots ou par divers dépôts.

- Des antennes de téléphone portable (figure I.26).

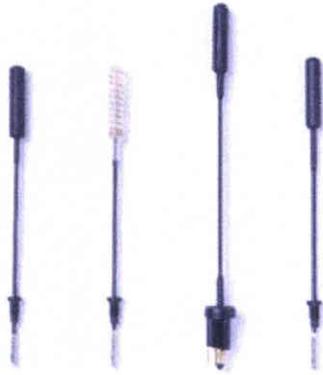


Fig. I.26 : Antennes de téléphone en AMF

On peut citer d'autres applications qui mettent en jeu les autres effets de ce type d'alliage :

- L'activateur thermique qui fonctionne par échange thermique avec le milieu extérieur afin de détecter une température de consigne et d'assurer son rôle d'actionneur (principe de la friteuse TEN (Patoor et al., 1990) : lorsque l'huile de la friteuse atteint 170°C l'actionneur thermique en A.M.F., qui est ici une lame, se déforme et laisse descendre le panier de frites dans l'huile).
- Compteur de cycle pour friteuse (figure I.27).

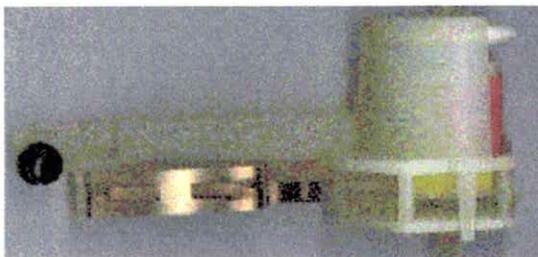


Fig. I.27 : Compteur de cycle pour friteuse.

- Le manchon d'étanchéité et de raccordement développé par la société RAYCHEM depuis 1969 : le diamètre intérieur du manchon en A.M.F. en phase austénitique est inférieur au diamètre du tube à raccorder. Ensuite le manchon est expansé en phase martensitique pour que son diamètre devienne supérieur à celui du tube à raccorder, on place alors facilement le manchon sur les deux tubes à raccorder et au chauffage celui-ci exerce un effort de serrage très important pour tenter de retrouver son diamètre initial (il s'agit d'un retour contraint).
- etc...

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

Le secteur biomédical est devenu l'un des domaines majeurs des applications de ces alliages (Moran, 1994). Les applications se divisent en deux grandes catégories : les implants (agrafe (Fig. I.28), stent (Fig. I.25), prothèse,...) qui utilisent en général les larges forces développées en retour contraint, et les instruments chirurgicaux (Minimal Access Surgery) qui utilisent plutôt l'effet superélastique. Dans ce secteur, seuls les alliages Nickel-Titane sont utilisés pour leur propriété de bio-compatibilité.

Exemple d'une agrafe en A.M.F. (Patoor et al., 1990)

Il s'agit de la mise en compression de la surface de réduction d'une fracture osseuse au moyen d'une agrafe en alliage à mémoire de forme (Fig. I.28a).

On place l'agrafe à basse température sur les deux parties de l'os fracturé. On a donc une grande déformation des agrafes (Fig. I.28b). A haute température (37°C), on a un changement de forme des agrafes assurant la mise en contact des deux parties osseuses (Fig. I.28c).

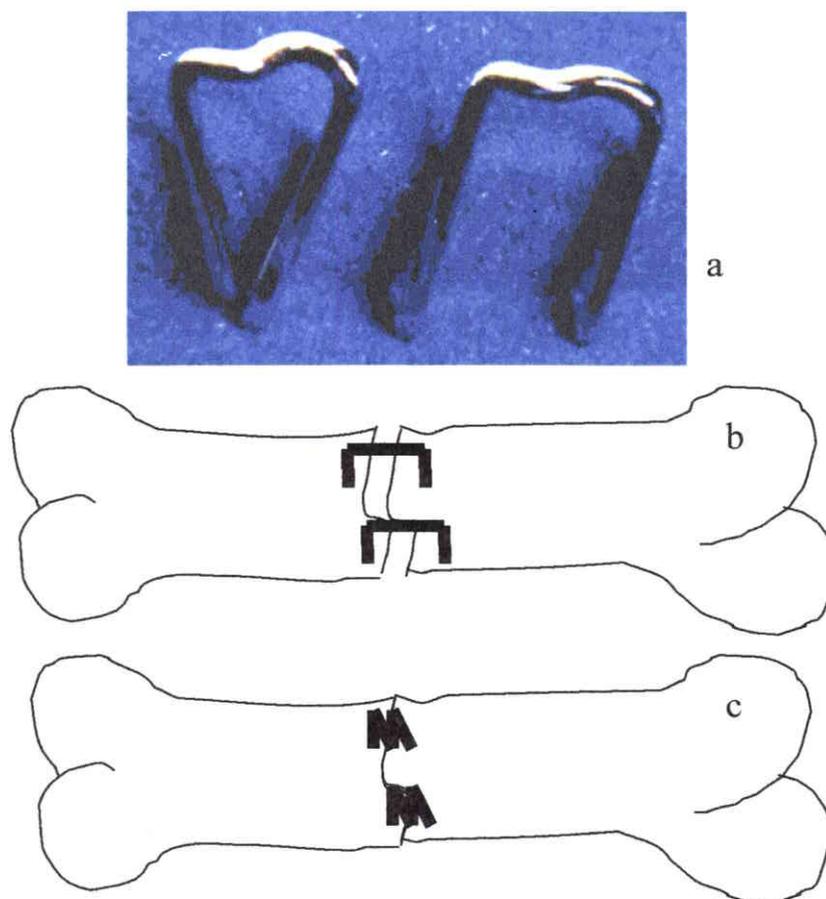


Fig. I.28 : a) agrafes d'ostéosynthèse en NiTi (NiTifrance.com). b) L'agrafe est à basse température et c) l'agrafe est à haute température (supérieure à 37°C)

CHAPITRE I : COMPORTEMENT ET APPLICATIONS DES A.M.F.

On utilise également des cylindres d'AMF dans les fusées pour rompre des assemblages boulonnés (figure I.29).

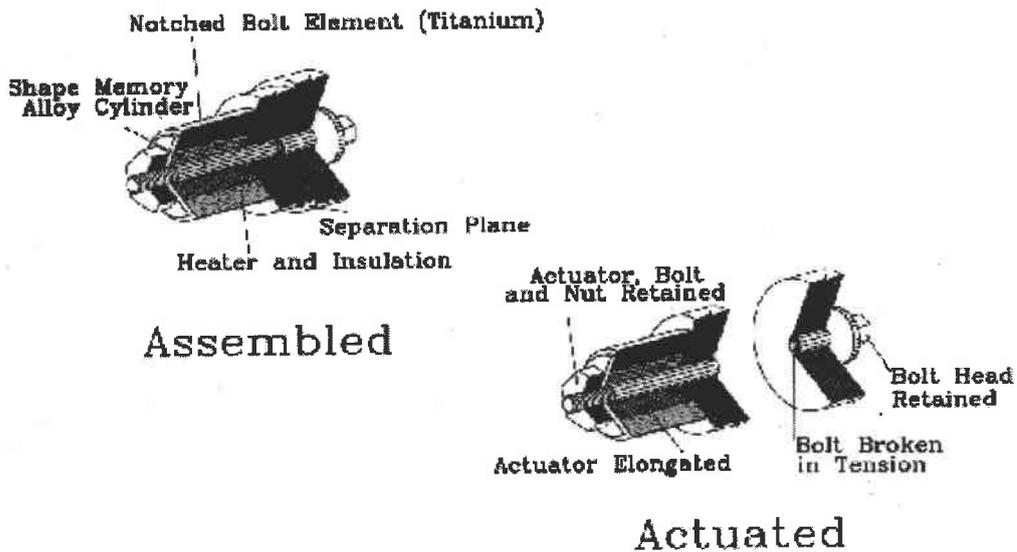


Fig. I.29 : Utilisation des AMF dans certaines fusées

I.6 Conclusion

Ce premier chapitre a présenté les principales caractéristiques de la transformation martensitique à l'origine de l'effet mémoire de forme. Les différents types de comportement observés dans ces alliages ont été commentés et plusieurs exemples d'applications industrielles ont été indiqués. Malgré le grand potentiel de ces alliages, leur succès industriel reste modeste. En effet, leur modélisation s'avère très complexe du fait du couplage entre la température et la contrainte.

La formation et l'évolution de la microstructure de la phase martensitique au cours du chargement jouent un rôle primordial dans le comportement macroscopique de ces alliages.

CHAPITRE II

COMPORTEMENT DES MONO ET DES POLYCRISTAUX

II.1 Introduction

La compréhension et la modélisation du comportement des AMF sont primordiales pour une utilisation optimum de ces matériaux dans les applications industrielles. De nombreuses études ont été réalisées ces dernières années par des « mécaniciens » et par des « physiciens », soit en mettant au point des modèles phénoménologiques, soit en analysant les mécanismes de la transformation martensitique.

Des études métallurgiques (Gobin et al., 1978) (Nishiyama, 1978) ont montré de manière semi-quantitative ou qualitative que les différents phénomènes ou effets des A.M.F. sont directement liés à la formation et au développement des différentes variantes de martensite. Si on se limite au cas de la transformation pure (absence de plasticité classique), les mécanismes élémentaires sont de deux types : formation réversible de variantes de martensite à partir de l'austénite et migration des interfaces entre les différentes variantes de martensite déjà formées avec modification des fractions volumiques correspondantes. Le comportement de ces alliages est donc très sensible à l'évolution des paramètres microstructuraux : variantes de martensite et déplacement d'interface. Il est très difficile de décrire les lois d'évolution de ces paramètres à l'échelle macroscopique, et les nombreuses approches qui adoptent ce point de vue (Tanaka et al., 1986), (Müller et al., 1991), (Raniecki et al., 1994), (Boyd et al., 1996), (Leclercq et al., 1996), (Bekker et al., 1997) doivent faire des hypothèses fortes et employer des identifications a priori pour surmonter ce problème. Les approches à transition d'échelle qui utilisent généralement une description phénoménologique du comportement à l'échelle mésoscopique sont plus proches des paramètres microstructuraux et bien adaptées pour la modélisation thermomécanique du comportement de ces matériaux. Depuis les premières études, vers la fin des années 80, utilisant les hypothèses de Reuss (Falk, 1989), le modèle de Taylor (Ono et al., 1988), l'approche de Mori Tanaka (Sun et al., 1993) ou l'approximation auto-cohérente (Patoor et al., 88), beaucoup de modèles basés sur des schémas de transition d'échelle ont été développés (Agouram et al., 1998), (Gall et al., 1999), (Bhattacharya, 1992), (Gao et al., 2000). La plupart de ces modèles emploient le concept de WLR (Wechsler et al., 1953) sur les variantes pour définir le domaine martensitique élémentaire. Le modèle de Bhattacharya est le seul qui emploie la déformation de Bain pour caractériser la transformation d'un domaine élémentaire martensitique. Dans les modèles utilisant les variantes de martensite, la détermination de l'énergie d'interaction entre deux variantes est un point crucial et négliger cette énergie mène à des résultats non réalistes : voir par exemple (Patoor et al., 1992).

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

Cette étude fait suite à une série de travaux sur la modélisation des alliages à mémoire de forme réalisée au Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM). Un premier modèle simplifié a vu le jour en 1986 (Patoor, 1986 et 1987). Il considérait une seule variante par grain et permettait d'obtenir des premiers résultats. Sur la base du modèle développé en plasticité par Lipinski (Lipinski, 1992), Bensalah (Bensalah, 1992) établit un modèle de comportement pour la transformation austénite-martensite en utilisant une approximation de type $[0\ 1\ 1]$ pour décrire l'orientation des variantes de martensite. El Amrani (El Amrani, 1994) utilise ensuite une orientation justifiée par des observations cristallographiques (de type $[2\ 11\ 12]$). Patoor (Patoor, 1995) inclut entre-temps les phénomènes d'hystérésis et de décharge (transformation inverse), ce qui permet d'aboutir à un modèle de comportement très performant pour le caractère superélastique (isotherme) des alliages à mémoire de forme. Ensuite D. Entemeyer (Entemeyer, 1996) a considéré la température comme variable de contrôle au même titre que la contrainte. Il caractérise le comportement d'un grain et utilise le modèle autocohérent pour connaître le comportement du polycristal. Cette approche sera succinctement développée au paragraphe suivant. Ce dernier modèle donne de bons résultats quant à l'effet superélastique mais reste limité pour le fluage anisotherme sous faible contrainte.

II.2 Approches phénoménologiques et approches par transition d'échelle

La modélisation du comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme a pour but de déterminer la réponse (souvent la déformation) à un chargement donné (température ou contrainte) la plus proche possible de la réalité.

L'élaboration de cette modélisation est rendue particulièrement difficile par le caractère non linéaire de la transformation martensitique et par la forte influence de l'état microstructural. Plusieurs démarches sont possibles.

Les approches phénoménologiques s'appuient sur une description macroscopique des phénomènes à modéliser. Cette méthode permet de traiter le milieu d'une manière homogène à l'aide de lois macroscopiques dans lesquelles les évolutions microstructurales sont représentées par des variables internes. Ces dernières sont identifiées à partir d'essais macroscopiques. Les méthodes découlant de cette approche sont très utilisées car elles donnent des résultats rapides et bien adaptés aux cas de chargements monotones et proportionnels. Ces modèles s'intègrent aisément dans les codes de calcul de structure. Cependant, dans le cas de chargements plus complexes, les paramètres du modèle deviennent

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

difficiles à obtenir par identification expérimentale. Ces modèles ne prennent pas compte explicitement de la microstructure. Par conséquent, il est difficile de prévoir dans quel sens joue la microstructure vis à vis de telle ou telle propriété mécanique globale.

Les approches dites micro-macro utilisent une transition d'échelle permettant de mieux prendre en compte l'état microstructural du matériau. Plusieurs approches existent, chacune étant optimale pour une microstructure donnée. Par exemple la méthode autocohérente est très performante pour des milieux présentant des microstructures très désordonnées (matériaux microhétérogènes tels que l'acier et ses alliages). Ce type de modèle micro-macro sera développé dans la suite.

II.2.1 Modèle de Leclercq et L'excellent (1996)

Le but de leur étude est de simuler le comportement thermodynamique global des AMF en utilisant le postulat de l'état local. Ils proposent un modèle où la déformation élastique, la température, la fraction volumique de martensite accommodée Z_T (il s'agit de la martensite formée par une variation de température) et la fraction volumique de martensite orientée Z_σ (il s'agit de la martensite formée par une variation de contrainte) sont prises comme variables internes.

Bien que d'un point de vue cristallographique, il n'y a aucune différence entre ces deux martensites, Leclercq et L'excellent considèrent que, contrairement à la martensite orientée, la martensite auto-accommodée ne produit pas de déformation de transformation macroscopique. Cette hypothèse de base du modèle est utilisée pour les différents comportements des AMF.

Comme dans la plupart des modèles, Leclercq et L'excellent (1996) ne prennent en compte que la déformation élastique et la déformation de transformation (la déformation plastique ainsi que la déformation thermique sont négligées). En utilisant l'hypothèse des petites perturbations, la déformation totale ε s'exprime comme :

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^tr \quad (\text{II.1})$$

L'hypothèse de base du modèle conduit à considérer trois phases : la phase austénitique (I), la phase martensitique auto-accommodée (II) et la phase martensitique orientée (III). Les

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

déformations élastiques sont supposées identiques dans ces trois phases et les déformations de transformation dans les phases (I) et (II) sont nulles.

$$\varepsilon_{(I)}^e = \varepsilon_{(II)}^e = \varepsilon_{(III)}^e = \varepsilon^e \quad (\text{II.2a})$$

$$\varepsilon_{(I)}^tr = \varepsilon_{(II)}^tr = 0 \quad \text{et} \quad \varepsilon_{(III)}^tr = \varepsilon^tr \quad (\text{II.2b})$$

Dans le cas où toute la martensite formée est de type (III) ($Z_T = 0$), Leclerc et Lexcellent utilisent la formulation proposée initialement par Raniecki et al. (1992).

$$\dot{\varepsilon}^tr = \frac{3}{2} \gamma \frac{\text{dev}\sigma}{\bar{\sigma}} \dot{z} \quad (\text{II.3})$$

Avec $\bar{\sigma}$ la contrainte équivalente au sens de Von Mises :

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} S_{ij} S_{ij}} \quad (S_{ij} : \text{partie déviatorique de } \sigma_{ij}) \quad (\text{II.4})$$

et γ représente la déformation uniaxiale pseudoélastique totale.

Le modèle Leclerc et Lexcellent généralise à un milieu à trois phases l'énergie libre de Gibbs Φ définie par Raniecki et al. (1992) pour un milieu biphasé austénite-martensite :

$$\Phi = (1-z)\Phi^1 + z_T \Phi^2 + z_\sigma \Phi^3 + \Delta\Phi \quad (\text{II.4b})$$

avec Φ^α ($\alpha=1, 2, 3$) l'énergie libre de la phase considérée et $\Delta\Phi$ l'énergie dite de configuration qui représente les interactions entre les différentes phases :

$$\Delta\Phi = z(1-z)\Phi_{it} + z_\sigma z_T \Phi_{it}^m \quad (\text{II.4c})$$

où Φ_{it} représente l'énergie d'interaction entre les phases I et II et entre les phases I et III, et où Φ_{it}^m représente l'énergie d'interaction entre les phases II et III.

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

Ce potentiel permet de définir les forces thermodynamiques Π_σ^f et Π_T^f qui sont associées aux variables internes z_σ et z_T . Les équations $\Pi_\sigma^f = 0$ et $\Pi_T^f = 0$ permettent de définir l'état d'équilibre du système. La résolution de ces équations conduit à une instabilité de l'équilibre (voir fig. II.1 et II.2) de manière analogue à celle obtenue dans le modèle développée par Huo et Müller (1993) dans le cas monocristallin.

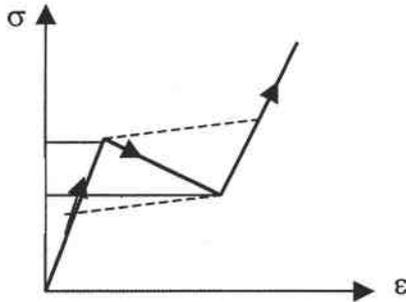


Fig. II.1: Etat d'équilibre pour le comportement superélastique.

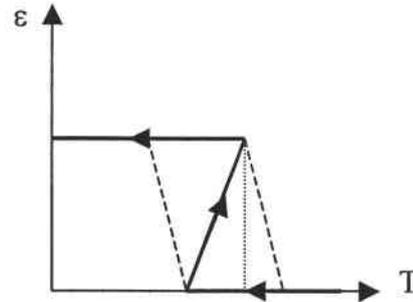


Fig. II.2 : Etat d'équilibre pour le fluage anisotherme.

Cette instabilité qui est en contradiction avec les observations expérimentales provient du terme en $z(1-z)$ utilisée dans l'énergie de configuration. Aucune énergie d'interaction n'est en effet associée à l'état martensitique pour $z=1$, négligeant ainsi l'influence des incompatibilités de déformation qui existent entre les variantes de martensite et entre les anciens grains d'austénite transformée en martensite.

En s'appuyant sur un concept développé par Rice (1971), Leclerc et Lexcellent, Ranieki et al. (1992) de même que Huo et Müller (1993) définissent l'hystérésis de la transformation à partir de cette instabilité de l'équilibre en introduisant des fonctions décrivant de façon phénoménologique les cinétiques d'évolutions des variables internes z_σ et z_T pour les transformations directes (austénite-martensite) et inverse (martensite-austénite). Ces fonctions font intervenir des paramètres identifiés à partir d'essais macroscopiques.

Leclercq et Lexcellent (1996) déterminent ensuite les paramètres thermodynamiques de leur modèle et ajustent les paramètres cinétiques afin de simuler pour un alliage donné l'effet superélastique et le fluage anisotherme.

Ce modèle permet de représenter un grand nombre de comportements spécifiques des AMF, tout en gardant un formalisme relativement simple. Cette formulation est satisfaisante pour les chargement proportionnels et est bien adaptée à une implémentation dans les codes de calcul de structure.

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

II.2.2 Modèle de Huang, Gao et Brinson (2000)

Huang et Brinson (1998) ont développé un modèle "multivariante" basé sur les différentes structures des Groupes Auto-Accommodants (GAA) qui se forment autour des pôles $\{011\}$ et $\{001\}$. Toutes les variantes sont identifiées à partir des données cristallographiques : normale au plan d'accolement et direction de transformation.

Ce modèle utilise une approche thermodynamique et micromécanique pour développer les équations qui serviront à la modélisation du comportement thermomécanique.

Cette approche "multivariante" est la seule qui prend en compte la morphologie des groupes de variantes auto-accommodantes. Malheureusement elle n'utilise que des inclusions sphériques pour représenter les variantes de martensite, ce qui a pour effet de limiter l'exploitation de ce modèle. Très récemment, Gao et al. (2000) ont examiné l'influence de la forme des inclusions sur les résultats obtenus : par exemple la morphologie "diamant" d'un GAA décrit par Saburi et Wayman (1979) est plus proche du penny-shape que de la sphère (voir Fig. II.3).

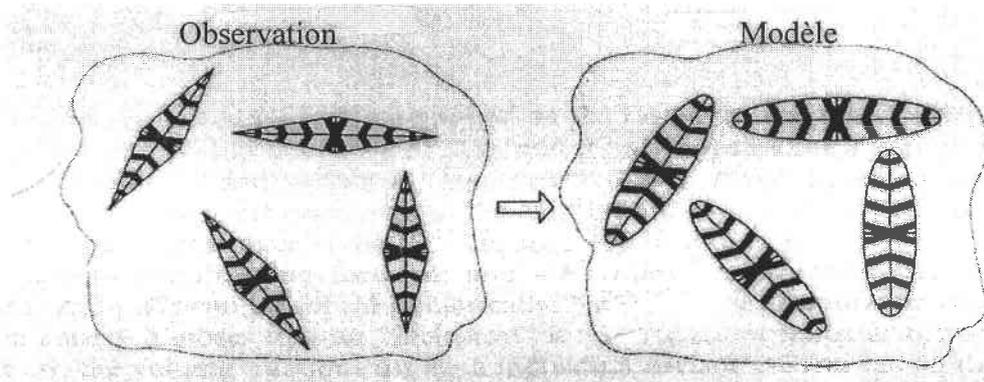


Fig. II.3 : représentation des groupes de variantes : chaque inclusion est composée de variantes compatibles qui croissent ensemble en minimisant l'énergie de leur formation (Gao et al, 2000).

Ce modèle utilise une expression de l'énergie libre de Gibbs, Ψ , qui sera explicitée plus loin dans ce chapitre.

$$\Psi = -B(T - T_0) \sum_n f^n + \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \sum_{ij} g \sum_n R_{ij}^n f^n + \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij} \epsilon_{ij}^r dV \quad (\text{II.5})$$

Le point essentiel dans cette démarche réside dans le fait que le calcul de l'énergie d'interaction est approximé par la somme de l'énergie d'interaction de chaque GAA :

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} dV = -\frac{1}{2} \sum_g \bar{\sigma}_{ij}^g \bar{\varepsilon}_{ij}^g \bar{f}^g \quad (\text{II.6})$$

où $\bar{\sigma}_{ij}^g$, $\bar{\varepsilon}_{ij}^g$ et \bar{f}^g sont respectivement la contrainte moyenne définie sur un groupe g , la déformation de transformation moyenne de ce groupe et la fraction volumique moyenne de martensite pour le groupe (rappelons que dans ce cas un groupe est composé de 4 variantes compatibles). L'équation (II.6) s'écrit :

$$W_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_g \bar{\varepsilon}_{ij}^g (\bar{\sigma}_{ij}^g - \sum_h \bar{f}^h \hat{\sigma}_{ij}^h) \bar{f}^g \quad (\text{II.7})$$

avec :

$$\bar{\sigma}_{ij}^g = C_{ijkl} (S_{klmn}^g \bar{\varepsilon}_{mn}^g - \bar{\varepsilon}_{kl}^g) \quad (\text{II.8})$$

où S^g est le tenseur d'Eshelby du groupe g .

L'incrément de dissipation est égal à :

$$d\Psi|_{\Sigma_{ij}, T} = dW^d \geq 0 \quad (\text{II.9})$$

Le système d'équations obtenu à partir de l'équation (II.5) et (II.9) est :

$$F^d \dot{f} = F_{\text{ext}} + F_{\text{int}} + F_{\text{wall}} - F_{\text{fric}} \quad (\text{II.10})$$

Où F_{int} , F_{ext} , F_{wall} et F_{fric} représentent respectivement la force motrice externe, la force d'interaction, la force appliquée aux frontières et une force de friction constante qui change de signe à la décharge. Ce système se résout numériquement.

Pour obtenir la déformation de transformation de chaque variante, on utilise les paramètres cristallographiques classiques définis au chapitre précédent :

$$\varepsilon_{ij}^r = \frac{1}{2}g(n_i m_j + n_j m_i) \quad (\text{II.11})$$

Contrairement à la première version de ce modèle (avec des inclusions sphériques) où la contrainte critique était surévaluée on a maintenant une nette diminution de cette surévaluation avec l'utilisation de penny-shape pour représenter les inclusions (voir Fig. II.4).

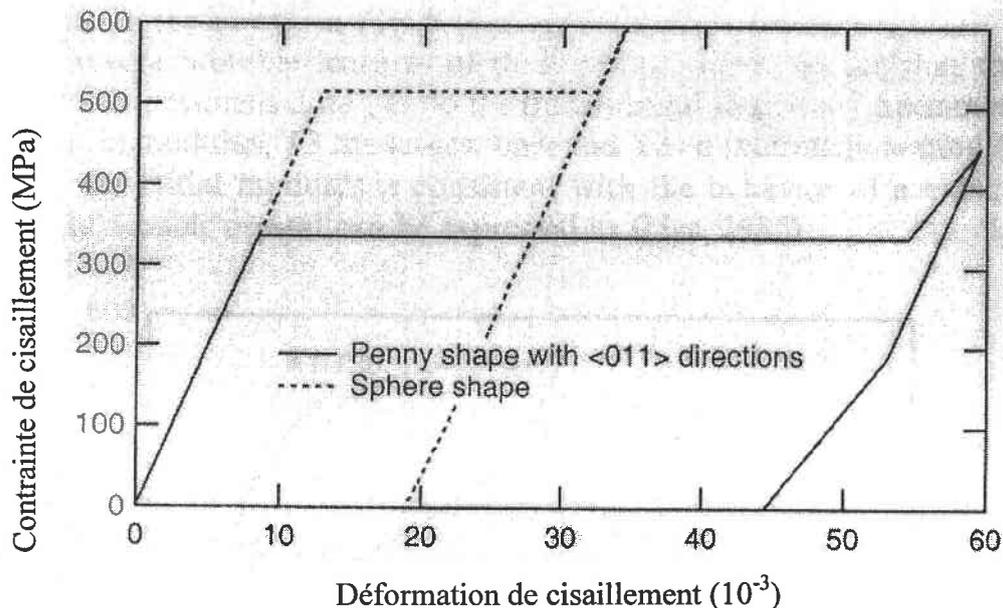


Fig. II.4 : Comparaison des courbes contrainte-déformation de l'effet mémoire de forme dans le cas où les variantes sont symbolisées par des inclusions sphériques ou par des inclusions de forme penny-shape (Gao et al., 2000).

Tous les résultats obtenus par Gao et al. (2000) montrent qu'une meilleure prise en compte de la structure cristallographique améliore fortement les résultats. Pour les alliages NiTi des résultats moins convaincants ont été obtenus. Ce problème provient de la morphologie typiquement triangulaire des GAA dans les NiTi, beaucoup plus complexe que la morphologie des GAA dans les alliages à base cuivre. Ce modèle est en pleine maturation et sera sûrement encore amélioré.

II.2.3 Modèle autocohérent

Le principe de cette approche repose sur le fait qu'un matériau hétérogène est constitué d'un nombre important de grains ayant un comportement spécifique. Il est donc permis de penser qu'en connaissant le comportement des grains ainsi que les textures cristallographiques et

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

morphologiques, cette méthode de transition d'échelle permettra de calculer d'une manière déterministe le comportement global du matériau. Cependant, la méthode ne recourt pas à une description statistique et systématique de la structure hétérogène du matériau. Elle est fondée sur une hypothèse implicite de distribution qui est celle du désordre parfait (Kröner, 1978). En conséquence, elle requiert, une double condition de macrohomogénéité et de microhétérogénéité (voir fig. II.5).

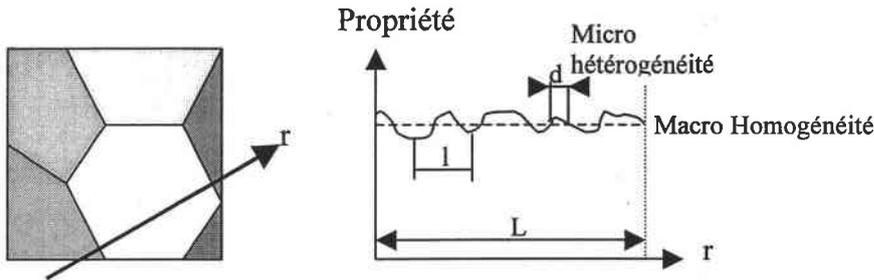


Fig. II.5 : Représentation schématique des conditions de macrohomogénéité et de microhétérogénéité (d longueur des micro-hétérogénéités dans les grains, l longueur des macro-hétérogénéités dans le polycristal et L longueur du polycristal) : $d \ll l$ et $l \ll L$.

Cette méthode est particulièrement adaptée à l'étude de la structure polycristalline de l'acier, des alliages courants et des alliages à mémoire de forme.

On cherche à représenter un agrégat hétérogène que constitue un alliage polycristallin par un matériau homogène équivalent de même comportement (inconnu). Nous sommes alors amenés à traiter le problème de manière simplifiée grâce à la méthode autocohérente à un site : on assimile les interactions mécaniques, entre chaque élément de l'agrégat et l'ensemble de tous les autres, aux interactions entre cet élément et un milieu homogène équivalent par lequel on cherche à représenter le milieu hétérogène. Une représentation schématique de cette homogénéisation est donnée en figure II.6.

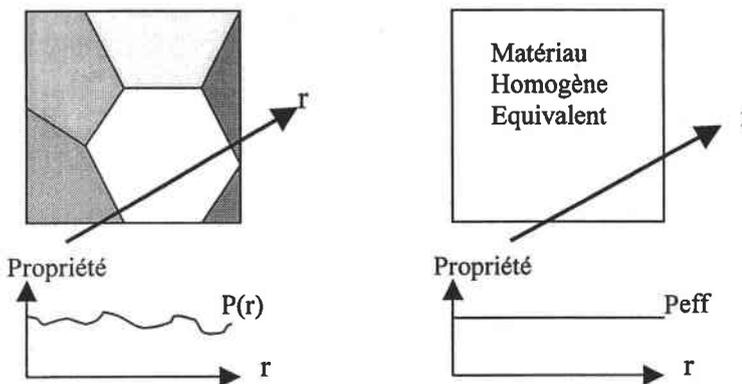


Fig. II.6 : Homogénéisation du polycristal.

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

En fait, on isole un élément (un grain) et on remplace le milieu granulaire en l'entourant d'un milieu homogène de comportement inconnu mais équivalent à celui du milieu réel (le MHE). Ce problème se ramène alors à celui de l'interaction entre une inclusion et une matrice infinie, bien connu des mécaniciens, Eshelby l'ayant traité en 1961 (Eshelby, 1961). Un problème à n grains peut donc être remplacé par n problèmes à un grain (voir fig. II.7). Il suffit, pour identifier le comportement du MHE, de relier les variables globales (celles du polycristal) aux variables locales (celles des grains) par l'intermédiaire de relations de localisation. Ces relations seront explicitées plus loin dans ce travail, mais toutes informations complémentaires concernant ces relations pour différents comportements peuvent être obtenues dans les articles suivants : (Kröner, 1958 et 1961), (Hill, 1965) et (Berveiller et Zaoui, 1979).

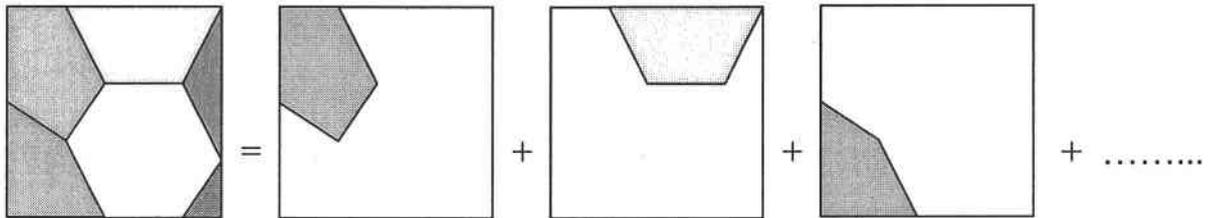


Fig. II.7 : Décomposition d'un problème à n grains par la méthode autocohérente à 1 site.

Le schéma numérique d'une telle méthode est plus lourd mais plus fiable que celui des approches phénoménologiques. Il peut servir de base pour développer un modèle analytique destiné à être introduit dans un code de calcul de structure (Gillet, 1995) (Gillet et al., 1998).

De nouveaux modèles autocohérents dits à double transition d'échelle ont été développés (Lemoine, 1995) (Muller, 1994). Ces approches décrivent plus finement les phénomènes liés aux dislocations et à leur mouvement (formation de cellules de dislocation) pour la plasticité.

Finalement, la méthode autocohérente se caractérise par son adaptabilité à une grande variété de problèmes de mécanique des matériaux hétérogènes. Sa principale limitation est liée à l'abandon de toute description de la répartition spatiale des grains, ceci est dû au fait que l'on assimile l'environnement de chaque inclusion à un milieu homogène infini.

Dans la suite, pour décrire le comportement du milieu homogène équivalent, nous expliciterons le comportement du monocristal (grain) et présenterons la transition d'échelle permettant le passage à l'échelle macroscopique.

Le modèle autocohérent sera employé pour la modélisation du fluage anisotherme sous faible contrainte des polycristaux, à partir du comportement du monocristal. C'est pourquoi nous

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

décrivons dans les paragraphes suivants le comportement du monocristal, du polycristal, ainsi que toutes les équations nécessaires à la modélisation.

II.3 Loi de comportement du monocristal

II.3.1 Déformation de transformation (Patoor et al.,1996)

Dans le cadre de l'approximation des petites perturbations, le champ total de déformation locale s'obtient par addition de contributions d'origines physiques différentes.

Considérons un monocristal d'austénite de volume initial V . A l'instant t , une partie V_m de ce volume est transformée en martensite. La déformation totale moyenne E du volume V est égale à la moyenne volumique des déformations totales locales.

$$E_{ij} = \frac{1}{V} \int_{V_a} \varepsilon_{ij}^a(\mathbf{r}) dV + \frac{1}{V} \int_{V_m} \varepsilon_{ij}^m(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.12})$$

avec:

$\varepsilon^a(\mathbf{r})$: déformation totale locale dans l'austénite

$\varepsilon^m(\mathbf{r})$: déformation totale locale dans la martensite

$$\varepsilon^a(\mathbf{r}) = \varepsilon^{ea}(\mathbf{r}) + \varepsilon^{tha}(\mathbf{r})$$

$$\varepsilon^m(\mathbf{r}) = \varepsilon^{em}(\mathbf{r}) + \varepsilon^{thm}(\mathbf{r}) + \varepsilon^t(\mathbf{r})$$

ε^{ea} : déformation élastique dans l'austénite

ε^{tha} : déformation thermique dans l'austénite

ε^{em} : déformation élastique dans la martensite

ε^{thm} : déformation thermique dans la martensite

avec:

$\varepsilon^t(\mathbf{r})$ déformation intrinsèque associée au changement de phase et à la variation de la fraction volumique des constituants.

On considère le même comportement élastique, supposé isotrope linéaire, au niveau de l'austénite et de la martensite. Il en est de même pour le comportement thermique. D'où :

$$E_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}^e(\mathbf{r}) dV + \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}^{th}(\mathbf{r}) dV + \frac{1}{V} \int_{V_m} \varepsilon_{ij}^t(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.13})$$

où:

$$\begin{aligned} \varepsilon^e(\mathbf{r}) &= \varepsilon^{ca}(\mathbf{r}) + \varepsilon^{cm}(\mathbf{r}) \\ \varepsilon^{th}(\mathbf{r}) &= \varepsilon^{tha}(\mathbf{r}) + \varepsilon^{thm}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

$$E_{ij}^T = \frac{1}{V} \int_{V_m} \varepsilon_{ij}^t(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.14})$$

Donc
$$E = E^e + E^{th} + E^T \quad (\text{II.15})$$

Avec E^T : la déformation macroscopique de transformation.

Dans la suite on négligera, pendant la phase de transformation, la déformation élastique et la déformation thermique qui sont très faibles par rapport à la déformation de transformation. La déformation a donc pour origine la déformation intrinsèque ε^t associée au changement de phase et à la variation de la fraction volumique des constituants.

On transforme la relation (II.14) en considérant des plaquettes de martensite de volume V^n :

$$E_{ij}^T = \frac{1}{V} \int_V \sum_n \varepsilon_{ij}^n \theta^n(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.16})$$

avec : $\theta^n(\mathbf{r}) = 1$ si $\mathbf{r} \in V^n$
 $\theta^n(\mathbf{r}) = 0$ si $\mathbf{r} \notin V^n$

La déformation étant constante sur le volume V^n , il vient :

$$E_{ij}^T = \frac{1}{V} \sum_n \varepsilon_{ij}^n \int_{V^n} \theta^n(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.17})$$

On considère la propriété suivante :

$$\int_{V^n} \theta^n(\mathbf{r}) dV = V^n \quad (\text{II.18})$$

Ce qui nous donne :

$$E_{ij}^T = \sum_n \varepsilon_{ij}^n \frac{V^n}{V} \quad (\text{II.19})$$

Or $\frac{V^n}{V} = f^n$ la fraction volumique de la variante n

d'où la cinétique de la transformation est définie par la relation suivante :

$$E_{ij}^T = \sum_n \varepsilon_{ij}^n f^n \quad (\text{II.20})$$

La déformation intrinsèque ε^n associée à la formation de la variante n est définie par la partie symétrique du gradient du déplacement U^{AM} . Les coordonnées U_i^t du déplacement d'un point P de coordonnées x_i s'obtiennent par :

$$U_i^T = g \ x_i \ n_j \ m_i \quad (\text{II.21})$$

Ce qui nous donne pour ε^n :

$$\varepsilon_{ij}^n = \frac{1}{2} g(n_i \ m_j + n_j \ m_i) = R_{ij}^n \ g \quad (\text{II.22})$$

où R^n est le tenseur d'orientation de la variante n

Cette approche permet de rendre compte d'une manière simple de la déformabilité des alliages à mémoire de forme. Dans un monocristal monovariant, une variation \dot{f} de la fraction volumique entraîne une variation $\dot{\varepsilon}^t$ de la déformation de transformation, définie par :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^t = \varepsilon_{ij}^n \dot{f}^n = g R_{ij}^n \dot{f}^n \quad (\text{II.23})$$

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

II.3.2 Aspect thermodynamique (Patoor et Berveiller.,1997)

L'utilisation de la thermodynamique permet de définir les conditions thermomécaniques d'existence de la transformation austénite-martensite (ou de la réorientation des variantes). Elle permet également de relier la variation de déformation globale aux évolutions de température et de contrainte.

Le potentiel thermodynamique associé aux transformations martensitiques thermoélastiques est fonction des variables de contrôle Σ (contrainte macroscopique) et T (température) et des variables internes liées au champ de transformation $\varepsilon^t(\mathbf{r})$.

L'énergie d'Helmholtz se compose d'une énergie chimique et d'une énergie mécanique qui est elle-même constituée d'une énergie élastique et d'une énergie d'interface :

$$\Phi(E, T) = \Delta G_{\text{chimique}} + W_{\text{mécanique}} = \Delta G_{\text{chimique}} + W_{\text{élastique}} + W_{\text{interface}} \quad (\text{II.24})$$

Les variantes de martensite s'accroissent sous forme de plaquettes, elles ne cherchent donc pas à minimiser leur énergie d'interface en prenant une configuration sphérique. Cette énergie d'interface est donc faible. Elle est d'ailleurs négligée par rapport à l'énergie élastique.

L'énergie libre ou complémentaire de Gibbs est mieux adaptée pour décrire le comportement des A.M.F. Cette énergie est égale au travail des efforts extérieurs ($\Sigma.E$) moins l'énergie d'Helmholtz :

$$\Psi(\Sigma, T) = -\Phi(E, T) + \Sigma E = -\Delta G_{\text{chimique}} - W_{\text{élastique}} + \Sigma E \quad (\text{II.25})$$

L'énergie libre chimique $\Delta G_{\text{chimique}}$ (ΔG_{ch}) est souvent approximée par une fonction linéaire de la température en définissant T_0 la température d'équilibre thermodynamique :

$$\Delta G_{\text{ch}} = B (T - T_0) (V_m/V). \quad (\text{II.26})$$

L'énergie élastique s'exprime par :

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

$$W_{\text{élastique}} = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^e dV = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dV - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^r dV \quad (\text{II.27})$$

En intégrant par partie la première intégrale, on obtient :

$$\frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(\mathbf{r}) u_{i,j}(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{2V} \int_S \sigma_{ij}(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) n_j dS \quad (\text{II.28})$$

Or sur la frontière S, on a la propriété suivante : $\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \Sigma_{ij}$, il vient :

$$\frac{1}{2V} \int_S \sigma_{ij}(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) n_j dS = \frac{1}{2V} \Sigma_{ij} \int_S u_i(\mathbf{r}) n_j dS = \frac{1}{2V} \Sigma_{ij} \int_V u_{i,j}(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.29})$$

On a finalement pour la première intégrale :

$$\frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dV = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij} \quad (\text{II.30})$$

Pour la seconde intégrale de l'équation (II.27), on décompose le champ de contrainte locale $\sigma(\mathbf{r})$ en un champ de contrainte appliquée Σ et des fluctuations locales $\tau(\mathbf{r})$.

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \Sigma_{ij} + \tau_{ij}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.31})$$

où $\tau(\mathbf{r})$ définit un champ à valeur moyenne nulle. Il représente le champ de contrainte interne lié aux incompatibilités de déformation des différentes variantes dans le volume représentatif considéré.

L'énergie élastique II.27 devient alors :

$$W_{\text{élastique}} = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij} - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij}^T - \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^r(\mathbf{r}) dV \quad (\text{II.32})$$

Le troisième terme de l'énergie élastique représente l'énergie d'interaction W_{int} .

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

$$W_{\text{élastique}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} + W_{\text{int}} \quad (\text{II.33})$$

Connaissant l'expression l'énergie chimique ainsi que celle de l'énergie élastique, on peut écrire :

$$\Psi(\Sigma, T) = -B(T - T_0) \sum_n f^n - \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \sum_{ij} E_{ij} + \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} dV \quad (\text{II.34})$$

Or le travail des efforts extérieurs peut s'écrire :

$$\sum_{ij} E_{ij} = \sum_{ij} E_{ij}^e + \sum_{ij} E_{ij}^T = \sum_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \sum_{ij} g \sum_n R_{ij}^n f^n \quad (\text{II.35})$$

D'où :

$$\Psi(\Sigma, T) = -B(T - T_0) \sum_n f^n + \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \sum_{ij} g \sum_n R_{ij}^n f^n + \frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} dV \quad (\text{II.36})$$

L'énergie d'interaction peut s'écrire à l'aide d'une matrice d'interaction H (nous verrons cette matrice en détail dans le chapitre III).

$$-\frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij} \varepsilon_{ij}^{\text{tr}} dV = W_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} H^{nm} f^n f^m \quad (\text{II.37})$$

Il en résulte que l'énergie complémentaire de Gibbs s'écrit :

$$\Psi(\Sigma, T, f^n) = -B(T - T_0) \sum_n f^n + \frac{1}{2} \sum_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \sum_{ij} g \sum_n R_{ij}^n f^n - \frac{1}{2} \sum_{n,m} H^{nm} f^n f^m \quad (\text{II.38})$$

En l'absence de dissipation, à l'équilibre thermodynamique la force thermodynamique $(\partial\Psi/\partial f^n)$ est nulle :

$$\partial\Psi/\partial f^n = B(T - T_0) + \sum_m H^{nm} f^m - \sum_{ij} g R_{ij}^n = 0 \quad (\text{II.39})$$

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

$$\sum_{ij} g R_{ij}^n = B (T - T_0) + \sum_m H^{nm} f^m \quad (\text{II.40})$$

La relation (II.40) définit un critère de transformation local qui généralise le critère bien connu de Patel et Cohen (Patel et Cohen, 1953). La relation de consistance appliquée à ce critère permet de déterminer la cinétique de la transformation.

$$B dT - g R_{ij}^n d\Sigma + \sum_m H^{nm} df^m = 0 \quad (\text{II.41})$$

On obtient ainsi :

$$df^m = \sum_n (H^{nm})^{-1} (g R_{ij}^n d\Sigma_{ij} + B dT) \quad (\text{II.42})$$

La loi de comportement locale s'obtient alors en introduisant la cinétique (II.42) dans les relation décrivant la cinétique de la transformation

D'après la relation $d\varepsilon_{ij} = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}^t$ on a :

$$d\varepsilon_{ij} = C^{-1}_{ijkl} d\Sigma_{kl} + g \sum_n R^n_{ij} df^n \quad (\text{II.43})$$

or d'après la relation (II.42) :

$$d\varepsilon_{ij} = C^{-1}_{ijkl} d\Sigma_{kl} + \sum_n R^n_{ij} g \sum_m (H^{mn})^{-1} (g R^m_{kl} d\Sigma_{kl} - B dT) \quad (\text{II.44})$$

il en résulte que :

$$d\varepsilon_{ij} = [C^{-1}_{ijkl} + \sum_{n,m} R^n_{ij} R^n_{kl} g^2 (H^{mn})^{-1}] d\Sigma_{kl} - [\sum_{n,m} R^n_{kl} g (H^{mn})^{-1} B] dT \quad (\text{II.45})$$

La démarche adoptée ici pour déterminer cette loi de comportement est appropriée à l'étude des monocristaux.

II.3.3 Modules tangents thermomécaniques (Entemeyer, 1996)

La transformation martensitique des AMF s'obtient lors d'une variation de température ou de contrainte. Aussi les modules tangents thermomécaniques $l(r)$ et $m(r)$ relient le taux de contrainte au taux de déformation total et à l'incrément de température au niveau du monocristal :

$$\dot{\sigma}_{ij}(r) = l_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{kl}(r) - m_{ij}(r) \dot{T} \quad (\text{II.46})$$

Afin de déterminer ces deux modules représentant le comportement du monocristal, nous allons établir une relation du type $\dot{\sigma}(r) = f(\dot{\epsilon}(r), \dot{T})$ dans le but d'identifier les deux modules l et m de l'expression (II.46).

Pour cela, on part de la loi de Hooke :

$$\dot{\sigma}_{ij}(r) = C_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{kl}^e(r) = C_{ijkl}(r) [\dot{\epsilon}_{kl}(r) - \dot{\epsilon}_{kl}^{th}(r) - \dot{\epsilon}_{kl}^t(r)] \quad (\text{II.47})$$

avec la déformation thermique et la déformation de transformation égales respectivement à :

$$\dot{\epsilon}_{kl}^{th}(r) = \alpha \delta_{kl} \dot{T} \quad (\alpha : \text{coefficient de dilatation thermique}) \quad (\text{II.48})$$

$$\dot{\epsilon}_{kl}^t(r) = \sum_n \epsilon_{kl}^n \dot{f}^n \quad (\text{II.49})$$

Le critère de cohérence obtenu pendant l'étude thermodynamique est également nécessaire, puisqu'il doit être vérifié pour toutes les variantes actives :

$$\epsilon_{ij}^n \dot{\sigma}_{ij} = B \dot{T} + \sum_m H^{nm} \dot{f}^m \quad (\text{II.50})$$

En introduisant la relation (II.47) dans le critère (II.50), on obtient :

$$\epsilon_{pq}^n C_{pqrs} \left(\dot{\epsilon}_{rs}(r) - \alpha \delta_{rs} \dot{T} - \sum_m \epsilon_{rs}^m \dot{f}^m \right) = B \dot{T} + \sum_m H^{nm} \dot{f}^m \quad (\text{II.51})$$

$$\sum_m H^{mn} \dot{f}^m + \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \sum_m \varepsilon_{rs}^m \dot{f}^m = \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} (\dot{\varepsilon}_{rs}(\mathbf{r}) - \alpha \delta_{rs} \dot{T}) - B \dot{T} \quad (\text{II.52})$$

$$\sum_m {}^* H^{mn} \dot{f}^m = \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \dot{\varepsilon}_{rs}(\mathbf{r}) - (B + \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \alpha \delta_{rs}) \dot{T} \quad (\text{II.53})$$

avec :

$${}^* H^{mn} = H^{mn} + \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \varepsilon_{rs}^m \quad (\text{II.54})$$

En inversant l'équation (II.53), on obtient :

$$\dot{f}^m = \sum_n ({}^* H^{mn})^{-1} [\varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \dot{\varepsilon}_{rs}(\mathbf{r}) - (B + \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \alpha \delta_{rs}) \dot{T}] \quad (\text{II.55})$$

Cette expression réintroduite dans la relation (II.47) par l'intermédiaire de la relation (II.49), permet d'obtenir la contrainte en fonction des variables désirées (déformation et température).

On a donc :

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = & C_{ijkl} \left\{ \delta_{kr} \delta_{ls} - \sum_{m,n} \varepsilon_{kl}^n ({}^* H^{mn})^{-1} \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \right\} \dot{\varepsilon}_{rs}(\mathbf{r}) \\ & - C_{ijkl} \left\{ \alpha \delta_{kl} - \sum_{m,n} \varepsilon_{kl}^n ({}^* H^{mn})^{-1} (B + \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \alpha \delta_{rs}) \right\} \dot{T} \end{aligned} \quad (\text{II.56})$$

L'identification des termes de cette équation avec les termes de l'équation II.46, permet de définir nos deux modules tangents thermomécaniques. Ils s'expriment de la façon suivante :

$$l_{ijkl}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} - C_{ijrs} \sum_{m,n} \varepsilon_{rs}^n ({}^* H^{mn})^{-1} \varepsilon_{pq}^n C_{pqkl} \quad (\text{II.57a})$$

$$m_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \alpha \delta_{kl} - C_{ijkl} \sum_{m,n} \varepsilon_{kl}^n ({}^* H^{mn})^{-1} (B + \varepsilon_{pq}^n C_{pqrs} \alpha \delta_{rs}) \quad (\text{II.57b})$$

Ces modules sont utilisés comme modules locaux dans la détermination du comportement du polycristal par transition d'échelle.

II.4 Loi de comportement du polycristal

Jusqu'à présent, l'étude du comportement du monocristal nous a permis d'aboutir à la loi de comportement du grain. La microstructure plus complexe du polycristal fait apparaître des difficultés supplémentaires liées aux interactions entre les différents grains. La méthode de transition d'échelle autocohérente résout cette difficulté en remplaçant le milieu hétérogène entourant un grain par un milieu homogène équivalent (Berveiller et al., 1984 et 1993). Cette méthode a été précisée au paragraphe II.2.3 de manière succincte. Ce paragraphe a pour but de renseigner sur les équations principales d'homogénéisation et de localisation de la méthode qui seront utilisées dans les chapitres suivants.

Le comportement local peut être défini de la manière suivante :

$$\dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = l_{ijkl}(\mathbf{r}) \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}) - m_{ij}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{II.58})$$

$$\dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r}) = [l_{ijkl}(\mathbf{r})]^{-1} \dot{\sigma}_{kl}(\mathbf{r}) + [l_{ijkl}(\mathbf{r})]^{-1} m_{kl}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{II.59})$$

où $l(\mathbf{r})$ et $m(\mathbf{r})$ sont les modules tangents microscopiques définis par les équations (II.57).

On suppose que le comportement effectif ou global est défini de manière similaire :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = L_{ijkl}^{\text{eff}} \dot{E}_{kl} - M_{ij}^{\text{eff}} \dot{T} \quad (\text{II.60})$$

$$\dot{E}_{ij} = [L_{ijkl}^{\text{eff}}]^{-1} \dot{\Sigma}_{kl} + [L_{ijkl}^{\text{eff}}]^{-1} M_{kl}^{\text{eff}} \dot{T} = [L_{ijkl}^{\text{eff}}]^{-1} \dot{\Sigma}_{kl} + N_{ij}^{\text{eff}} \dot{T} \quad (\text{II.61})$$

L'objectif étant de décrire le comportement global à partir des relations de comportement local, on introduit deux relations de localisation :

$$\dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = B_{ijkl}(\mathbf{r}) \dot{\Sigma}_{kl} + b_{ij}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{II.62})$$

$$\dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r}) = A_{ijkl}(\mathbf{r}) \dot{E}_{kl} + a_{ij}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{II.63})$$

$A(\mathbf{r})$ et $B(\mathbf{r})$ sont les tenseurs de localisation mécaniques et $a(\mathbf{r})$ et $b(\mathbf{r})$ sont les tenseurs de localisation thermiques.

Grâce à l'approximation autocohérente à un site, le milieu granulaire (le polycristal) est représenté par N inclusions I de volume V^I , dans lesquelles les champs de vitesses de déformation et de contrainte sont uniformes. Les différentes variantes de martensite qui

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

peuvent apparaître dans le grain ont tendance à s'opposer à cette hypothèse. Cependant, on estime que l'approche micromécanique antérieure permettant la détermination du comportement monocristallin (du grain) est suffisamment réaliste d'un point de vue physique pour justifier cette approximation réalisée à l'échelle supérieure. On obtient donc, grâce à cette méthode, les tenseurs de localisation relatifs au grain I (Entemeyer et al., 1996) :

$$A_{ijkl}^I = [I_{ijkl} - T_{ijmn}^{II} \delta l_{mnkl}^I]^{-1} \quad (II.64)$$

$$a_{ij}^I = -A_{ijkl}^I T_{klmn}^{II} \delta m_{mn}^I \quad (II.65)$$

Avec le tenseur T^{II} représentant et décrivant les interactions du grain I sur lui-même. Le calcul analytique de ce tenseur est assez complexe et fait intervenir la composante locale du tenseur de Green symétrisé. Ce calcul n'est pas explicité dans ce travail (Entemeyer et al., 1996).

Les deux modules tangents, mécanique et thermique, macroscopiques peuvent être obtenus de deux manières différentes :

- la première approche repose sur l'hypothèse que le taux de contrainte macroscopique est égal à la moyenne des taux de contrainte dans chaque grain de fraction volumique f^g :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = \sum_g f^g \dot{\sigma}_{ij}^g \quad (II.66)$$

En remplaçant le taux de contrainte microscopique par son expression donnée dans l'équation (II.58), on obtient :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = \sum_g f^g l_{ijkl}^g \dot{\epsilon}_{kl}^g - \sum_g f^g m_{ij}^g \dot{T} \quad (II.67)$$

En remplaçant maintenant le taux de déformation microscopique par son expression donnée dans l'équation (II.63) en fonction des tenseurs de localisation, on obtient :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = \left(\sum_g f^g l_{ijkl}^g A_{klmn}^g \right) \dot{E}_{mn} - \left(\sum_g f^g (m_{ij}^g - l_{ijkl}^g a_{kl}^g) \right) \dot{T} \quad (\text{II.68})$$

On peut donc définir, par une simple identification avec l'équation (II.60), les deux modules thermomécaniques macroscopiques :

$$L_{ijmn}^{\text{eff}} = \sum_g f^g \left(l_{ijkl}^g A_{klmn}^g \right) \quad (\text{II.69})$$

$$M_{ij}^{\text{eff}} = \sum_g f^g \left(m_{ij}^g - l_{ijkl}^g a_{kl}^g \right) \quad (\text{II.70})$$

- la seconde approche repose sur l'hypothèse que le taux de déformation macroscopique est égal à la moyenne des taux de déformation dans chaque grain de fraction volumique f^g :

$$\dot{E}_{ij} = \sum_g f^g \dot{\epsilon}_{ij}^g \quad (\text{II.71})$$

En remplaçant le taux de déformation microscopique par son expression donnée dans l'équation (II.63), en fonction des tenseurs de localisation, on obtient :

$$\dot{E}_{ij} = \sum_g f^g \left(A_{ijkl}^g \dot{E}_{kl} + a_{ij}^g \dot{T} \right) \quad (\text{II.72})$$

En remplaçant maintenant le taux de déformation macroscopique par son expression donnée dans l'équation (II.61), en fonction des modules tangents macroscopiques, et en regroupant les termes facteurs du taux de contrainte et les termes facteurs du taux de température, on obtient :

$$\dot{E}_{ij} = \left(\sum_g f^g A_{ijmn}^g L_{mnkl}^{-1} \right) \dot{\Sigma}_{kl} + \left(\sum_g f^g (a_{ij}^g + A_{ijkl}^g N_{kl}) \right) \dot{T} \quad (\text{II.73})$$

On peut donc définir, par une simple identification avec l'équation (II.61), les deux modules thermomécaniques macroscopiques :

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

$$\left\{ \begin{array}{l} L^{-1}_{ijkl} = \sum_g f^g A^g_{ijmn} L^{-1}_{mnkl} \\ N^{\text{eff}}_{ij} = \sum_g f^g (a^g_{ij} + A^g_{ijkl} N^g_{kl}) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(II.74)} \\ \text{(II.75)} \end{array}$$

avec $f^g = V^g/V$ la fraction volumique du grain.

Toutes ces équations vont nous être utiles lors de la modélisation du comportement thermomécanique des AMF polycristallins. Nous utiliserons, dans la suite de ce travail, les modules tangents thermomécaniques macroscopiques L et N .

II.5 Quelques problèmes en suspens

Malgré ces nombreuses méthodes de modélisation plusieurs aspects du comportement des AMF restent mal décrits. Les différentes propriétés des alliages à mémoire de forme trouvent un grand nombre d'applications. Leurs avantages mécaniques proviennent de la transformation martensitique, malheureusement cette même transformation induit des mécanismes de dégradation propres à cette classe de matériaux.

La tenue en fatigue est l'un des problèmes majeurs rencontrés dans ces matériaux. Il en est de même du problème du vieillissement car, bien que la transformation martensitique s'effectue sans diffusion, le temps est un paramètre important pour décrire le comportement des A.M.F. et les modifications des caractéristiques qui en découlent constituent une forte limitation au développement industriel de ces matériaux.

Deux types de vieillissement sont observés :

- un vieillissement initial en phase martensitique qui correspond à un réarrangement des atomes par diffusion : on a une stabilisation de la phase martensitique par diminution de son énergie libre et une modification des températures de transformation ; c'est la stabilisation à basse température.
- un vieillissement à plus long terme qui apparaît pour des températures plus élevées lors d'un maintien en phase austénitique. L'austénite hors équilibre se décompose en phase plus stable ; c'est la décomposition à haute température. On observe aussi, pour une température un peu plus faible mais toujours dans le domaine

CHAPITRE II : COMPORTEMENT DES MONO ET POLYCRISTAUX

austénitique, la formation de précipités. Ces deux phénomènes modifient les conditions d'apparition de la martensite.

D'autres problèmes tels que l'éducation des AMF afin d'obtenir l'effet mémoire double sens restent à approfondir. Tous ces problèmes métallurgiques subsistent encore dans ce type d'alliage.

Nous nous attarderons plus sur les problèmes de modélisation, en particulier sur le problème de la simulation du fluage anisotherme soumis à de faibles taux de contrainte. La modélisation par transition d'échelle du comportement des AMF polycristallins a été réalisée en utilisant un modèle auto-cohérent, par Entemeyer (1996). Les résultats numériques et expérimentaux ont été obtenus pour les alliages à base cuivre : CuAlBe et CuZnAl.

Une bonne concordance des résultats est obtenue pour le comportement global superélastique (fig. II.8). Cependant, les résultats numériques sont très différents des courbes (température-contrainte) obtenues expérimentalement pour des essais de fluage anisotherme sous des contraintes inférieures à 100 MPa (fig. II.9).

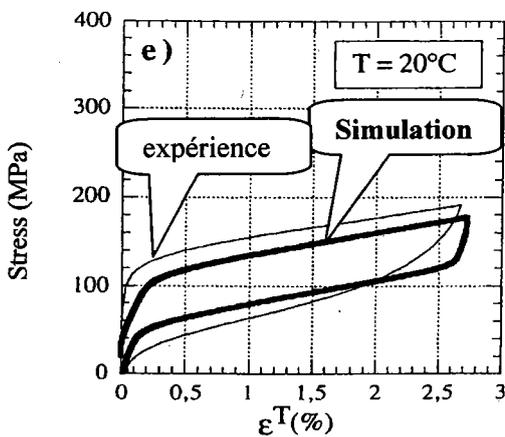


Fig. II.8 : Comportement superélastique pour une température de 20°C (Entemeyer, 1996).

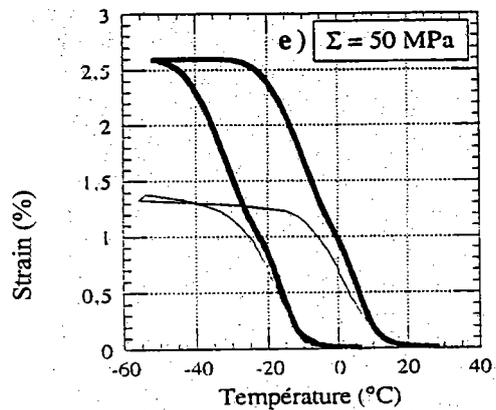


Fig. II.9 : Fluage anisotherme sous une contrainte de 50 MPa (Entemeyer, 1996).

Un autre problème concernant les alliages Nickel-Titane est à noter : la matrice d'interaction utilisée jusqu'à aujourd'hui est incomplète (Gall et Sehitoglu, 1999). Nous proposons, dans le chapitre suivant, une nouvelle matrice d'interaction où tous les GAA (selon Miyasaki et al., 1989) sont représentés.

II.5 Conclusion

Ce chapitre portant sur la modélisation du comportement des AMF nous permet de connaître les différents types de modélisations existantes, leurs avantages et leurs défauts. Il permet également de nous situer parmi les modèles existants afin d'apporter les améliorations nécessaires pour tenter de résoudre certains problèmes.

Toute la partie loi de comportement (loi monocristalline, loi polycristalline, modules tangents) où l'on retrouve toutes les équations nécessaires aux simulations, nous sera très utile et permettra une lecture plus saine et plus conviviale des chapitres suivants en allant directement à l'essentiel, sans submerger le lecteur d'équations intermédiaires.

CHAPITRE III

MATRICES D'INTERACTIONS

III.1 Introduction

La simulation du fluage anisotherme, réalisée par D. Entemeyer (1996) à l'aide de l'approche autocohérente, a mis en évidence une forte surestimation de la déformation de transformation induite par un refroidissement sous faible contrainte.

Afin de résoudre ce problème, une meilleure prise en compte de la microstructure formée lors de ce type d'essai semble nécessaire. Les observations montrent que les variantes se rassemblent pour former des groupes auto-accommodants et que le nombre de variantes activées augmente quand la contrainte appliquée diminue. Or la matrice d'interaction obtenue par l'approche classique est déterminée en considérant que le nombre de variantes activées reste faible. L'utilisation de cette matrice aux faibles contraintes conduit donc à une surévaluation de l'énergie d'interaction. C'est pourquoi ce chapitre porte sur l'amélioration de la loi de comportement en considérant à nouveau le problème des interactions entre les HPV de martensite dans les alliages à mémoire de forme. Une nouvelle approche de ce problème, basée sur la définition de "groupes de variantes", est proposée. Cette approche est appliquée à deux situations où les résultats obtenus, en utilisant des formulations classiques, ne correspondent pas aux observations expérimentales.

Nous étudierons tout d'abord les AMF à base cuivre où la formulation classique montre ses limites lors de la simulation d'un essai de fluage anisotherme sous faible contrainte. La formulation proposée utilise une description plus proche de la microstructure martensitique réellement développée pendant ce type de chargement. On aboutit, à l'aide de cette approche, à une nouvelle matrice d'interaction conduisant à une diminution de l'énergie d'interaction.

En ce qui concerne les alliages NiTi, la formulation classique ne fait pas apparaître dans la matrice d'interaction les groupes auto-accommodants observés expérimentalement par Miyazaki et al. (1989). Ceci est lié à la morphologie particulière des HPV de martensite dans ce type d'alliage : Chaque HPV de NiTi est composée de deux variantes correspondantes (CV). La description de cette morphologie est développée dans ce chapitre. La nouvelle approche est appliquée à l'échelle des CV (i.e. à l'échelle des déformations de Bain) et la matrice d'interaction ainsi obtenue pour les NiTi rend compte des observations expérimentales de Miyazaki et al. (1989).

Ces matrices interviennent de façon non négligeable dans la loi de comportement (équation II.45) et donc dans la modélisation du comportement des AMF. Ce chapitre n'est consacré qu'à la formulation de la nouvelle approche ainsi qu'à la construction des nouvelles matrices d'interaction qui seront exploitées au chapitre suivant.

III.2 Matrice d'interaction pour les AMF à base cuivre

Pour les AMF à base cuivre (CuZnAl et CuAlBe) la déformation de transformation à l'intérieur d'une HPV de martensite est uniforme. C'est pourquoi nous utiliserons, dans cette partie et par abus de langage, indifféremment la notion de variante ou d'HPV.

III.2.1 Matrice d'interaction

La matrice d'interaction 24x24 obtenue par les calculs classiques (Siredey et al., 1999) renseigne sur la compatibilité ou l'incompatibilité entre deux variantes de martensite isolées. L'utilisation de cette matrice est largement répandue dans les modèles cristallographiques. Plusieurs auteurs ont proposé différentes approches pour la déterminer. Toutes ces approches conduisent aux mêmes résultats et sont basées sur la définition donnée dans la théorie de WLR (Wechsler et al., 1953) pour la déformation de transformation ϵ^k d'une HPV k de martensite considérée comme élément martensitique élémentaire :

$$\epsilon_{ij}^k = \frac{g}{2} (n_i^k m_j^k + n_j^k m_i^k) \quad (\text{III.1})$$

où n_i représente la coordonnée i de la normale au plan d'habitat de la variante k, m_j représente la coordonnée j de la direction de transformation de la variante k et g représente l'amplitude de la déformation (comme défini au chapitre II).

Pour déterminer la nature de l'interaction entre deux variantes n et m ayant des déformations de transformation ϵ^n et ϵ^m , El Amrani (1994) suppose que celles-ci sont compatibles si une interface plane existe entre elles. La condition d'existence d'une telle interface est donnée par (El Amrani 1994) :

$$\det(\epsilon_{ij}^n - \epsilon_{ij}^m) = 0 \quad (\text{III. 2})$$

Agouram et al. (1998) et Patoor et Berveiller (1997) ont également proposé de déterminer la compatibilité entre deux variantes par la minimisation de l'énergie d'interaction définie par la

relation suivante :

$$W_{int} = -\frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^t(r) dV \tag{III. 3}$$

où $\varepsilon^t(r)$ définit le champ de déformation de transformation et $\tau(r)$ le champ de contrainte interne établi par les incompatibilités de $\varepsilon^t(r)$.

Des considérations topologiques et morphologiques sur le processus de croissance de la martensite à l'intérieur des grains d'un polycristal sont nécessaires pour évaluer cette contribution. En superélasticité, on observe que l'augmentation de la fraction volumique est principalement produite par la croissance de nouvelles plaquettes de martensite à l'intérieur d'une région limitée du grain. De cette observation et en considérant que les contraintes internes proviennent principalement des interactions martensite/martensite, on déduit une schématisation de la microstructure observée (voir figure III.1).

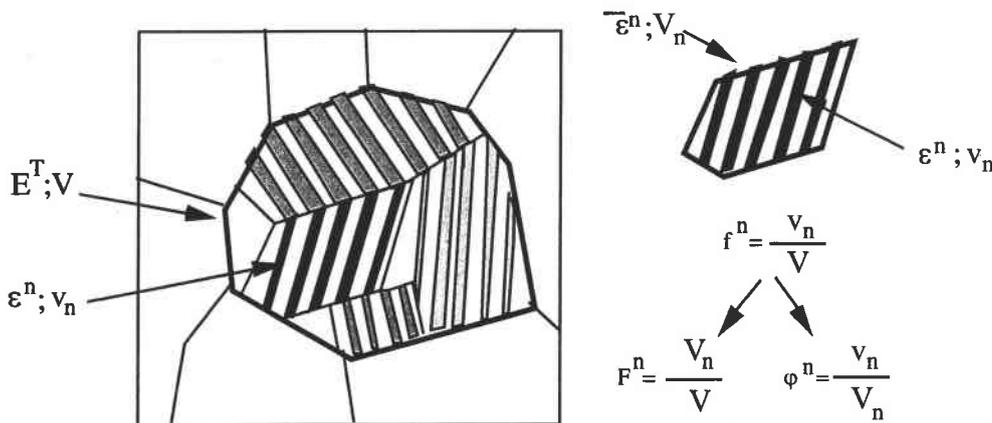


Fig. III.1 : Représentation de l'aspect microstructural à l'intérieur d'un grain d'AMF polycristallin. Définition des paramètres V_n , v_n , F^n , f^n and φ^n , Patoor et al. (1997).

On note V_n le domaine partiellement constitué par la variante n et v_n le volume occupé par les plaquettes n de martensite à l'intérieur de V_n . La fraction volumique f^n d'une variante n à l'intérieur d'un grain du volume V est classiquement définie par :

$$f^n = v_n / V \tag{III.4}$$

et on note $F^n = V_n/V$ la fraction volumique du domaine rempli par la variante n à l'intérieur du grain. La quantité de martensite à l'intérieur de V_n est caractérisée par le paramètre $\varphi^n =$

v_n/V_n . Les quantités f^n , φ^n et F^n sont liées par la relation suivante :

$$f^n = \frac{v_n}{V} = \frac{v_n}{V_n} \frac{V_n}{V} = \varphi^n F^n \quad (\text{III. 5})$$

La déformation de transformation moyenne $\overline{\varepsilon}^{Tn}$ sur le domaine V_n est définie de la façon suivante :

$$\overline{\varepsilon}_{ij}^{Tn} = \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \varepsilon_{ij}^t(\mathbf{r}) dV = \varepsilon_{ij}^{Tn} \frac{V_n}{V} = \varepsilon_{ij}^{Tn} \varphi^n \quad (\text{III.6})$$

Si nous considérons le champ de déformation de transformation $\varepsilon^t(\mathbf{r})$ uniforme par morceaux. Une déformation de transformation uniforme $\overline{\varepsilon}^{Tn}$ peut être définie à l'intérieur de chaque volume V_n et l'énergie d'interaction (III.3) devient :

$$W_{\text{int}} = -\frac{1}{2V} \int_V \tau_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^t(\mathbf{r}) dV = -\frac{1}{2V} \sum_n \overline{\tau}_{ij}^n \overline{\varepsilon}_{ij}^{Tn} V_n \quad (\text{III. 7})$$

où $\overline{\tau}^n$ représente la contrainte interne sur le domaine V_n .

En considérant ces domaines comme des inclusions ellipsoïdales caractérisées par le tenseur d'Eshelby S^n , on obtient :

$$\overline{\tau}_{ij}^n = C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^n) (E_{rs}^T - \overline{\varepsilon}_{rs}^{Tn}) \quad (\text{III.8})$$

où C est le tenseur de compliance élastique d'ordre quatre (supposé homogène dans les deux phases), I représente le tenseur d'identité d'ordre quatre et E^T est la déformation de transformation dans le volume V .

La valeur moyenne de $\overline{\tau}^n$ dans le domaine V doit être égale à zéro. Ainsi on obtient la propriété suivante :

$$\frac{1}{V} \int_V \tau_{ij}(\mathbf{r}) E_{ij}^T dV = \frac{1}{V} \sum_n \overline{\tau}_{ij}^n E_{ij}^T V_n = 0 \quad (\text{III.9})$$

A partir des équations (III.8) et (III.9), l'énergie d'interaction (III.7) peut être exprimée de la façon suivante :

$$W_{int} = \frac{1}{2} \sum_n \{ \overline{\varepsilon_{ij}^{Tn}} - E_{ij}^T \} C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^n) \{ \overline{\varepsilon_{rs}^{Tn}} - E_{rs}^T \} F^n \quad (III.10)$$

Comme peu de variantes sont formées dans chaque grain en superélasticité, le calcul de l'énergie d'interaction se limite au calcul de l'interaction entre deux variantes isolées. Ainsi lorsque deux variantes p et q sont prises en compte, l'énergie (III.10) devient :

$$W_{int} = \frac{1}{2} (\overline{\varepsilon_{ij}^{Tp}} - E_{ij}^T) C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^p) (\overline{\varepsilon_{rs}^{Tp}} - E_{rs}^T) F^p + \frac{1}{2} (\overline{\varepsilon_{ij}^{Tq}} - E_{ij}^T) C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^q) (\overline{\varepsilon_{rs}^{Tq}} - E_{rs}^T) F^q \quad (III.11)$$

et la déformation de transformation globale E^T est définie par :

$$E_{ij}^T = \overline{\varepsilon_{ij}^{Tp}} F^p + \overline{\varepsilon_{ij}^{Tq}} F^q \quad \text{avec} \quad F^p + F^q = 1 \quad (III.12)$$

En considérant qu'une forte corrélation existe entre la forme ellipsoïdale des domaines V_p et V_q , la propriété suivante $S^p = S^q = S^{pq}$ est vérifiée. En introduisant la relation (III.12) dans la relation (III.11) l'énergie d'interaction s'écrit :

$$W_{int} = \frac{1}{2} F^p F^q (\overline{\varepsilon_{ij}^{Tp}} - \overline{\varepsilon_{ij}^{Tq}}) C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^{pq}) (\overline{\varepsilon_{rs}^{Tp}} - \overline{\varepsilon_{rs}^{Tq}}) \quad (III.13)$$

L'utilisation des équations (III.5) et (III.6) pour définir les fractions volumiques et la contrainte moyenne de transformation dans les domaines V_p et V_q permet d'exprimer (III.13) à l'aide des paramètres f^p et ε^{Tp} de la façon suivante :

$$W_{int} = \frac{1}{2} \frac{f^p}{\varphi^p} \frac{f^q}{\varphi^q} (\varphi^p \varepsilon_{ij}^p - \varphi^q \varepsilon_{ij}^q) C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^{pq}) (\varphi^p \varepsilon_{rs}^p - \varphi^q \varepsilon_{rs}^q) \quad (III.14)$$

La prise en compte de la physique de transformation permet de simplifier la relation (III.14). Il est raisonnable de supposer que pour chaque domaine V_p la progression de la transformation est la même. Ceci nous donne :

$$\varphi^p = \varphi^q \quad (III.15)$$

en utilisant cette hypothèse, on obtient :

$$W_{int} = \frac{1}{2} f^p f^q (\varepsilon_{ij}^{Tp} - \varepsilon_{ij}^{Tq}) C_{ijkl} (I_{klrs} - S_{klrs}^{pq}) (\varepsilon_{rs}^{Tp} - \varepsilon_{rs}^{Tq}) \quad (III.16)$$

Dans l'expression de cette énergie, seules les fractions volumiques des variantes considérées, la forme et l'orientation des domaines V_n et V_m par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby, sont variables. En prenant des inclusions de forme ellipsoïdale aplatie (penny-shape), la forme des domaines ne dépend que du paramètre scalaire c/a qui caractérise le rapport épaisseur/diamètre. Ainsi l'énergie d'interaction n'est fonction que des fractions volumiques f^p et f^q et de l'orientation des domaines V_n et V_m . Pour simplifier encore ce problème et afin de décrire les aspects microstructuraux en utilisant seulement la fraction volumique des variables internes, on détermine l'orientation du tenseur S^{pq} en minimisant l'énergie d'interaction (III.16) pour un rapport c/a donné. On distingue alors deux types d'interactions correspondant aux plaquettes incompatibles et aux plaquettes compatibles. Cette distinction est effectivement observée en métallurgie. A partir de ces résultats, la contribution résistive associée à l'énergie d'interaction (III.3) est représentée en utilisant une matrice d'interaction notée par H^{mn} . L'énergie d'interaction (III.3) s'écrit maintenant :

$$W_{int} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} H^{nm} f^n f^m \quad (III.17)$$

Cette expression est employée pour déterminer l'énergie libre d'un monocristal d'austénite subissant une transformation martensitique thermoélastique ou pour un grain à l'intérieur d'un polycristal.

Nous pouvons noter que les différentes hypothèses utilisées pour déterminer cette matrice limitent son utilisation aux transformations provoquées par la contrainte (superélasticité et mémoire de forme double sens). Parmi ces limitations, le nombre de variantes actives dans un

grain doit demeurer faible. Nous verrons plus tard les conséquences de ces hypothèses.

Une manière plus élégante de déterminer cette matrice a été proposée récemment par Siredey et al. (1999) et appliquée aux alliages CuAlBe. Cette méthode consiste à minimiser l'énergie d'interaction entre deux variantes isolées en utilisant la technique des opérateurs interfaciaux. L'orientation de l'interface séparant les deux variantes considérées est déterminée par minimisation de l'énergie d'interaction. Si ce minimum d'énergie correspond à une valeur extrêmement faible ou même nulle, alors l'interface existe et les variantes de part et d'autre de cette interface sont compatibles. Dans le cas contraire, les deux variantes sont dites incompatibles. Grâce à cette méthode, l'orientation des interfaces 'compatibles' est également déterminée et peut être confrontée aux déterminations expérimentales. Cette méthode est détaillée dans le paragraphe suivant.

III.2.2 Interfaces entre les plaquettes de martensite

Pour valider la méthode de Siredey et al. (1999), nous déterminons, avec la même démarche, la matrice d'interaction d'un alliage à mémoire de forme CuZnAl. La microstructure utilisée est représentée par deux domaines séparés par une interface (figure III.2). L'énergie d'interaction dépend de la microstructure de transformation, i.e. de ϵ^T et de l'orientation de l'interface.

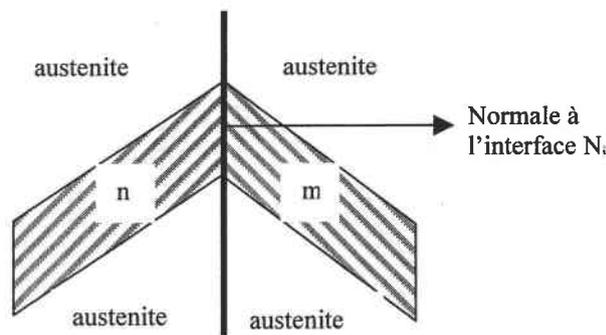


Fig. III.2 : Microstructure utilisée pour la détermination de la matrice d'interaction, dans la formulation classique où l'on détermine la position de l'interface entre 2 variantes isolées n et m.

Le champ de contrainte fluctue faiblement à l'intérieur des domaines mais présente des sauts au passage de l'interface. Ces sauts sont évalués en utilisant la technique des opérateurs interfaciaux. L'énergie d'interaction est calculée en considérant la progression de la transformation par naissance et croissance de nouvelles plaquettes à l'intérieur des domaines. Les interfaces de ces domaines sont mobiles sans dissipation, ainsi un ensemble adéquat de variables internes minimise cette énergie. En considérant la définition (III.6) de la déformation moyenne de transformation dans un domaine, l'énergie d'interaction s'écrit :

$$W_{int} = -\frac{1}{2} \sum_n F_n \overline{\tau_{ij}^n} \varphi^n \varepsilon_{ij}^{Tn} = -\frac{1}{2} (f^n \overline{\tau_{ij}^n} \varepsilon_{ij}^{Tn} + f^m \overline{\tau_{ij}^m} \varepsilon_{ij}^{Tm}) \quad (III.18)$$

La contrainte interne $\overline{\tau}^n$ est liée au saut de la déformation de transformation au travers de l'interface N^{nm} et est calculée entre les domaines notés n et m en utilisant l'opérateur d'interface Q^{nm} . Ainsi on obtient l'expression :

$$\overline{\tau_{ij}^n} = \overline{\tau_{ij}^m} - Q_{ijkl}^{nm} (\varepsilon_{kl}^n - \varepsilon_{kl}^m) \quad (III.19)$$

Cet opérateur possède les propriétés suivantes : $Q^{nm}(N) = Q^{nm}(-N)$ et $Q_{ijkl} = Q_{klij}$

En supposant un comportement élastique isotrope, $Q(N)$ est défini par (Siredey et al., 1999) :

$$Q_{ijkl} = 2\mu \{ F_{ijkl} + \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} (\delta_{ij} - N_i N_j)(\delta_{kl} - N_k N_l) \} \quad (III.20)$$

où N_i représente la composante i de la normale à l'interface N et où l'opérateur d'interface F est donné par :

$$F_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} - N_i N_k)(\delta_{jl} - N_j N_l) + \frac{1}{2} (\delta_{jk} - N_j N_k)(\delta_{il} - N_i N_l) \quad (III.21)$$

μ et λ sont les coefficients de Lamé et δ_{ij} représente le symbole de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ et $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$).

En considérant que la contrainte interne moyenne sur l'ensemble des domaines est nulle :

$$\sum_n f^n \overline{\tau_{ij}^n} = 0 \quad (\text{III.22})$$

On obtient, grâce aux équations (III.19) et (III.22), l'expression de la contrainte interne moyenne dans un domaine :

$$\overline{\tau_{ij}^n} = \sum_m f^m Q^{nm} (\varepsilon^n - \varepsilon^m) \quad (\text{III.23a})$$

$$\overline{\tau_{ij}^m} = \sum_n f^n Q^{nm} (\varepsilon^m - \varepsilon^n) \quad (\text{III.23b})$$

L'énergie d'interaction, grâce aux équations (III.23) et (III.18), est définie par :

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{2} f^n f^m \frac{1}{a_n a_m} (a_m \varepsilon_{ij}^n - a_n \varepsilon_{ij}^m) Q_{ijkl}^{nm} (a_m \varepsilon_{kl}^n - a_n \varepsilon_{kl}^m) = \frac{1}{2} f^n f^m H^{mn} \quad (\text{III.24})$$

Avec:

$$a_n = \sqrt{(\varepsilon_{ij}^n Q_{ijkl}^{nm} \varepsilon_{kl}^n)} \quad (\text{III.25})$$

Dans l'expression (III.24) l'énergie d'interaction ne dépend que des paramètres du matériau : les constantes d'élasticité (μ , λ) et les déformations de transformation qui sont obtenues en utilisant l'équation (III.1) qui, elle-même, utilise les normales aux plans d'habitat et les directions de transformation pour un alliage CuZnAl. Ces vecteurs sont listés dans le tableau III.1.

variantes	Normales aux plans d'habitat			Directions de transformation		
	n1	n2	n3	m1	m2	m3
1	-0,182	0,669	0,721	-0,165	-0,737	0,655
2	-0,182	0,721	0,669	-0,165	0,655	-0,737
3	0,182	0,669	0,721	0,165	-0,737	0,655
4	0,182	0,721	0,669	0,165	0,655	-0,737
5	-0,669	-0,182	0,721	0,737	-0,165	0,655
6	-0,721	-0,182	0,669	-0,655	-0,165	-0,737
7	-0,669	0,182	0,721	0,737	0,165	0,655
8	-0,721	0,182	0,669	-0,655	0,165	-0,737
9	-0,182	-0,669	0,721	-0,165	0,737	0,655
10	-0,182	-0,721	0,669	-0,165	-0,655	-0,737
11	0,182	-0,669	0,721	0,165	0,737	0,655
12	0,182	-0,721	0,669	0,165	-0,655	-0,737
13	0,721	-0,182	0,669	0,655	-0,165	-0,737
14	0,669	-0,182	0,721	-0,737	-0,165	0,655
15	0,721	0,182	0,669	0,655	0,165	-0,737
16	0,669	0,182	0,721	-0,737	0,165	0,655
17	0,669	-0,721	0,182	-0,737	-0,655	0,165
18	0,721	-0,669	0,182	0,655	0,737	0,165
19	-0,669	0,721	0,182	0,737	0,655	0,165
20	-0,721	0,669	0,182	-0,655	-0,737	0,165
21	-0,721	-0,669	0,182	-0,655	0,737	0,165
22	-0,669	-0,721	0,182	0,737	-0,655	0,165
23	0,721	0,669	0,182	0,655	-0,737	0,165
24	0,669	0,721	0,182	-0,737	0,655	0,165

Tableau III.1 : Normales aux plans d'habitat et directions de transformation pour les 24 variantes de martensite dans un alliage Cu-Zn-Al, (Entemeyer, 1996).

Pour un couple de variantes donné, tous les paramètres sont fixés sauf le paramètre N qui caractérise l'orientation de l'interface. La valeur minimale de l'énergie d'interaction dépend donc de l'orientation de cette interface qui est représentée par sa normale N^{nm} repérée dans l'espace par deux angles φ_1 et φ_2 (voir figure III.3).

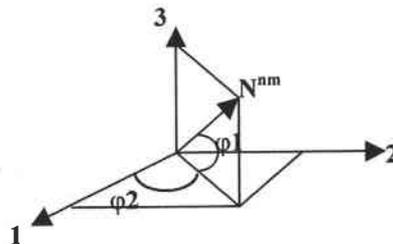


Fig. III.3 : Repérage de la normale N^{nm} dans l'espace.

Pour deux variantes données, cette énergie est calculée pour chaque position de l'interface (supposée plane). On considère ensuite la position de l'interface qui minimise l'énergie d'interaction entre les deux variantes considérées. Ce calcul est reproduit pour les 276 combinaisons possibles entre les 24 variantes de martensite.

Cette minimisation de l'expression (III.24) conduit à la définition de la matrice d'interaction notée H^{nm} qui est donnée dans le tableau III.2. C'est une matrice carrée symétrique 24x24 qui indique si deux variantes sont compatibles ou non. Par exemple les variantes 8 et 13 sont compatibles parce que leur énergie d'interaction est très faible ($W_{int} = 10^{-12}$ MPa), par contre les variantes 5 et 11 sont incompatibles car leur énergie d'interaction est forte ($W_{int} = 10^{-1}$ MPa) (voir Fig. III.4). Cette matrice a la même forme que celle déterminée par Siredey et al. (1999) pour des alliages CuAlBe.

On remarque que la courbe de compatibilité fluctue beaucoup plus que la courbe d'incompatibilité (voir Fig. III.4). Elle passe de 500 à 10^{-11} MPa tandis que l'autre courbe passe de 50 à 0,1 MPa. La courbe de compatibilité a cette forte fluctuation car l'interface trouve une position d'équilibre stable (position dans laquelle l'énergie d'interaction est nulle). Cette position correspond à la position réelle de l'interface entre les deux variantes considérées, qui sont dans ce cas compatibles. La courbe d'incompatibilité n'a pas de position d'équilibre, donc une faible fluctuation.

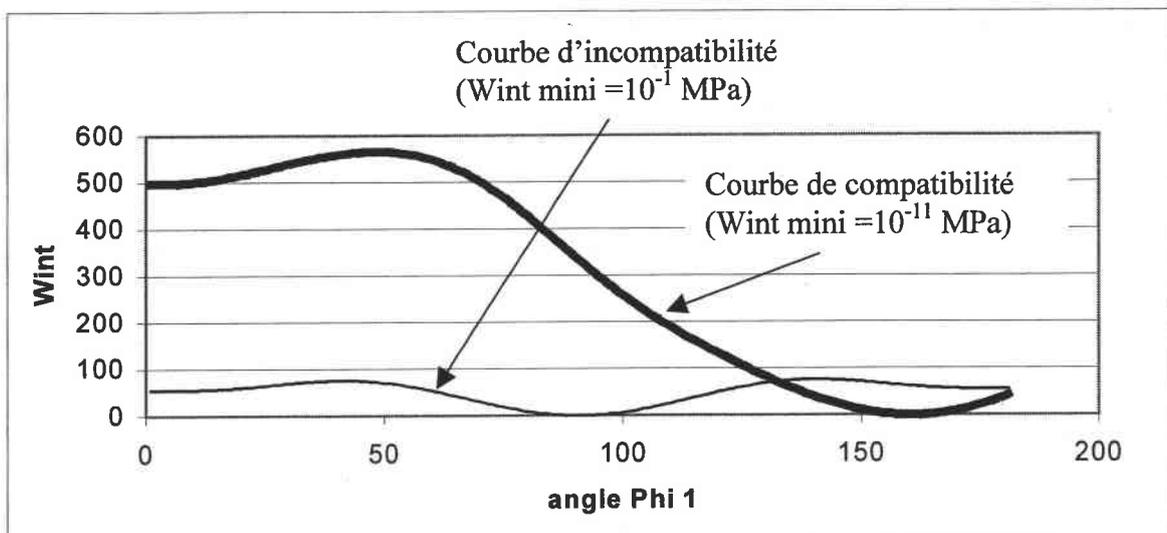


Fig. III.4 : Variation de l'énergie d'interaction en fonction de la position de l'interface. L'angle $\phi 2$ a été fixé afin d'obtenir le minimum sur les présentes courbes.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	
1	C	C	C	C	I	I	C	I	C	I	C	I	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	
2	C	C	C	C	I	I	I	C	I	C	I	C	C	I	I	I	I	I	C	I	I	C	I	I	
3	C	C	C	C	C	I	I	I	C	I	C	I	I	I	I	C	I	C	I	I	I	I	I	C	I
4	C	C	C	C	I	C	I	I	I	C	I	C	I	I	C	I	C	I	I	I	I	I	I	I	C
5	I	I	C	I	C	C	C	C	C	I	I	I	I	C	I	C	C	I	I	I	I	I	C	I	I
6	I	I	I	C	C	C	C	C	I	C	I	I	C	I	C	I	I	C	I	I	C	I	I	I	I
7	C	I	I	I	C	C	C	C	I	I	C	I	I	C	I	C	I	I	C	I	I	I	I	I	C
8	I	C	I	I	C	C	C	C	I	I	I	C	C	I	C	I	I	I	I	C	I	I	C	I	I
9	C	I	C	I	C	I	I	I	C	C	C	C	I	I	I	C	I	I	I	C	C	I	I	I	I
10	I	C	I	C	I	C	I	I	C	C	C	C	I	I	C	I	I	I	C	I	I	C	I	I	I
11	C	I	C	I	I	I	C	I	C	C	C	C	I	C	I	I	I	C	I	I	I	I	I	C	I
12	I	C	I	C	I	I	I	C	C	C	C	C	C	I	I	I	C	I	I	I	I	I	I	I	C
13	I	C	I	I	I	C	I	C	I	I	I	C	C	C	C	C	I	C	I	I	C	I	I	I	I
14	C	I	I	I	C	I	C	I	I	I	C	I	C	C	C	C	C	I	I	I	I	I	C	I	I
15	I	I	I	C	I	C	I	C	I	C	I	I	C	C	C	C	I	I	I	C	I	I	C	I	I
16	I	I	C	I	C	I	C	I	C	I	I	I	C	C	C	C	I	I	C	I	I	I	I	I	C
17	I	I	I	C	C	I	I	I	I	I	I	C	I	C	I	I	C	C	C	C	C	I	C	I	C
18	I	I	C	I	I	C	I	I	I	C	I	C	I	I	I	I	C	C	C	C	C	I	C	I	I
19	I	C	I	I	I	I	C	I	I	C	I	I	I	I	I	C	C	C	C	C	I	C	I	C	I
20	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I	I	C	I	I	C	C	C	C	C	I	C	I	I
21	C	I	I	I	I	C	I	I	C	I	I	I	C	I	I	I	I	C	I	C	C	C	C	C	C
22	I	C	I	I	C	I	I	I	I	C	I	I	I	C	I	I	C	I	C	I	C	I	C	C	C
23	I	I	C	I	I	I	I	C	I	I	C	I	I	I	C	I	I	C	I	C	C	C	C	C	C
24	I	I	I	C	I	I	C	I	I	I	I	C	I	I	I	C	C	I	C	I	C	C	C	C	C

Tableau III.2 : Matrice d'interaction pour un alliage CuZnAl. "C" représente les compatibilités and "I" les incompatibilités entre 2 variantes.

La matrice obtenue (tableau III.2) met en évidence six groupes auto-accommodants constitués de quatre variantes. Ces six groupes auto-accommodants donnent une déformation de transformation quasi nulle. Il subsiste juste un cisaillement de 4,5 % pour chaque groupe. On remarque également que ces cisaillements peuvent se compenser deux à deux pour annuler complètement la déformation de transformation (le groupe I avec le III, le groupe II avec le IV et le groupe V avec le VI) (voir le tableau III.3) .

Les six groupes auto-accommodants sont :

- le groupe I, constitué des variantes 1/2/3/4,
- le groupe II, constitué des variantes 5/6/7/8,
- le groupe III, constitué des variantes 9/10/11/12,
- le groupe IV, constitué des variantes 13/14/15/16,
- le groupe V, constitué des variantes 17/18/19/20,
- le groupe VI, constitué des variantes 21/22/23/24

variantes	ϵ_{23}	ϵ_{31}	ϵ_{12}	
1	-0,046591	-0,119088	0,0118745	} Groupe I
2	-0,046591	0,0118745	-0,119088	
3	-0,046591	0,1190875	-0,011875	
4	-0,046591	-0,011875	0,1190875	
Moy.	-0,04659	0	0	
5	-0,119088	0,046591	-0,011875	} Groupe II
6	0,0118745	0,046591	0,1190875	
7	0,1190875	0,046591	0,0118745	
8	-0,011875	0,046591	-0,119088	
Moy.	0	0,04659	0	
9	0,046591	-0,119088	-0,011875	} Groupe III
10	0,046591	0,0118745	0,1190875	
11	0,046591	0,1190875	0,0118745	
12	0,046591	-0,011875	-0,119088	
Moy.	0,04659	0	0	
13	0,0118745	-0,046591	-0,119088	} Groupe IV
14	-0,119088	-0,046591	0,0118745	
15	-0,011875	-0,046591	0,1190875	
16	0,1190875	-0,046591	-0,011875	
Moy.	0	-0,04659	0	
17	-0,119088	-0,011875	0,046591	} Groupe V
18	0,0118745	0,1190875	0,046591	
19	0,1190875	0,0118745	0,046591	
20	-0,011875	-0,119088	0,046591	
Moy.	0	0	0,04659	
21	0,0118745	-0,119088	-0,046591	} Groupe VI
22	-0,119088	0,0118745	-0,046591	
23	-0,011875	0,1190875	-0,046591	
24	0,1190875	-0,011875	-0,046591	
Moy.	0	0	-0,04659	

Tableau III.3 : Calcul des valeurs moyennes des termes de cisaillement (ϵ_{12} , ϵ_{13} , ϵ_{23}) pour les six groupes de quatre variantes. Dans le cas des groupes auto-accommodants, deux cisaillements sur trois s'annulent.

Ces groupes auto-accommodants sont représentés dans la projection stéréographique des normales aux plans d'habitat des 24 variantes (voir la fig. III.5). La contrainte moyenne de transformation associée à chaque groupe est réduite à un cisaillement simple (à la variation de volume près).

A partir de cette matrice nous pouvons noter que chaque variante est compatible avec neuf autres. Ces compatibilités sont toujours répétées de la même manière :

- Il y a trois compatibilités dans le groupe auto-accommodant de la variante étudiée.
- Il y a deux compatibilités dans le groupe complémentaire, produisant le cisaillement

simple opposé : par exemple dans le groupe III si nous considérons une variante du groupe I.

- Il y a une seule compatibilité dans les autres groupes.

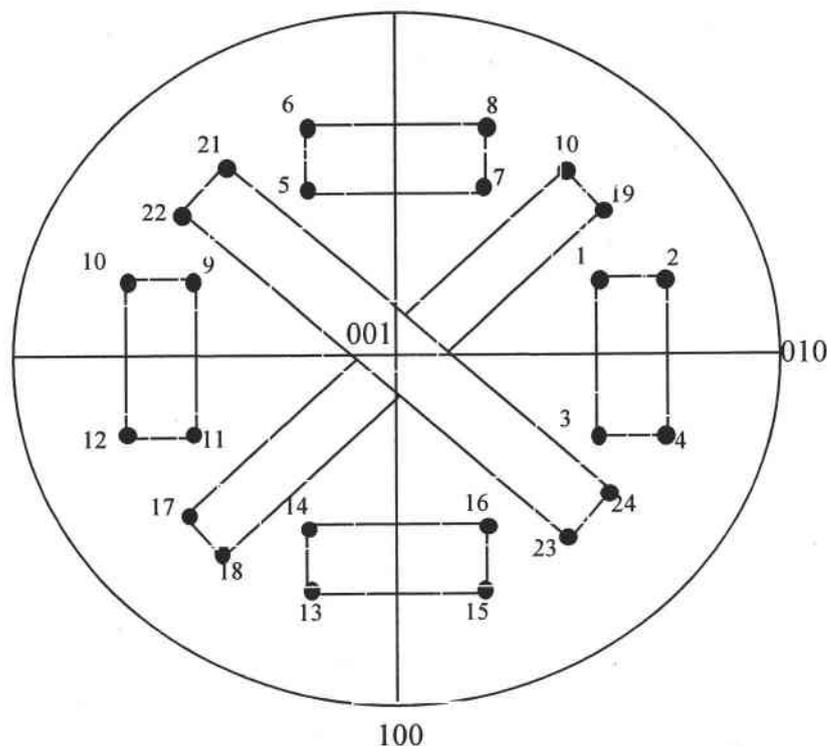


Fig. III.5: Projection stéréographique des normales aux plans d'habitat pour les HPVs. Il y a six groupes auto-accommodants constitués de quatre variantes regroupées autour des pôles $\{011\}$ (El Amrani Zirifi , 1994).

La détermination de l'orientation cristallographique de l'interface entre variantes permet de comparer nos résultats aux résultats expérimentaux. Dans leurs observations, Adachi et al. (1988) ont déterminé cristallographiquement l'existence de 16 combinaisons simples entre variantes sur 276 possibles. Parmi ces combinaisons, neuf sont de type compatible et sept sont de type incompatible.

Les résultats que nous obtenons sont en bon accord avec ceux d'Adachi et al. (1988). Ils sont présentés pour des compatibilités entre la HPV 3 et les autres dans le tableau III.4.

variantes	Normale à l'interface (présent résultats)			Normale à l'interface (Adachi et al., 1988)		
3-1	1	0	0	1	0	0
3-2	0	0,707	0,707	0	0,707	0,707
3-4	0	0,707	-0,707	0	0,707	-0,707
3-5	0,707	0,707	0	0,707	0,707	0
3-9	0	0	1	0	0	1
3-11	0	1	0	0	1	0
3-16	-0,707	0,707	0	-0,707	0,707	0
3-18	0,707	0	0,707	0,707	0	0,707
3-23	0,707	0	-0,707	0,707	0	-0,707

Tableau III.4: Normales aux interfaces entre les variantes de martensite : comparaison avec les résultats observés par Adachi et al. (1988) pour un alliage CuZnAl.

De cette étude nous pouvons conclure que cette détermination théorique des compatibilités est en bon accord avec la réalité. Malgré cela, une limitation sévère de cette formulation persiste dans la modélisation du fluage anisotherme soumis à de faibles contraintes. C'est pourquoi une nouvelle approche est proposée dans la partie suivante.

III.3 Nouvelle formulation

II.3.1 Problème du fluage anisotherme à faible contrainte

La modélisation par transition d'échelle du comportement des AMF polycristallins a été réalisée en utilisant un modèle auto-cohérent (Entemeyer, 1996). Les résultats numériques et expérimentaux ont été obtenus pour les alliages à base de cuivre : CuAlBe et CuZnAl.

Une bonne concordance des résultats est obtenue pour le comportement superélastique (fig.III.6a et fig.III.6b) en utilisant la matrice d'interaction classique. Cependant, les résultats numériques sont très différents des courbes (température-contrainte) obtenues expérimentalement pour des essais de fluage anisotherme sous des contraintes inférieures à 100 MPa. Pour un fluage anisotherme effectué sous une contrainte de 100 MPa, les résultats demeurent relativement corrects (voir la figure III.6c) et on remarque que lors de cet essai, une quantité très limitée de HPV par grain s'activent. Ce résultat est analogue à celui obtenu en superélasticité où peu de variantes sont activées (voir la figure III.7a).

Par contre pendant un refroidissement avec une contrainte constante de 50 MPa, les résultats numériques conduisent à une forte surestimation de la déformation globale de transformation déterminée expérimentalement (voir la figure III.6d). Nous observons aussi, dans ce cas, que le nombre de variantes activées est en nette augmentation et que les variantes formées appartiennent au même groupe auto-accommodant (voir les variantes 9-10-11-12 dans la

figure III.7b).

Nous pouvons en conclure que, quand de nombreuses variantes sont activées, les hypothèses employées pour déterminer la matrice d'interaction ne sont plus valides. Il est alors nécessaire d'utiliser une meilleure description de la microstructure réelle en considérant un nombre de variantes plus important pendant un tel refroidissement sous contraintes faibles.

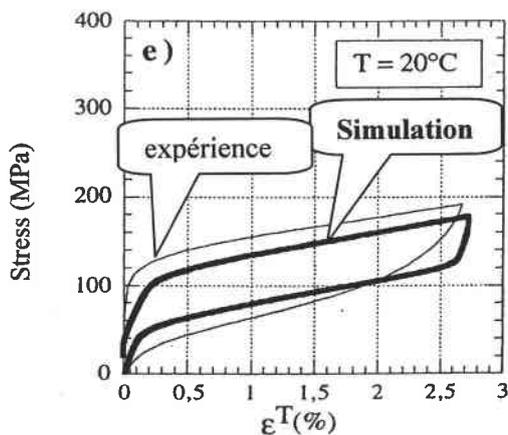


Fig. III.6a : Comportement superélastique, T=20°C, CuAlBe, (Entemeyer, 1996).

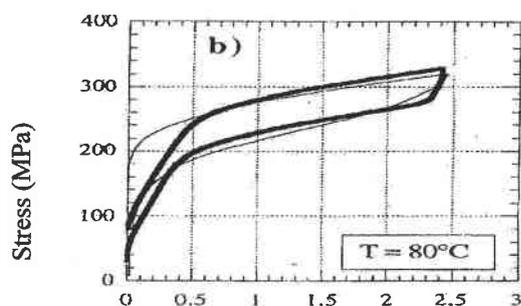


Fig. III.6b : Comportement superélastique pour une température de 80°C pour un alliage CuAlBe (Entemeyer, 1996).

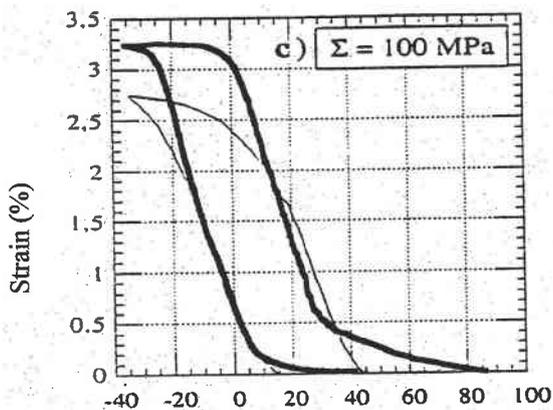


Fig. III.6c : Fluage anisotherme, $\sigma=100$ Mpa, CuAlBe, (Entemeyer, 1996)

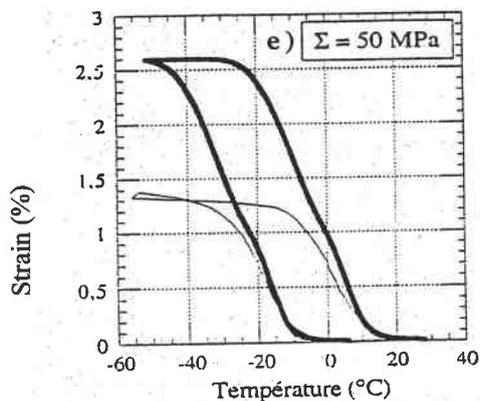


Fig. III.6d : Fluage anisotherme, $\sigma=50$ MPa, CuAlBe, (Entemeyer, 1996)

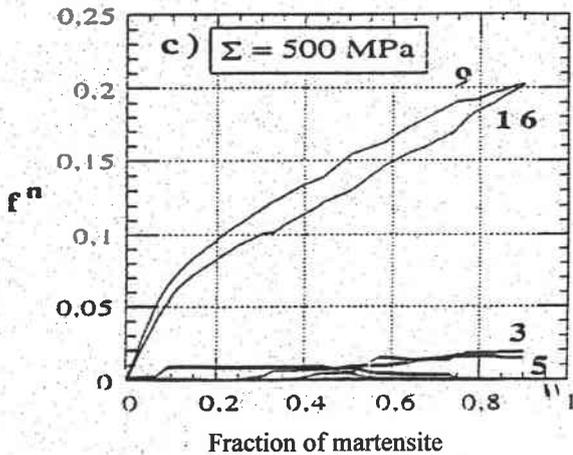


Fig. III.7a : Peu de variantes sont activées pour 500 MPa (Entemeyer,

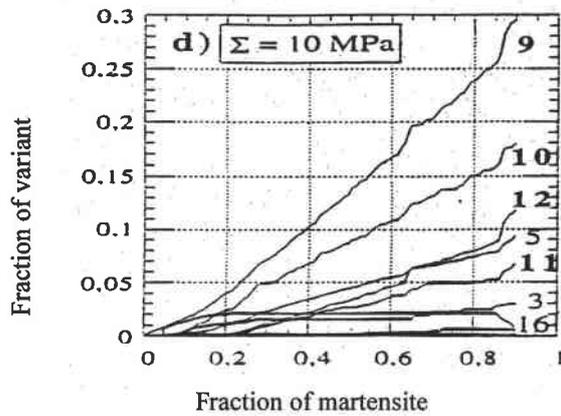


Fig. III.7b : Beaucoup de variantes sont activées (Entemeyer, 1996). Le groupe auto-accommodant 9-10-11-12 apparaît.

L'idée fondamentale de la nouvelle formulation est de considérer les domaines comme des groupes de deux variantes plutôt que comme un mélange de martensite et d'austenite. Cette description semble être plus représentative de la microstructure martensitique réellement observée lors d'un refroidissement sans contrainte appliquée ou sous une faible contrainte. En considérant toutes les combinaisons possibles de deux variantes, on obtient 300 solutions différentes. Toutefois certaines sont exclues car nous supposons que les groupes ne se composent qu'à partir de variantes compatibles, comme défini dans le tableau III.2. (par exemple le groupe formé des variantes 1 et 5 est exclu car les deux variantes qui le composent sont incompatibles). Ainsi, seuls 132 groupes sont pris en considération.

II.3.2 Nouvelle matrice d'interaction pour les AMF à base cuivre

La matrice d'interaction 24x24 utilisée habituellement sera remplacée par une matrice 132x132 qui rendra compte des compatibilités ou des incompatibilités entre groupes de variantes. Dans cette matrice nous retrouvons les compatibilités où les incompatibilités classiques (celles de la matrice 24x24), en plus des nouvelles. La microstructure utilisée dans cette approche est schématisée sur la figure III.8. Nous supposons que θ représente la fraction volumique de la variante n dans le groupe 1 ainsi que la fraction volumique de la variante k dans le groupe 2.

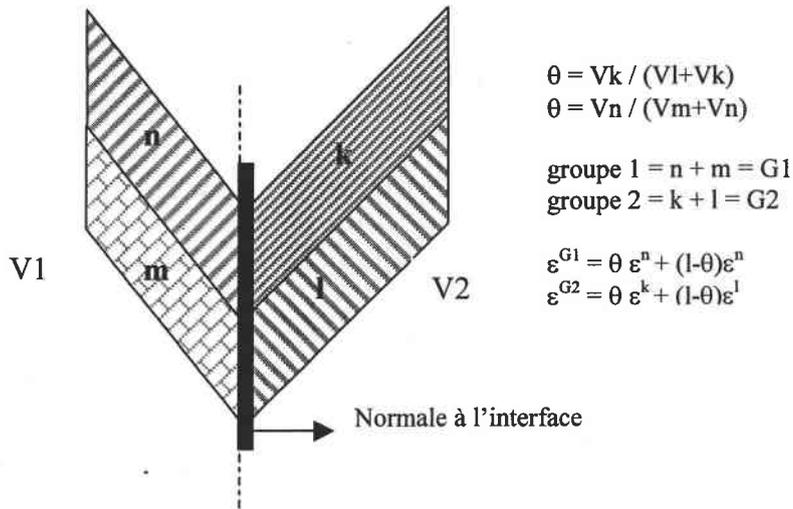


Fig. III.8 : Microstructure utilisée dans la nouvelle formulation. Deux groupes de deux HPV sont utilisés, ce qui donne quatre variantes différentes.

La nouvelle matrice est obtenue, comme précédemment, en minimisant l'énergie d'interaction. L'interface n'est plus prise entre deux variantes individuelles (formulation classique) mais entre deux groupes de variantes (nouvelle formulation) : n/m représente le groupe 1 et k/l représente le groupe 2. Avec une minimisation de l'énergie qui s'opère sur la position de l'interface par l'intermédiaire de sa normale N^{G1G2} .

Pour un état de transformation donné, caractérisé par la fraction volumique φ^n pour la variante n, l'énergie d'interaction dépend de la microstructure de transformation, i.e. de ε^T comme mentionné précédemment (voir la relation III.18).

Dans ce travail, nous nous concentrons sur le cas de la microstructure définie sur la figure III.8 où les groupes définissent des domaines martensite-martensite. Le groupe 1 (resp. 2) se compose d'un mélange de deux variantes notées n et m (resp. k et l) ayant un volume V_n et V_m (resp. V_k et V_l). La déformation moyenne de transformation dans le volume V_1 occupé par le groupe 1 et dans le volume V_2 occupé par le groupe 2 est donnée par :

$$\overline{\varepsilon}_{ij}^{G1} = \frac{1}{V_1} \int_V \varepsilon_{ij}^t dV = \varepsilon_{ij}^n \varphi^n + \varepsilon_{ij}^m (1 - \varphi^n) \quad \text{et} \quad \overline{\varepsilon}_{ij}^{G2} = \frac{1}{V_2} \int_V \varepsilon_{ij}^t dV = \varepsilon_{ij}^k \varphi^k + \varepsilon_{ij}^l (1 - \varphi^k) \quad (\text{III.26})$$

où φ^n et φ^k sont les fractions volumiques des variantes n et k dans les groupes 1 et 2 respectivement. Nous supposons que ces fractions volumiques sont égales : $\varphi^n = \varphi^k = \theta$.

L'énergie d'interaction (III.3) déterminée par cette microstructure constituée de deux groupes

est définie de la manière suivante :

$$W_{int} = -\frac{1}{2}(F^1 \overline{\tau}_{ij}^1 \overline{\varepsilon}_{ij}^{G1} + (1-F^1) \overline{\tau}_{ij}^2 \overline{\varepsilon}_{ij}^{G2}) = -\frac{1}{2V} \sum_N \overline{\tau}_{ij}^N \overline{\varepsilon}_{ij}^{GN} V^N \quad (III.27)$$

où F^1 représente la fraction volumique occupée par le groupe 1 et $\overline{\tau}^1$ et $\overline{\tau}^2$ sont les contraintes internes dans ces groupes. Les contraintes internes sont déterminées en utilisant les opérateurs interfaciaux F et Q définis par les équations (III.20) et (III.21) en respectant la normale N^{G1G2} de l'interface entre ces deux groupes.

Avec cette nouvelle microstructure, l'énergie d'interaction définie par l'équation (III.22) s'écrit maintenant :

$$W_{int} = \frac{1}{2} f^{G1} f^{G2} \frac{1}{a_{G1} a_{G2}} (a_{G2} \varepsilon_{ij}^{G1} - a_{G1} \varepsilon_{ij}^{G2}) \quad (III.28)$$

$$Q_{ijkl}^{G1G2} (a_{G2} \varepsilon_{kl}^{G1} - a_{G1} \varepsilon_{kl}^{G2}) = \frac{1}{2} f^{G1} f^{G2} H^{G1G2}$$

où les groupes G_i sont définis de la manière suivante :

$$a_{G_i} = \sqrt{(\varepsilon_{ij}^{G_i} Q_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{G_i})} \quad i=1,2 \quad (III.29)$$

L'énergie d'interaction (III.28) dépend des déformations de transformation ε^{G1} et ε^{G2} de chaque domaine, de l'orientation de la normale N^{G1G2} à l'interface entre les groupes considérés. La valeur de cette énergie est obtenue à partir de la minimisation de l'équation (III.28) sur la position d'interface par l'intermédiaire des composantes de sa normale (i.e. on considère la position de l'interface qui minimise cette énergie). Quand ce minimum est « faible » alors les deux domaines sont dits compatibles et quand cette valeur est « forte » alors la solution est considérée comme incompatible. La distinction entre groupe compatible et groupe incompatible ne pose pas d'ambiguïté car les énergies trouvées pour les variantes incompatibles sont toujours supérieures à 10^{-2} MPa et les énergies trouvées pour les variantes compatibles sont toujours inférieures à 10^{-11} MPa.

Grâce à cette approche, de nouvelles solutions compatibles sont obtenues, comme par exemple les groupes contenant les variantes 1-2/7-8, 1-3/14-16, 1-9/2-12, 1-11/2-10, 2-3/5-8,

21-24/13-16, 23-24/19-20.... On détermine ainsi 576 nouvelles solutions compatibles (Nielaeys et al., sous presse). Il est important de souligner que l'on appelle nouvelle solution, une solution dont les variantes formant le groupe ne sont pas toutes compatibles deux à deux. Pour chaque nouvelle solution (par exemple pour la solution 1-2/7-8), il existe deux possibilités de positionner les variantes. Dans un cas, nous avons une position où toutes les variantes directement en contact sont compatibles (voir la fig. III.9). Cette configuration est physiquement acceptable. Dans l'autre cas, les variantes en contact ne sont pas toutes compatibles (voir la fig. III.10), cette configuration est vraisemblablement impossible.

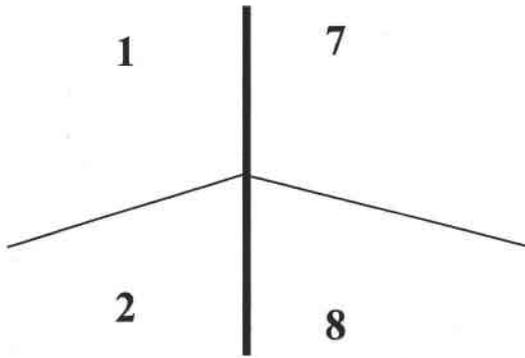


Fig. III.9 : Cette configuration de la microstructure est acceptable car toutes les variantes en contact 1/7, 1/2, 2/8 et 7/8 sont compatibles.

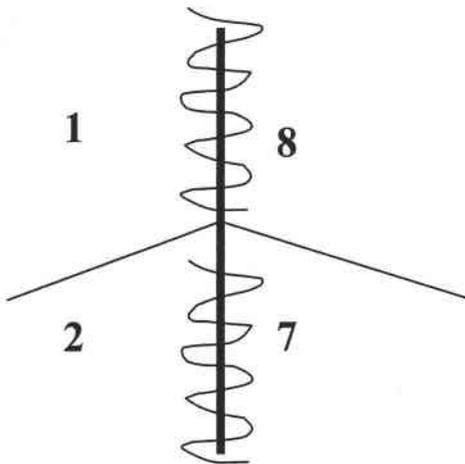


Fig. III.10 : Cette configuration n'est pas acceptable car toutes les variantes en contact ne sont pas compatibles. Par exemple les variantes 1/8 et 2/7 ne sont pas compatibles.

Toutes ces nouvelles solutions compatibles apparaissent maintenant dans la nouvelle matrice d'interaction. Cette matrice est schématisée en figure III.11.

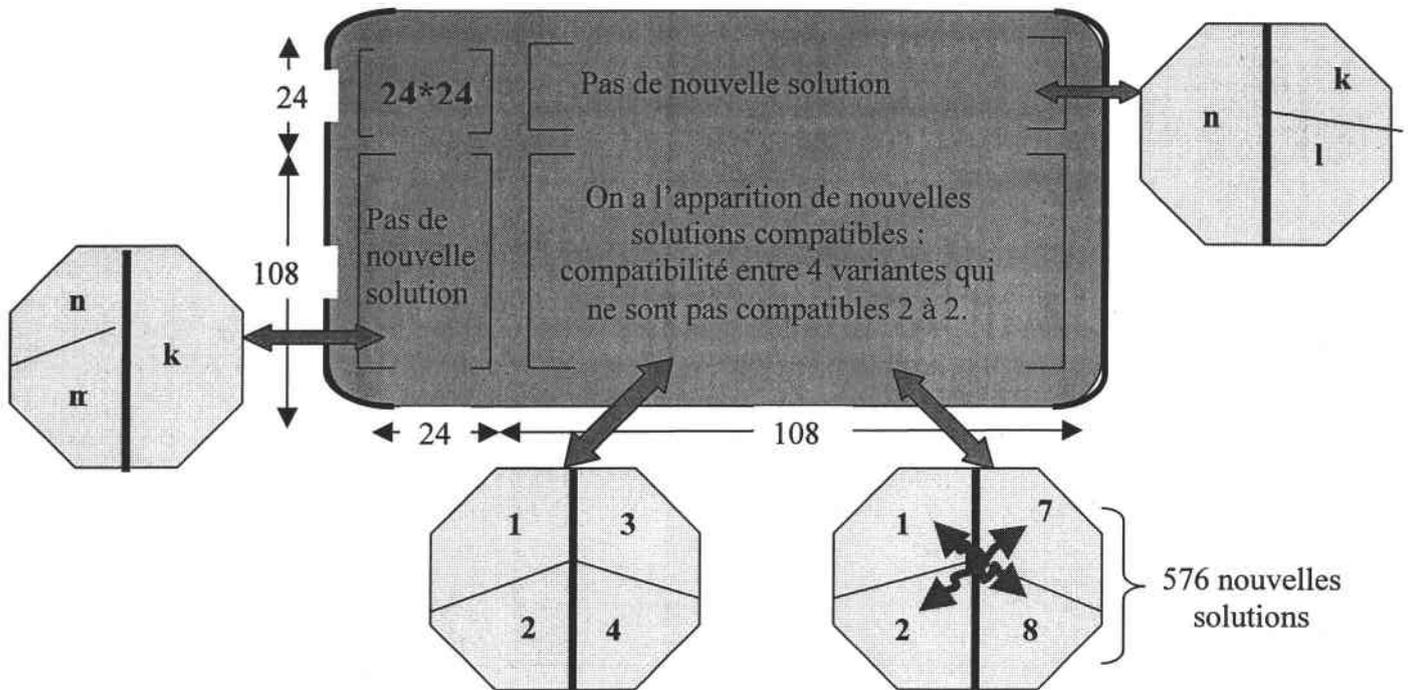


Fig. III.11 : Schématisation de la nouvelle matrice 132x132 d'interaction (Niciaeys et al., sous presse)

En raison de la grande taille de cette nouvelle matrice d'interaction (132x132), ainsi que du grand nombre de nouvelles solutions compatibles (576), tous les résultats ne peuvent pas être présentés. Le tableau III.5 regroupe les résultats des interactions entre les groupes 1-2, 1-3 et 1-4 et les autres.

Groupe 1	Groupe 2	Normale à l'interface entre les deux groupes		
1 2	7 8	0,707	0,707	0
1 2	9 10	0	1	0
1 2	11 12	0	0	-1
1 2	13 14	-0,707	0,707	0
1 2	19 20	0,707	0	0,707
1 2	21 22	0,707	0	-0,707
1 3	5 7	0,707	0,707	0
1 3	14 16	-0,707	0,707	0
1 3	18 20	0,707	0	0,707
1 3	21 23	0,707	0	-0,707
1 4	6 7	0,707	0,707	0
1 4	9 12	0	1	0
1 4	10 11	0	0	-1
1 4	14 15	-0,707	0,707	0
1 4	17 20	0,707	0	0,707
1 4	21 24	0,707	0	-0,707

Tableau III.5 : Compatibilité des groupes 1-2, 1-3 et 1-4 avec tous les autres groupes. La normale à l'interface entre deux groupes est aussi représentée. De nouvelles solutions compatibles apparaissent, par exemple la solution composée des variantes 1,2,7 et 8 forme une nouvelle solution compatible avec la particularité que les variantes 1 et 8 ainsi que les variantes 2 et 7 sont incompatibles deux à deux (Niciaeys et al., sous presse).

Si l'on analyse le tableau III.5, on remarque que tous les résultats obtenus sont en bon accord et observables sur la matrice d'interaction représentée en tableau III.2. Par exemple, le groupe composé des variantes 1-2 est compatible, d'après les résultats, avec les groupes composés des variantes 7-8, 9-10, 11-12, 13-14, 19-20 et 21-22. Or tous ces groupes sont observables dans les deux premières lignes du tableau III.2 (voir tableau III.6). On remarque également que chaque groupe solution est formé avec deux variantes appartenant au même groupe auto-accommodant (c'est pourquoi il n'y a pas de compatibilité entre les groupes 1-2 et 7-19).

La même analyse est faite pour les deux autres résultats montrés dans le tableau III.5 et on aboutit à la même conclusion, mis à part que pour le groupe 1-3 où la compatibilité avec le groupe 9-11 n'apparaît pas. En fait cette compatibilité ne fait pas partie des nouvelles solutions car les 4 variantes formant cette solution sont toutes compatibles deux à deux. Cette analyse est représentée dans les tableaux III.6, III.7 et III.8.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
1	C	C	C	C	I	I	C	C	I	C	C	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I
2	C	C	C	C	I	I	C	C	I	C	C	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I

Tableau III.6 : On retrouve les 6 groupes compatibles avec le groupe 1-2

1	C	C	C	C	I	I	C	C	I	C	C	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I
3	C	C	C	C	I	I	C	C	I	C	C	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I

Tableau III.7 : On retrouve les 6 groupes compatibles avec le groupe 1-3 dont 2 ne font pas partie des nouvelles solutions (en pointillés).

1	C	C	C	C	I	I	C	C	I	C	C	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I
4	C	C	C	C	I	I	C	C	I	C	C	I	C	I	I	I	I	I	C	C	I	I	I	I

Tableau III.8 : On retrouve les 6 groupes compatibles avec le groupe 1-4

III.3.3 Influence sur l'énergie d'interaction

Dans ce paragraphe nous allons estimer l'influence de la nouvelle matrice sur l'énergie d'interaction. Considérons une microstructure martensitique formée de quatre variantes (par exemple 1, 2, 7 et 8) ayant la même fraction volumique par souci de simplicité. La détermination de l'énergie d'interaction, en considérant les quatre variantes individuellement ou en considérant deux groupes (1/2 et 7/8), donne des résultats totalement différents.

Le calcul employant la matrice d'interaction définie par les calculs classiques (III.24) donne :

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{2}(H^{11} + H^{12} + H^{17} + H^{18} + H^{21} + H^{22} + \dots + H^{78} + H^{81} + H^{82} + H^{87} + H^{88}) \frac{1}{16} \quad (\text{III.30})$$

Parmi toutes les interactions possibles formées entre ces quatre variantes, plusieurs sont de type incompatible. L'interaction entre les variantes 1/8 et 2/7 sont incompatibles, ceci donne aux composantes H^{18} , H^{27} , H^{72} , H^{81} de la matrice H une valeur très élevée notée par H^{fort} . D'autres composantes qui apparaissent dans l'équation (III.30) représentent des interactions compatibles et ont une valeur faible égale à H^{faible} . L'énergie d'interaction s'écrit alors :

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{32}(12H^{\text{faible}} + 4H^{\text{fort}}) = \frac{1}{8}(3H^{\text{faible}} + H^{\text{fort}}) \quad (\text{III.31})$$

Si nous considérons maintenant le calcul avec la nouvelle formulation, l'énergie d'interaction définie par l'équation (III.28) devient :

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{2}(H^{G1G1} + H^{G1G2} + H^{G2G1} + H^{G2G2}) \frac{1}{4} \quad (\text{III.32})$$

où le groupe G1 se compose des variantes 1 et 2 et le groupe G2 des variantes 7 et 8. Ces deux groupes forment une solution compatible au vu de la nouvelle formulation (voir tableau III.5), ainsi nous avons $H^{G1G1} = H^{G1G2} = H^{G2G1} = H^{G2G2} = H^{\text{faible}}$. D'où :

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{2}(H^{\text{faible}}) \quad (\text{III.33})$$

Les composantes de la matrice qui apparaissent dans l'équation (III.32) sont liées aux interactions compatibles (en dépit de l'incompatibilité entre les différentes variantes), ainsi cette dernière évaluation donne une énergie d'interaction beaucoup plus faible que dans le cas précédent. Ce résultat est bien en accord avec les observations. La nouvelle matrice d'interaction ainsi obtenue est plus proche de la réalité pour les faibles taux de contrainte. La taille de cette matrice est très grande, mais cette taille est encore raisonnable pour l'usage en code machine, même si un grand nombre de configurations de microstructures peut être pris

par le matériau, les conditions de chargement appliquées sur ce système sélectionnent un ensemble limité de solutions possibles, ainsi seule une sous-matrice de la matrice sera impliquée dans le calcul. L'intégration de cette matrice dans le code auto-cohérent correspond au prochain chapitre de ce mémoire.

III.4. Matrice d'interaction pour des alliages Ni-Ti

Dans les alliages à mémoire de type NiTi, contrairement aux alliages à base cuivre, la déformation de transformation à l'intérieur d'une variante n'est plus uniforme et la notion de variante devient plus complexe. Une variante à plan d'habitat (HPV) (celle-ci correspond à la notation "variante" pour les cuivreux) est en fait composée de deux CV. Dans toute la suite, les deux notations retenues sont HPV et CV .

Dans les alliages NiTi, les approches classiques ne permettent pas de déterminer une matrice d'interaction correcte. En effet, la matrice habituellement utilisée ne fait pas apparaître les groupes auto-accommodants (GAA) expérimentalement observés dans ces alliages (Miyazaki et al., 1989). Ce problème provient de la morphologie particulière et complexe des HPV ou plaquettes de martensite dans les NiTi.

III.4.1 Morphologie des HPV de NiTi

La différence entre les AMF à base cuivre et les NiTi provient de la déformation à réseau invariant (faute d'empilement pour les cuivreux et maclage pour les NiTi). Cette distinction est à l'origine des différences entre les variantes de martensite d'AMF à base cuivre et celles des NiTi.

En effet, les plaquettes (ou variantes) de martensite dans les cuivreux ont une morphologie simple avec des déformations intrinsèques et constantes suivant les variantes considérées (Voir figure III.12).

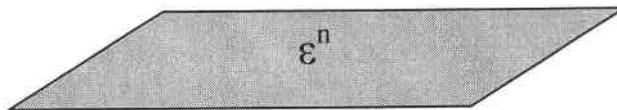


Fig. III.12 : Morphologie d'une plaquette de martensite pour un AMF à base cuivre. ϵ^n : déformation de transformation de la variante numéro n.

Les variantes de martensite des NiTi ont une morphologie plus complexe que celle des cuivreux ; ces variantes sont composées (du fait du maillage) de deux sous-variantes (voir figure III.13) qui sont reliées par des relations de macle. Chaque sous-variante possède sa propre déformation qui reste constante au cours du chargement.

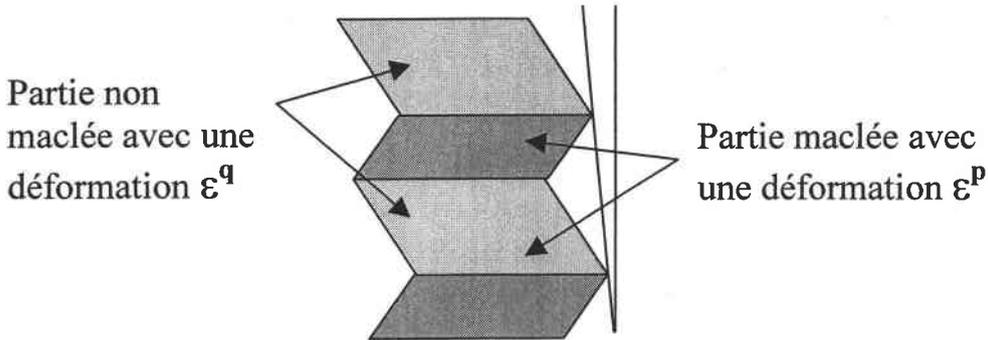


Fig. III.13 : morphologie d'une variante de NiTi

Il existe 12 sous-variantes appelées Variantes Correspondantes (CV) et notées 1, 1', 2, 2', 3, 3', 4, 4', 5, 5', 6 et 6'. Ces 12 CV s'accouplent pour donner naissance aux 24 variantes appelées Variantes à Plan d'Habitat (HPV). Cette morphologie particulière nous amène à utiliser une notation pour les HPV des NiTi qui met en évidence les deux CV qui composent la HPV considérée. Cette notation est utilisée pour l'étude des NiTi.

Par exemple la HPV notée 1(+) est composée des CV 1 et 2 : le numéro qui précède la parenthèse (i.e. 1) correspond au numéro de la CV majoritaire (la CV qui a la plus grande fraction volumique), le signe plus (resp. moins) qui se trouve à l'intérieur de la parenthèse correspond à la seconde CV qui compose la HPV sans le symbole prime (resp. avec le symbole prime). Ainsi les HPV 1'(+) et 1(-) sont composées respectivement des CV 1'-2 et 1-2', les 24 correspondances sont listées en tableau III.9.

D'autre part, les Groupes Auto-Accommodants (GAA) dans les NiTi se distinguent de ceux observés dans les cuivreux. En effet, on trouve dans les AMF à base cuivre des GAA formés de deux ou de quatre HPV de type lance, coin, fourchette, zigzag ou diamant (voir figure III.14, III.15 et III.16).

Variantes à plan d'habitat	Variantes Correspondentes
1(+)	1 - 2
1'(+))	1' - 2
1'(-)	1' - 2'
1(-)	1 - 2'
4'(+))	4' - 3
4(+)	4 - 3
4(-)	4 - 3'
4'(-)	4' - 3'
2'(-)	2' - 1'
2(-)	2 - 1'
2(+)	2 - 1
2'(+))	2' - 1
3(+)	3 - 4
3'(+))	3' - 4
3'(-)	3' - 4'
3(-)	3 - 4'
6'(-)	6' - 5'
6(-)	6 - 5'
6(+)	6 - 5
6'(+))	6' - 5
5'(+))	5' - 6
5(+)	5 - 6
5(-)	5 - 6'
5'(-)	5' - 6'

Tableau III.9 : Correspondance entre les variantes à plan d'habitat et les 2 variantes correspondantes qui composent chaque HPV. La première CV représente la CV majoritaire d'un point de vue volumique (Madangopal, 1997) .

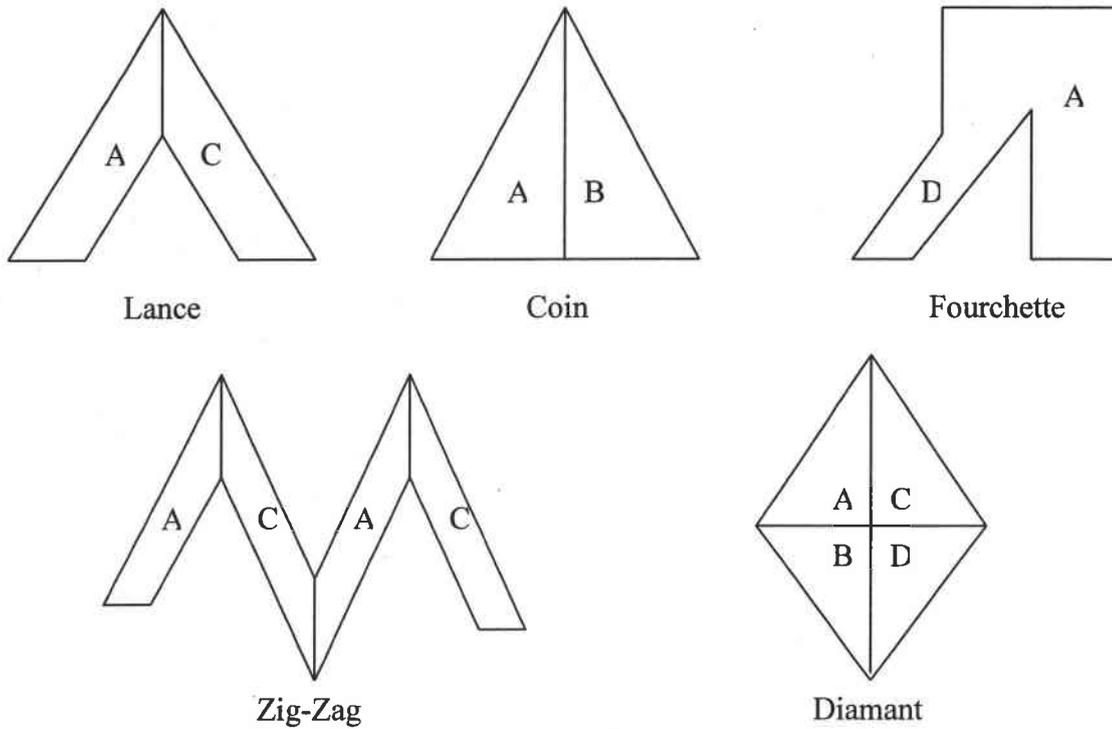


Fig. III.14 : Représentation schématique des configurations de type lance, coin, fourchette ou vrille, zig-zag et diamant adoptées par les GAA.

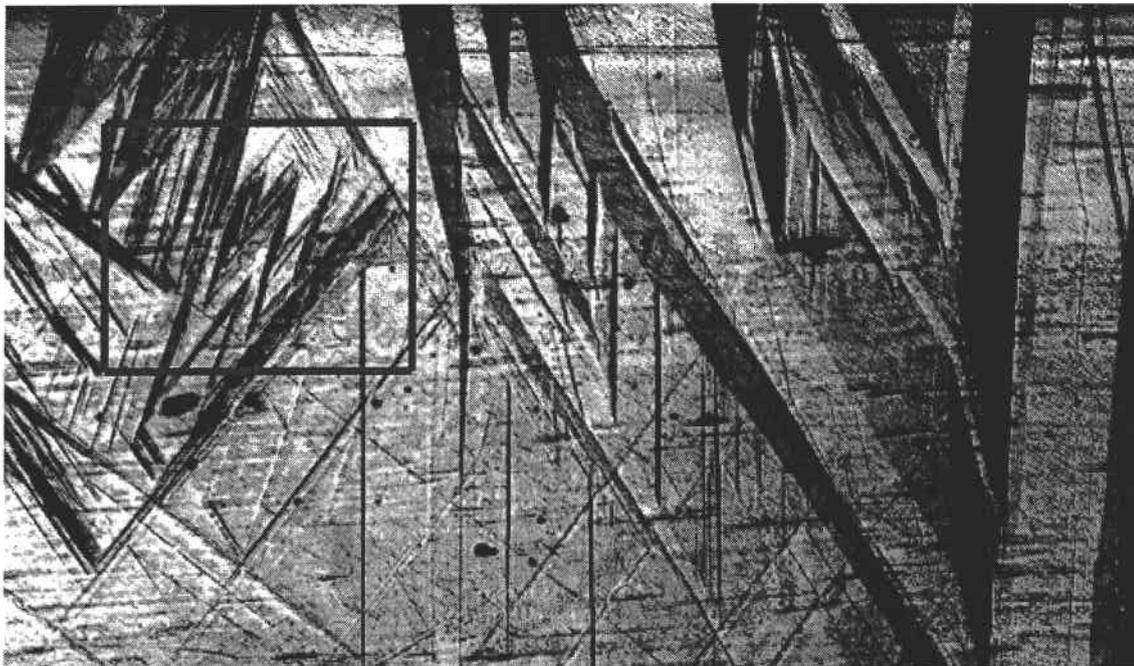


Fig. III.15 : Apparition d'un groupe auto-accommodant lors de la transformation d'un alliage à base cuivre.



Fig. III.16 : Apparition d'un groupe auto-accommodant lors de la transformation d'un alliage à base cuivre.

Tandis que les GAA observés expérimentalement par Miyazaki en 1989 ont une morphologie typique triangulaire formée de trois HPV (voir figure III.17 et III.18).

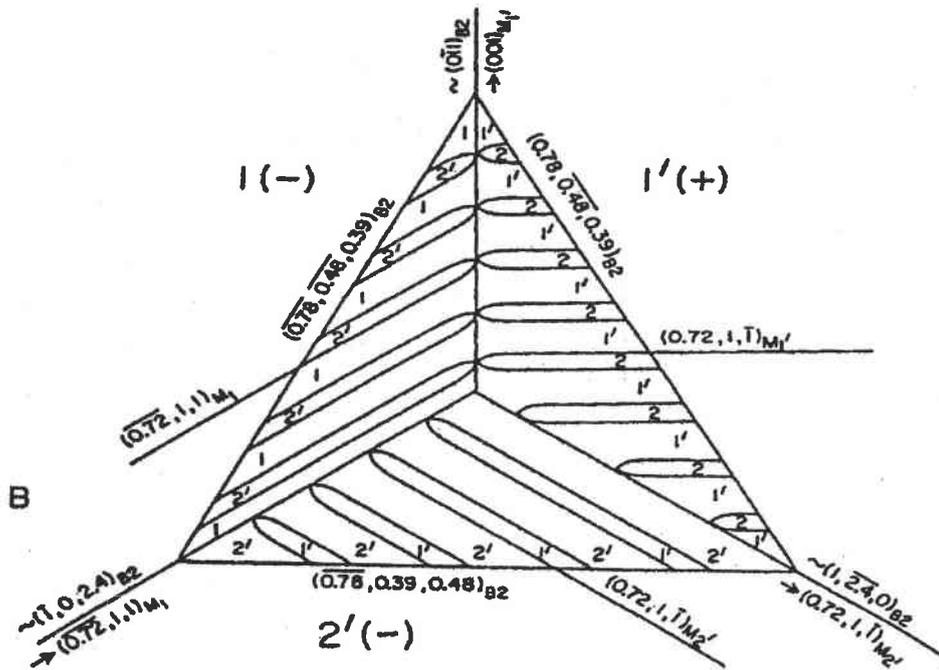


Fig. III.17 : Exemple de GAA composés des HPV 1(-), 1'(+) et 2'(-) (Miyazaki, 1989).

- On retrouve:
- trois plans d'habitat entre l'austénite et la martensite: $(-0,78 \ -0,48 \ 0,39)_{B2}$, $(-0,78 \ 0,39 \ 0,78)_{B2}$ et $(0,78 \ 0,48 \ -0,39)_{B2}$
 - trois plans d'interface entre les différentes HPV : $(0 \ 0 \ 1)_{M1'}$, $(0,72 \ 1 \ 1)_{M1}$ et $(-0,72 \ 1 \ -1)_{M2'}$
 - et trois plans d'interface entre les différentes CV : $(0,72 \ 1 \ -1)_{M1'}$, $(0,72 \ 1 \ 1)_{M1}$ et $(-0,72 \ 1 \ 1)_{M1}$

Les indices M1, M1', M2 et B2 représentent les réseaux dans lesquels les plans sont donnés.

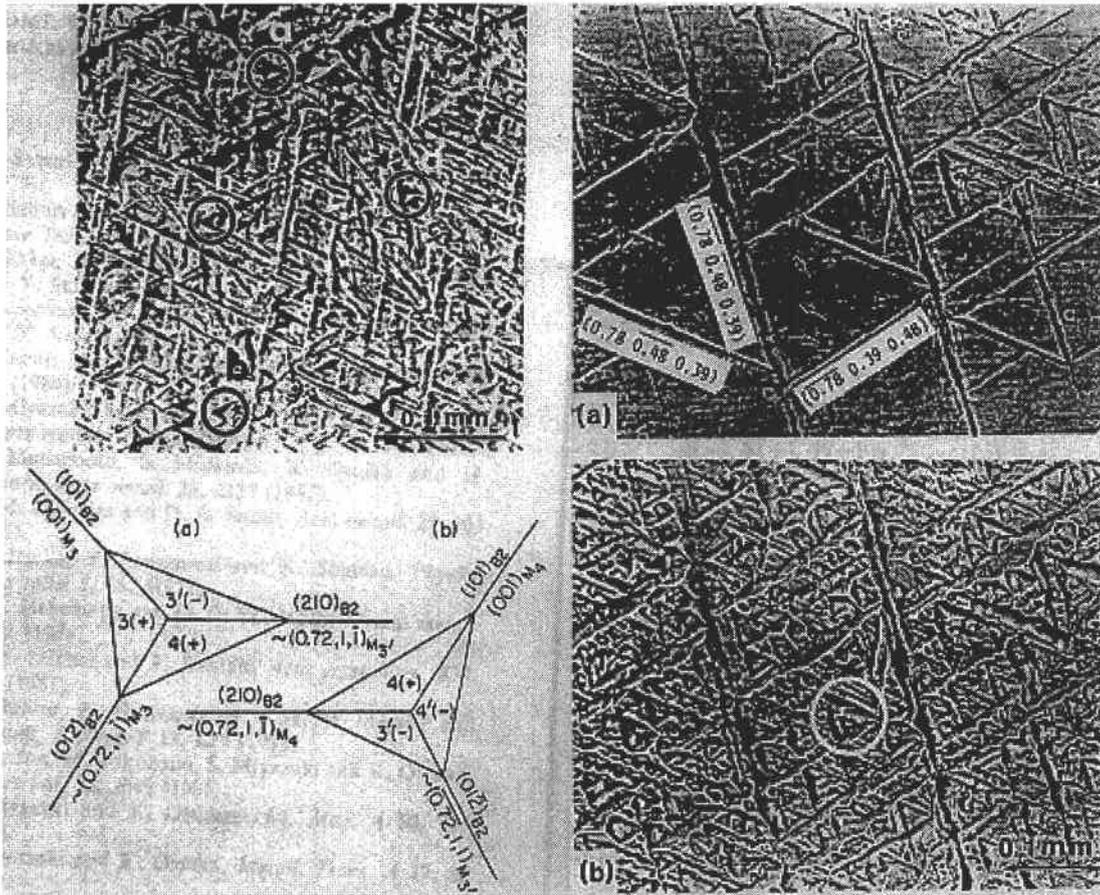


Fig. III.18 : Micrographie de groupes auto-accommodants de morphologie triangulaire dans les alliages NiTi (Miyasaki et al., 1989).

III.4.2 Calcul classique de la matrice d'interaction

Comme supposé dans les théories cristallographiques et phénoménologiques de la formation de martensite telle que la théorie de WLR (Wechsler et al., 1953), le gradient de la transformation locale F est composé de trois transformations élémentaires, une déformation de Bain B, une déformation à réseau invariant (LIS) L et une rotation de corps rigide R.

$$F = B L R$$

(III.34)

La LIS peut être produite par différents mécanismes tels que le glissement dans les alliages ferreux, des fautes d'empilement dans les alliages à base cuivre (CuZnAl et CuAlBe) ou tels que le maclage pour les alliages NiTi. Le glissement et les fautes d'empilement produisent des domaines martensitiques où la déformation de transformation est uniforme ; ces domaines s'appellent variantes à plan d'habitat (HPV). Dans le cas du maclage, la notion de HPV existe également, mais la déformation de transformation n'est pas uniforme à l'intérieur de la HPV. La non-uniformité de la déformation de transformation à l'intérieur d'une HPV est à l'origine des inconvénients cités précédemment dans la détermination de l'énergie d'interaction pour les alliages NiTi.

Pour éclaircir ce point, nous avons utilisé, dans un premier temps, l'approche classique. Le calcul de la matrice d'interaction est effectué en utilisant la déformation intrinsèque de transformation définie par l'équation (III.1) pour chaque HPV à partir des normales au plan d'habitat $\{-0,889 \ 0,215 \ 0,404\}$ et des directions de transformation $\{0,434 \ 0,487 \ -0,754\}$. Ces vingt-quatre couples (n, m) sont énumérés dans le tableau III.10.

La matrice d'interaction ainsi obtenue (calcul classique entre deux HPV isolées) a la même forme que celle obtenue pour les alliages à base cuivre (voir le tableau III.11). Ce résultat correspond à la matrice donnée par Gall et Sehitoglu (1999).

Néanmoins cette matrice est incomplète car tous les GAA expérimentalement observés ne sont pas représentés dans cette matrice. Miyazaki et al. (1989) ont déterminé que 48 GAA peuvent être définis pour les alliages NiTi. Ces groupes sont formés de trois HPV et ont une morphologie triangulaire typique (figure III.17).

Variante	Normales aux plans d'habitat			Direction de transformation		
	n1	n2	n3	m1	m2	m3
1(+)	-0,8888	-0,215	0,4044	-0,4315	0,7574	-0,4874
1'(+)	-0,8888	0,4044	-0,215	-0,4315	-0,4874	0,7574
1'(-)	0,8888	-0,215	0,4044	0,4315	0,7574	-0,4874
1(-)	0,8888	0,4044	-0,215	0,4315	-0,4874	0,7574
4'(+)	0,215	-0,8888	0,4044	-0,7574	-0,4315	-0,4874
4(+)	-0,4044	-0,8888	-0,215	0,4874	-0,4315	0,7574
4(-)	0,215	0,8888	0,4044	-0,7574	0,4315	-0,4874
4'(-)	-0,4044	0,8888	-0,215	0,4874	0,4315	0,7574
2'(-)	-0,8888	0,215	0,4044	-0,4315	-0,7574	-0,4874
2(-)	-0,8888	-0,4044	-0,215	-0,4315	0,4874	0,7574
2(+)	0,8888	0,215	0,4044	0,4315	-0,7574	-0,4874
2'(+)	0,8888	-0,4044	-0,215	0,4315	0,4874	0,7574
3(+)	0,4044	-0,8888	-0,215	-0,4874	-0,4315	0,7574
3'(+)	-0,215	-0,8888	0,4044	0,7574	-0,4315	-0,4874
3'(-)	0,4044	0,8888	-0,215	-0,4874	0,4315	0,7574
3(-)	-0,215	0,8888	0,4044	0,7574	0,4315	-0,4874
6'(-)	-0,215	-0,4044	0,8888	0,7574	0,4874	0,4315
6(-)	0,4044	0,215	0,8888	-0,4874	-0,7574	0,4315
6(+)	0,215	0,4044	0,8888	-0,7574	-0,4874	0,4315
6'(+)	-0,4044	-0,215	0,8888	0,4874	0,7574	0,4315
5'(+)	-0,4044	0,215	0,8888	0,4874	-0,7574	0,4315
5(+)	0,215	-0,4044	0,8888	-0,7574	0,4874	0,4315
5(-)	0,4044	-0,215	0,8888	-0,4874	0,7574	0,4315
5'(-)	-0,215	0,4044	0,8888	0,7574	-0,4874	0,4315

Tableau III.10 : Normales aux plans d'habitat (n) et directions de transformation (m) pour les 24 HPV de martensite des alliages NiTi (Madangopal et al., 2000)

	1(+)	1(-)	1'(+)	1'(-)	2(+)	2(-)	2'(+)	2'(-)	3(+)	3(-)	3'(+)	3'(-)	4(+)	4(-)	4'(+)	4'(-)	5(+)	5(-)	5'(+)	5'(-)	6(+)	6(-)	6'(+)	6'(-)
1(+)	C	C	C	C	C			C				C				C	C							C
1(-)	C	C	C	C		C	C				C				C			C						C
1'(+)	C	C	C	C		C	C			C			C					C				C		
1'(-)	C	C	C	C	C			C	C				C								C	C		
2(+)	C			C	C	C	C	C				C				C					C	C		
2(-)		C	C		C	C	C	C			C				C				C				C	
2'(+)		C	C		C	C	C	C			C				C				C					C
2'(-)	C			C	C	C	C	C	C				C				C							C
3(+)				C				C	C	C	C	C	C			C		C					C	
3(-)			C				C		C	C	C	C		C	C		C					C		
3'(+)		C					C		C	C	C	C		C	C						C			C
3'(-)	C				C				C	C	C	C	C			C				C				C
4(+)				C				C	C			C	C	C	C	C			C					C
4(-)			C						C	C			C	C	C	C					C			C
4'(+)		C							C	C			C	C	C	C	C					C		
4'(-)	C				C				C			C	C	C	C	C							C	
5(+)	C							C		C					C		C	C	C	C	C			C
5(-)		C						C		C						C	C	C	C	C			C	C
5'(+)			C									C	C				C	C	C	C			C	C
5'(-)				C	C							C			C		C	C	C	C				C
6(+)				C	C				C						C		C				C	C	C	C
6(-)			C						C							C					C	C		C
6'(+)		C										C	C								C	C		C
6'(-)	C							C				C					C				C	C	C	C

Tableau III.11 : Matrice d'interaction déterminée par la formulation classique (normales aux plans d'habitat et directions de transformation). Cette matrice est incomplète car tous les GAA possibles n'y sont pas représentés. Par exemple le GAA de la figure III.17 n'apparaît pas (zones hachurées). Les regroupements 3(-)/4(-)/5'(-)/6(+), 2'(-)/3(+)/5'(-) et 5(-)/5'(+)/6(-)/6'(+) représentés par les cases grises dans ce tableau seront analysés dans la suite.

Les aspects microstructuraux de l'auto-accommodation dans les NiTi ont été largement étudiés au début des années 90 en utilisant la microscopie électronique. Miyazaki (1989), Madangopal et Banerjee (1992) ont considéré deux conditions pour l'auto-accommodation : la condition macroscopique et la condition microscopique. Pour la condition macroscopique, il s'agit de rassembler des HPV susceptibles de donner, lorsqu'elles sont enchevêtrées, une déformation macroscopique nulle, cette condition est obtenue en minimisant la déformation totale de transformation par interaction entre plaquettes ou entre groupes. Quant à la condition microscopique, elle stipule que l'interface formée entre les HPV doit être cohérente.

La condition macroscopique donne plusieurs regroupements auto-accommodants possibles. Miyazaki et al. ont déterminé (fig. III.19) la position des plans d'habitat (points noirs) et les directions de transformation (flèches). On peut, à partir de ces données, créer, a priori, des GAA composés de 3, 4, 6 ou 8 HPV autour des pôles $\{111\}$, $\{011\}$ et $\{001\}$. Des groupes composés de trois ou de six HPV regroupés autour des pôles $\{111\}$ sont susceptibles d'être créés (voir exemple en figure III.20). Des combinaisons de quatre ou de huit HPV autour des pôles $\{001\}$ sont également susceptibles de former des GAA (voir exemple en figure III.21). On a aussi une possibilité de quatre variantes formant un GAA autour des pôles $\{011\}$. Toutes ces solutions satisfont la condition macroscopique et ont la même opportunité de former des GAA du point de vue déformation macroscopique.

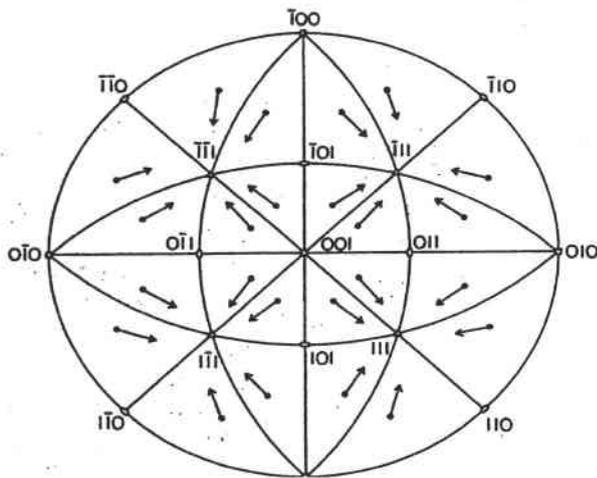


Fig. III.19 : Projection stéréographique standard $(001)_{b2}$ montrant les plans d'habitat calculés (points noirs) et les directions de transformation correspondantes (flèches) (Miyazaki et al., 1989).

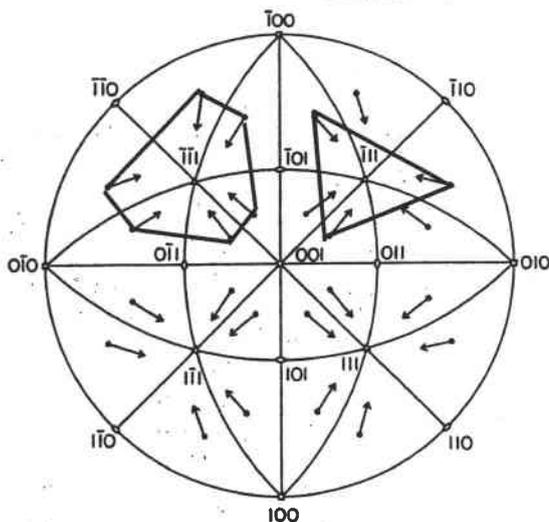


Fig. III.20 : Exemple de regroupements de 2 ou de 6 HPV autour des pôles $\{111\}$.

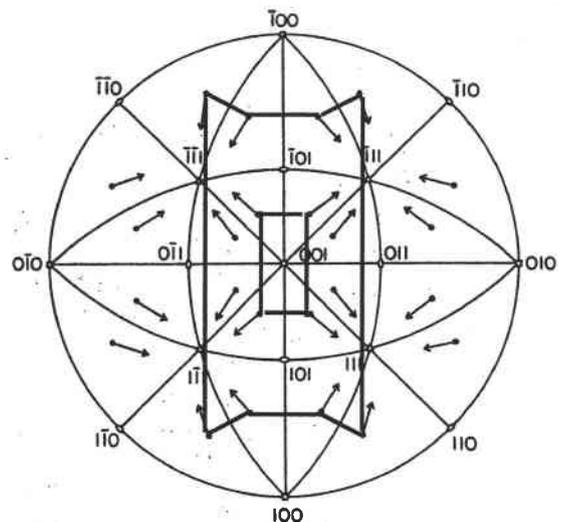


Fig. III.21 : Exemple de regroupements de 4 ou de 8 HPV autour des pôles $\{001\}$.

D'un point de vue expérimental, les observations montrent toujours des regroupements de HPV autour des pôles $\{100\}$ avec un arrangement de trois HPV plutôt que de quatre (Miyazaki et al., 1989) (Wayman, 1986). Le critère macroscopique ne donne aucun avantage au regroupement de quatre variantes par rapport au regroupement de trois. C'est donc le critère microscopique qui prédomine pour sélectionner un arrangement cristallographique raisonnable parmi toutes ces possibilités (Miyazaki et al., 1989).

En considérant cette condition microscopique excluant les solutions autour des pôles $\{111\}$ et $\{011\}$ et favorisant le cas de trois variantes autour des pôles $\{100\}$, Miyazaki et al. considèrent l'existence de 48 GAA se composant de trois HPV avec une morphologie triangulaire (Miyazaki et al., 1989). Ces 48 combinaisons sont énumérées dans le tableau III.12. Si nous comparons maintenant ces 48 GAA à ceux qui apparaissent dans la matrice d'interaction obtenue en utilisant les vingt-quatre HPV du tableau III.11, plusieurs conclusions peuvent être tirées :

- Autour des pôles $\{111\}$, trois variantes auto-accommodantes obtenues par la condition macroscopique et réfutées par la condition microscopique, comme par exemple la solution $[2'(-), 3(+), 5'(-)]$, incluent des variantes incompatibles (au sens de la matrice classique) : $2'(-)/5'(-)$ et $3(+)/5'(-)$. Ces groupes n'apparaissent pas dans cette matrice.
- Autour des pôles $\{011\}$, quatre variantes auto-accommodantes obtenues par la condition macroscopique et réfutées par la condition microscopique, comme le groupe $[3(-), 4(-), 5'(-), 6(+)]$, incluent également des incompatibilités (toujours au sens de la matrice classique) : $3(-)/5'(-)$, $4(-)/6(+)$ et $5'(-)/6(+)$. Ces groupes n'apparaissent pas dans cette matrice.
- Autour des pôles $\{100\}$, quatre variantes auto-accommodantes, comme par exemple le groupe formé des HPV $[5(-), 5'(+) , 6(-), 6'(+)]$, sont toutes compatibles deux à deux. Ces groupes sont complètement représentés dans la matrice habituelle.

La matrice d'interaction habituelle est donc conforme à certaines observations : aucun GAA autour des pôles $\{111\}$ et $\{011\}$ n'est observé, par contre il existe des GAA autour des pôles

{100}. Voir tableau III.11.

Dans ce tableau III.11, les compatibilités entre les variantes qui proviennent d'un regroupement autour des pôles {110} ne sont pas entièrement représentées. Voir, par exemple, le regroupement 3(-), 4(-), 5'(-), 6(+) cases gris foncé dans le tableau III.11 où plusieurs HPV telles que les HPV 3(-) et 5'(-) sont représentées comme incompatibles.

De la même façon, les compatibilités entre les variantes qui proviennent d'un regroupement autour des pôles {111} ne sont pas entièrement représentées. Voir, par exemple, le regroupement 2'(-), 3(+), 5'(-) cases gris clair dans le tableau III.11 où, là encore, il subsiste des incompatibilités.

Par contre, les compatibilités entre les variantes qui proviennent d'un regroupement autour des pôles {100} sont entièrement représentées. Voir, par exemple, le regroupement 5(-), 5'(+) , 6(-), 6'(+) cases noires dans le tableau III.11 où toutes les HPV de ce regroupement sont données compatibles.

Cette matrice n'est pas fausse, mais incomplète (l'hypothèse déformation de transformation uniforme dans la variante est donc trop forte).

GAA composé de 3 variantes		
1(-), 1'(+) , 2(-)	3(-), 3'(+) , 4(-)	5(-), 5'(+) , 6(-)
1(-), 1'(+) , 2'(+))	3(-), 3'(+) , 4'(+))	5(-), 5'(+) , 6'(+))
2(-), 2'(+) , 1(-)	4(-), 4'(+) , 3(-)	6(-), 6'(+) , 5(-)
2(-), 2'(+) , 1'(+))	4(-), 4'(+) , 3'(+))	6(-), 6'(+) , 5'(+))
1(+), 1'(-) , 2(+)	3(+), 3'(-) , 4(+)	5(+), 5'(-) , 6(+)
1(+), 1'(-) , 2'(-))	3(+), 3'(-) , 4'(-))	5(+), 5'(-) , 6'(-))
2(+), 2'(-) , 1(+)	4(+), 4'(-) , 3(+)	6(+), 6'(-) , 5(+)
2(+), 2'(-) , 1'(-))	4(+), 4'(-) , 3'(-))	6(+), 6'(-) , 5'(-))
1(-), 1'(+) , 2(+)	3(-), 3'(+) , 4(+)	5(-), 5'(+) , 6(+)
1(-), 1'(+) , 2'(-))	3(-), 3'(+) , 4'(-))	5(-), 5'(+) , 6'(-))
2(+), 2'(-) , 1(-)	4(+), 4'(-) , 3(-)	6(+), 6'(-) , 5(-)
2(+), 2'(-) , 1'(+))	4(+), 4'(-) , 3'(+))	6(+), 6'(-) , 5'(+))
1(+), 1'(-) , 2(-)	3(+), 3'(-) , 4(-)	5(+), 5'(-) , 6(-)
1(+), 1'(-) , 2'(+))	3(+), 3'(-) , 4'(+))	5(+), 5'(-) , 6'(+))
2(-), 2'(+) , 1(+)	4(-), 4'(+) , 3(+)	6(-), 6'(+) , 5(+)
2(-), 2'(+) , 1'(-))	4(-), 4'(+) , 3'(-))	6(-), 6'(+) , 5'(-))

Trois interfaces sont compatibles au sens de la matrice d'interaction classique.

Une seule interface est compatible sur les trois au sens de la matrice d'interaction

Tableau III.12 : Définition des 48 GAA possibles de morphologie triangulaire qui satisfont les conditions nécessaires à l'auto-accommodation (Miyazaki et al., 1989).

Les incohérences interviennent quand nous examinons la compatibilité des 48 groupes de trois variantes expérimentalement observés autour des pôles {100} (tableau III.12). Ces 48 combinaisons peuvent être divisées en deux parties. Dans les groupes tels que [1(-),1'(+),2(-)] où toutes les interfaces sont compatibles au sens de la matrice d'interaction classique. Ces groupes sont indiqués en gras dans le tableau III.12. Mais pour d'autres combinaisons telles que le groupe [1(-), 1'(+) , 2'(-)], les interactions entre les HPV 1(-) et 2'(-) et entre 1'(+) et 2'(-) sont de type incompatible (zones hachurées dans la matrice d'interaction montrée dans le tableau III.11). En fait, ces 48 combinaisons existent et devraient apparaître dans la matrice d'interaction. Par exemple la combinaison [1(-), 1'(+) , 2'(-)] a été expérimentalement observée (voir la figure III.17) mais n'apparaît qu'en partie dans la matrice. Ainsi nous pouvons conclure que la matrice d'interaction déterminée à partir des déformations de transformation des 24 HPV n'est pas adaptée pour représenter l'énergie d'interaction dans les alliages NiTi.

III.4.3 Nouvelle matrice d'interaction pour les alliages NiTi

Ces problèmes d'auto-accommodation dans les NiTi proviennent de la microstructure martensitique maclée. Nous suggérons de tenir compte de l'existence des CV pour déterminer la matrice d'interaction de ces alliages.

La méthode développée dans la partie précédente pour déterminer l'énergie d'interaction entre les groupes de HPV pour les alliages à base cuivre est maintenant appliquée à l'échelle des CV.

Dans une formulation en transformation finie, le gradient de la transformation locale F qui transforme un élément d'austenite en CV se compose d'une déformation de Bain B et d'une rotation R de corps rigide.

$$F = R B \quad (III.35)$$

L'expression du tenseur de déformation de Green-Lagrange (E) dans la configuration de référence est :

$$E = \frac{1}{2}(F^t F - I) \tag{III.36}$$

où I représente le tenseur identité d'ordre deux. A partir de l'équation (III.35) nous obtenons

$$E = \frac{1}{2}(B^t R^t R B - I) = E = \frac{1}{2}(B^t B - I) \quad \text{car } R^t R = I \text{ (R: rotation)} \tag{III.37}$$

Comme les douze tenseurs de déformation de Bain sont connus (Madangopal et al., 2000) (tableau III.13), les douze tenseurs de déformation de Green-Lagrange correspondant à chaque CV peuvent être déterminés (tableau III.14).

CV	Déformation de Bain B_{ij}								
	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}	B_{21}	B_{31}	B_{32}
1	0,9582	1,0213	1,0213	0,0907	-0,0907	-0,055	0	0	-0,055
1'	0,9582	1,0213	1,0213	-0,0907	0,0907	-0,055	0	0	-0,055
2	0,9582	1,0213	1,0213	0,0907	-0,0907	0,055	0	0	0,055
2'	0,9582	1,0213	1,0213	-0,0907	0,0907	0,055	0	0	0,055
3	1,0213	0,9582	1,0213	0	0,055	-0,0907	-0,0907	0,055	0
3'	1,0213	0,9582	1,0213	0	0,055	0,0907	0,0907	0,055	0
4	1,0213	0,9582	1,0213	0	-0,055	0,0907	-0,0907	-0,055	0
4'	1,0213	0,9582	1,0213	0	-0,055	-0,0907	0,0907	-0,055	0
5	1,0213	1,0213	0,9582	0,055	0	0	0,055	-0,0907	-0,0907
5'	1,0213	1,0213	0,9582	0,055	0	0	0,055	0,0907	0,0907
6	1,0213	1,0213	0,9582	-0,055	0	0	-0,055	0,0907	-0,0907
6'	1,0213	1,0213	0,9582	-0,055	0	0	-0,055	-0,0907	0,0907

Tableau. III.13 : Déformation de Bain (Madangopal et al., 2000) pour les alliages NiTi.

CV	Déformation de Green-Lagrange E_{ij}								
	E11	E22	E33	E12	E13	E23	E21	E31	E32
1	-0,0409	0,0272	0,0271	0,0435	-0,0435	-0,0603	0,0435	-0,0435	-0,0603
1'	-0,0409	0,0272	0,0271	-0,0435	0,0435	-0,0603	-0,0435	0,0435	-0,0603
2	-0,0409	0,0272	0,0271	0,0435	0,0435	0,0603	0,0435	0,0435	0,0603
2'	-0,0409	0,0272	0,0271	-0,0435	-0,0435	0,0603	-0,0435	-0,0435	0,0603
3	0,0271	-0,0409	0,0271	-0,0435	0,0603	-0,0435	-0,0435	0,0603	-0,0435
3'	0,0271	-0,0409	0,0271	0,0435	0,0603	0,0435	0,0435	0,0603	0,0435
4	0,0271	-0,0409	0,0271	-0,0435	-0,0603	0,0435	-0,0435	-0,0603	-0,0435
4'	0,0271	-0,0409	0,0271	0,0435	-0,0603	-0,0435	0,0435	-0,0603	0,0435
5	0,0271	0,0271	-0,0409	0,0603	-0,0435	-0,0435	0,0603	-0,0435	-0,0435
5'	0,0271	0,0271	-0,0409	0,0603	0,0435	0,0435	0,0603	0,0435	0,0435
6	0,0271	0,0271	-0,0409	-0,0603	0,0435	-0,0435	-0,0603	0,0435	-0,0435
6'	0,0271	0,0271	-0,0409	-0,0603	-0,0435	0,0435	-0,0603	-0,0435	0,0435

Tableau III.14 : Déformation de Green-Lagrange (Madangopal et al., 2000).

Dans cette nouvelle approche du problème de l'interaction entre variantes dans les alliages NiTi, les deux HPV considérées sont maintenant remplacées par les quatre CV qui les composent, formant ainsi la microstructure de la figure III.22.

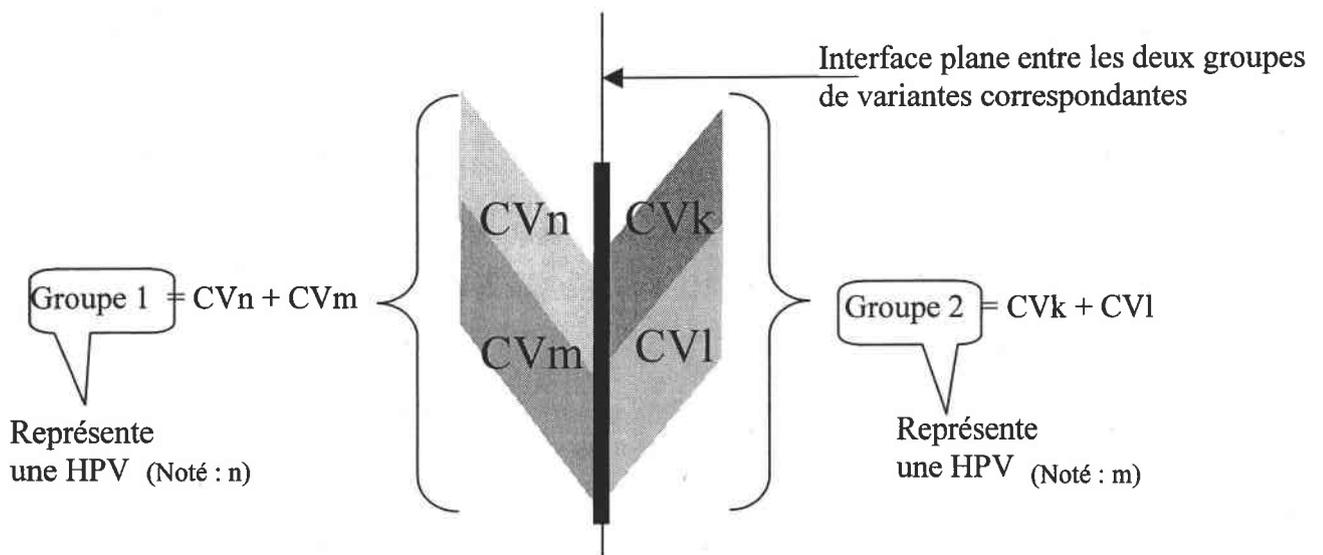


Fig. III.22 : Microstructure utilisée dans la nouvelle formulation. On remplace les quatre HPV des AMF à base cuivre par quatre CV des AMF NiTi.

 Cette microstructure représente l'interaction entre deux HPV et non pas entre quatre HPV comme dans la microstructure utilisée pour résoudre le problème du fluage dans le cas des cuivreux.

La détermination de l'énergie d'interaction développée dans le paragraphe II.3 est maintenant appliquée à cette microstructure et la définition (III.24) de la matrice d'interaction devient :

$$H^{nm} = \frac{1}{a_n a_m} \left[a_m (\theta E_{ij}^{CVn} (1-\theta) E_{ij}^{CVm}) - a_n (\theta E_{ij}^{CVk} + (1-\theta) E_{ij}^{CVl}) \right] Q_{ijkl}^{mn} \quad (III.38)$$

$$\left[a_m (\theta E_{kl}^{CVn} + (1-\theta) E_{kl}^{CVm}) - a_n (\theta E_{kl}^{CVk} + (1-\theta) E_{kl}^{CVl}) \right]$$

où E^{CVn} et E^{CVm} (resp. E^{CVk} , E^{CVl}) représentent les tenseurs de déformation de Green-Lagrange des deux CV impliqués dans la HPV n (resp. m). θ représente la fraction volumique de macles CVn dans la HPV n et de la macle CVk dans la HPV m. Les coefficients a_n et a_m sont définis par l'équation (III.25) en respectant les tenseurs de déformation des CV et de l'opérateur interfacial Q^{nm} défini par l'équation (III.20) tout en considérant la normale N de l'interface entre les deux HPV n et m. Une nouvelle matrice d'interaction (voir tableau III.15) est ainsi définie pour les alliages NiTi. Dans cette matrice de nouvelles solutions compatibles apparaissent et trois GAA formés de 8 HPV apparaissent également. Ceci donne 13 interactions de type compatible pour les alliages de NiTi, ce qui est supérieur aux neuf interactions de type compatible dans les cuivreux.

	1(+)	1(-)	1'(+)	1'(-)	2(+)	2(-)	2'(+)	2'(-)	3(+)	3(-)	3'(+)	3'(-)	4(+)	4(-)	4'(+)	4'(-)	5(+)	5(-)	5'(+)	5'(-)	6(+)	6(-)	6'(+)	6'(-)
1(+)	C	C	C	C	C	C	C	C				C				C	C			C	C			C
1(-)	C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C			C						C
1'(+)	C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C			C					C	
1'(-)	C	C	C	C	C	C	C	C	C				C				C			C	C			C
2(+)	C	C	C	C	C	C	C	C				C				C	C			C	C			C
2(-)	C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C			C				C		
2'(+)	C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C			C					C	
2'(-)	C	C	C	C	C	C	C	C	C				C				C			C	C			C
3(+)				C				C	C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C	
3(-)		C	C			C	C		C	C	C	C	C	C	C	C	C				C			
3'(+)		C	C			C	C		C	C	C	C	C	C	C	C				C				C
3'(-)	C				C				C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C	
4(+)				C				C	C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C	
4(-)		C	C			C	C		C	C	C	C	C	C	C	C					C			C
4'(+)		C	C			C	C		C	C	C	C	C	C	C	C	C				C			
4'(-)	C				C				C	C	C	C	C	C	C	C		C	C			C	C	
5(+)	C			C	C			C		C					C		C	C	C	C	C	C	C	C
5(-)		C					C		C			C	C			C	C	C	C	C	C	C	C	C
5'(+)			C			C			C			C	C			C	C	C	C	C	C	C	C	C
5'(-)				C	C			C				C			C		C	C	C	C	C	C	C	C
6(+)				C	C			C		C					C		C	C	C	C	C	C	C	C
6(-)			C			C			C			C	C			C	C	C	C	C	C	C	C	C
6'(+)		C				C			C			C	C			C	C	C	C	C	C	C	C	C
6'(-)	C			C	C			C			C				C		C	C	C	C	C	C	C	C

Tableau III.15 : Nouvelle matrice d'interaction pour les alliages Ni-Ti. Dans cette matrice, tous les GAA formés de 3 HPV du tableau 6 apparaissent. Par exemple, le GAA de la figure 10 apparaît dans cette matrice (zones grisées). On observe aussi 3 GAA formés de 8 HPV (Nictlaeys et al., sous presse).

Dans cette nouvelle matrice, les solutions incompatibles définies par Miyasaki et al. (1989) autour des pôles {111} et {011} telles que [2'(-), 3(+), 5'(-)] et [3(-), 4(-), 5'(+) , 6(+)] restent rejetées, ce qui est conforme aux observations (nous n'avons donc pas fait apparaître dans notre nouvelle matrice des GAA inexistantes). Une modification est observée autour des pôles {100} où les 48 GAA sont maintenant compatibles. Nous sommes donc en accord avec les observations expérimentales de Miyazaki et al. (1989).

Nous pouvons conclure que le fait de prendre en compte la microstructure de maillage typique dans les NiTi a considérablement amélioré la matrice d'interaction.

III.5 Conclusion

L'énergie d'interaction stockée dans les alliages à mémoire de forme au cours de la transformation Austénite \Rightarrow Martensite a été déterminée en utilisant une analyse micromécanique basée sur une description des aspects microstructuraux de la transformation martensitique des NiTi et des alliages à base cuivre.

Le but de ce travail n'était pas de construire une microstructure accommodante à une échelle très fine comme Battacharya (1992), mais d'établir une matrice d'interaction utilisable pour décrire le comportement d'un monocristal d'austenite basé sur un schéma thermomécanique avec des variables internes à une échelle cristallographique comme Patoor et al. (1988).

La détermination classique de cette matrice a été faite en considérant l'interaction entre deux domaines martensitiques ayant une déformation de transformation uniforme (Fassi-Fehri et al., 1987) (El Amrani, 1994) (Agouram et al., 1998) ou entre deux domaines où l'existence d'un mélange austénite-martensite est assuré (Siredey et al., 1999) (Patoor et al., 1997). La limitation de ces dernières approches a été montrée pour de faibles taux de contrainte pour les alliages à base cuivre (Entemeyer, 1996) et dans ce travail pour les alliages NiTi. Dans ces derniers alliages, nous avons établi que les approches classiques ne permettent pas de rendre compte de tous les GAA de trois variantes observées expérimentalement.

Une nouvelle formulation basée sur la non-uniformité de la déformation de transformation dans les domaines considérés est proposée avec succès dans ce chapitre.

A partir de l'observation microstructurale de la phase martensitique formée pour des faibles taux de contrainte, chaque domaine a été considéré comme un groupe de deux variantes compatibles. Ceci permet de déterminer de nouvelles solutions compatibles et mène à une diminution de l'énergie d'interaction dans un état entièrement martensitique. Cette non-uniformité de la déformation de transformation a été également appliquée aux alliages NiTi où les HPV sont composées de deux CV. Dans ce cas la nouvelle formulation donne une description complète de la structure auto-accommodante observée dans ces alliages. La nouvelle matrice d'interaction exclut les GAA formés de trois ou de quatre HPV déterminées à partir du critère macroscopique mais qui ne satisfont pas le critère microscopique dans le sens de Miyazaki (1989) et elle détermine entièrement les interactions compatibles pour les 48 GAA constitués de trois variantes observés par Miyazaki et al. (1989) et Wayman (1986).

Dans le chapitre suivant, cette matrice d'interaction sera implantée dans un modèle micromécanique pour déterminer le comportement des AMF monocristallins à base cuivre soumis à de faibles taux de contrainte. Cette matrice sera également implémentée dans un

modèle autocohérent pour l'étude des polycristaux d'AMF.

CHAPITRE IV

MODELISATION DU

FLUAGE ANISOTHERME

IV.1 Introduction

On définit deux modes de chargements thermomécaniques élémentaires dans les AMF : soit la contrainte appliquée varie à température imposée constante (comportement superélastique), soit la contrainte macroscopique est imposée et la température varie (fluage anisotherme). Le présent travail porte sur la modélisation du fluage anisotherme de ces alliages qui se caractérise par la formation de plaquettes de martensite lors d'une variation de température pour une contrainte appliquée extérieure constante.

Comme cela a été présenté dans l'introduction du chapitre II, l'approche micromécanique détermine tout d'abord la loi de comportement d'un cristal d'austénite, puis considère que cette loi décrit le comportement d'un grain dans un polycristal et utilise alors le modèle autocohérent pour simuler le comportement du polycristal. Cette approche peut être appliquée en considérant la température comme variable de contrôle au même titre que la contrainte (Entemeyer, 1996). De bons résultats sont obtenus quant à l'effet superélastique mais les résultats sont plus discutables pour le fluage anisotherme en particulier sous faible contrainte. Cette difficulté se retrouve également dans les approches phénoménologiques (Leclercq et al., 1996). L'origine physique probable de ce problème réside dans le nombre important de variantes activées lors d'un refroidissement sous faible contrainte qui modifie totalement la microstructure de la phase martensitique. En superélasticité, ou en fluage anisotherme sous forte contrainte, des domaines intragranulaires bien délimités, constitués d'un mélange d'austénite et de martensite, sont majoritairement formés (Siredey et al., 1999). Aux basses contraintes les plaquettes de martensite sont plus enchevêtrées, allant jusqu'à constituer à contrainte nulle des groupes autoaccommodants.

C'est pourquoi une nouvelle approche, basée sur la notion de groupe de variantes et décrivant plus finement la microstructure obtenue lors d'un fluage, a été proposée au chapitre III. Cette approche nous a amené à définir une nouvelle matrice d'interaction. Cette matrice va être exploitée dans ce chapitre.

Nous nous intéresserons tout d'abord à la modélisation de l'effet superthermoélastique (fluage anisotherme) pour les AMF à base cuivre de type CuAlBe et CuZnAl monocristallin. Ensuite, nous étendrons cette étude aux polycristaux de manière analogue à D. Entemeyer.

IV.2 Fluage anisotherme du monocristal

IV.2.1 Introduction

Le but de ce paragraphe est de montrer la démarche adoptée afin de modéliser le fluage anisotherme d'un monocristal soumis à de faibles taux de contrainte. L'étude portera sur un alliage à base de cuivre de type CuAlBe.

Le modèle proposé ici reprend l'idée principale de la nouvelle formulation décrite dans les chapitres précédents. En effet la notion de groupe de variantes est la clé de voûte de cette approche. Les équations constitutives de ce modèle ont été établies dans le chapitre II, en particulier pour les deux modules tangents thermomécaniques. La première modification par rapport à un modèle classique est que nous considérons 132 groupes de variantes au lieu des 24 variantes habituelles. Ces groupes sont composés de deux variantes compatibles au sens de la matrice d'interaction classiquement utilisée.

Le problème rencontré depuis de nombreuses années est représenté sur la figure IV.1. L'expérience montre que la déformation macroscopique de transformation d'un monocristal obtenue pour une transformation complète diminue avec la contrainte appliquée. Cette diminution est certes moins progressive que celle observée pour les polycristaux mais demeure cependant très sensible aux faibles contraintes. Or les modèles classiquement utilisés ignorent ce phénomène.

Considérons le cas d'un monocristal d'austénite soumis à une traction uniaxiale dans la direction 1. Une variante de martensite s'active quand le critère (II.40) est satisfait, c'est-à-dire :

$$\sigma_{11} R_{11} \geq \frac{B}{g} (T - M_s) \quad (\text{IV.1})$$

L'application de ce critère ne permet jamais d'activer des variantes d'orientation différente. En effet, quel que soit le niveau de la contrainte appliquée, seule la variante la mieux orientée (ou les variantes les mieux orientées) sera activée. Pour décrire la diminution de la déformation globale de transformation avec la contrainte appliquée dans le cas d'un monocristal, la définition d'un nouveau critère de transformation est incontournable. Ce nouveau critère de sélection doit tenir compte de l'effet d'une faible perturbation dans le cas

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

où plusieurs variantes sont susceptibles de s'activer car très proches énergétiquement. Une légère fluctuation de contrainte à l'intérieur du cristal, une faible hétérogénéité, ou un défaut peuvent freiner la variante la mieux orientée et permettre ainsi à des variantes, moins bien orientées, de se déclencher.

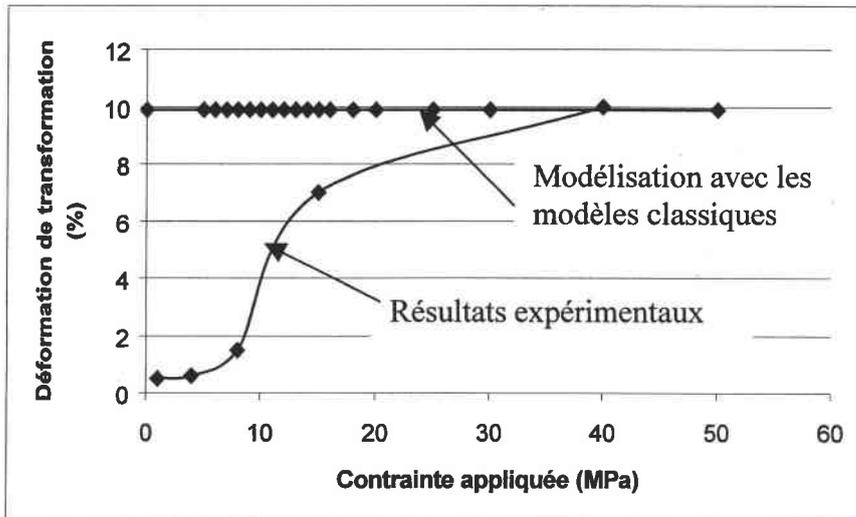


Fig. IV.1 : Déformation maximale de transformation obtenue lors d'essais de fluage anisotherme et lors de la modélisation classique de ces mêmes essais, en fonction de la contrainte appliquée. Les modèles classiques ne sont pas adaptés à la simulation de ce type d'essai.

C'est pourquoi la première chose à vérifier est que le nombre de variantes potentiellement actives augmente avec la nouvelle formulation, c'est-à-dire avec la prise en compte des groupes. Cette première condition est nécessaire pour envisager de continuer l'élaboration du modèle.

IV.2.2 Solution énergétiquement voisine

Pour définir les solutions considérées comme énergétiquement voisines, nous allons, pour une orientation cristalline donnée, déterminer la contrainte résolue maximum ($\tau_{\max} = \sigma_{ij} R_{ij}^n$) parmi tous les tenseurs d'orientation R_{ij}^n possibles. On considère une faible fluctuation notée Δ de la contrainte résolue maximum et toutes les solutions satisfaisant la condition suivante :

$$\sigma_{ij} R_{ij}^n \geq \tau_{\max} - \Delta \quad (\text{IV.2})$$

sont considérées comme des solutions énergétiquement voisines (SEV).

On détermine tout d'abord l'évolution du nombre de SEV avec la contrainte appliquée en considérant les 24 variantes de martensite. On effectue ensuite la même détermination pour les 132 groupes en sachant que l'orientation R_{ij} d'un groupe est égale à la moyenne des orientations des 2 variantes qui le composent.

$$R_{ij}^{1/2} = (R_{ij}^1 + R_{ij}^2)/2 \quad (\text{IV.3})$$

On trace ensuite le nombre de SEV en fonction de la contrainte pour cette formulation.

La comparaison des 2 courbes ainsi obtenues nous montre que pour une contrainte faible donnée le nombre de SEV obtenues en considérant les groupes est beaucoup plus important qu'avec la formulation habituelle et ceci en considérant une fluctuation Δ très faible égale à 1 MPa (voir Fig. IV.2).

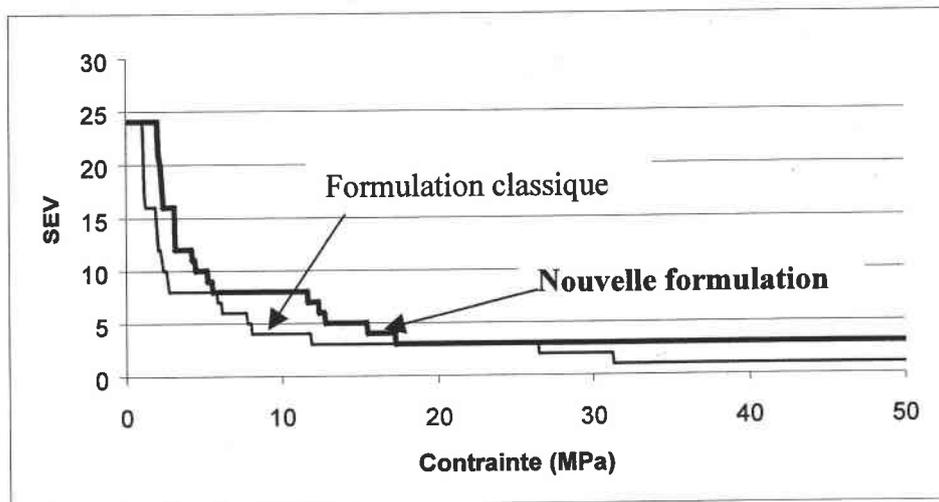


Fig. IV.2 : Comparaison du nombre de SEV déterminées pour $\Delta=1$ MPa en fonction de la contrainte appliquée pour la nouvelle formulation et pour la formulation classique. Pour une contrainte fixée, le nombre de SEV est plus important lorsqu'on utilise la nouvelle approche.

L'augmentation du nombre de solutions énergétiquement voisines est un résultat encourageant pour la suite de la modélisation.

Ce calcul étant réalisé pour une orientation cristallographique donnée, on est en droit de se demander si ce résultat n'est pas le fruit du hasard. C'est pourquoi nous avons reconduit ce

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

calcul pour plusieurs orientations cristallographiques balayant le triangle standard. Les résultats obtenus sont identiques. Ne pouvant pas montrer tous ces résultats un à un nous les avons mis sous forme d'un nuage de points. La comparaison entre les nuages de points obtenus pour les groupes de variantes et pour la formulation initiale nous montre une nette augmentation du nombre de solutions énergétiquement voisines lorsque l'on utilise la notion de groupe (voir Fig. IV.3a et IV.3b).

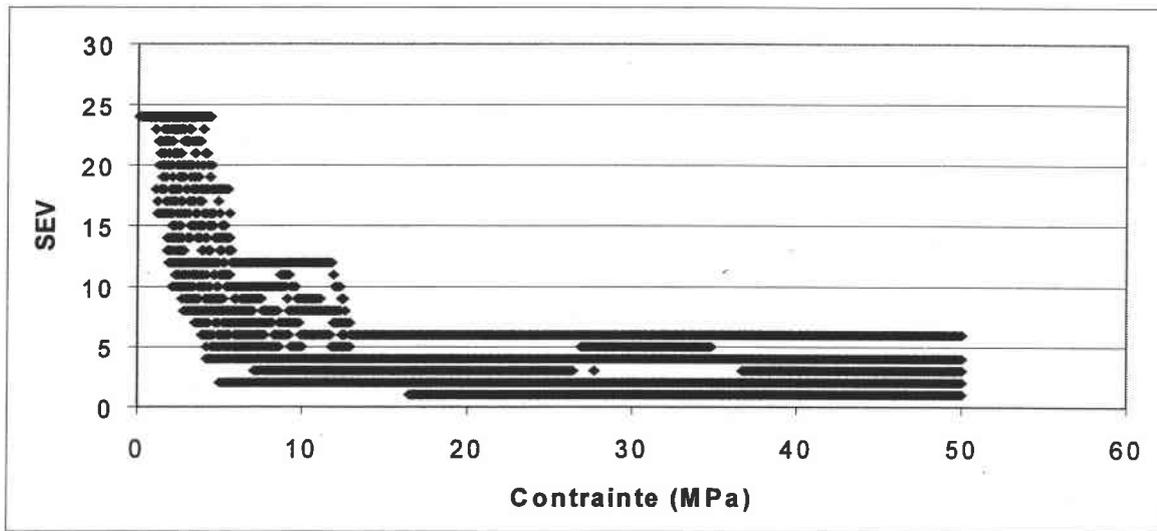


Fig. IV.3a : Nombre de solutions énergétiquement voisines en fonction de la contrainte pour des orientations cristallines balayant tout le triangle standard pour la formulation classique.

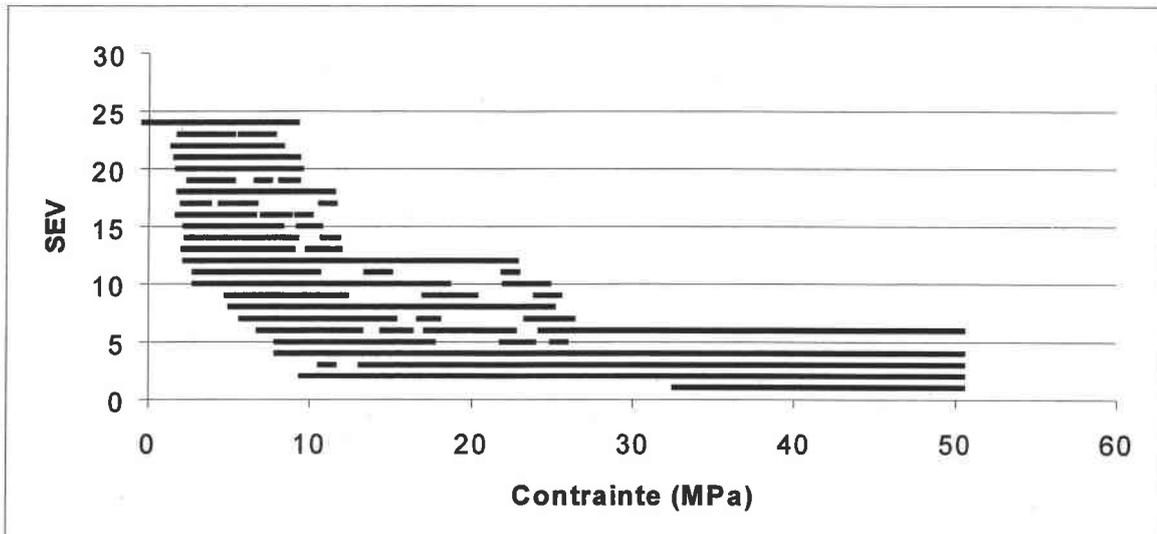


Fig. IV.3b : Nombre de solutions énergétiquement voisines en fonction de la contrainte pour des orientations cristallines balayant tout le triangle standard pour la nouvelle formulation.

Cette première étape permet d'affirmer que prendre en compte les groupes de variantes augmente le nombre de solutions énergétiquement voisines.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

La nouvelle matrice d'interaction faisant intervenir les groupes de variantes permet de diminuer l'énergie d'interaction pour des rassemblements de 4 variantes. Cette étape est nécessaire mais pas suffisante. Un nouveau critère doit être défini, et c'est la combinaison de la nouvelle formulation (par l'intermédiaire de la nouvelle matrice d'interaction) et du critère qui donnera des résultats significatifs se rapprochant de l'expérience.

IV.2.3 Critère de sélection des variantes

L'application d'une contrainte sur le monocristal en fluage anisotherme a pour effet de sélectionner les variantes les mieux orientées par rapport à la direction du chargement. Cet effet Magee est tout particulièrement mis en évidence dans les monocristaux, où une variante unique est sélectionnée en traction uniaxiale. Cependant cette sélection de variantes par la contrainte appliquée devient inopérante aux faibles niveaux de contrainte, la formation de plusieurs variantes de martensite conduisant alors à une très forte réduction de la déformation moyenne de transformation sur le cristal considéré. On obtient ainsi une transition entre la grande déformation associée à la formation d'une variante unique et la transformation sans déformation macroscopique observable qui accompagne la formation des structures autoaccommodantes lors d'un refroidissement sans contrainte (Fig. IV.4).



Fig. IV.4 : Apparition de groupes autoaccommodants dans un AMF à base cuivre. Ces variantes ne donnent aucune déformation macroscopique mis à part un léger cisaillement (voir tableau III.3).

Aux faibles contraintes la formation simultanée de plusieurs variantes de martensite conduit à utiliser la matrice d'interaction entre groupes de variantes pour déterminer l'énergie

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

d'interaction. Cette utilisation a pour conséquence d'augmenter fortement le nombre de solutions énergétiquement voisines qui satisfont la condition suivante :

$$\sigma_{ij} R_{ij}^N + \sum_M H^{NM} f^M = \frac{B}{g} (T - Ms) \quad (IV.4)$$

où R^N représente le tenseur d'orientation du groupe N composé des variantes n et m :

$$R^N = \theta R^n + (1 - \theta) R^m \quad (IV.5)$$

avec θ la fraction volumique de la variante n dans le groupe N. H^{NM} représente alors la matrice d'interaction entre les 132 groupes définis au chapitre III.

Parmi toutes les combinaisons possibles, la solution effectivement réalisée sera celle qui maximise la dissipation définie comme :

$$D = \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^T \quad \text{avec} \quad \dot{\epsilon}_{ij}^T = \sum_N R_{ij}^N \dot{f}^N \quad (IV.6)$$

Cependant la contrainte étant maintenue constante pendant toute la phase de refroidissement du cristal, la même variante est sélectionnée à forte contrainte et à faible contrainte. En effet cette approche considère que la contrainte appliquée est parfaitement uniforme dans le cristal. Cette hypothèse est trop restrictive et néglige les faibles fluctuations de contrainte liées à la présence d'hétérogénéité dans le cristal. On introduit une faible fluctuation $\Delta\sigma$ de la contrainte appliquée pour tenir compte de ce phénomène et on définit une fluctuation ΔD de la dissipation maximale correspondant à la fluctuation de contrainte. Aux contraintes élevées une seule variante produit une dissipation comprise entre D^{maxi} et $(D^{\text{maxi}} - \Delta D)$ voir figure IV.5a. Quand la contrainte diminue, un nombre croissant de solutions énergétiquement proches et potentiellement actives possède une dissipation comprise entre D^{maxi} et $(D^{\text{maxi}} - \Delta D)$ voir figure IV.5b.

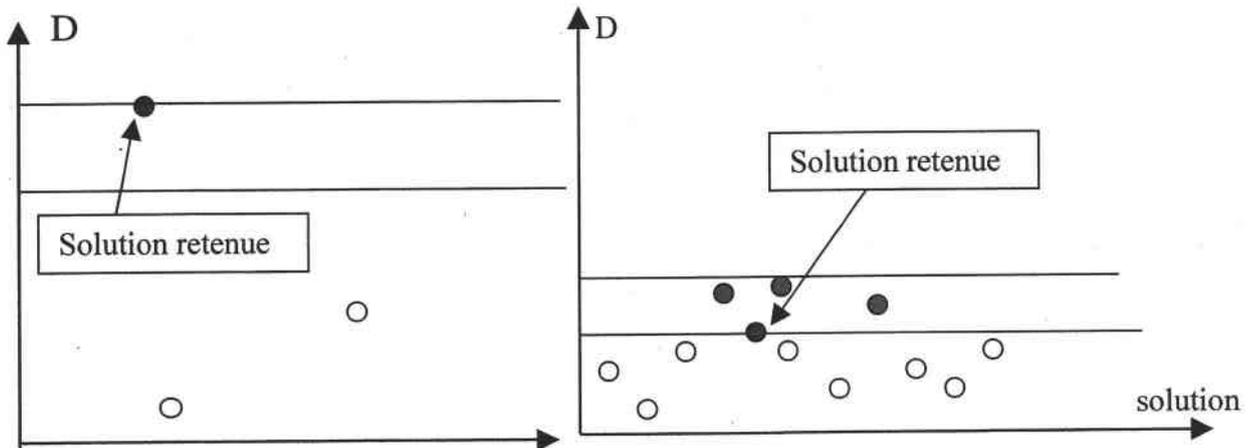


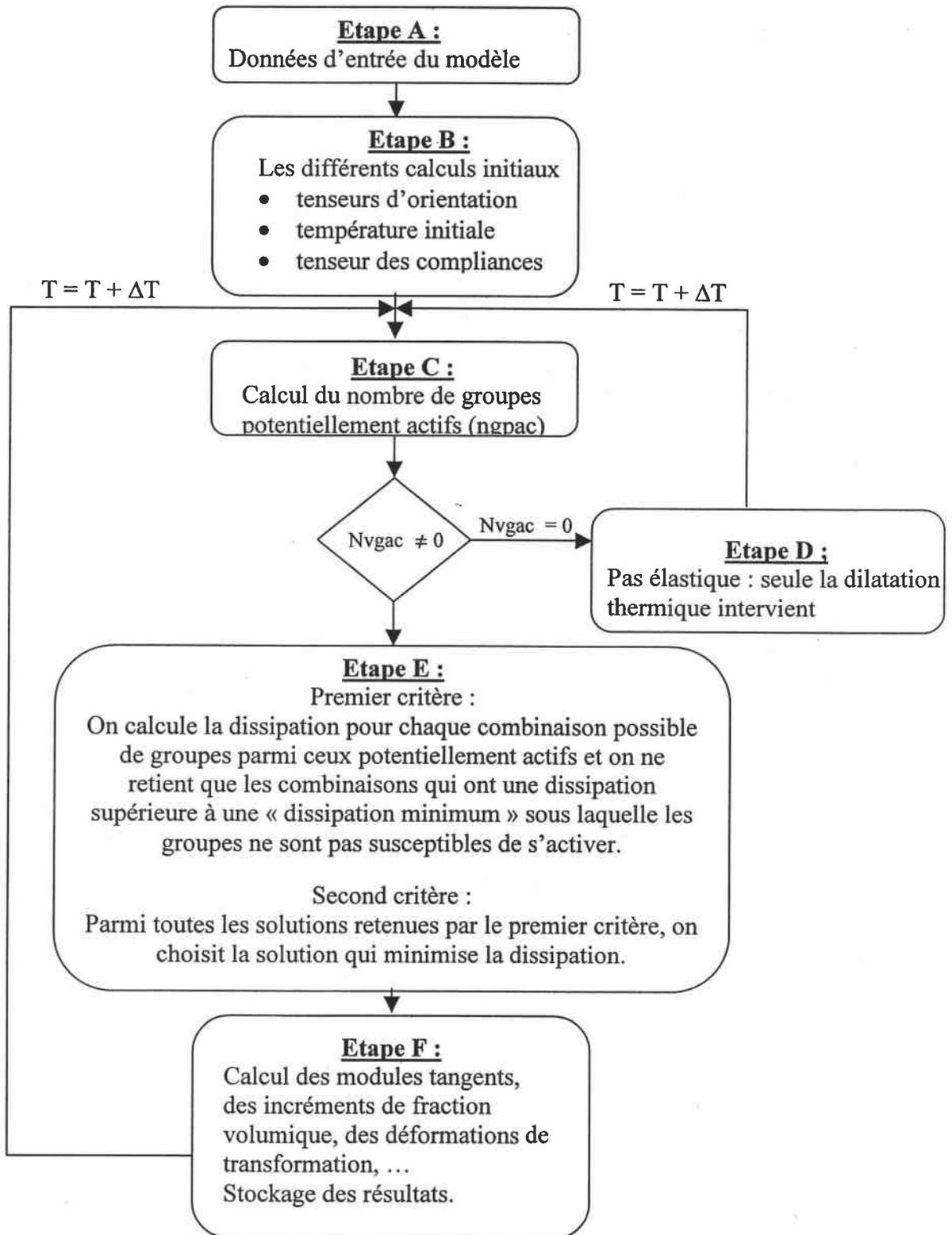
Fig. IV.5a : Influence du nouveau critère pour les contraintes fortes, on n'observe aucune différence avec le critère classique. Une solution unique est retenue.

Fig. IV.5b : Influence du nouveau critère aux contraintes faibles, la solution retenue n'est plus celle qui maximise la dissipation, plusieurs solutions sont possibles.

Toutes ces solutions produisent une dissipation équivalente et parmi ces solutions, nous sélectionnons celle dont la dissipation est la plus faible. Le fait de ne plus prendre la variante la mieux orientée, c'est-à-dire celle qui a la plus forte dissipation, mais une combinaison de variantes légèrement moins bien orientées, a pour effet de diminuer la déformation de transformation obtenue en fin de refroidissement.

IV.2.4 Application

Un programme permettant de modéliser le refroidissement d'un monocristal d'AMF soumis à une faible traction uniaxiale a été élaboré. Pour expliciter le mieux possible ce modèle et ses critères, un organigramme du programme (Hist. IV.1) est présenté et chaque étape explicitée.



Hist. IV.1 : Histogramme simplifié du programme utilisé pour modéliser le fluage anisotherme du monocristal.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

- Etape A : données d'entrée

Toutes les données de notre modèle sont listées dans le tableau 1, mis à part les valeurs des normales au plan d'habitat et des directions de transformation qui sont listées dans le tableau IV.2.

Symbole	Désignation	Valeur
g	Amplitude de transformation dans la direction de transformation	0,23
B_0	Sensibilité à la température	0,2 MPa/K
$\varphi_1, \phi, \varphi_2$	Angles d'Euler : orientation du monocristal	variable
α	Coefficient de dilatation	10^{-5}°C^{-1}
ΔT	Incrément de température	variable
σ	Contrainte imposée	variable
M_s	Température de début de transformation	0°C
H^{mn}	Matrice d'interaction ; les coefficients dépendent de la compatibilité (c) ou de l'incompatibilité (I) entre les groupes.	I = 150 MPa C = 30 MPa
ν	Coefficient de Poisson	0,3
μ	Module de cisaillement	30000 MPa
$\Delta\sigma$	Fluctuation de la contrainte à l'intérieur du cristal	variable

Tableau IV.1 : Données d'entrée du programme de modélisation du fluage anisotherme du monocristal.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

No. Variante	Normales au plan d'habitat n			directions de transformation m		
	n1	n2	n3	m1	m2	m3
1	-a	b	c	-d	-f	e
2	-a	c	b	-d	e	-f
3	a	b	c	d	-f	e
4	a	c	b	d	e	-f
5	-b	-a	c	f	-d	e
6	-c	-a	b	-e	-d	-f
7	-b	a	c	f	d	e
8	-c	a	b	-e	d	-f
9	-a	-b	c	-d	f	e
10	-a	-c	b	-d	-e	-f
11	a	-b	c	d	f	e
12	a	-c	b	d	-e	-f
13	c	-a	b	e	-d	-f
14	b	-a	c	-f	-d	e
15	c	a	b	e	d	-f
16	b	a	c	-f	d	e
17	b	-c	a	-f	-e	d
18	c	-b	a	e	f	d
19	-b	c	a	f	e	d
20	-c	b	a	-e	-f	d
21	-c	-b	a	-e	f	d
22	-b	-c	a	f	-e	d
23	c	b	a	e	-f	d
24	b	c	a	-f	e	d
<u>CuZnAl :</u>	a =	0,182	d =	0,165		
	b =	0,669	e =	0,737		
	c =	0,721	f =	0,655		
<u>CuAlBe :</u>	a =	0,168	d =	0,121		
	b =	0,688	e =	0,678		
	c =	0,705	f =	0,725		

Tableau IV.2 : Définition des normales aux plans d'habitat et des directions de transformation utilisées pour décrire la cristallographie de la transformation martensitique dans les AMF CuAlBe ou CuZnAl. (Siredey et al., 1999).

- Etape B : les différents calculs initiaux

Une fois les données d'entrée insérées dans le programme, nous pouvons calculer :

- les tenseurs d'orientation R pour les 24 variantes en utilisant la formule classique :

$$R_{ij}^n = \frac{1}{2}g(n_i^n m_j^n + n_j^n m_i^n) \quad n = 1, 24 \quad (IV.7)$$

A l'aide de ces 24 tenseurs, on calcule les 132 tenseurs d'orientation correspondant aux 132 groupes de la nouvelle formulation de la façon suivante :

$$R_{ij}^G = \frac{1}{2}(R_{ij}^n + R_{ij}^m) \text{ si le groupe G est composé des 2 variantes n et m} \quad (IV.8)$$

Toutes les correspondances entre les groupes et les variantes qui les composent sont indiquées en annexe 1.

- Il faut également connaître la température initiale à partir de laquelle on refroidit pour transformer notre échantillon. Cette température dépend de la contrainte constante appliquée et du coefficient B_0 (voir Fig. IV.6).

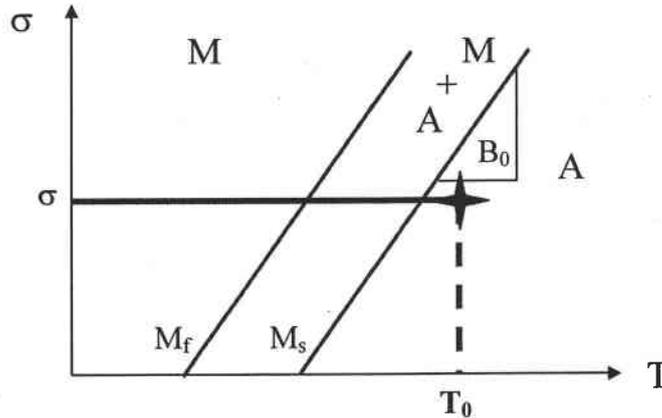


Fig. IV.6 : Identification de la température initiale avant refroidissement pour être complètement austénitique

On obtient cette température initiale par un simple calcul où la cission résolue doit être égale à la cission critique :

$$\sigma_{ij} R_{ij} = (B/g) \cdot (T_0 - M_s) \quad (IV.9)$$

$$T_0 = (g\sigma_{ij} R_{ij} / B) + M_s \quad (IV.10)$$

Les valeurs numériques considérées dans nos simulations sont données dans le tableau IV.1 et en imposant une traction uniaxiale dans la direction 1 (seul σ_{11} est différent de 0). En prenant R_{11} égale à sa valeur maxi (0,5), nous obtenons

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

une température T_0 proche de la droite M_s mais toujours dans le domaine austénitique (voir Fig. IV.6). On obtient donc :

$$T_0 = \frac{0.23}{0.2} 0.5 \sigma_{11} = 0.575 \sigma_{11} \quad (\text{IV.11})$$

Ainsi quelques pas élastiques seront effectués avant le début de la transformation martensitique.

➤ On doit également calculer le tenseur des compliances élastiques de façon classique :

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (\text{IV.12})$$

avec :

$$\lambda = \frac{2\mu(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (\text{IV.13})$$

- Etape C : calcul du nombre de variantes potentiellement actives (nvpac)

On doit maintenant déterminer les groupes qui sont susceptibles de s'activer. Pour cela on calcule la cission résolue de chaque groupe et on la compare à la cission critique qui dépend des données d'entrée ainsi que de la fraction volumique de chaque groupe dans le cristal :

$$\tau_{\text{resolu}} = \sigma_{ij} R_{ij}^G \geq \frac{B}{g} (T - M_s) + \sum_L H^{KL} f^L = \tau_{\text{critique}} \quad (\text{IV.14})$$

Si la cission résolue du groupe G est supérieure à la cission critique, alors le groupe G est potentiellement actif.

- Etape D : pas élastique

Cette étape n'intervient que dans les premiers et les derniers pas du calcul, il s'agit des pas élastiques. L'incrément de déformation totale engendré au cours de ces pas est égal à l'incrément de déformation thermique (absence de déformation de transformation) :

$$\dot{\epsilon}^{\text{totale}} = \alpha \dot{T} = 10^{-6} \quad (\text{l'incrément de température est de } 0,1^\circ\text{C}) \quad (\text{IV.15})$$

Cette déformation thermique est prise en compte dans le programme, mais est négligeable devant la déformation de transformation

- Etape E : le double critère

Cette partie du programme est la plus importante après l'introduction de la notion de groupe dans le modèle. C'est aussi la plus longue en temps de calcul (analyse combinatoire), ce qui aura pour effet de limiter son utilisation. Nous verrons cet inconvénient un peu plus loin. Cette partie du programme a été détaillée dans le paragraphe IV.2.3

Tous les résultats obtenus à l'aide de ce programme sur les différentes orientations cristallines données au cristal, l'influence de l'amplitude donnée à la fluctuation de la contrainte à l'intérieur du cristal, ainsi que l'influence de la nouvelle matrice d'interaction sur les résultats sont exposés dans le paragraphe suivant.

IV.2.5 Résultats.

La figure IV.1 est le point de départ des résultats que nous voulons obtenir pour le monocristal. On sait que la modélisation du fluage anisotherme pour les fortes valeurs de contrainte est correcte et que les problèmes interviennent aux faibles contraintes. Sur la figure IV.1 nous avons une déformation de transformation maximale de 10%, il nous faut donc travailler avec un cristal dont la variante la mieux orientée (celle qui va s'activer) permet d'obtenir cette valeur de déformation en fin de transformation. Comme à forte contrainte une seule variante de martensite est activée et comme nous travaillons avec une contrainte appliquée extérieure de type traction uniaxiale dans la direction 1, nous pouvons facilement obtenir l'orientation (par l'intermédiaire des angles d'Euler) approximative que doit avoir le cristal pour que sa variante la mieux orientée donne une déformation en fin de transformation de 10%. Nous ne considérons que les calculs faisant intervenir la direction 1, ainsi nous obtenons la valeur R_{11} de la variante la mieux orientée à partir de la déformation de transformation ε_{11}^t :

$$\varepsilon_{11}^t = g R_{11} \quad (\text{IV.16})$$

$$0,1 = 0,23 R_{11} \quad (\text{IV.17})$$

$R_{11} \cong 0,43$

(IV.18)

Nous allons tout d'abord tester l'influence de la nouvelle matrice par rapport à l'ancienne lorsque l'on applique le nouveau critère de sélection de variante avec une fluctuation $\Delta\sigma = 3$ MPa. Pour cela nous considérons un monocristal dont l'orientation cristallographique est donnée par les angles d'Euler suivants $\varphi_1= 253,1$, $\phi=173,7$ et $\varphi_2=216,8$. La variante 8 est la mieux orientée par rapport à une traction d'axe 1 avec un facteur R_{11} d'environ 0,43. Nous effectuons les calculs avec l'ancienne matrice d'interaction pour différentes valeurs de contrainte appliquée. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure IV.7.

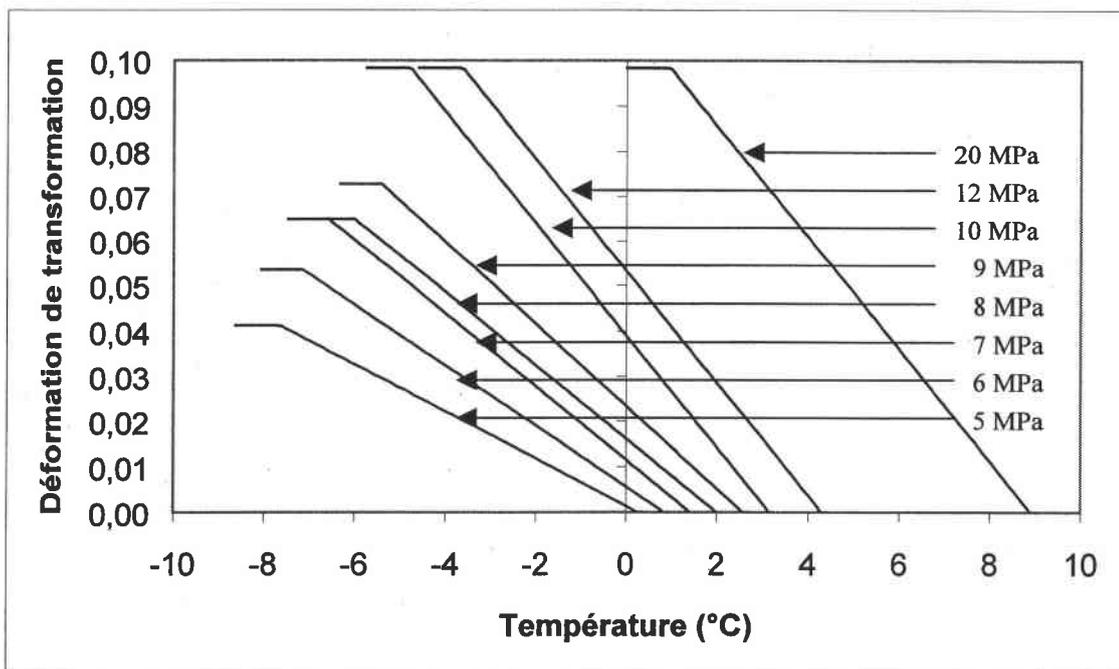


Fig. IV.7 : Evolution des courbes de fluage en fonction de la contrainte appliquée en utilisant la matrice classique. Les contraintes appliquées lors de ces simulations varient de 20 à 5 MPa.

On remarque que pour des contraintes supérieures à 10 MPa, les différentes courbes sont parallèles les unes aux autres. Seules les températures de transformation sont modifiées. Une variante unique, la mieux orientée (la variante 8) est formée (voir tableau IV.3). Toutes les variantes activées lors de ces simulations sont dans ce tableau.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

Contrainte appliquée (MPa)	20	12	10	9	8	7	6	5
Variantes activées	8	8	8	2 et 13	2 et 12	2 et 12	13 et 18	21

Tableau IV.3 : Correspondance entre les courbes de la fig. IV.7 et les variantes activées de ces simulations.

Pour des contraintes inférieures à 10 MPa, la fluctuation de contrainte $\Delta\sigma$ considérée dans le critère de transformation a pour conséquence de sélectionner d'autres variantes (2-12-13-18-21 : voir tableau IV.3) dont l'orientation est moins favorable (tableau IV.4). Ceci a pour effet de réduire la déformation de transformation obtenue.

Numéro de la variante	R_{11}
2	0,279
6	0,237
8	0,428
12	0,282
13	0,428
15	0,229
18	0,163
21	0,18

Tableau IV.4 : Correspondance entre les numéros des variantes et leur composante R_{11} du tenseur d'orientation. Les variantes 13 et 8 sont les mieux orientées par rapport à la direction de la contrainte appliquée.

On observe également une tendance spontanée à la création de groupes de variantes (croissance simultanée des variantes 2 et 13, par exemple, pour une contrainte de 9 MPa).

L'introduction dans la modélisation de cette notion de groupe a pour effet de rendre la déformation de transformation sensible à la contrainte appliquée pour des niveaux de contrainte plus élevés qu'avec l'approche classique (voir figure IV.8). Pour une valeur de $\Delta\sigma$ identique, la sensibilité à la contrainte intervient maintenant dès 15 MPa et 2 groupes sont en général activés (voir tableau IV.5).

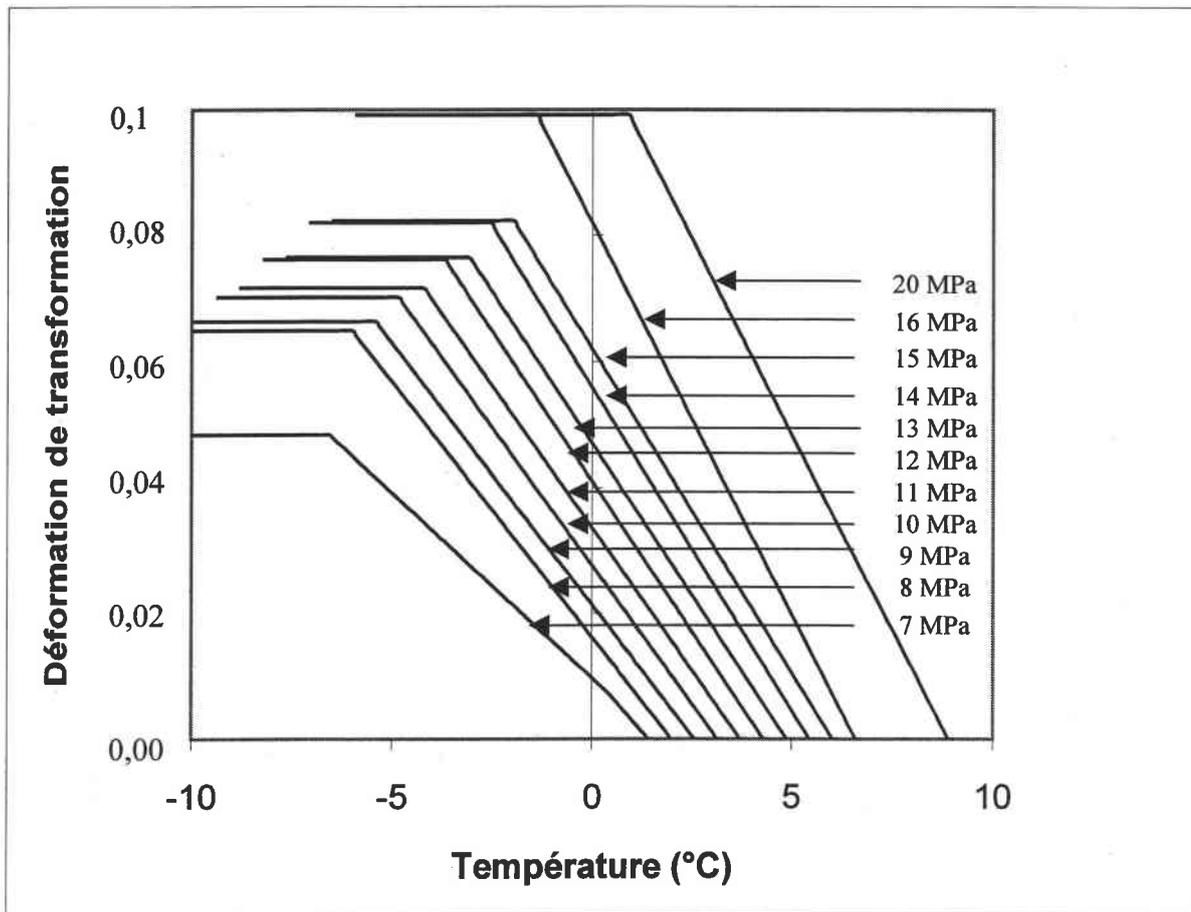


Fig. IV.8 : Evolution des courbes de fluage et des variantes activées en fonction de la contrainte appliquée en utilisant la nouvelle matrice. Les contraintes appliquées varient de 20 à 7 MPa.

Toutes les correspondances entre les groupes et les variantes qui les composent se trouvent en annexe 1.

Contrainte appliquée (MPa)	20	16	15	14	13	12	11	10	9	8	7
Groupes activés	8 et 77	8 et 77	76 et 96	36 et 39	66	78 et 100	79	102 et 103	2 et 36	2 et 12	38 et 69

Tableau. IV.5 : Correspondance entre les courbes de la figure IV.8b et les groupes activés lors de ces simulations.

Si pour une contrainte donnée on compare maintenant les résultats fournis par les deux formulations, on constate qu'en règle générale la prise en compte des groupes de variantes aboutit également à une réduction de la déformation de transformation obtenue. Cette

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

tendance est bien sûr très sensible pour les contraintes comprises entre 10 et 20 MPa (voir figure VI.9a et 9b).

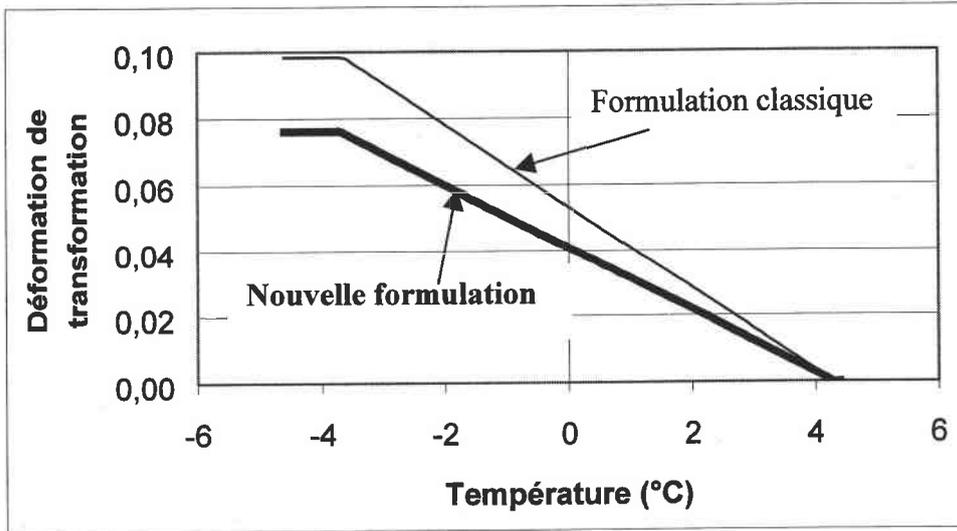


Fig. IV.9a : Courbes représentant la modélisation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 12MPa pour la nouvelle matrice (132x132) et pour la matrice classique (24x24). Dans ce cas la diminution de la déformation de transformation en fin de refroidissement est très nette pour la nouvelle formulation.

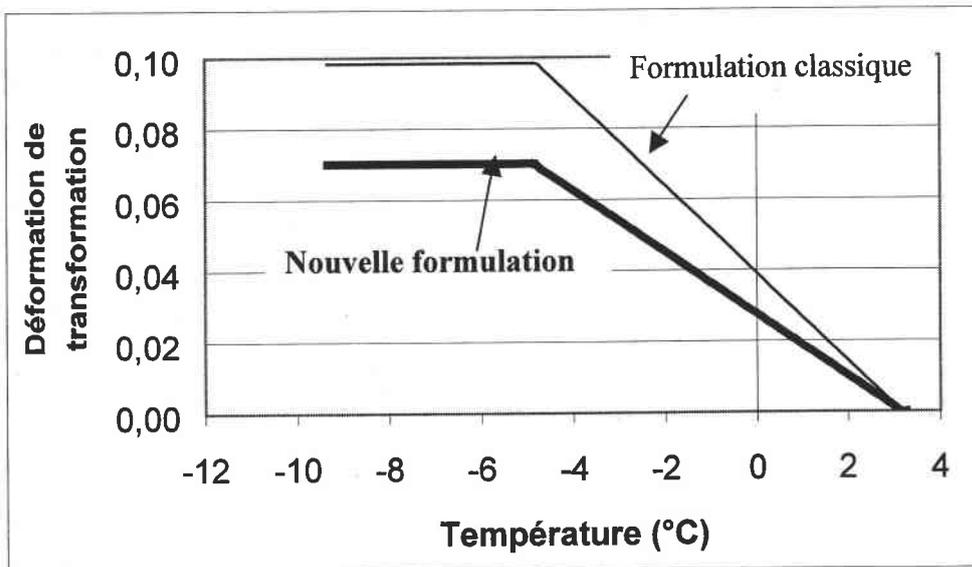


Fig. IV.9b : Courbes représentant la modélisation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 10MPa pour la nouvelle matrice (132x132) et pour la matrice classique (24x24). Dans le cas de la nouvelle formulation, la diminution de la déformation de transformation en fin de refroidissement est encore plus nette.

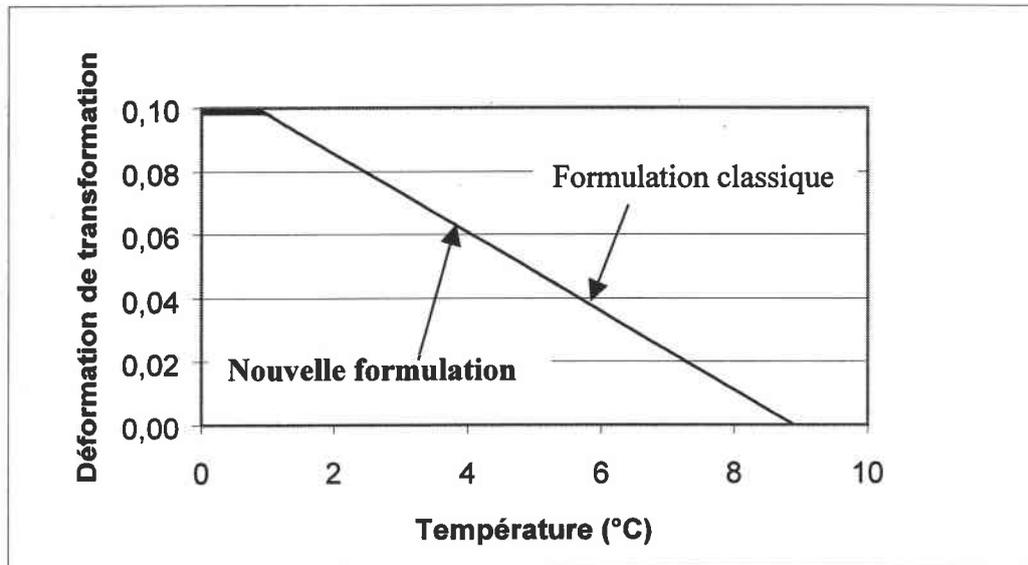


Fig. IV.10 : Simulation du fluage anisotherme sous une contrainte de 20 MPa. La déformation de transformation atteint 10%. Un résultat identique est obtenu en considérant les 24 variantes ou les 132 groupes. Mais les variantes induites sont différentes.

Le comportement à 20 MPa doit être souligné (figure IV.10).

Ce comportement global est identique pour les deux formulations, mais les variantes activées sont différentes. Dans la formulation considérant les variantes seules, une variante unique (la variante 8) est induite. Dans la formulation avec les groupes, la variante 8 et le groupe 77 sont formés. Or le groupe 77 est composé des variantes 8 et 13 qui sont en fait deux variantes dont les orientations R_{11} sont très proches (environ 0,43). L'écart entre les deux courbes de comportement est dès lors insignifiant.

Pour les contraintes inférieures à 10 MPa la déformation de transformation est réduite pour la formulation avec les groupes (voir figure IV.11a, 11b et 11c).

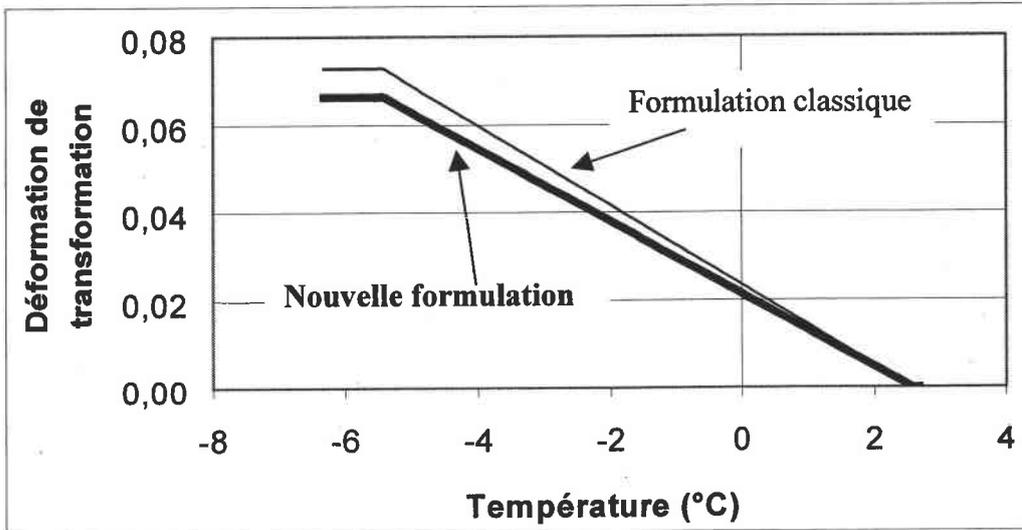


Fig. IV.11a : Courbes représentant la modélisation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 9MPa pour la nouvelle matrice (132x132) et pour la matrice classique (24x24). Dans ce cas la diminution de la déformation de transformation en fin de refroidissement est nette.

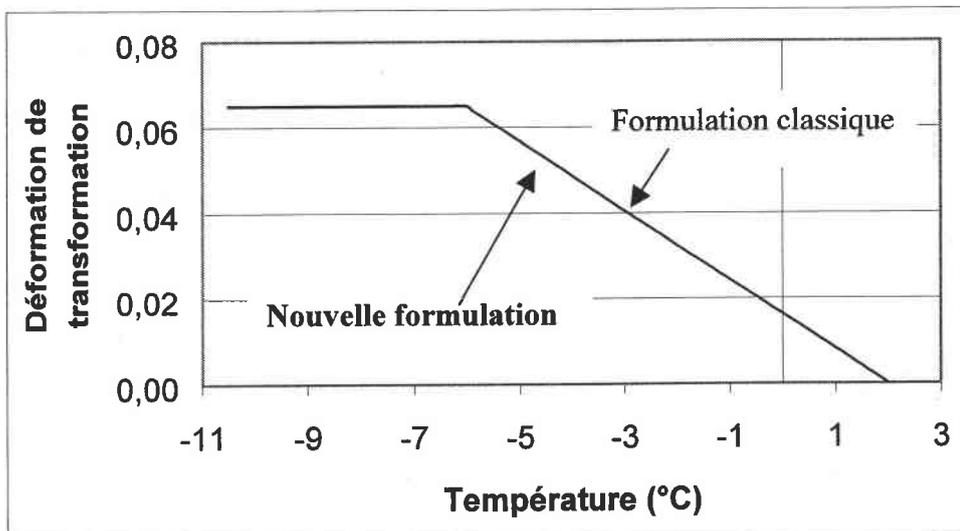


Fig. IV.11b : Courbes représentant la modélisation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 8MPa pour la nouvelle matrice (132x132) et pour la matrice classique (24x24). Dans ce cas il n'y a pas de différence car les mêmes variantes sont activées avec l'ancienne ou la nouvelle matrice.

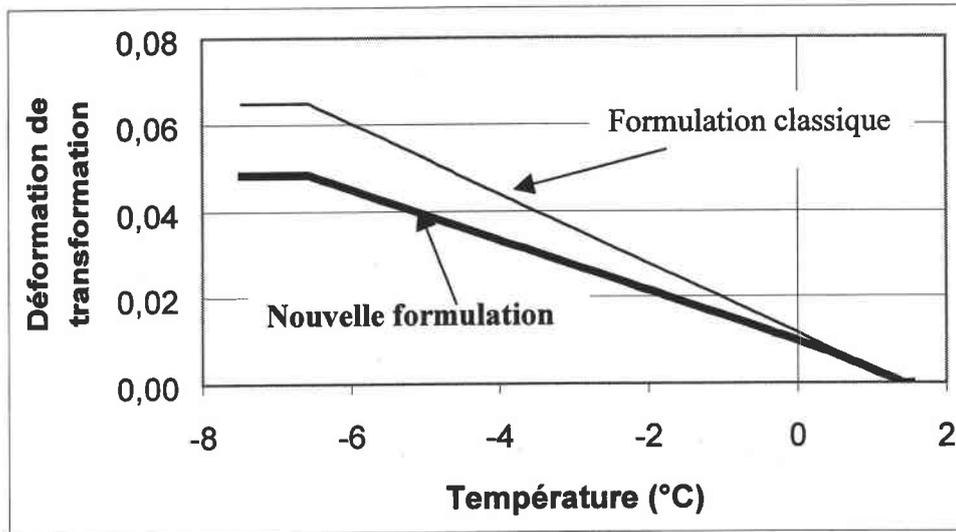


Fig. IV.11c : Courbes représentant la modélisation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 7MPa pour la nouvelle matrice (132x132) et pour la matrice classique (24x24). Dans ce cas la diminution de la déformation de transformation en fin de refroidissement est nette.

		20 MPa	12 MPa	10 MPa	9 MPa	8 MPa	7 MPa	Remarques
Matrice classique	Variantes activées	8	8	8	2-13	2-12	2-12	ces regroupements sont en bon accord avec la matrice classique : 2 est compatible avec 12 et 13.
Nouvelle matrice	Groupes activés	8-77	78-100	102-103	2-36	2-12	68-69	ces regroupements sont en bon accord avec la nouvelle matrice : tous les regroupements ci-contre sont compatibles.
	Variantes correspondantes	8-13	8-13-15	13-18-21	2-8	2-12	6-18-21	

Tableau IV.6 : Récapitulatif des variantes et des groupes activés au cours des différentes simulations avec la nouvelle matrice et la matrice classique. Des variantes moins bien orientées apparaissent avec la nouvelle matrice.

Un récapitulatif des différentes variantes activées lors de ces simulations est donné en tableau IV.6.

Les regroupements de deux variantes ou de deux groupes sont uniquement des regroupements compatibles (par exemple 8/77 pour la nouvelle formulation). On remarque également qu'avec la nouvelle formulation, on a l'apparition de nouvelles variantes moins bien orientées

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

qui ont tendance à faire baisser la déformation de transformation pour les contraintes inférieures à 12 MPa.

Afin de mieux visualiser les résultats obtenus, nous les rassemblons sur un même graphe où nous traçons la déformation de transformation obtenue en fin de refroidissement en fonction de la contrainte appliquée dans la direction 1 (σ_{11}). Les résultats obtenus avec un critère classique de sélection de variantes sont également tracés sur ce graphe. Nous pouvons ainsi observer l'influence du nouveau critère de sélection de variante, l'influence de la nouvelle matrice d'interaction et le résultat obtenu avec ce nouveau critère et la nouvelle matrice (figure IV.12)

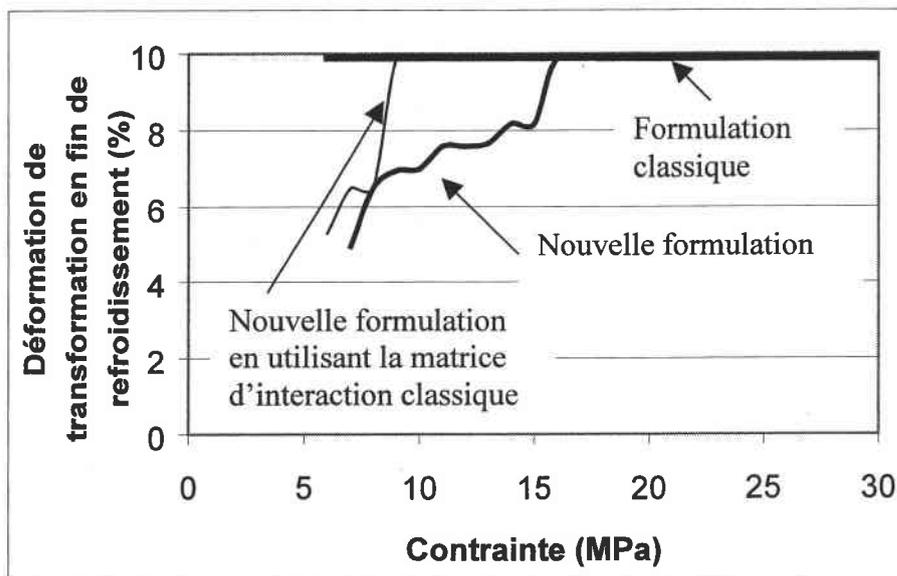


Fig. IV.12 : Influence de la matrice d'interaction et du nouveau critère de sélection de variantes sur la déformation de transformation en fin de refroidissement en fonction de la contrainte appliquée.

Avant que ce résultat ne soit comparé à l'expérience, il nous faut encore voir l'influence de l'orientation du cristal sur les courbes obtenues. Pour cela nous prenons 7 orientations différentes (en vérifiant, bien-sûr, que le R_{11} de la variante la mieux orientée reste voisin de 0,43 environ) et nous refaisons toutes les simulations précédentes. Toutes ces orientations cristallographiques sont listées en tableau IV.7 et toutes les courbes obtenues sont sur la figure IV.13.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

R = 0,430	R = 0,434	R = 0,432	R = 0,431
phi1 = 33,7	phi1 = 253,1	phi1 = 114,7	phi1 = 305,0
phi = 11,1	phi = 173,7	phi = 139,6	phi = 100,8
phi2 = 182,8	phi2 = 216,	phi2 = 204,9	phi2 = 265,1

R = 0,430	R = 0,430	R = 0,435
phi1 = 173,4	phi1 = 152,2	phi1 = 6,5
phi = 104,5	phi = 11,7	phi = 122,4
phi2 = 34,5	phi2 = 350,8	phi2 = 309,1

Tableau IV.7 : Orientation cristallographique des sept monocristaux retenus pour les simulations.

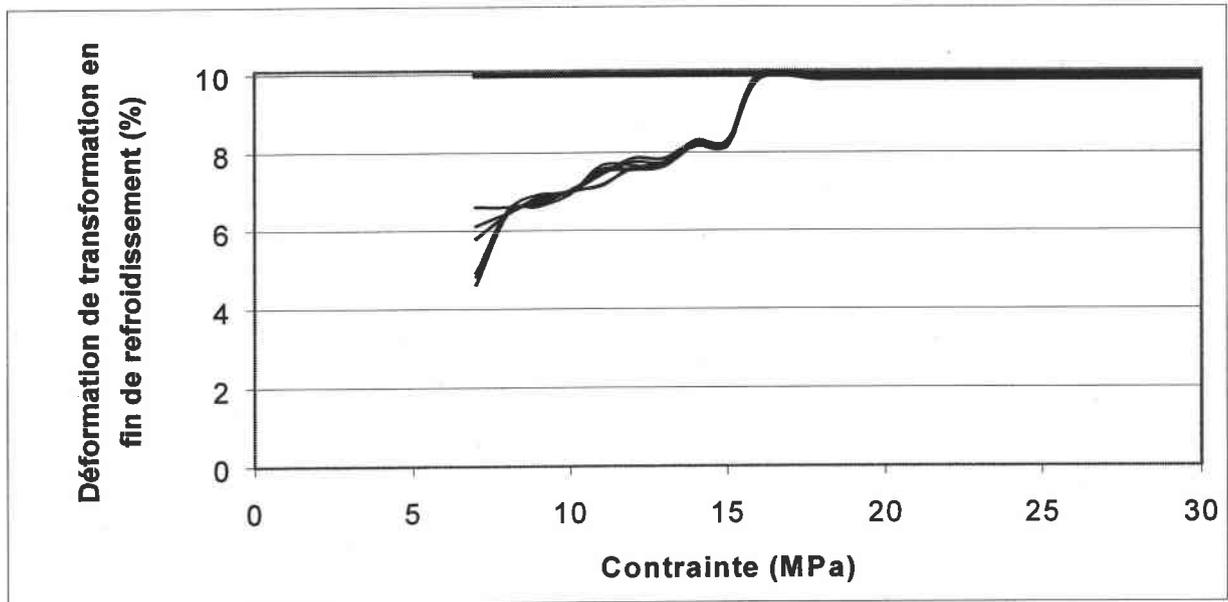


Fig. IV.13 : Influence de l'orientation cristallographique sur les courbes de déformation de transformation finale en fonction de la contrainte appliquée. Toutes ces courbes sont quasi identiques.

On remarque que quelle que soit l'orientation du monocristal, les résultats sont quasi-identiques. Ceci nous permet de conclure que la courbe obtenue précédemment en figure IV.12 peut être comparée aux résultats expérimentaux de la figure IV.1. Cette approche permet donc de reproduire de façon satisfaisante le comportement observé par un monocristal et cela en introduisant une valeur raisonnable de 3 MPa pour la fluctuation de la contrainte intervenant dans le critère de sélection de variantes (voir Fig. IV.14). Dans cette figure nous faisons la comparaison entre les courbes contrainte/déformation maximale en fin de

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

refroidissement par rapport aux mesures expérimentales. La formulation classique ne donne aucune différence entre les refroidissements à forte ou à faible contrainte imposée et conserve une déformation maximale en fin de refroidissement égale à 10%, ce qui est loin de la réalité. Par contre, la nouvelle formulation qui tient compte du nombre de variantes qui s'activent à faible contrainte donne des résultats nettement plus satisfaisants.

On est malheureusement limité en contrainte à 7 MPa à cause du temps de calcul (plus la contrainte est faible plus le nombre de variantes potentiellement actives est élevé et plus l'analyse combinatoire est longue).

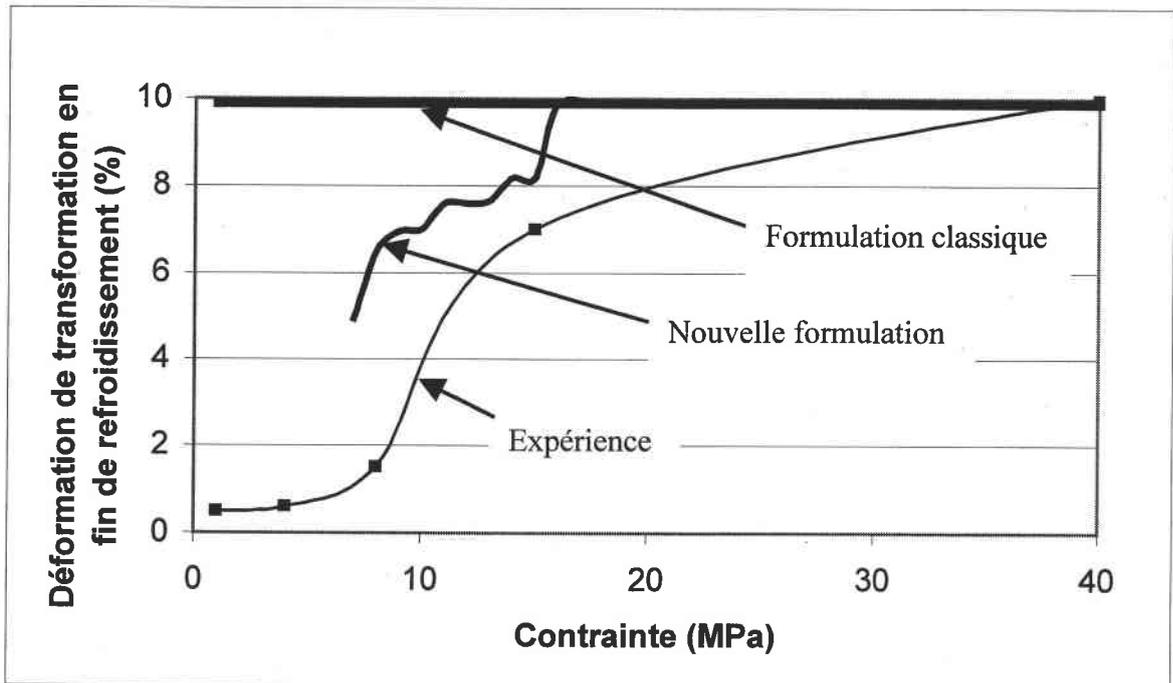


Fig IV.14 : Comparaison des courbes contrainte/déformation maximale en fin de refroidissement par rapport aux mesures expérimentales. La nouvelle formulation donne des résultats plus proches de la réalité pour les refroidissements soumis à de faibles taux de contrainte que les formulations classiques.

Nous allons voir à présent l'influence de la fluctuation de contrainte $\Delta\sigma$ sur la courbe obtenue. Sachant que toutes les orientations vues précédemment donnent le même résultat, nous en choisissons une et nous simulons un essai de fluage anisotherme pour différentes valeurs de $\Delta\sigma$. Le résultat obtenu est tout à fait logique : plus la valeur de fluctuation de contrainte est forte plus on active des variantes moins bien orientées et plus la déformation de transformation en fin de refroidissement est faible. Ce résultat est en figure IV.15.

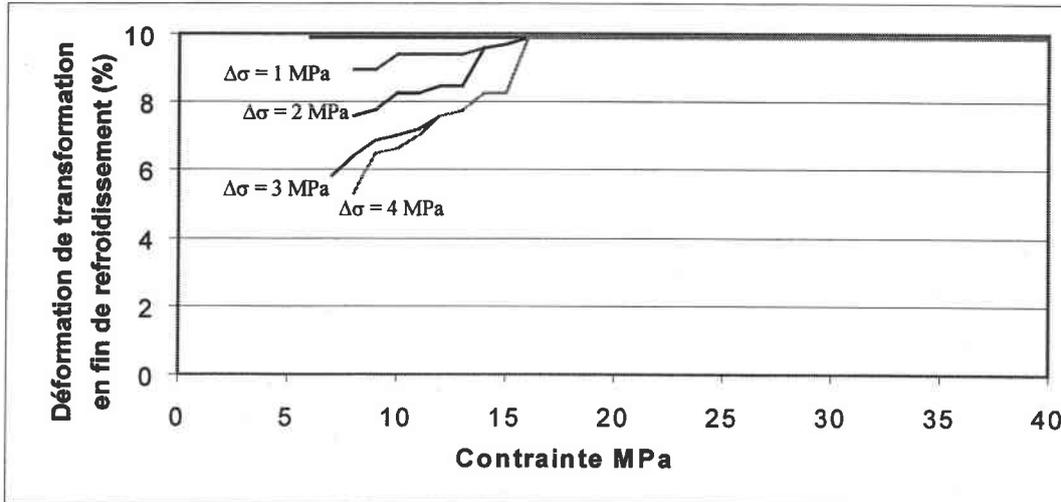


Fig. IV.15 : Influence de la valeur donnée pour la fluctuation de la contrainte dans le cristal sur les courbes déformation de transformation en fonction de la contrainte appliquée. On remarque que plus cette valeur est forte plus la déformation finale baisse. Ce résultat est logique.

IV.2.6 Conclusion

La modélisation du fluage anisotherme des monocristaux soumis à de faibles taux de contraintes a été réalisée à l'aide de la nouvelle approche, et donne de bien meilleurs résultats que les formulations classiques. Cependant, le temps de calcul dû à l'analyse combinatoire limite les résultats. En effet, plus l'on descend la contrainte appliquée, plus le nombre de variantes potentiellement actives est grand et plus le temps de calcul croît. Nous arrivons tout de même, pour une contrainte de 7 MPa, à obtenir une déformation inférieure à 5 % au lieu de 10 % avec les approches classiques.

La même démarche est adoptée pour simuler le comportement des polycristaux et le passage du grain au polycristal se fait à l'aide du modèle auto-cohérent.

IV.3 Fluage anisotherme du polycristal

IV.3.1 Rappel des équations de base pour la modélisation des polycristaux

Toutes les équations qui vont suivre ont été explicitées dans le chapitre II et sont récapitulées ci-dessous dans un souci de clarté et de simplicité de lecture. Elles sont nécessaires pour la modélisation des polycristaux à l'aide d'un modèle autocohérent.

Les équations caractérisant le comportement microscopique sont :

$$\dot{\sigma}_{ij}(\mathbf{r}) = l_{ijkl}(\mathbf{r}) \dot{\epsilon}_{kl}(\mathbf{r}) - m_{ij}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{IV.19})$$

$$\dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r}) = [l_{ijkl}(\mathbf{r})]^{-1} \dot{\sigma}_{kl}(\mathbf{r}) + [l_{ijkl}(\mathbf{r})]^{-1} m_{kl}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{IV.20})$$

avec des modules tangents microscopiques définis par les équations suivantes :

$$l_{ijkl}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} - C_{ijrs} \sum_{m,n} \epsilon_{rs}^n \left({}^*H^{mn} \right)^{-1} \epsilon_{pq}^n C_{pqkl} \quad (\text{IV.21a})$$

$$m_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \alpha \delta_{kl} - C_{ijkl} \sum_{m,n} \epsilon_{kl}^n \left({}^*H^{mn} \right)^{-1} \left(B + \epsilon_{pq}^n C_{pqrs} \alpha \delta_{rs} \right) \quad (\text{IV.21b})$$

Les équations caractérisant le comportement macroscopique sont :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = L_{ijkl}^{\text{eff}} \dot{E}_{kl} - M_{ij}^{\text{eff}} \dot{T} \quad (\text{IV.22})$$

$$\dot{E}_{ij} = [L_{ijkl}^{\text{eff}}]^{-1} \dot{\Sigma}_{kl} + [L_{ijkl}^{\text{eff}}]^{-1} M_{kl}^{\text{eff}} \dot{T} = [L_{ijkl}^{\text{eff}}]^{-1} \dot{\Sigma}_{kl} + N_{ij}^{\text{eff}} \dot{T} \quad (\text{IV.23})$$

avec des modules tangents macroscopiques définis par les équations suivantes :

$$L_{ijmn}^{\text{eff}} = \sum_g f^g \left(l_{ijkl}^g A_{klmn}^g \right) \quad (\text{IV.24})$$

$$M_{ij}^{\text{eff}} = \sum_g f^g \left(m_{ij}^g - l_{ijkl}^g a_{kl}^g \right) \quad (\text{IV.25})$$

où a et A sont les tenseurs de localisation permettant le passage micro-macro :

$$\dot{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r}) = A_{ijkl}(\mathbf{r}) \dot{E}_{kl} + a_{ij}(\mathbf{r}) \dot{T} \quad (\text{IV.26})$$

avec a et A définis de la façon suivante :

$$A_{ijkl}^I = \left[I_{ijkl} - T_{ijmn}^{\text{II}} \delta l_{mnkl}^I \right]^{-1} \quad (\text{IV.27})$$

$$a_{ij}^I = -A_{ijkl}^I T_{klmn}^{\text{II}} \delta m_{mn}^I \quad (\text{IV.28})$$

Pour le fluage anisotherme les données d'entrée sont : la contrainte macroscopique imposée Σ , la température initiale T , l'incrément de contrainte macroscopique $d\Sigma$ (nul dans le cas du fluage) et l'incrément de température dT .

Ainsi grâce à l'équation (IV.23) nous calculons l'incrément de déformation macroscopique dE supposée au début du pas. Ensuite, de la même manière que pour le comportement des monocristaux, nous déterminons la (ou les) variante(s) de martensite qui s'active(nt) dans chaque grain, ainsi que les deux modules tangents locaux l et m correspondants (équations IV.21). Ces deux modules permettent, grâce aux équations (IV.27) et (IV.28), de calculer les deux tenseurs de localisation. Puis on applique l'équation (IV.26) pour obtenir la déformation microscopique $d\epsilon$.

Connaissant la fraction volumique, les modules locaux l , m , les tenseurs de localisation a et A pour chaque grain, nous pouvons, par l'intermédiaire des équations (IV.24) et (IV.25), calculer les nouveaux modules tangents macroscopiques. Nous finissons par déterminer le nouvel incrément de déformation macroscopique dE pour obtenir la courbe E en fonction de T ($E=f(T)$). Un organigramme du schéma de résolution numérique pour la superthermoélasticité des alliages à mémoire de forme se trouve en annexe 2.

IV.3.2 Résultats obtenus avec la formulation classique

Un modèle auto-cohérent, ne faisant que du refroidissement sous contrainte appliqué, a été réalisé dans le but d'introduire la nouvelle formulation décrite dans les chapitres précédents.

Ce programme est calqué sur le modèle d'Entemeyer D. (1996).

Pour tester ce programme nous allons tout d'abord voir l'influence du pas de temps sur les courbes obtenues, ainsi que l'influence du nombre de grains utilisés dans la base de données.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

Ensuite nous comparerons nos résultats aux résultats d'Entemeyer (1996) sur deux alliages à base cuivre (CuAlBe et CuZnAl).

- Influence de l'incrément de température (voir figure IV.16) :

Nous allons étudier l'influence de l'incrément de température pour des contraintes appliquées variant de 200 à 20 MPa (nous couvrons ainsi toutes les contraintes que Entemeyer a utilisées lors de ses simulations). Les résultats obtenus semblent très fiables car en divisant l'incrément de température par dix, les déformations de transformation en fin de refroidissement restent quasi-identiques. On peut d'ailleurs voir que pour une contrainte appliquée de 200 MPa, le résultat se stabilise pour un incrément de -0.1°C (voir figure IV.16).

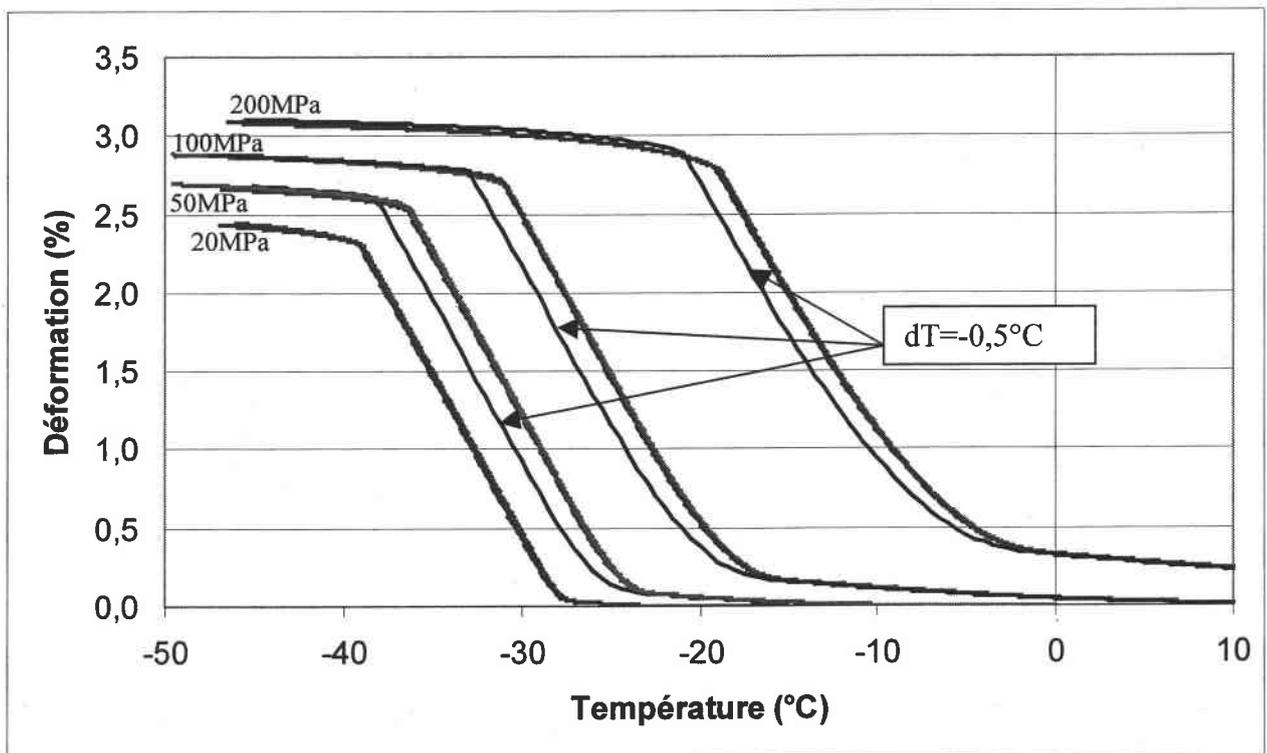


Fig. IV.16 : Influence de l'incrément de température sur les résultats. Les incréments températures pris sont 0,5 ; 0,1 et 0,05°C. Les résultats sont quasi identiques. On note un léger décrochement des courbes pour l'incrément de 0,5°C, mais la déformation de transformation obtenue en fin de transformation reste identique.

Au vu des résultats, un incrément de température de -0.1°C semble un bon compromis entre la précision du calcul et le temps de calcul. Dans toute la suite l'incrément de température sera donc de $-0,1^{\circ}\text{C}$.

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

- Influence du nombre de grains sur les résultats (voir figure IV.17) :

Nous allons à présent étudier l'influence du nombre de grains sur les résultats pour trois contraintes différentes (200MPa, 100MPa et 50MPa). Dans chaque cas, les résultats sont très proches, que l'on prenne 1000 grains ou 100 grains (voir figure IV.17). Il y a moins de 3% d'erreur sur la déformation de transformation obtenue en fin de refroidissement. Nous prendrons donc un nombre de grains égal à 100 pour les calculs suivants.

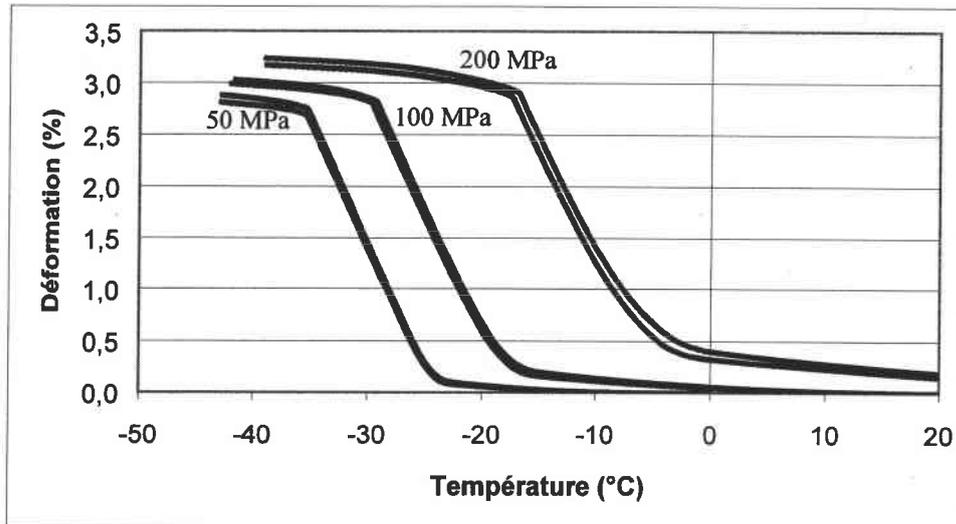


Fig. IV.17 : Influence du nombre de grains sur les résultats (100 et 1000 grains). Là encore les résultats sont très similaires. A noter que les courbes obtenues avec 1000 grains sont toujours légèrement supérieures aux courbes obtenues en utilisant 100 grains.

- Résultat sur un alliage Cu-Zn-Al:

Lors de sa thèse en 1996 D. Entemeyer a simulé le refroidissement d'un alliage Cu-Zn-Al soumis à différentes contraintes (124 MPa, 100 MPa, 80MPa, 65MPa et 49 MPa) (figure IV.18). Nous allons faire les mêmes simulations pour valider notre programme.

Les résultats obtenus sont en très bon accord avec ceux obtenus par Entemeyer. Nos cinq résultats sont sur la figure IV.19.

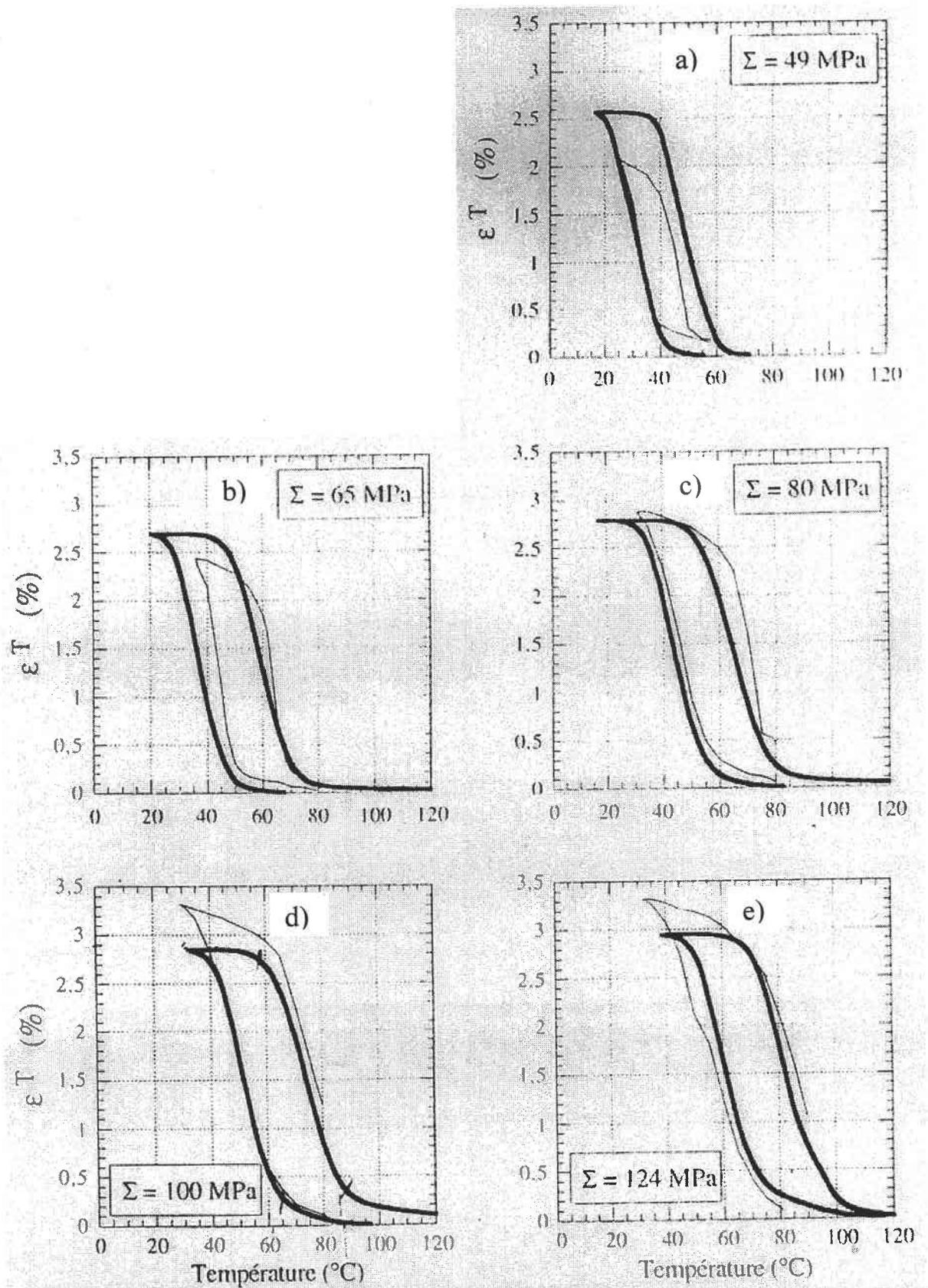


Fig. IV.18 : Résultats obtenus par Entemeyer (1996) pour le fluage anisotherme d'un alliage CuZnAl pour différentes contraintes appliquées : a) 49MPa, b) 65MPa, c) 80MPa, d) 100MPa et e) 124MPa.

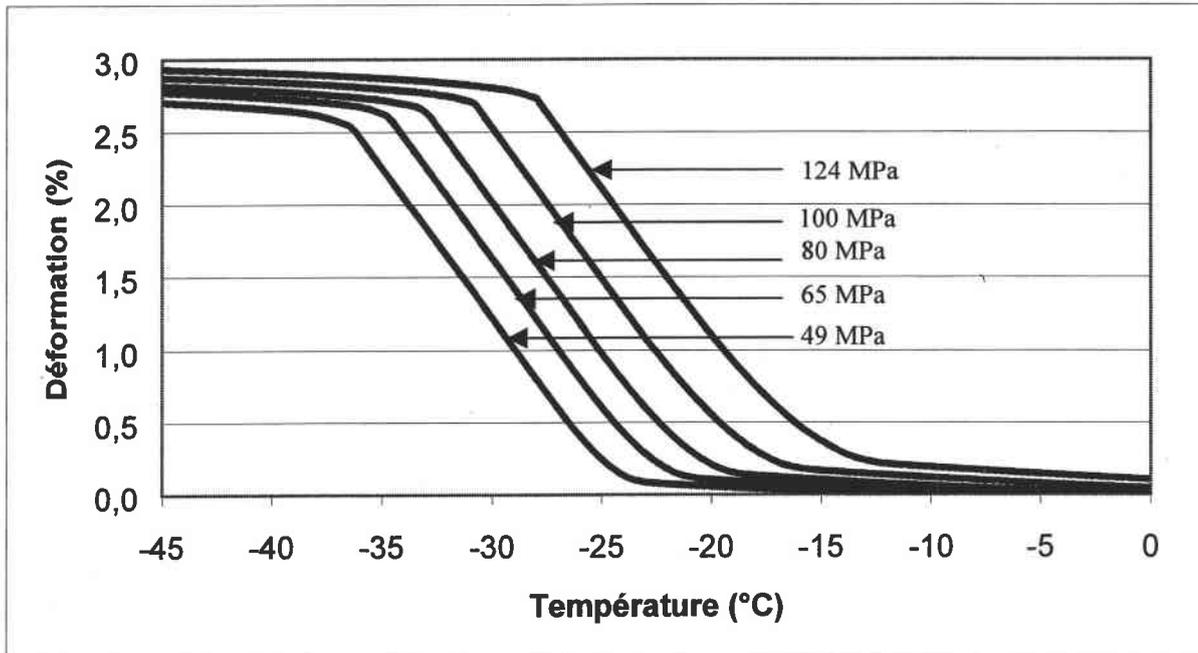


Fig. IV.19 : Les résultats obtenus ici pour le fluage anisotherme soumis à différentes contraintes sont en bon accord avec les résultats obtenus par Entemeyer en 1996. Les contraintes appliquées varient de 124 à 49 MPa.

Les déformations de transformation obtenues en fin de refroidissement varient de 2,7 à 2,9 % dans nos simulations et elles varient de 2,6 à 2,9 % dans celles de Entemeyer. L'erreur est donc inférieure à 4%.

- Résultat sur un alliage Cu-Al-Be (voir figure IV.20) :

Nous allons une fois de plus comparer nos résultats à ceux de Entemeyer pour un alliage Cu-Al-Be. Contrairement à l'alliage Cu-Zn-Al, les résultats sont très différents (voir figure IV.20 et les figures III.6c et III.6d du chapitre III) car les directions de transformation ne sont pas normées. Nous avons donc relancé les calculs avec les valeurs prises par Entemeyer pour une simple vérification.

Les résultats obtenus avec les valeurs non normées sont identiques à ceux obtenus par Entemeyer. Les deux séries de résultats sont en figure IV.20.

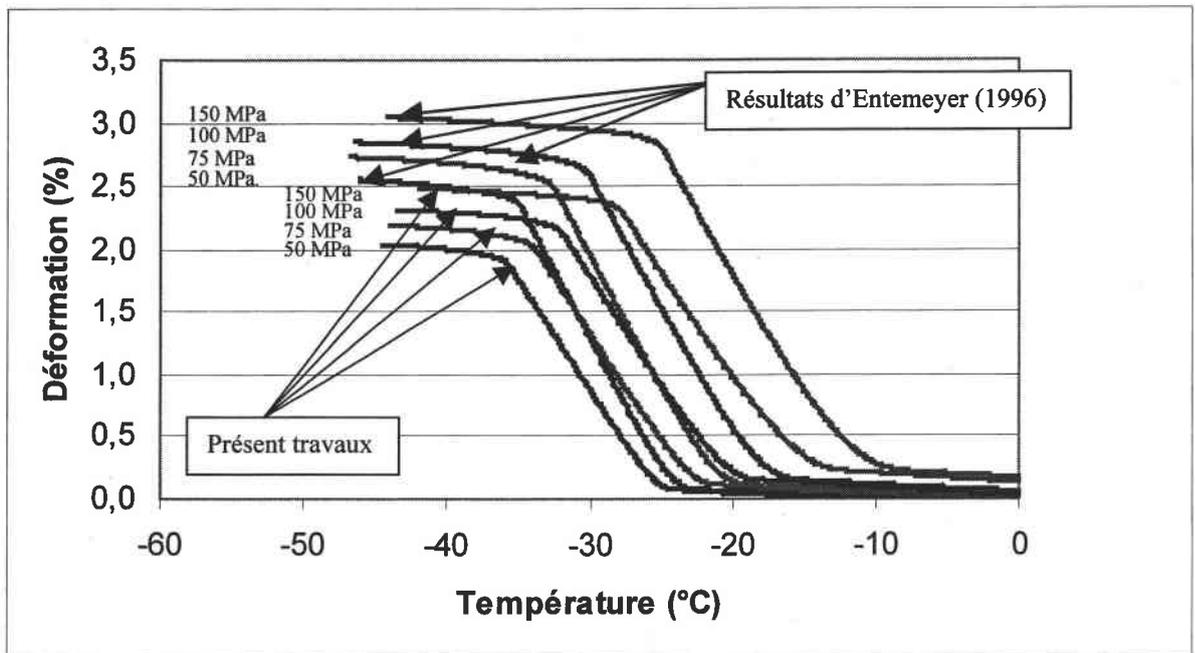


Fig.IV.20 : Comparaison entre les résultats obtenus par Entemeyer (1996) et ceux obtenus au cours de cette thèse pour le fluage anisotherme d'un alliage Cu-Al-Be. Les résultats diffèrent à cause d'une différence sur les données des directions de transformation. Dans le cas de Entemeyer ces directions n'ont pas été normées.

Tous les résultats obtenus pour la modélisation du fluage anisotherme d'un polycristal sont cohérents et quasi-identiques à ceux obtenus par Entemeyer en 1996 au cours de sa thèse. Nous avons un modèle qui fonctionne correctement avec la formulation classique, nous allons donc pouvoir implémenter la nouvelle approche dans ce programme comme nous l'avons fait pour les monocristaux. Il s'agit maintenant de travailler avec des groupes de variantes et non avec des variantes indépendantes, ainsi qu'avec la nouvelle matrice d'interaction.

IV.3.3 Résultats obtenus avec la nouvelle formulation

Le problème rencontré avec les monocristaux sur le temps de calcul se retrouve également pour les polycristaux. Ce problème est d'autant plus important que le nombre de grains est important. Pour pouvoir travailler avec un temps de calcul correct (quelques jours maximums) et avec des contraintes de l'ordre de 50 MPa, nous allons faire nos simulations en utilisant des polycristaux composés de 10 grains. Ce nombre de grains est un peu faible pour obtenir des courbes macroscopiques représentatives du comportement réel du polycristal, mais dans le

CHAPITRE IV : MODELISATION DU FLUAGE ANISOTHERME

cadre de ce travail, nous allons simplement comparer les résultats de la formulation classique avec les résultats de la nouvelle approche.

Les simulations sont effectuées pour un alliage Cu-Zn-Al. Lorsque la contrainte appliquée est forte, il y a très peu de variantes actives et il n'y a aucune différence entre les résultats obtenus à partir des deux formulations. Nous avons réalisé deux simulations à 500 MPa (haute contrainte), une avec l'approche classique et une avec la nouvelle formulation. Les deux courbes ainsi obtenues sont confondues (voir figure IV.21).

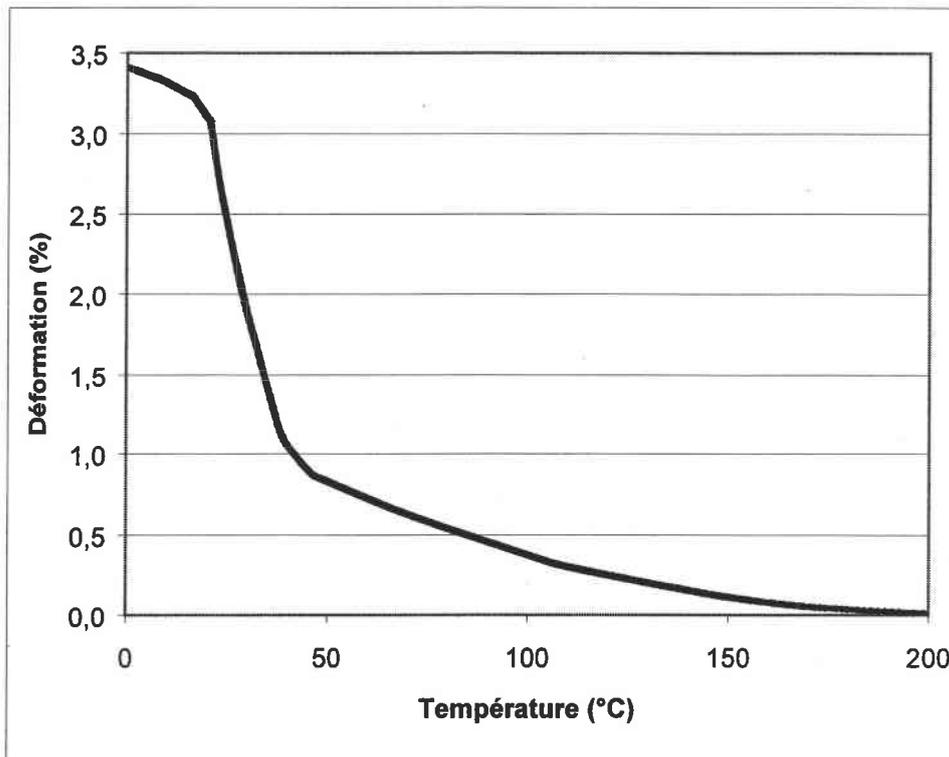


Fig. IV.21 : Simulation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 500MPa. Aucune différence n'est constatée entre la formulation classique et la nouvelle formulation pour les fortes contraintes.

Lorsque la contrainte appliquée est faible, le nombre de variantes actives augmente et on commence à avoir une différence entre les résultats obtenus à partir des deux formulations. Nous avons réalisé trois simulations à 50 MPa (faible contrainte), une avec l'approche classique, une avec la nouvelle formulation en prenant une fluctuation de contrainte à l'intérieur des grains de 2 MPa et une en prenant une fluctuation de contrainte à l'intérieur du grain de 6 MPa. Les trois courbes ainsi obtenues sont en figure IV.22. On peut s'apercevoir

que la déformation de transformation finale diminue avec la nouvelle formulation. Elle diminue d'autant plus que la fluctuation dans les grains est grande.

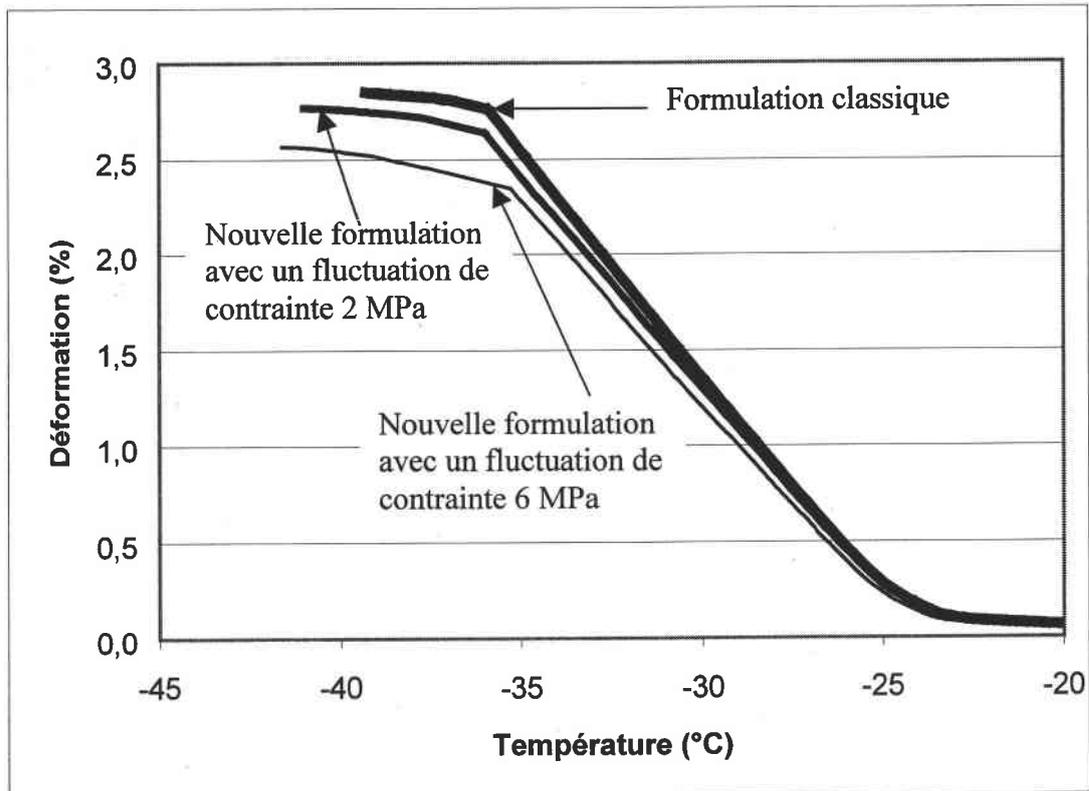


Fig. IV.19 : Simulation du fluage anisotherme soumis à une contrainte de 50 MPa. La déformation de transformation finale diminue avec la nouvelle formulation. Elle diminue d'autant plus que la fluctuation à l'intérieur des grains est grande.

Cette diminution de la déformation est très intéressante, mais elle n'atteint pas la valeur escomptée. Nous obtenons en effet une diminution de la déformation de 0,35 maximum, ce qui correspond à environ 14 % de diminution alors que l'on attendait une diminution beaucoup plus forte de la déformation.

Cette diminution s'accroît, peut-être, lorsque l'on baisse encore la contrainte, mais on est limité par le temps de calcul. Cette étape reste encore à améliorer.

IV.3.3 Conclusion

Nous avons simulé le fluage anisotherme d'un polycristal d'AMF à l'aide du modèle auto-cohérent. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux obtenus par Entemeyer en 1996. Ceci aussi bien pour un alliage Cu-Al-Be que pour un alliage CU-Zn-Al. Une fois le modèle validé nous avons implémenté la nouvelle approche dans ce modèle.

Les résultats sont qualitativement bons, mais demandent à être améliorés sur le plan quantitatif. Le plus gros problème rencontré est le temps de calcul : quand il y a plus de 20 systèmes potentiellement actifs l'analyse combinatoire est beaucoup trop longue. C'est pourquoi nous avons utilisé un nombre limité de grains et sommes restés au-dessus de 50 MPa pour les simulations. Cette partie demande donc à être améliorée en limitant, par exemple, le nombre de systèmes actifs.

CHAPITRE V

SIMULATION DE

MICRO-SYSTEMES

PAR ELEMENTS FINIS

V.1 Introduction

La tendance actuelle est de concevoir et de fabriquer des systèmes et des pièces de plus en plus petits afin de satisfaire aux contraintes du milieu où évolue la pièce, de gagner en encombrement, en matière et ainsi en coût. Les micro-systèmes, dont la taille est de l'ordre de la centaine de microns, sont en général des systèmes électroniques, où les différents composants (capteurs, mise en forme et traitement du signal, actionneurs) sont miniaturisés (voir figure V.1). En plus de cette miniaturisation, il est important que les matériaux constituant les systèmes jouent un rôle actif au niveau de la fonctionnalité et de ne pas simplement se limiter à une résistance ou une rigidité. Les matériaux intelligents tels que les céramiques piézo-électriques ou les alliages à mémoire de forme sont d'excellents candidats pour ce type d'application.

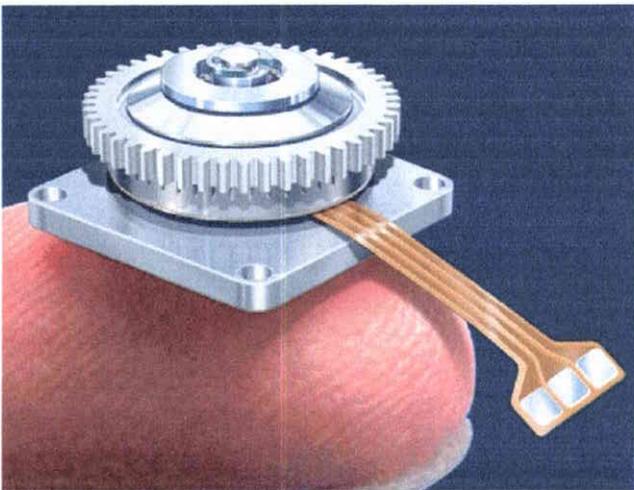


Fig. V.1 : Exemple de micro-système

La conception et le dimensionnement de tels systèmes nécessitent, comme pour les systèmes classiques, l'exploitation de logiciels numériques de calcul par éléments finis. Par contre, même si la démarche globale reste classique, il est nécessaire d'intégrer des spécificités liées aux faibles dimensions des composants de ces micro-systèmes. En effet, avec des macro-systèmes, on peut négliger la taille du grain par rapport à la taille de la pièce (figure V.2) et donc modéliser un matériau avec un comportement homogénéisé équivalent. En revanche, dans les micro-systèmes, la taille du grain ne peut être négligée puisqu'elle est du même ordre de grandeur que celle de la pièce (figure V.2). Il faut donc simuler le comportement de ces micro-systèmes grâce à un outil numérique tel que le code éléments finis ABAQUS. Ceci permet d'intégrer la forme, la taille et la morphologie de chaque grain.

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

Il est donc nécessaire de disposer au niveau du code E.F. de la loi constitutive permettant de décrire le comportement au niveau de chaque grain. Cette loi intègre le processus de transformation martensitique d'une manière globale comme cela a été décrit au chapitre II.

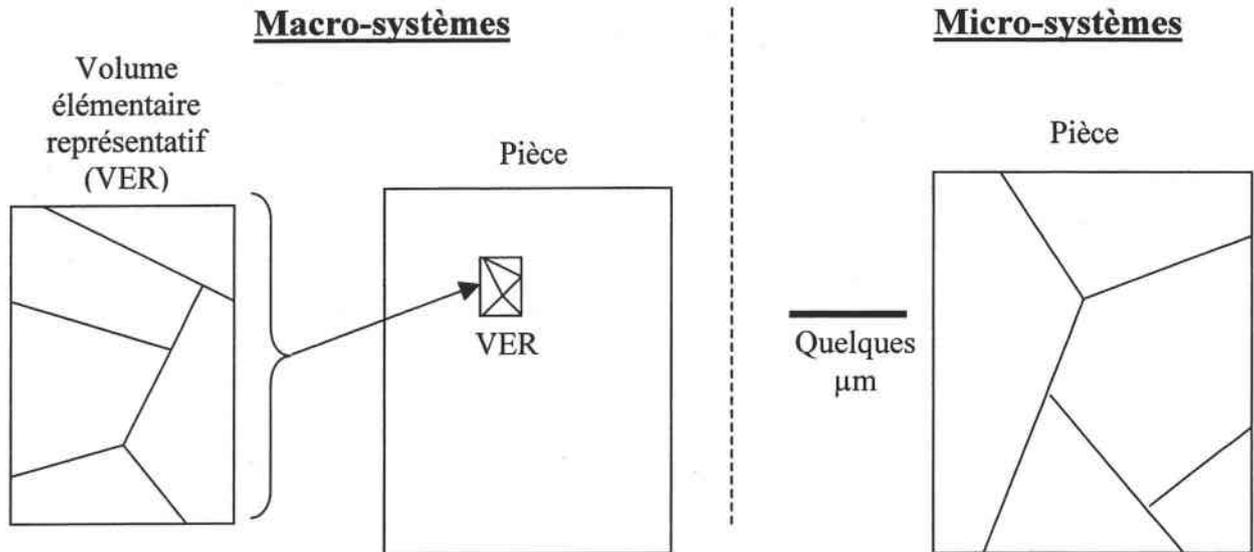


Fig.V.2 : Comparaison du rapport taille du grain taille de la pièce pour les macro-systèmes et les micro-systèmes.

Ce chapitre décrit uniquement la procédure d'implémentation du modèle superélastique (on augmente la contrainte en gardant la température constante) où peu de variantes sont activées, en utilisant la matrice d'interaction classique, dans le code éléments finis ABAQUS.

Les différentes étapes de cette étude sont :

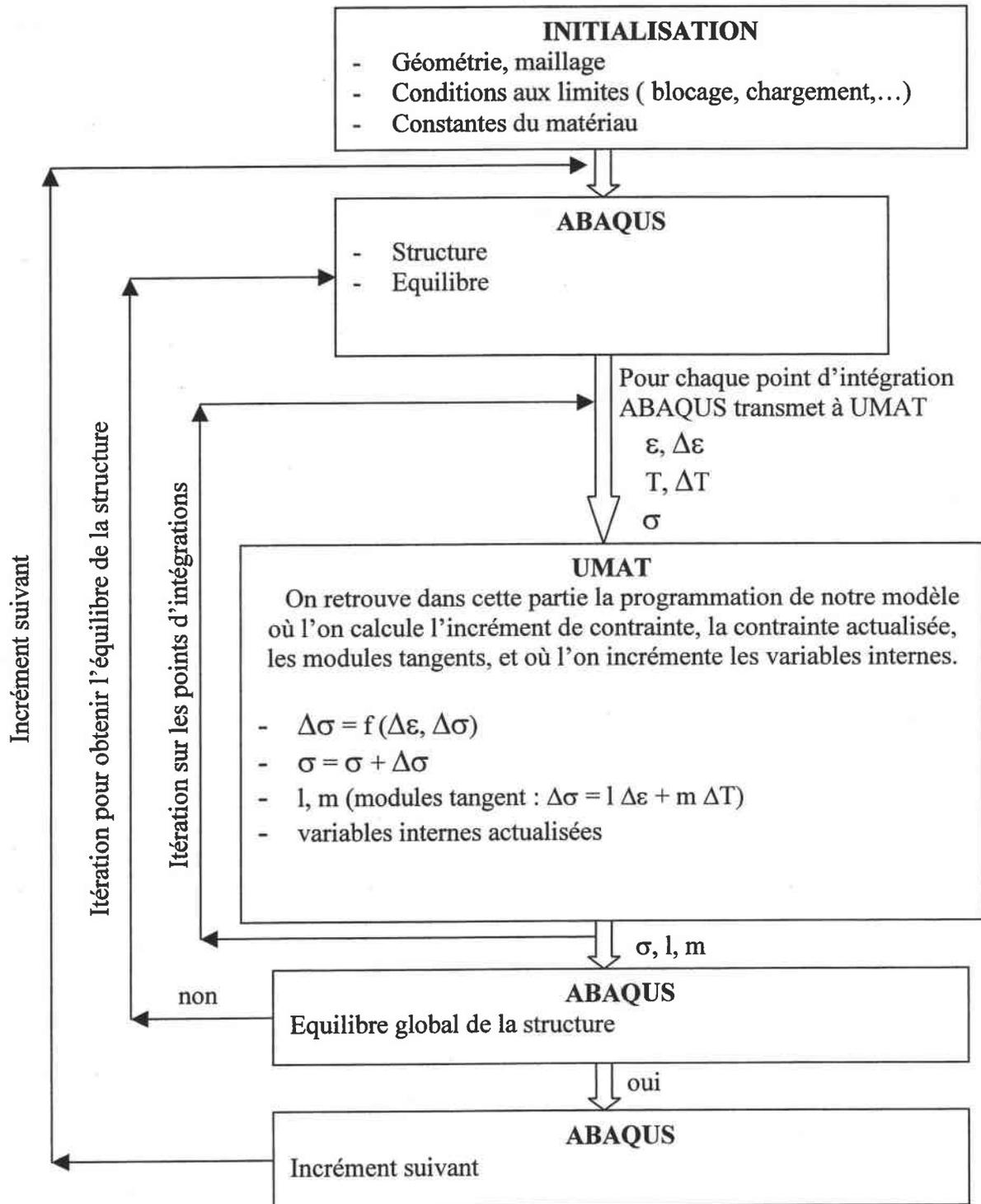
- Implémentation du modèle superélastique dans ABAQUS par l'intermédiaire du sous-programme User Material (UMAT)
- Vérification de l'implémentation grâce à la simulation d'un seul élément à intégration réduite. Ceci permet de vérifier la bonne implémentation du modèle dans le code éléments finis sans effectuer un réel calcul de structure. Nous verrons également grâce à ce calcul monocristallin l'influence de l'orientation cristallographique du cristal sur les résultats.
- Simulation d'un micro-système de type film mince composé de plusieurs grains d'orientations différentes.

V.2 Implémentation du modèle dans ABAQUS

En plus des modules standards présents dans le code éléments finis ABAQUS et permettant de décrire la plupart des lois de comportement classiques, il est possible d'introduire une loi spécifique utilisateur. Il faut alors implémenter les outils permettant, pour chaque incrément, d'effectuer les tâches suivantes :

- a) Calcul de l'incrément de contrainte pour un incrément de déformation donné.
- b) Calcul des modules tangents nécessaires au calcul des matrices de rigidité de chaque élément et pour le calcul de la matrice de rigidité globale.
- c) Actualiser l'état de contrainte et l'ensemble des variables internes associées à la loi de comportement utilisateur employée.

Pour ce faire ABAQUS dispose d'une routine appelée UMAT (User Material) permettant d'introduire le programme effectuant les opérations citées ci-dessus et d'assurer la communication avec les autres modules du code. L'historique (Hist. V.1) ci-dessous explique le fonctionnement du code ABAQUS utilisant le sous-programme UMAT.



Hist. V.1 : Visualisation globale du fonctionnement du code de calcul par éléments finis ABAQUS utilisant la routine User Material (UMAT). ($\Delta T=0$ superélasticité).

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

Les premières simulations réalisées dans le cadre de cette étude ont pour objectif de vérifier la validité du modèle sous Abaqus. On considère tout d'abord une situation très simple : un seul élément sollicité en traction pure. La validation réalisée sur un élément, nous considérerons un multicristal formé de quelques grains, chaque grain ayant des propriétés particulières.

V.2.1 Traction uniaxiale sur un élément

Nous considérerons, dans un premier temps un cas très simple : soit un monocristal cubique, sur lequel on va simuler un essai de traction uniaxiale suivant la direction 1 (figure V.3)

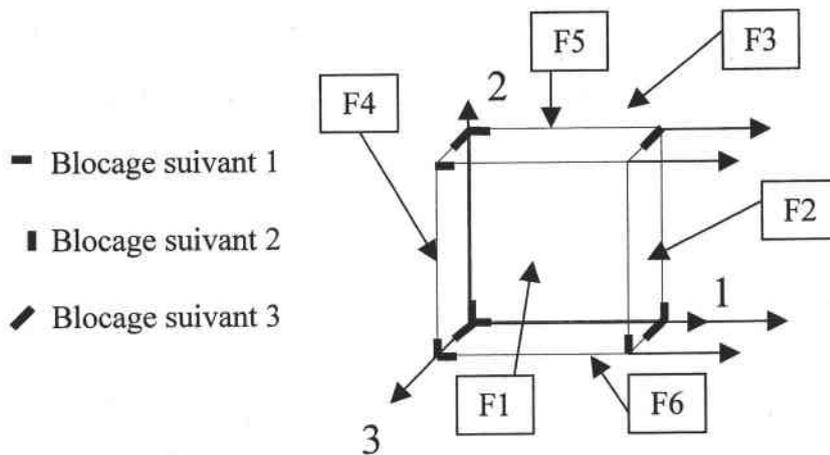


Fig. V.3 : Simulation de traction uniaxiale dans la direction 1.
Définition des conditions limites imposées au monocristal.

On confronte, dans un premier temps, les résultats obtenus à partir d'Abaqus et ceux correspondant à la réponse issue du modèle analytique lors d'un essai de traction ($\Delta\epsilon_{11}=\Delta\epsilon_0$, $\Delta\epsilon_{22}=\Delta\epsilon_{33}=-0,5\Delta\epsilon_0$ et les autres termes du tenseur incrément de déformation sont nuls). Dans le cas du calcul dans Abaqus, on utilise des éléments volumiques iso-paramétriques à intégration réduite C3D8R, où le calcul est ramené en un seul point d'intégration par élément. Les résultats obtenus (figure V.4) sont très satisfaisants. On note toutefois une légère différence entre la courbe analytique et celle déterminée avec Abaqus. Cette différence peut être attribuée à des choix de conditions de chargement légèrement différentes dans les deux cas. Le calcul Abaqus simule un essai de traction pure alors que le modèle analytique considère un essai de pseudo traction. Chaque incrément de chargement étant piloté par le tenseur incrément de déformation suivant :

$$\Delta\varepsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \Delta\varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\Delta\varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\Delta\varepsilon_0 \end{bmatrix}$$

Les résultats et les conclusions effectués pour ce chargement restent valables pour un essai de traction dans les directions 2 et 3. Il en est de même pour un essai de cisaillement où les courbes sont quasi-identiques. L'étape suivante de la vérification consiste à étudier la cohérence de l'évolution des variables internes. A titre d'exemple, l'effet de l'orientation cristallographique du monocristal est présenté au paragraphe suivant.

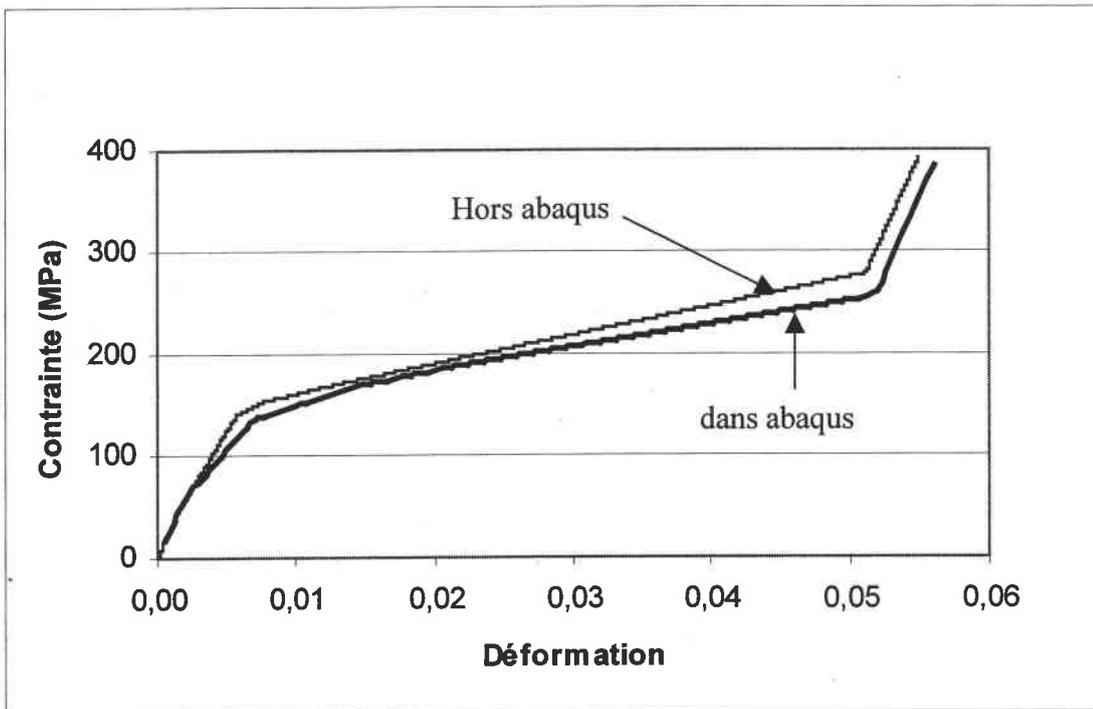


Fig. V.4 : Comparaison des résultats pour un calcul effectué par Abaqus et pour un calcul effectué en dehors d'Abaqus. On remarque que les deux résultats sont très proches.

V.2.2 Résultats sur un essai de traction-compression d'un monocristal d'AMF

On simule des essais de traction-compression sur des monocristaux de différentes orientations cristallographiques. L'évolution du chargement en fonction du temps est représentée sur la figure V.5. Pour ce type d'essai, on sait que la déformation peut atteindre plus de 10% sous une contrainte de quelques MPa, pour un monocristal bien orienté par rapport à la direction de traction-compression. Plus le cristal sera « mal » orienté et moins la déformation finale sera importante et plus la contrainte nécessaire pour atteindre cette déformation sera grande.

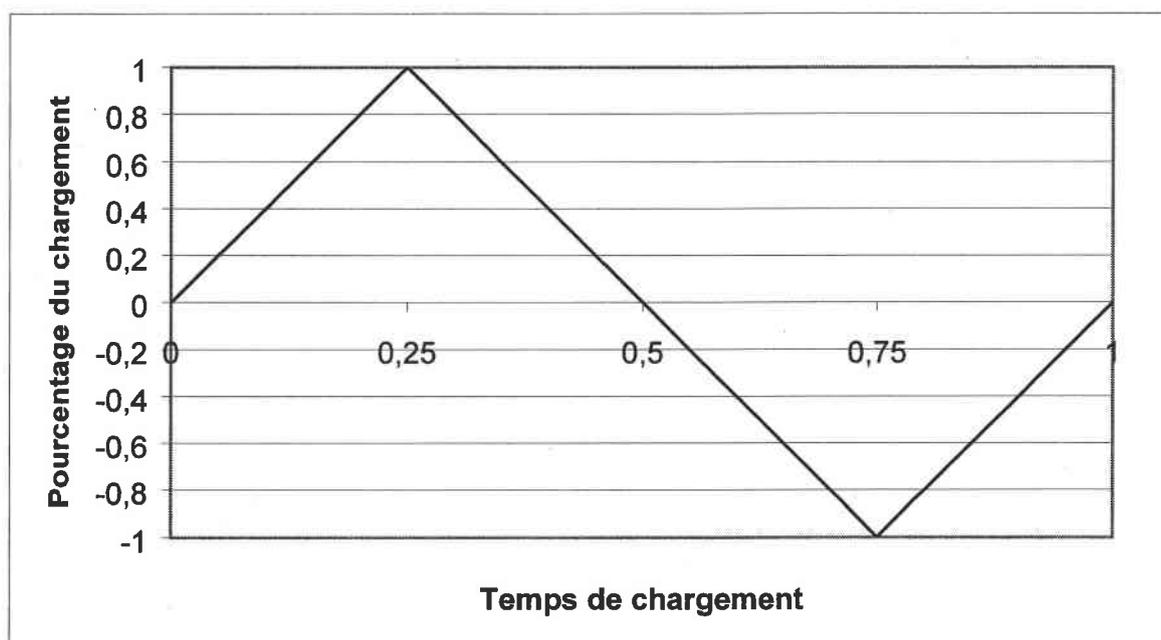


Fig. V.5 : Evolution du chargement au cours du temps : cette évolution est normalisée et le temps de chargement introduit correspond au pourcentage de chargement effectué (0 = début de chargement et 1 = fin de chargement).

On considère 5 orientations cristallographiques, chacune est caractérisée par ses 3 angles d'Euler (ϕ_1 , ϕ , ϕ_2). Comme il s'agit d'un essai de traction-compression suivant la direction 1, seules les 24 composantes R_{11} du tenseur d'orientation des variantes sont représentatives de la « bonne » ou « mauvaise » orientation des variantes. En effet, plus la composante R_{11} d'une variante est proche de 0,5 plus cette variante est bien orientée et plus elle est susceptible de s'activer. Ainsi en prenant, pour chacune des 5 orientations considérées, la composante R_{11} maximale parmi les 24 possibles, nous pouvons identifier le cristal le mieux orienté. Les angles d'Euler des 5 orientations ainsi que les composantes R_{11} maximales correspondantes

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

sont listés en tableau V.1. La numérotation des orientations est prise croissante du cristal le mieux orienté au moins bien orienté.

	$\varphi 1$	φ	$\varphi 2$	Traction	Compression
				R_{11}	R_{11}
orientation 0	0	0	0	0,5	-0,5
orientation 1	351,9	21,3	212,1	0,49	-0,41
orientation 2	173,4	104,5	34,5	0,43	-0,33
orientation 3	88,6	55,6	327,6	0,39	-0,33
orientation 4	210,3	91,9	131,8	0,21	-0,17

Tableau V.1 : Orientations cristallographiques et composantes R_{11} maximales du tenseur d'orientation pour les différents monocristaux étudiés. Le cristal d'orientation 0 est le mieux orienté, l'orientation 4 est la plus mauvaise.

On constate une cohérence au niveau des résultats obtenus : plus le cristal est bien orienté plus sa déformation maximale est grande et plus la contrainte nécessaire à sa transformation totale est faible. Le grain d'orientation 0 a la déformation la plus grande et la contrainte la plus faible, inversement pour le grain 4 (figure V.6).

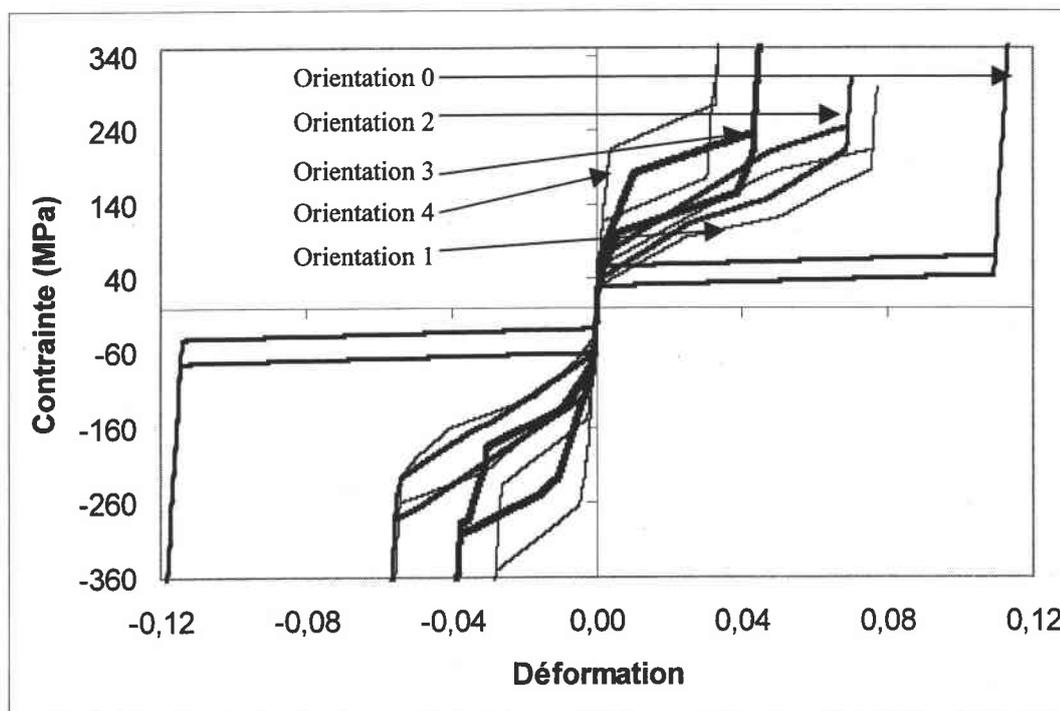


Fig.V.6 : Courbes contrainte-déformation pour cinq monocristaux d'orientation cristalline différente.

On remarque également la bonne prise en compte de la différence entre le comportement en traction et celui en compression : les déformations maximales sont différentes, le départ des transformations austénite-martensite et martensite-austénite ainsi que la valeur de l'hystérésis sont également différents (voir figure V.7).

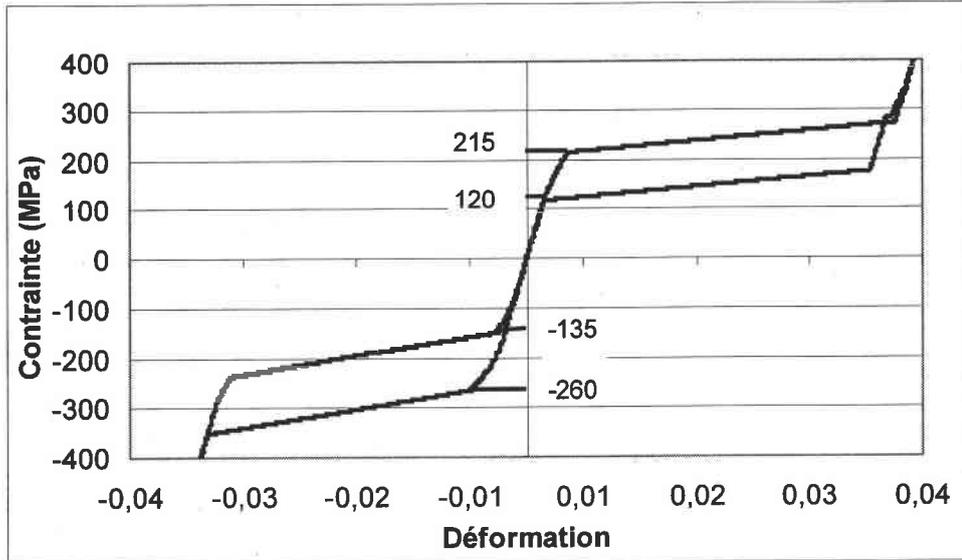


Fig. V.7 : Différence entre les résultats de traction et de compression pour un cristal d'orientation 4

D'autres informations intéressantes, telles que le nombre et le type de variantes activées au cours des différentes simulations, sont obtenues grâce aux variables internes qu'on a pris soin de mettre en sortie d'UMAT pour pouvoir les visualiser en post traitement. On peut ainsi vérifier que les variantes activées en traction sont différentes de celles activées en compression et ceci pour une même orientation.

Nous avons tracé pour chaque orientation l'évolution des fractions volumiques des variantes de martensite au cours du chargement ainsi que la fraction volumique globale de martensite dans le cristal. D'autre part, le nombre de variantes actives au cours des chargements a été représenté. Toutes ces courbes sont représentées sur les figures V.7a, V.7b, V.8a, V.8b, V.9a, V.9b, V.10a, V.10b, V.11a, V.11b, et une analyse succincte pour chaque figure est faite dans les légendes.

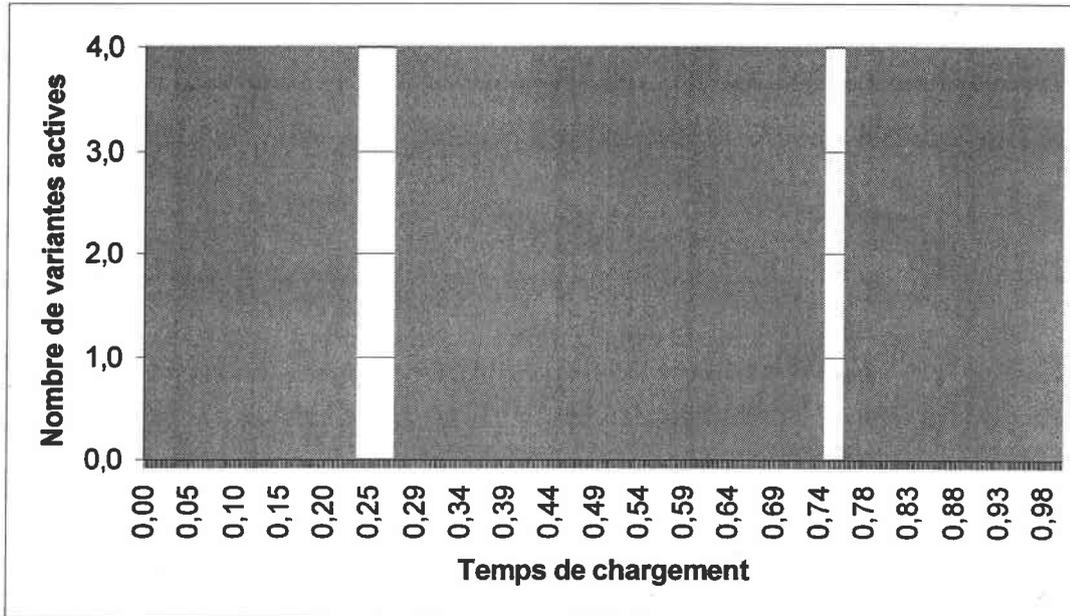


Fig. V.7a : Nombre de variantes activées au cours du chargement pour l'orientation 0. Pour cette orientation le nombre est toujours de quatre au cours de la transformation.

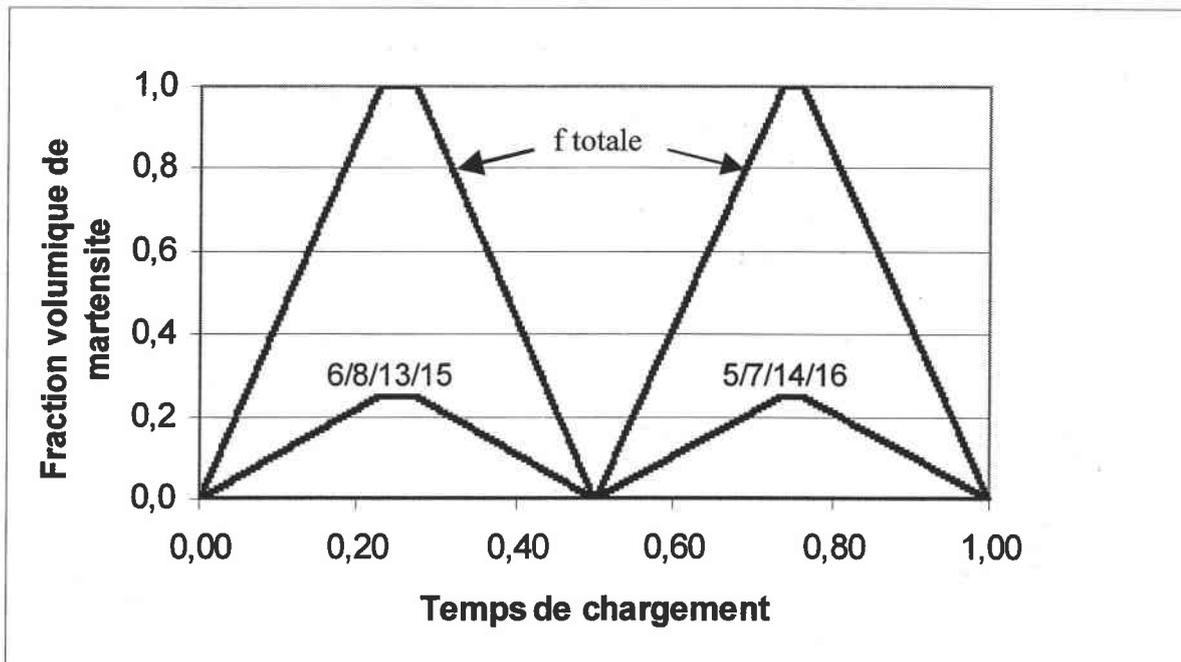


Fig.V.7b : Evolution des fractions volumiques de martensite au cours du chargement pour l'orientation 0. Pour ce type de chargement et pour cette orientation particulière, plusieurs variantes sont identiques du fait des symétries.

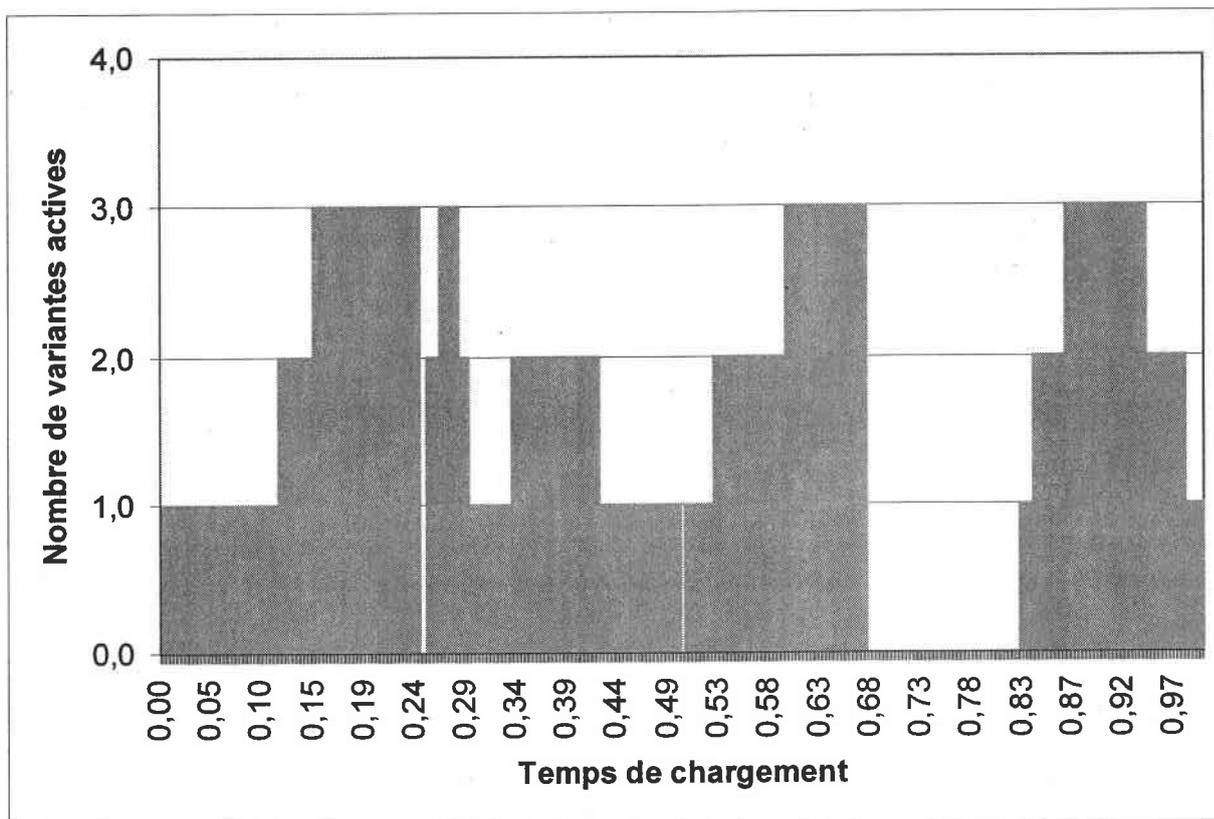


Fig. V.8a : Nombre de variantes activées au cours du chargement pour l'orientation 1. Pour cette orientation le nombre varie de 1 à 3 au cours des différentes transformations.

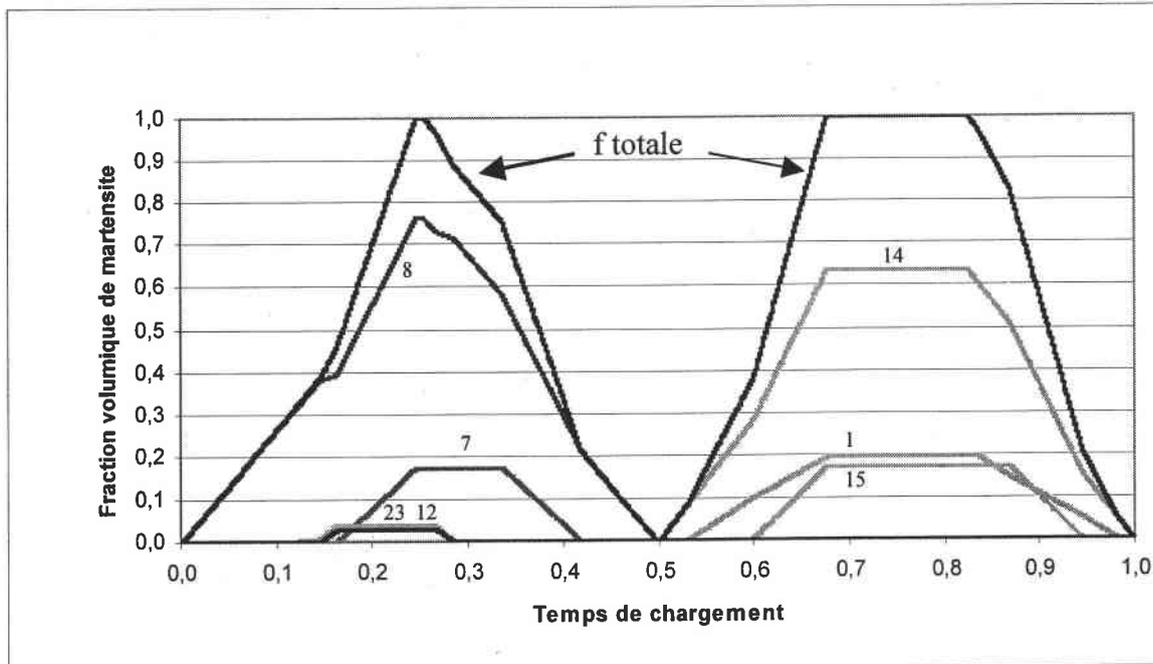


Fig.V.8b : Evolution des fractions volumiques de martensite au cours du chargement pour l'orientation 1. Les variantes activées sont différentes en traction et en compression. La variante 8 est majoritaire en traction et la variante 14 en compression. On remarque aussi que la saturation est atteinte plus rapidement en compression.

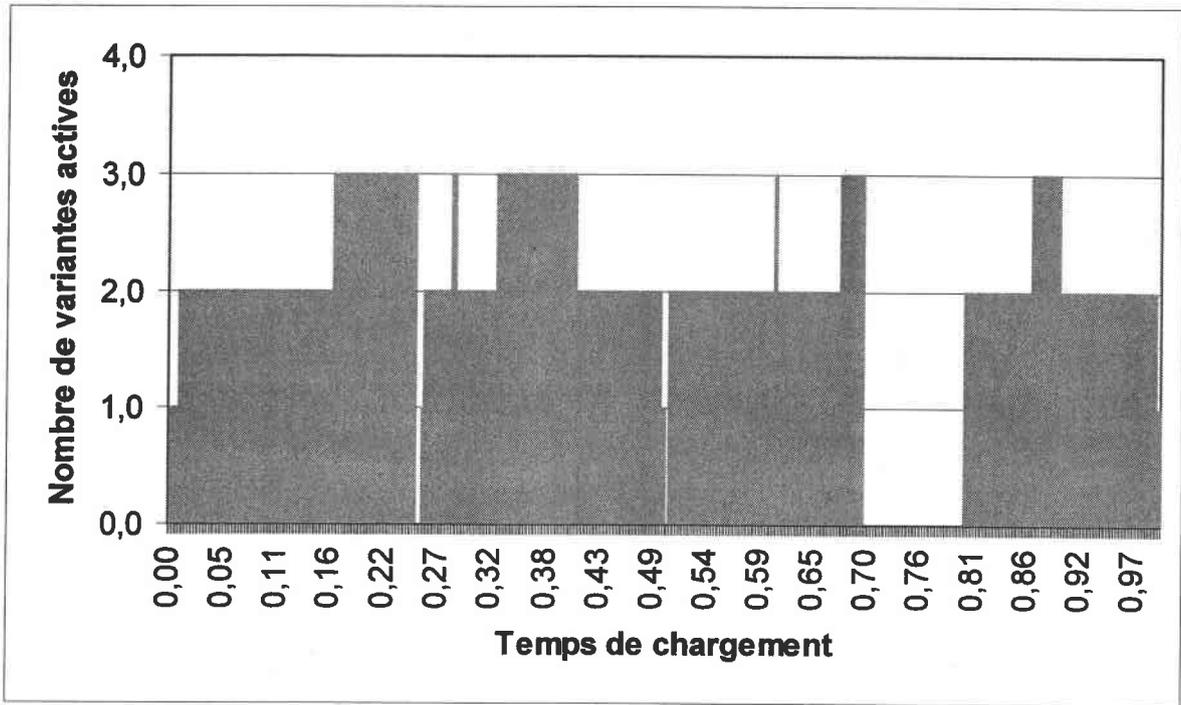


Fig. V.9a : Nombre de variantes activées au cours du chargement pour l'orientation 2. Pour cette orientation le nombre varie de 1 à 3 au cours des différentes transformations.

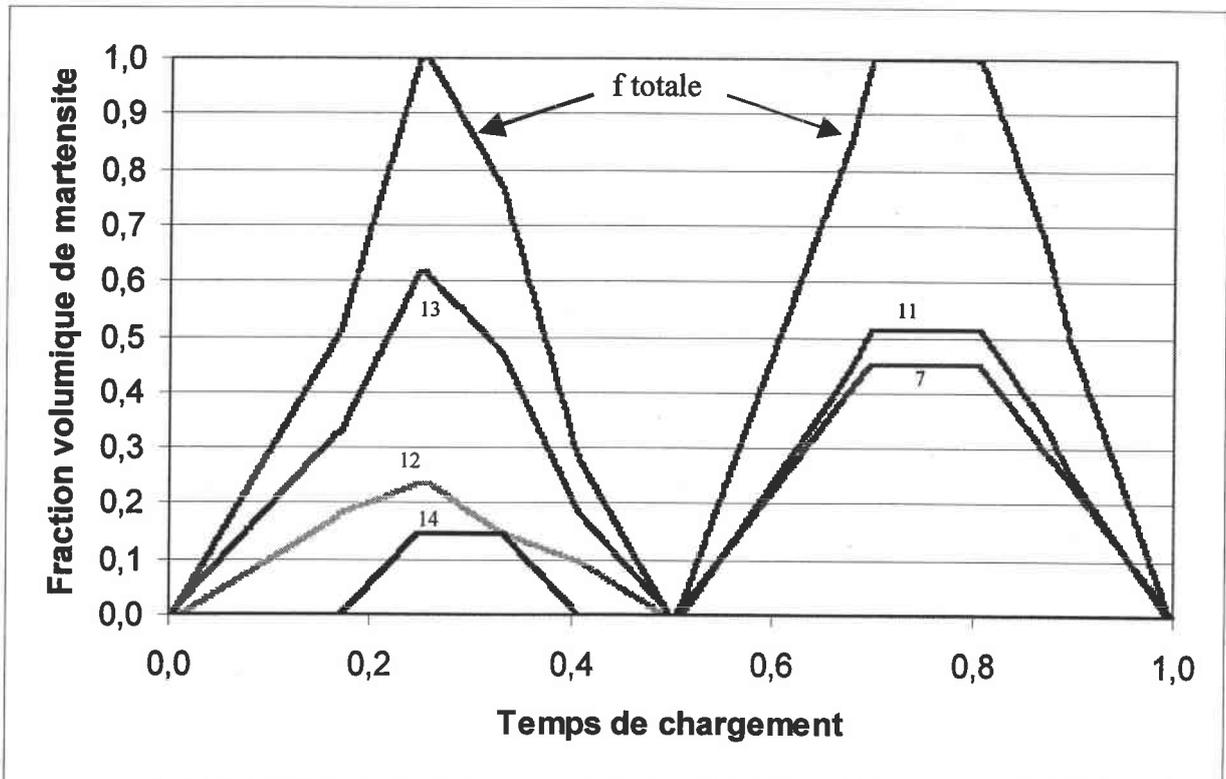


Fig.V.9b : Evolution des fractions volumiques de martensite au cours du chargement pour l'orientation 2. Les variantes activées sont différentes en traction et en compression. La variante 13 est majoritaire en traction et les variantes 7 et 11 en compression. On remarque également que la saturation arrive plus rapidement en compression

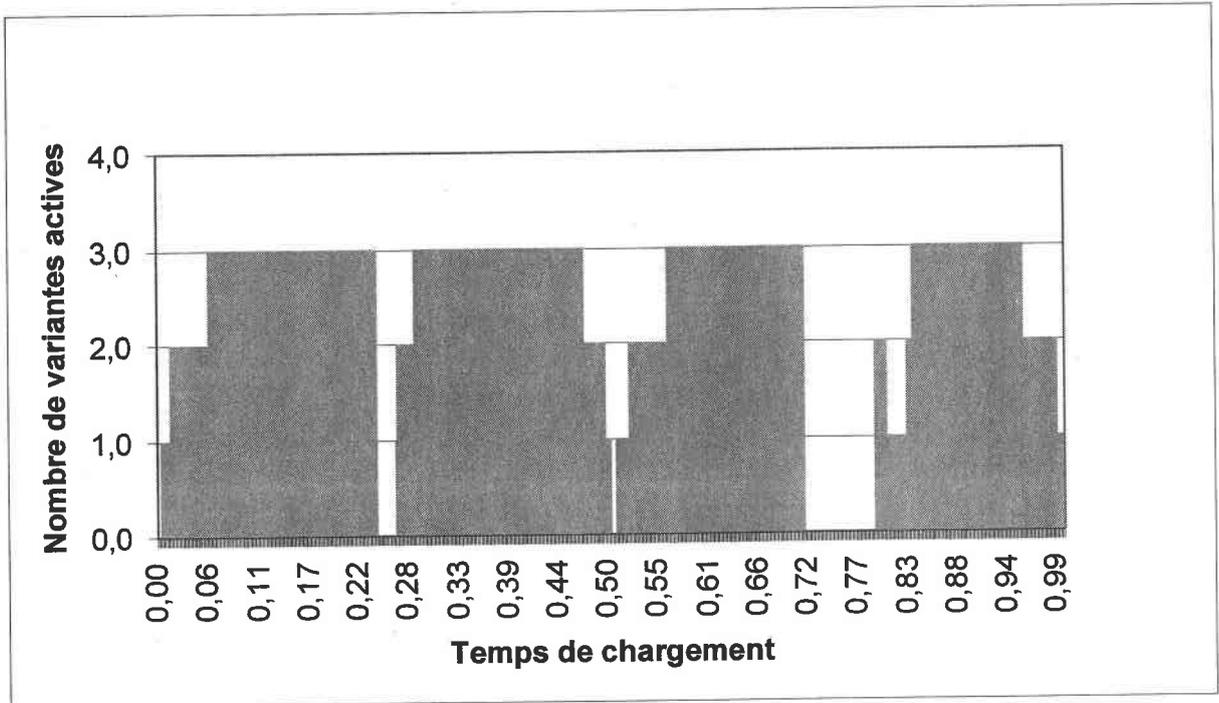


Fig. V.10a : Nombre de variantes activées au cours du chargement pour l'orientation 3. Pour cette orientation le nombre varie de 1 à 3 au cours des différentes transformations.

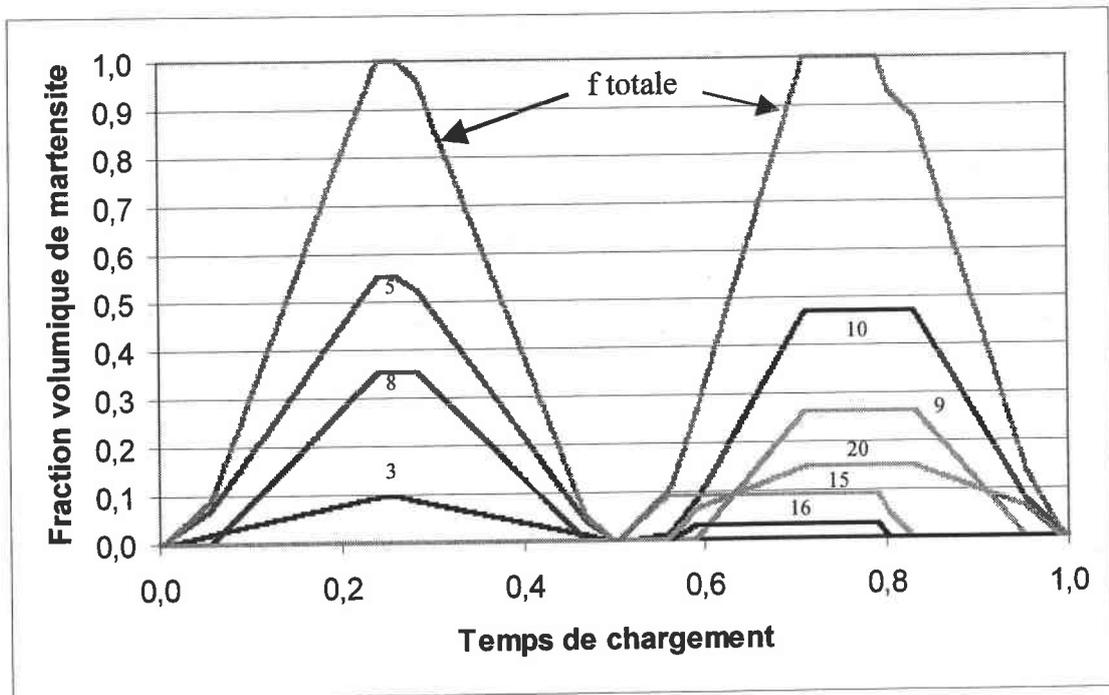


Fig.V.10b : Evolution des fractions volumiques de martensite au cours du chargement pour l'orientation 3. Les variantes activées sont différentes en traction et en compression. Pour cette orientation un plus grand nombre de variantes sont activées. On a tout de même un maximum de trois variantes activées simultanément.

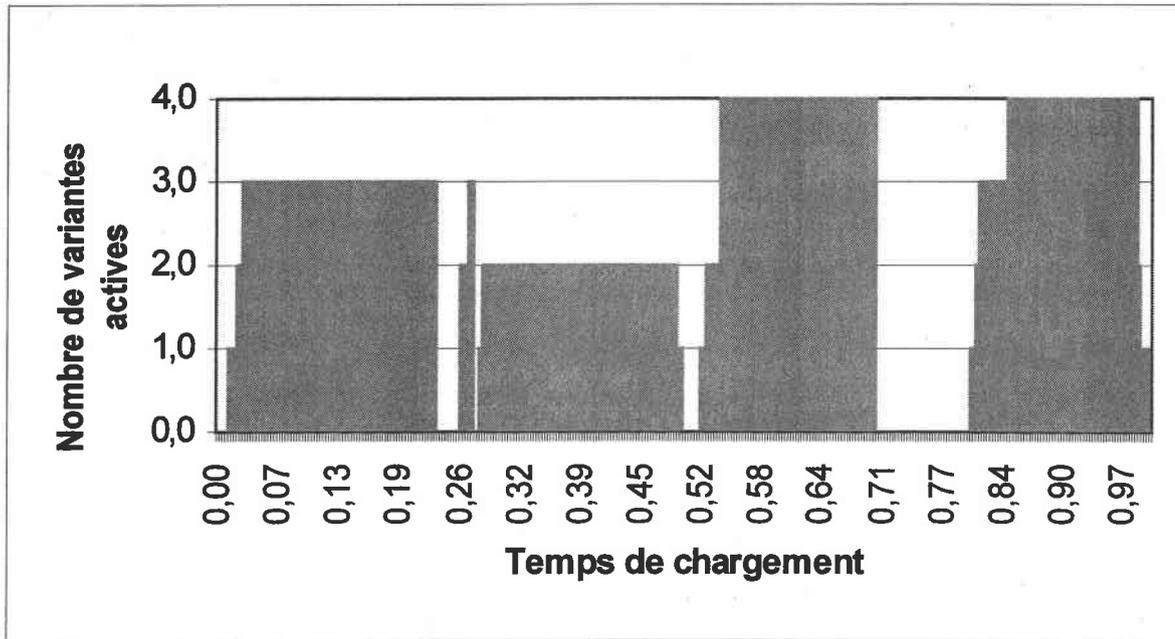


Fig. V.11a : Nombre de variantes activées au cours du chargement pour la moins bonne des orientations (orientation 4). Pour cette orientation le nombre varie de un à quatre au cours des différentes transformations.

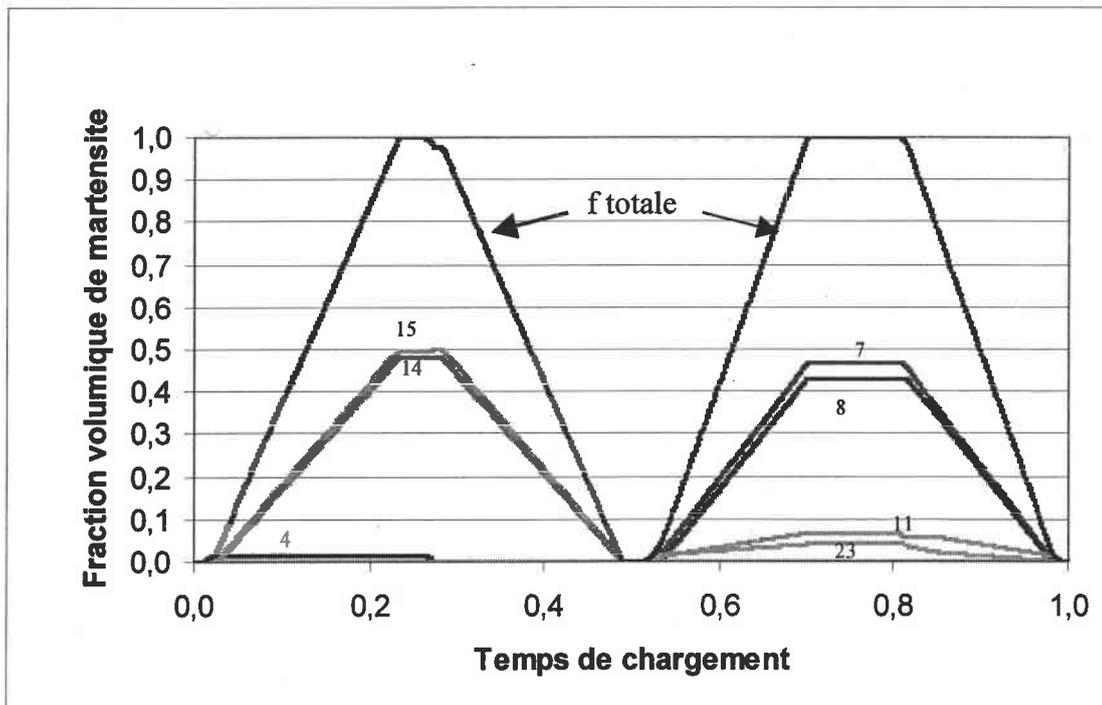


Fig.V.11b : Evolution des fractions volumiques de martensite au cours du chargement pour l'orientation 4. Les variantes activées sont différentes en traction et en compression. En traction ce sont les variantes 15 et 14 qui donnent la quasi-totalité de la transformation. Tandis qu'en compression ce sont les variantes 7 et 8.

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

Toutes les courbes précédentes montrent que les variantes activées sont différentes selon qu'on simule un essai de traction ou un essai de compression. On retrouve bien la dissymétrie entre la traction et la compression mise en évidence par de nombreux auteurs (Patoor et al., 1995), (Gall et al., 1999), (Qidwai et al., 2000).

On remarque également que la transformation complète du monocristal est plus rapide en compression qu'en traction.

D'autre part, on observe que la fraction volumique globale de martensite dans le monocristal est supérieure à 80% lorsqu'on ne considère que les deux variantes majoritairement activées. Ce phénomène est encore plus marqué pour l'orientation 1 où la variante 8 représente à elle seule 75% de la fraction volumique globale de martensite formée en traction et où la variante 14 représente 65% de la fraction volumique globale de martensite formée en compression (voir fig. V.8b). Ce résultat est très satisfaisant car Entemeyer (1996) a montré qu'en superélasticité un nombre très réduit de variantes est activé. D'ailleurs, dans toutes ces simulations nous ne dépassons jamais quatre variantes activées en même temps.

On peut également souligner que si l'on considère simplement les variantes dont la fraction volumique maximale est supérieure à 10%, il ne reste que deux ou trois variantes actives pour toutes nos simulations.

La cinétique de transformation lors de ces simulations est la suivante : on a tout d'abord une première variante de martensite qui s'active, et lorsque les conditions aux limites empêchent le monocristal de se déformer "à son aise" (par exemple par du cisaillement), alors d'autres variantes s'activent pour compenser ce phénomène et accommoder la déformation de l'échantillon en fonction des conditions aux limites imposées.

Ce problème se retrouve d'ailleurs dans les essais de traction classique sur des monocristaux d'AMF. En effet, au début du chargement, les axes des traverses de la machine de traction sont alignés et lorsqu'une variante de martensite est induite dans l'échantillon, elle engendre un cisaillement qui a tendance à séparer les deux axes. Le matériau est alors contraint de développer d'autres variantes pour conserver l'alignement des axes (voir figure V.12).

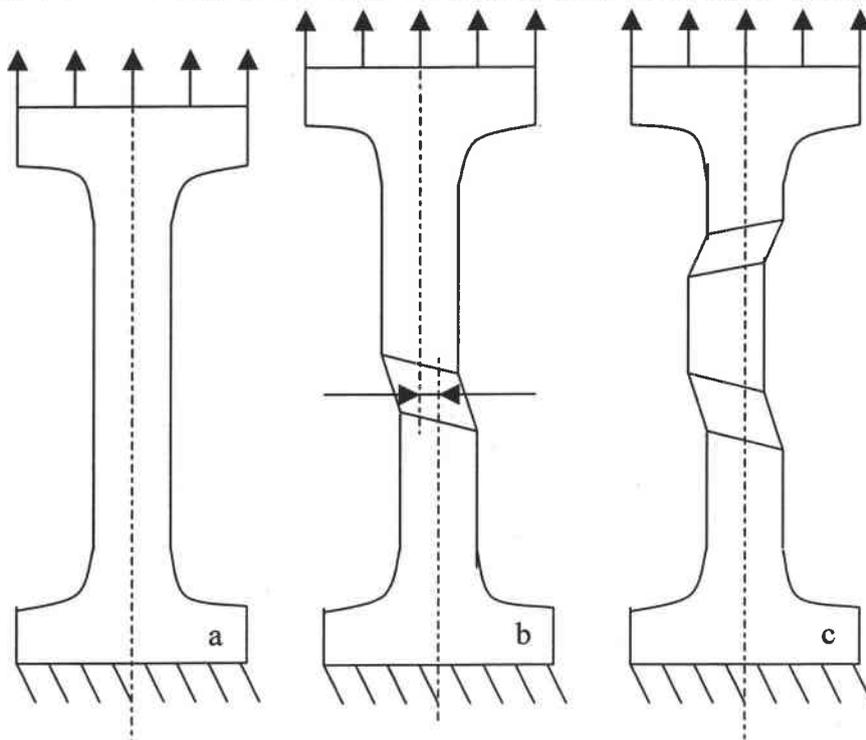


Fig. V.12 : Décalage de l'axe des traverses lors d'un essai de traction sur une machine de traction classique. a) début de l'essai, b) apparition d'une variante de martensite donnant un cisaillement qui a tendance à séparer les 2 axes et c) apparition d'une deuxième variante pour remettre les axes dans leur position initiale.

Dans le cas d'un calcul sous Abaqus où tous les déplacements sont laissés libres (sauf ceux nécessaires à la simulation), on doit aboutir à la formation d'une seule et unique variante de martensite à l'intérieur du monocristal. Celle-ci doit transformer complètement l'échantillon en donnant une déformation de transformation maximale. Un nouvel essai est donc réalisé avec les conditions aux limites moins contraignantes de la figure V.13.

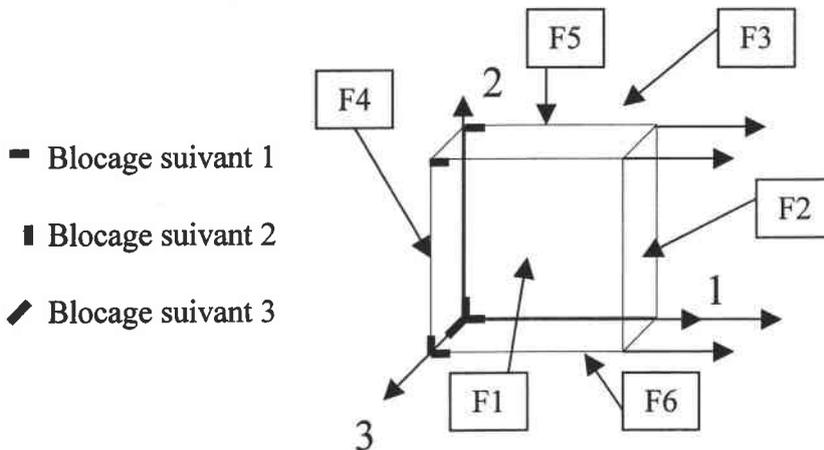


Fig. V.13 : Conditions aux limites pour l'essai de traction.

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

Ce calcul n'est effectué que pour l'une des 5 orientations précédentes, en l'occurrence l'orientation 1 a été arbitrairement choisie. Pendant la traction, une seule variante qui correspond à la mieux orientée par rapport à la direction de traction : ici la variante 8 s'active et transforme entièrement l'échantillon (voir figure V.14). Et pendant la compression, une seule variante, la mieux orientée par rapport à la direction de compression : ici la variante 7 s'active et transforme entièrement l'échantillon (voir figure V.14).

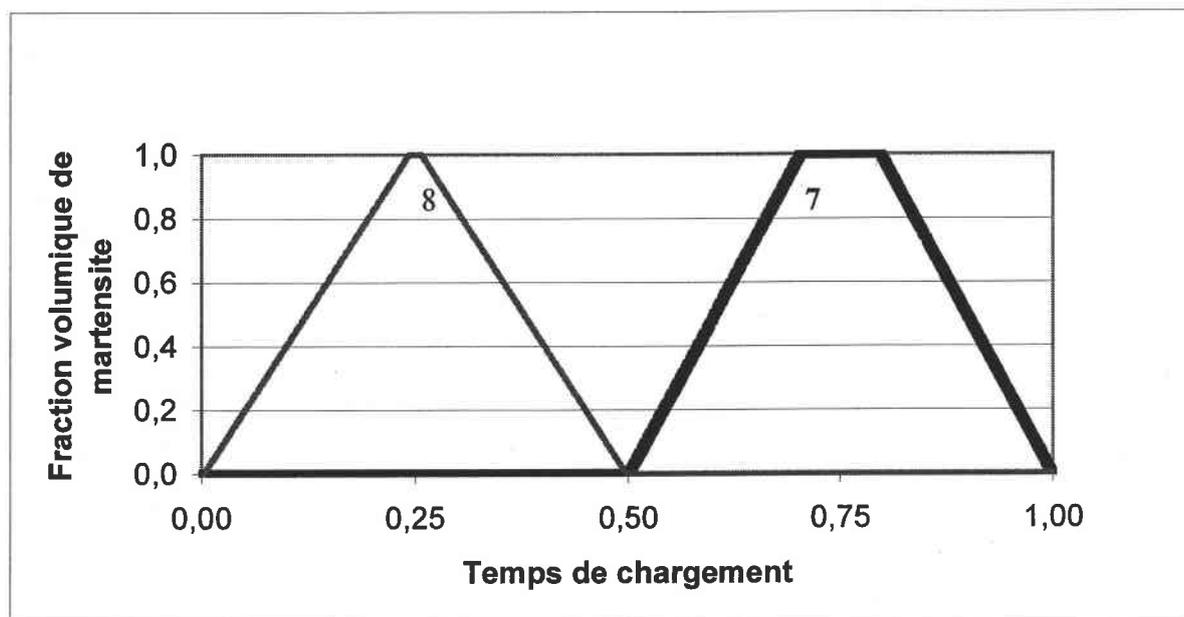


Fig. V.14 : Variantes activées au cours du chargement pour l'orientation 1 avec les conditions aux limites de la figure V.13. La variante 8 apparaît et disparaît pendant la traction et la décharge tandis que la variante 7 apparaît et disparaît pendant la compression et la décharge.

La déformation finale obtenue avec ces nouvelles conditions aux limites est beaucoup plus forte qu'avec les conditions initiales de la figure V.3. La déformation qu'engendre, à elle seule, la variante la mieux orientée est beaucoup plus forte que lorsqu'elle est accompagnée d'autres variantes. Avec les anciennes conditions aux limites, la déformation atteinte par l'échantillon ayant l'orientation 1 est de presque 8%. Avec les nouvelles conditions cet échantillon dépasse 11% de déformation (voir figure V.15).

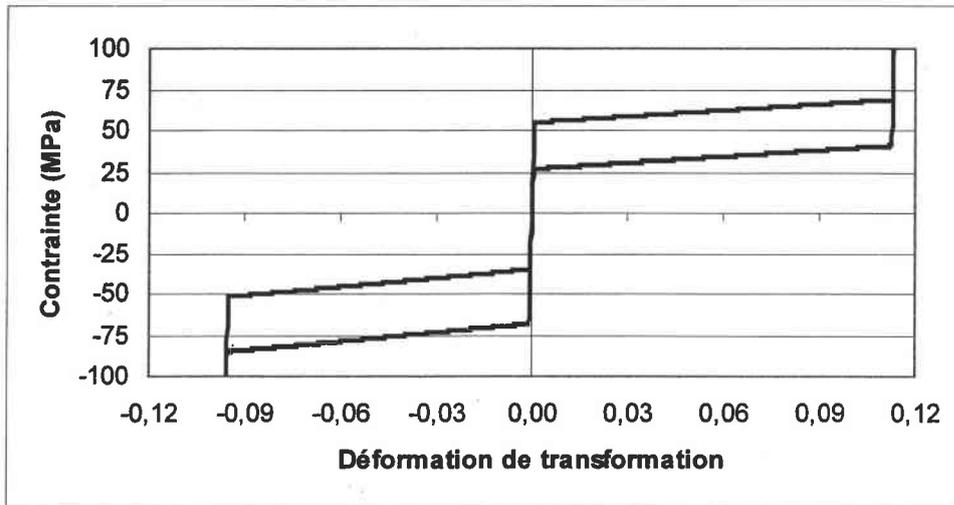


Fig. V.15 : Courbe contrainte – déformation pour un élément ayant l'orientation1 et les conditions aux limites de la figure V.13.

Une dernière vérification peut être faite sur cette courbe : il faut que l'aire entre la courbe de traction et la décharge soit identique à l'aire entre la courbe de compression et la décharge. Ce calcul est réalisé en annexe 3 où l'on observe que ces deux aires sont égales à 3,2 MPa.

V.2.3 Conclusion

Nous avons vérifié la cohérence de l'implémentation du modèle superélastique dans le code d'éléments finis ABAQUS à l'aide d'une simulation de traction, sur un élément cubique. Ces résultats étant satisfaisants, nous avons simulé différents essais de traction-compression sur des monocristaux ayant des orientations cristallines très différentes. Nous avons également testé deux types de conditions aux limites. Ceci nous a permis de simuler toutes les propriétés du comportement d'un monocristal d'AMF en traction/compression uniaxiale. Cette approche est ensuite utilisée pour simuler le comportement d'un multicristal de six grains.

V.3 Application : cas d'un film mince multicristallin

Pour la simulation par éléments finis du comportement d'un multicristal, il faut mailler judicieusement l'échantillon en prenant soin de distinguer les différents grains. Les orientations cristallographiques des grains peuvent être obtenues par EBSD (Electron Back Scattered Diffraction) comme le font Delaire et al. (Delaire et al., 2000) pour un multicristal de cuivre. Ensuite, on peut mailler l'intérieur des grains en fonction de la distribution du champ de contrainte ou de déformation : on affine le maillage aux endroits où l'on observe une concentration de contrainte. C'est ainsi que Raabe et al. (Raabe et al., 2001) ont maillé leur multicristal en affinant les zones frontières entre deux grains (joints de grains) et tout particulièrement les zones frontières entre trois grains. Le maillage à l'intérieur des grains dépend fortement de la distribution du champ de déformation observé expérimentalement dans ces grains (voir figure V.16). Le type de maillage influe fortement sur les résultats.

Il est aussi possible de générer un maillage à partir de la géométrie extérieure de la pièce grâce à certains logiciels tels que CASTEM 2000. Feyel et al. (Feyel et al., 1997) utilisent ce logiciel pour mailler une pièce 3D de géométrie complexe avec des éléments tétraédriques à 4 nœuds. Barbe et al. (Barbe et al., 2001a et 2001b) ont généré un agrégat polycristallin grâce à un outil numérique utilisant le modèle de Voronoï (Gilbert, 1962). Les résultats que nous exposons dans ce chapitre étant purement qualitatifs (sans observation et comparaison expérimentale), un maillage régulier pour chaque grain est donc suffisant.

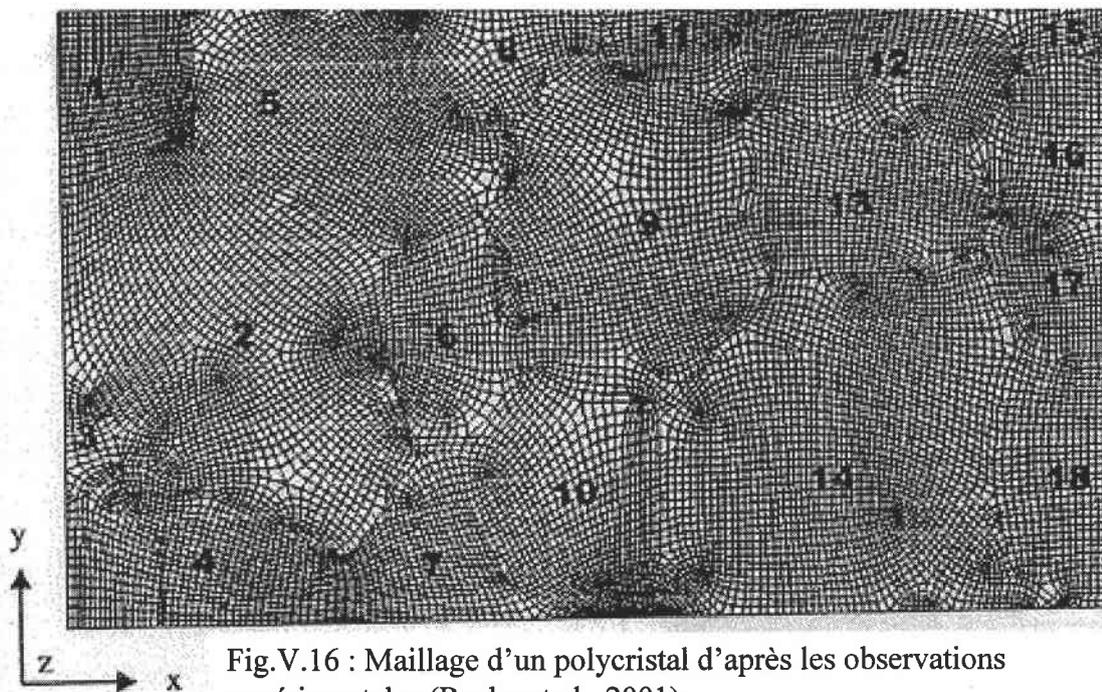


Fig.V.16 : Maillage d'un polycristal d'après les observations expérimentales (Raabe et al., 2001).

V.3.1 Caractérisation géométrique et données de la simulation

Nous modélisons dans cette partie un film mince de 0.1 mm d'épaisseur dont la géométrie (Peralta J., 2001), les dimensions et les orientations cristallographiques sont représentées sur la figure V.17

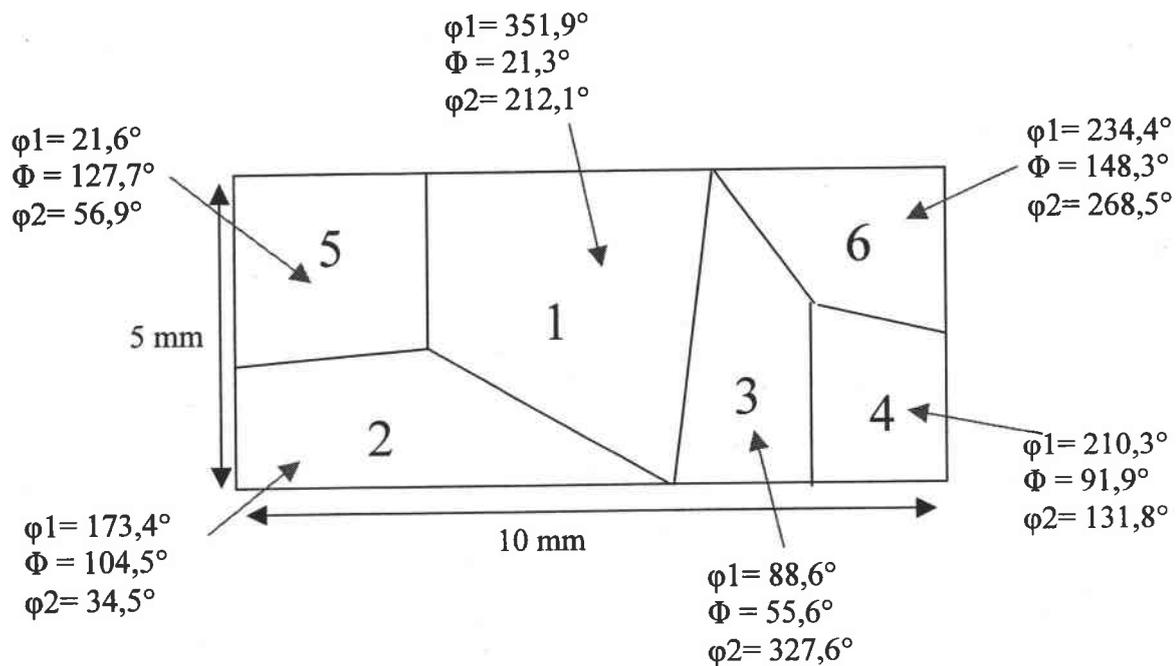


Fig. V.17 : Représentation du film mince, de sa géométrie et de ses dimensions.

Un tableau donnant le numéro du grain, les angles d'Euler associés et la composante R_{11} maximale est présenté (tableau V.2). On peut immédiatement observer que le grain numéro 1 est le mieux orienté et que le grain numéro 4 a la moins bonne orientation.

n° du grain	ϕ_1	ϕ	ϕ_2	R_{11}
grain 2	173,4	104,5	34,5	0,43
grain 3	88,6	55,6	327,6	0,4
grain 6	234,4	148,3	268,5	0,28
grain 4	210,3	91,9	131,8	0,21
grain 5	21,6	127,7	56,96	0,33
grain 1	351,9	21,3	212,1	0,49

Tableau V.2 : Orientation cristallographique des six grains composant le film mince.

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

Chaque grain est ensuite maillé par 144 éléments cubiques à intégration réduite, soit 864 éléments (voir figure V.18).

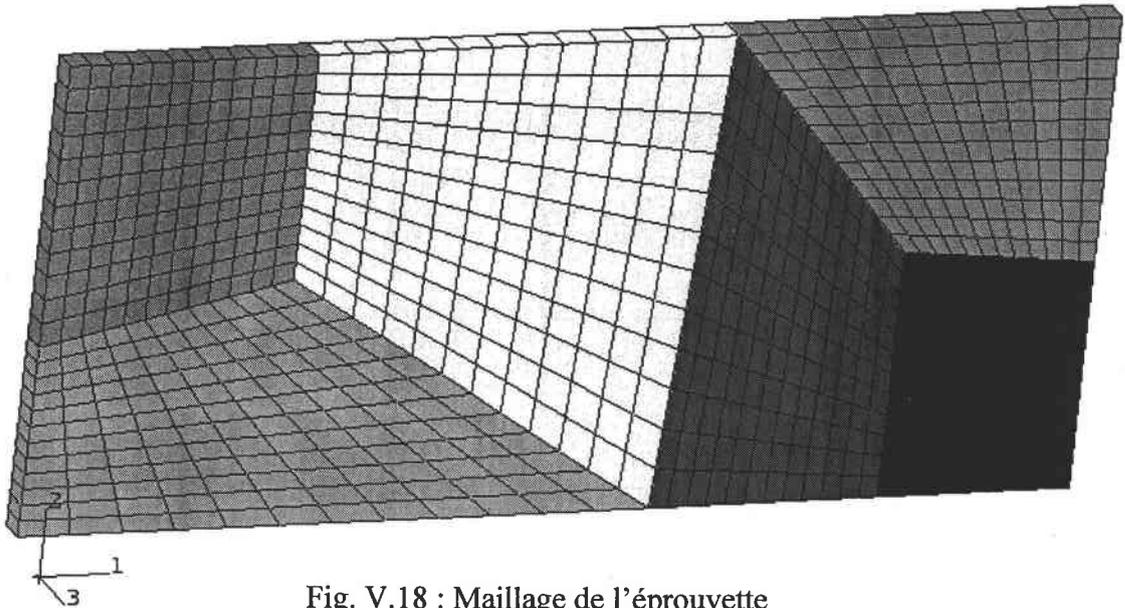


Fig. V.18 : Maillage de l'éprouvette

Nous avons simulé un essai de traction suivant la direction 1. Les conditions aux limites imposées à la structure sont définies de la façon suivante :

- Blocage de tous les nœuds de la face gauche dans la direction 1, blocage d'un nœud de cette face suivant les directions 2 et 3 et blocage d'un dernier nœud de cette face suivant la direction 2 uniquement.
- Déplacement de l'ensemble des nœuds de la face droite suivant la direction 1.

Ces conditions aux limites sont symbolisées et représentées sur les figures V.19 et V.20.

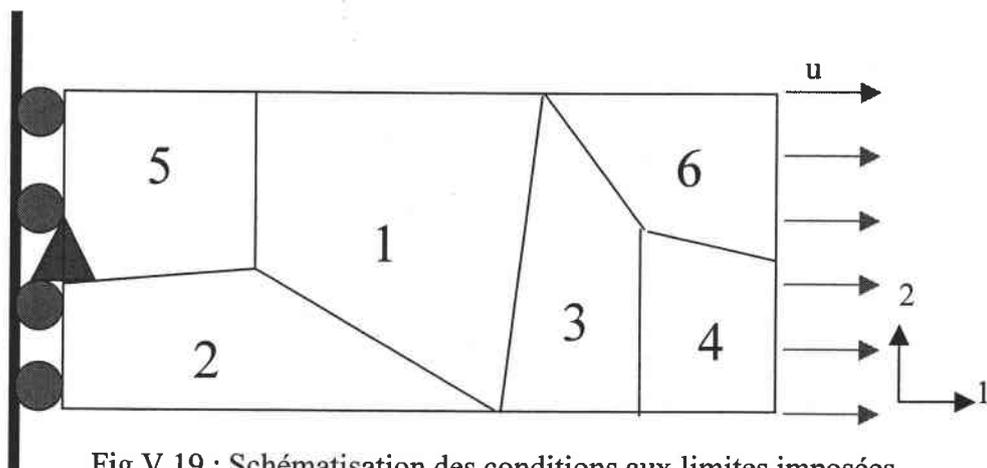


Fig. V.19 : Schématisation des conditions aux limites imposées au film mince AMF.

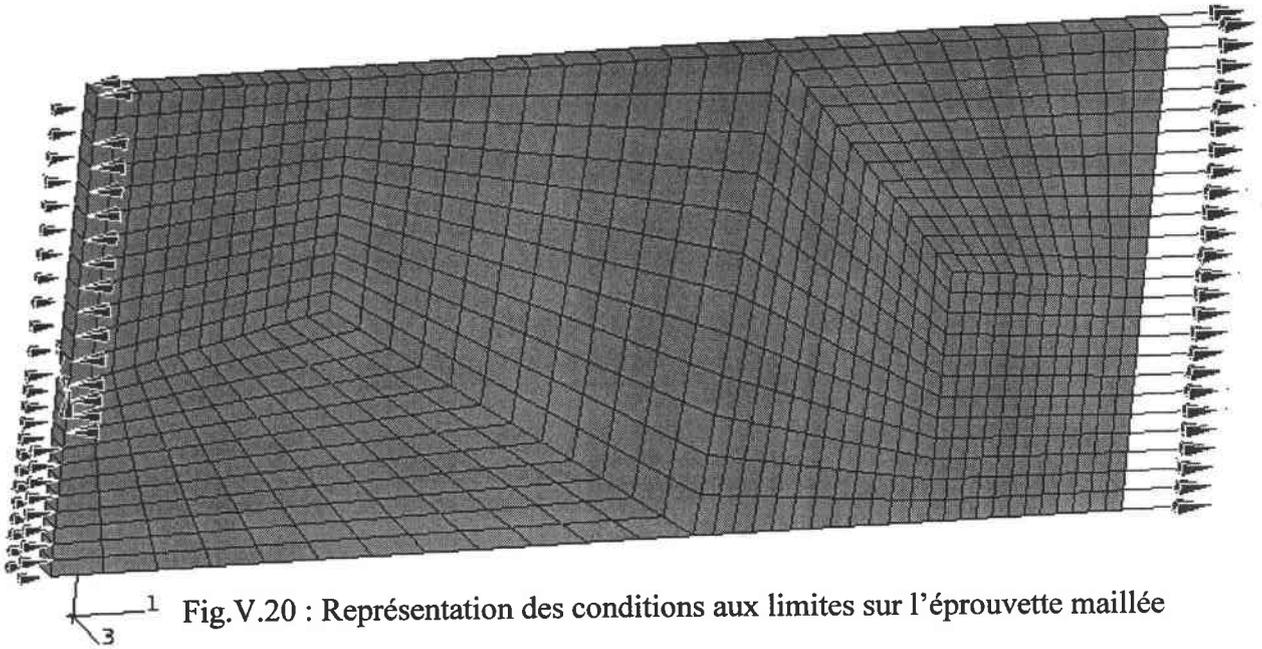


Fig.V.20 : Représentation des conditions aux limites sur l'éprouvette maillée

Le grain le mieux orienté par rapport à la direction de chargement est le grain numéro 1, puis les grains 2, 3, 5 et 6 sont de moins en moins bien orientés, pour finir avec le grain 4 qui est le moins bien orienté parmi les 6 (voir tableau V.2). Le grain numéro 1 devrait être le premier à se transformer. Tous les résultats de cette simulation sont expliqués dans la partie suivante.

V.3.2 Résultats

Le premier résultat présenté est l'évolution de la fraction volumique de martensite formée au cours du chargement. Ce résultat peut directement être visualisé grâce à l'évolution de la cartographie des iso-valeurs de la fraction volumique de martensite sur l'échantillon au cours du chargement. On peut constater que les grains se transforment dans un ordre préférentiel selon leur orientation. Ainsi le premier grain à s'activer est le grain 1 qui est le mieux orienté (voir figure V.21a) et le dernier à s'activer est le grain 4 (voir figure V.21g). L'ordre d'activation ou de transformation des grains est donc le suivant : d'abord le grain 1, puis 2, 3, 5, 6 et enfin 4. Cette évolution est visible sur les figures V.21a/b/c/d/e/f/g, où une analyse succincte est faite dans les légendes. Plusieurs informations d'ordre techniques et numériques se trouvent en annexe 4.

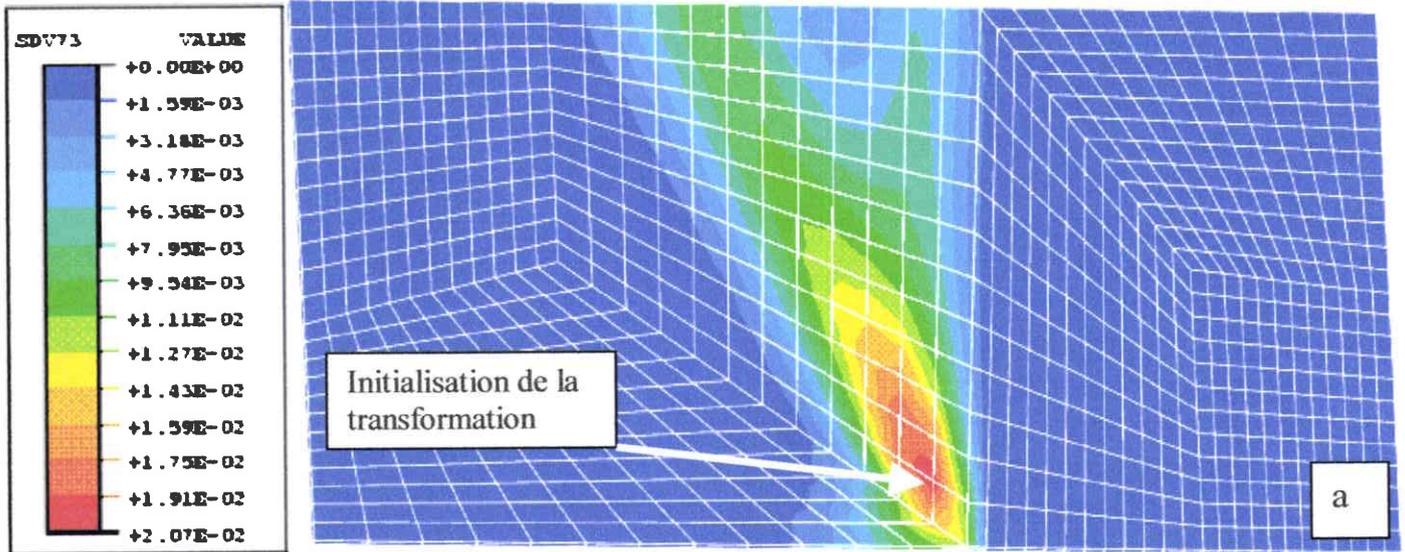


Fig. V.21a : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 1% du chargement. L'initialisation de la transformation a lieu à l'intérieur du grain 1, quasiment à l'intersection des grains 1, 2 et 3. Cette transformation se propage dans le grain 1 qui est le mieux orienté.

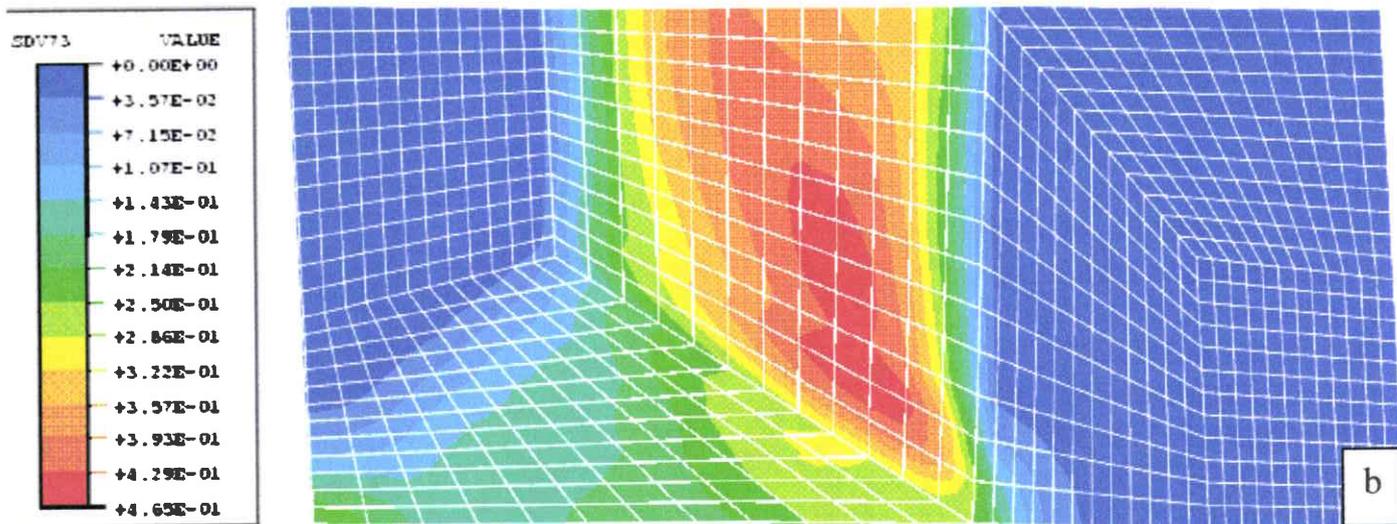


Fig. V.21b : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 17% du chargement. La fraction volumique s'étend au grain 1 (certains endroits de ce grain sont à 46% de martensite). Le grain 2 continue sa transformation.

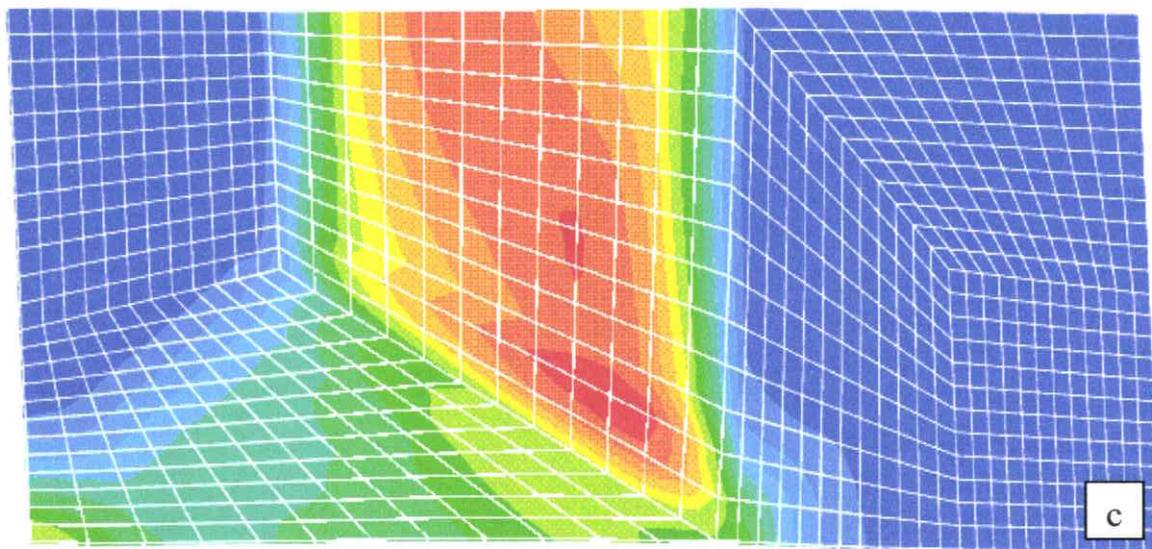
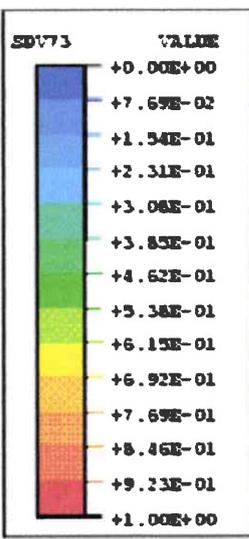


Fig. V.21c : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 30% du chargement. Cette évolution continue dans le grain 1 où certains endroits atteignent maintenant 85% de martensite. La propagation de la fraction volumique se fait également dans le grain 2 où l'on peut atteindre jusqu'à 50% de martensite.

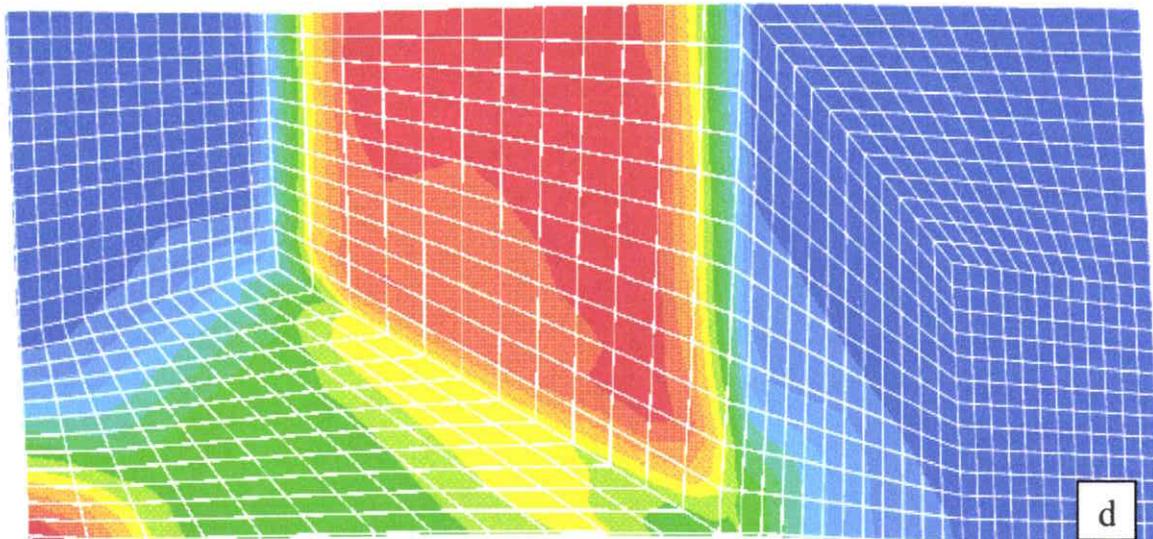
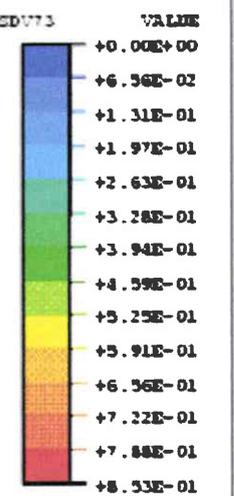


Fig. V.21d : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 51% du chargement. La fraction volumique de martensite dans le grain 1 est maintenant de 70% en moyenne. On observe un brusque démarrage de la transformation dans un « coin » du grain 2 et le grain 3 commence à se transformer.

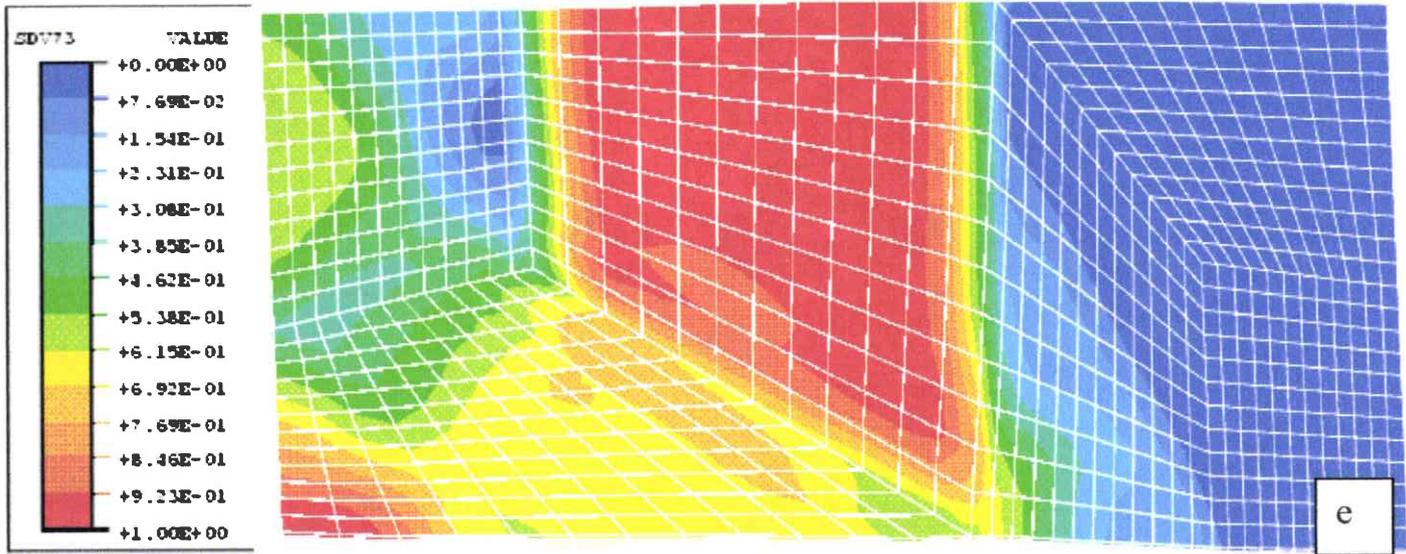


Fig. V.21e : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 68% du chargement. A présent, le grain 1 est quasi martensitique. Seuls les bords de ce grain ont des difficultés pour se transformer, car la contrainte au joint de ce grain est perturbée par les grains voisins. Le grain 5 commence à se transformer.

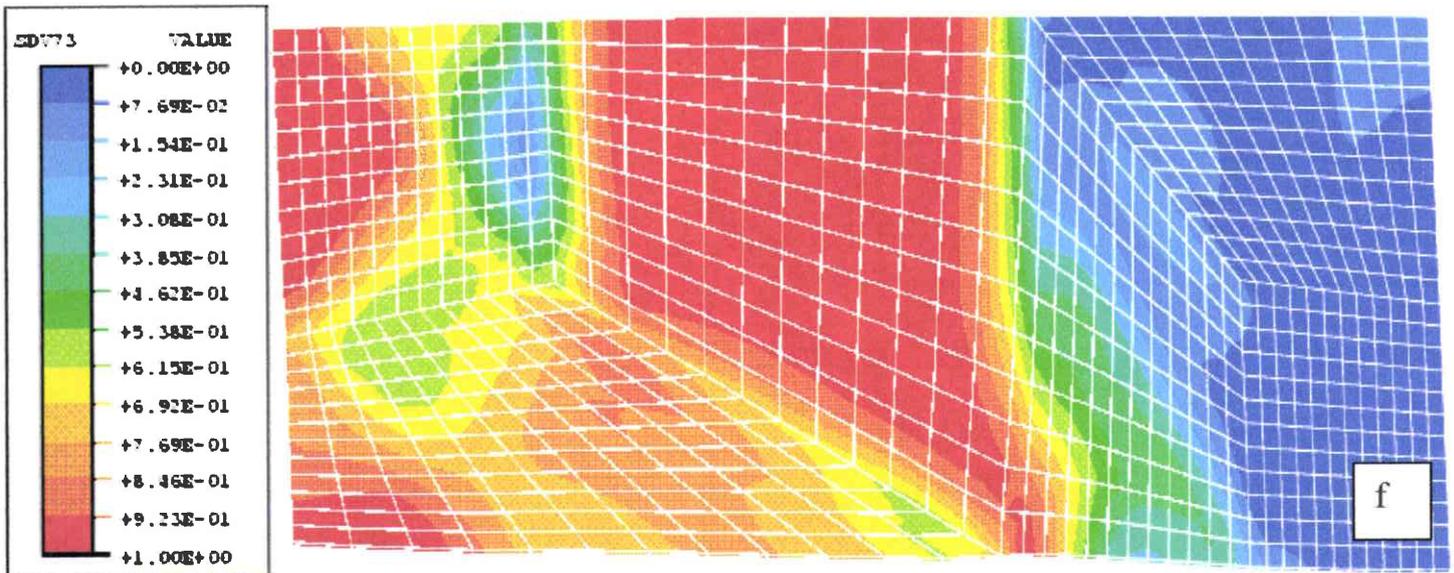


Fig. V.21f : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 85% du chargement. Dans cette cartographie la fraction volumique moyenne dans les grains 1, 2, 3 et 5 est respectivement de 90%, 75%, 25% et 65%. Les grains 6 et 4 commencent à leur tour à se transformer.

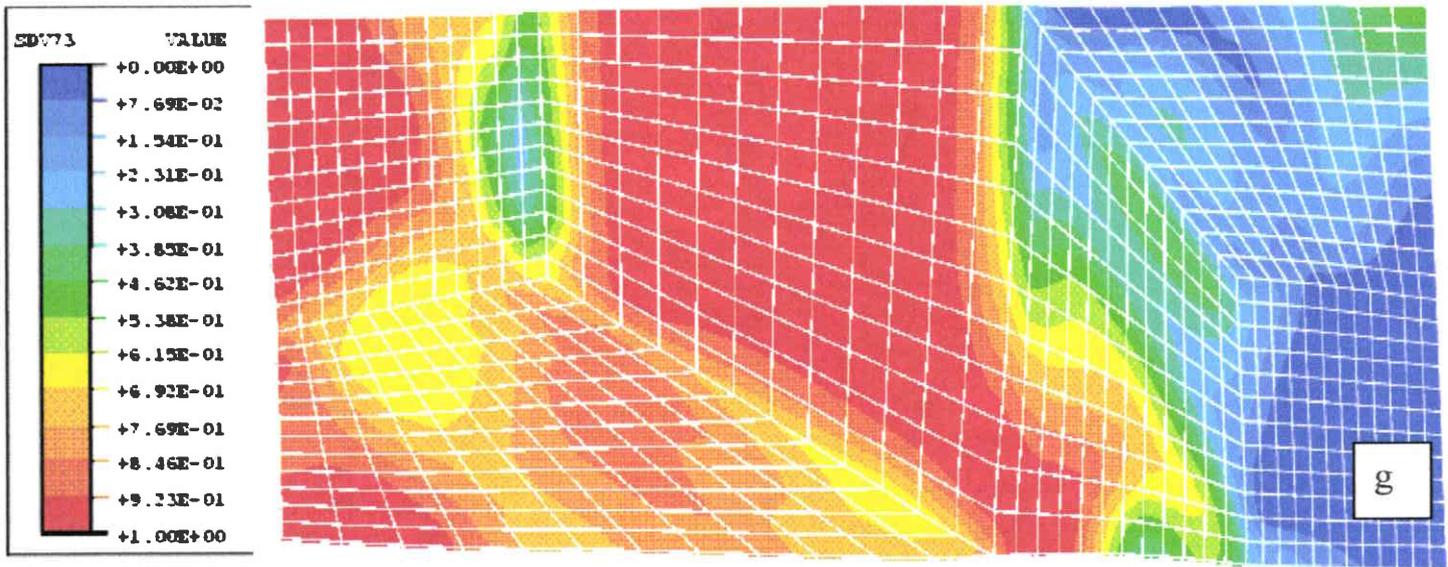
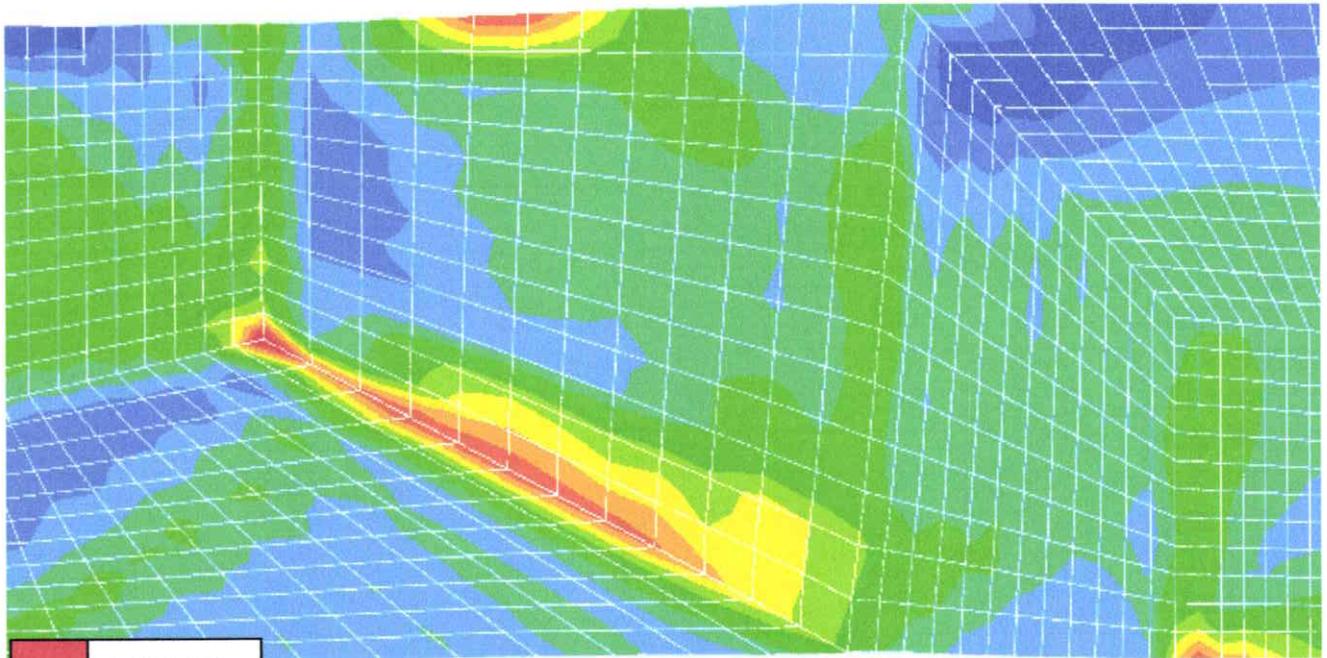


Fig. V.21g : Evolution de la fraction volumique de martensite à l'intérieur de l'échantillon à 100% du chargement. Ici la fraction volumique du grain 1 stagne à environ 90%. Les grains 2, 5 et 3 continuent leur évolution. Le grain 6 se transforme beaucoup plus rapidement que le grain 4, qui est le moins bien orienté.

Sur la figure V.21g, où le chargement est complètement fini, on peut observer que le grain 1 est quasiment martensitique (il y a 92% de martensite), tandis que le grain 4 commence seulement à se transformer (il n'y a dans ce grain que 4% de martensite). Le grain 1 sature à environ 65% du chargement et les zones difficiles à transformer se situent aux joints de grains. Ceci est qualitativement correct car la contrainte au voisinage des joints de grain est perturbée par les différentes transformations qui se produisent dans les grains adjacents (d'ailleurs on remarque que le bord libre du grain 1 est complètement martensitique).

Il y a aussi quelques effets de maillage et de bord dans ces résultats. L'intersection entre les grains 1, 2 et 3 se situe sur un bord de l'échantillon et la transformation démarre à cet endroit pour s'étendre principalement au grain 1. Cet effet de maillage se retrouve également sur la cartographie des contraintes (voir figure V.22) où l'on observe parfaitement l'hétérogénéité de la contrainte dans le multicristal au cours du chargement.



150 MPa
130 MPa
100 MPa
80 MPa
60 MPa
40 MPa

Fig. V. 22 : Cartographie de la contrainte au sens de Von Mises à environ 50 % du chargement. Il y a une forte hétérogénéité de cette contrainte à l'intérieur de multicristal.

Afin de mieux comprendre ce qui se passe dans chaque grain, une moyenne des fractions volumiques de martensite des éléments d'un même grain est faite. On obtient ainsi l'évolution de la fraction de martensite au cours du chargement, et ceci pour les 6 grains (voir figure V.23).

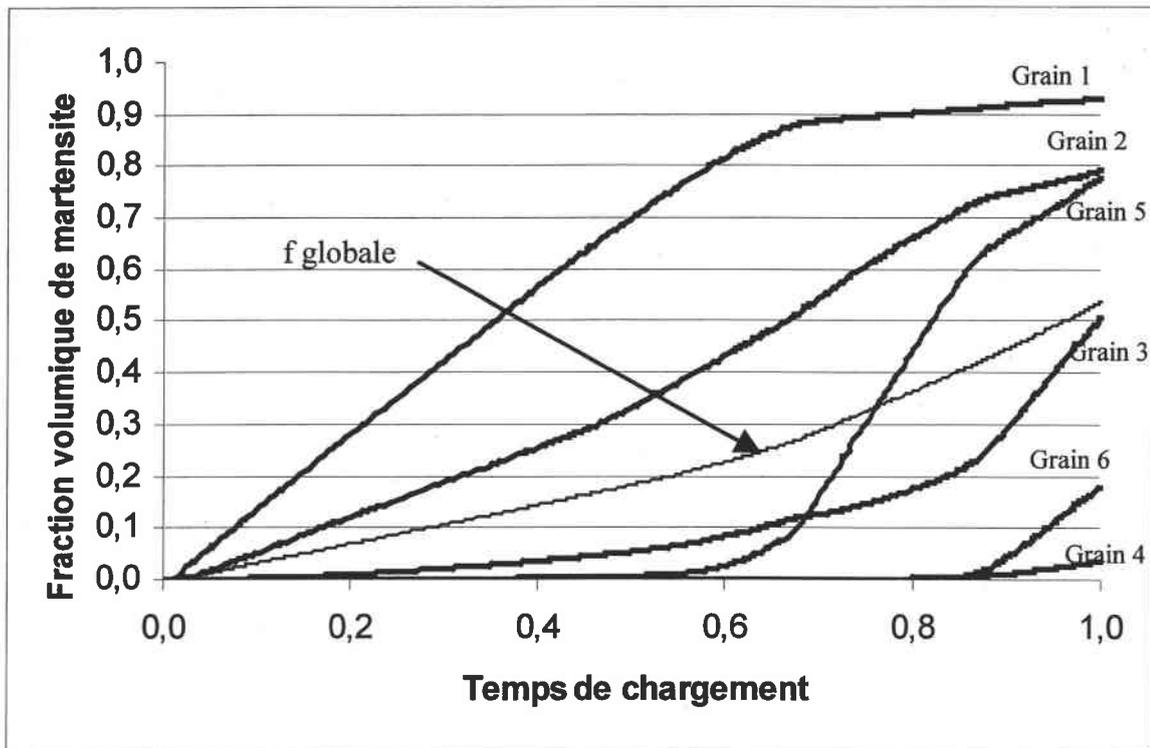


Fig. V.23 : Evolution des fractions volumiques de martensite au cours du chargement pour les 6 grains et pour le multicristal.

Sur ces courbes moyennes par grain, on retrouve les mêmes tendances que sur les iso-valeurs : l'activation des grains se fait chronologiquement : grain 1, puis 2, 3, 5, 6 et enfin 4. On remarque également sur cette figure que le grain 1 sature quand le grain 5 se transforme rapidement (à environ 65% du chargement), et que les grains 2 et 5 saturent lorsque les grains 6 et 4 s'activent et que le grain 3 se transforme rapidement (ceci se passe à environ 85% du chargement).

Le grain 5 qui est moins bien orienté que le grain 3 au départ, se transforme après le grain 3. Mais l'état de contrainte à 60% du chargement est tel que la transformation dans le grain 5 progresse beaucoup plus que dans le grain 3. Au final, le grain 5 atteint pratiquement 80% de martensite alors que le grain 3 n'est qu'à 50%. Si l'on fait la moyenne de la fraction de martensite, en considérant que tous les grains ont la même fraction volumique, on obtient environ 54% de martensite sur l'échantillon en fin de chargement.

De la même manière que pour les fractions volumiques de martensite, l'analyse de l'évolution des moyennes par grain des déformations et des contraintes donne des informations

pertinentes. Nous pouvons ainsi tracer les courbes contrainte / déformation pour les 6 grains. Une courbe moyenne sur l'échantillon a également été tracée. Toutes ces courbes sont regroupées sur la figure V.24.

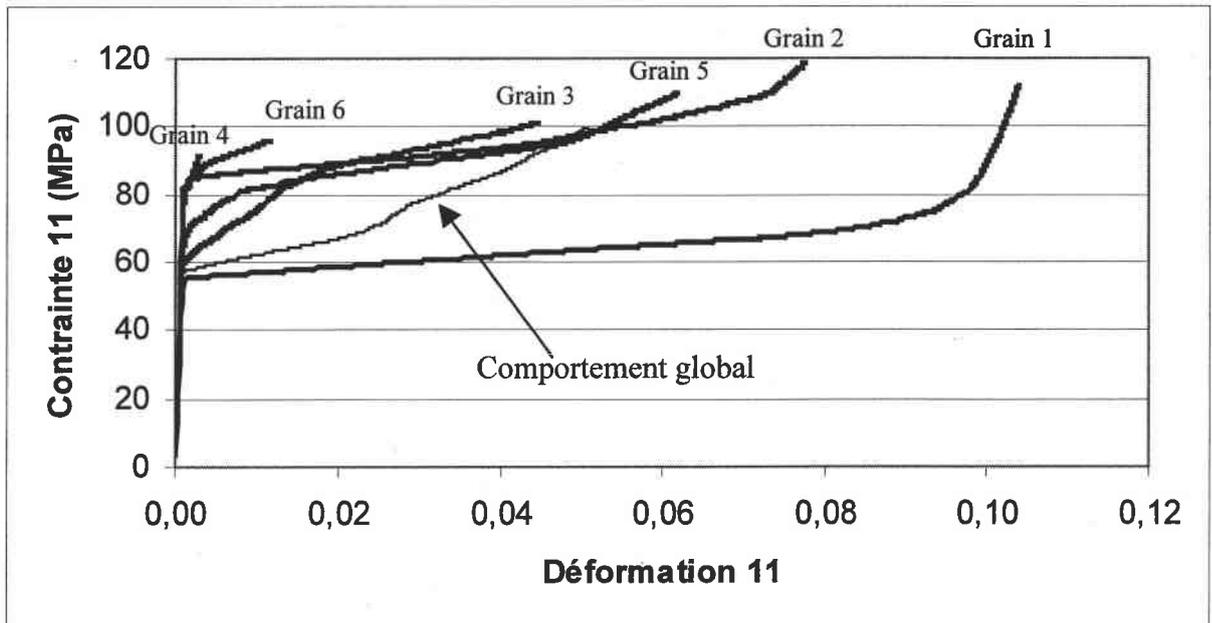


Fig. V.24 : Courbe contrainte / déformation pour les six grains du film mince et pour le multicristal.

Les courbes ainsi obtenues montrent bien que le grain le mieux orienté se transforme beaucoup avec peu de contraintes. D'autre part, il y a une nette différence entre les grains 6 et 4 : à 80 MPa, le grain 1 sature alors que le grain 4 est encore totalement austénitique.

Nous n'avons pas essayé d'augmenter la sollicitation appliquée à l'échantillon pour obtenir plus de déformation car certains endroits de la structure ont déjà dépassé les 300 MPa. La déformation globale obtenue ici est de 5% (voir courbe en trait fin sur la figure V.18).

Pour mieux se rendre compte de « l'effet film mince », nous avons introduit dans un polycristal composé de 100 grains six grains ayant les mêmes orientations cristallographiques que les grains constituant le film mince. Ceci a été réalisé dans le but de comparer le comportement de ces 6 grains dans un film mince (où ils ont des surfaces libres) et quand ils sont immergés dans un polycristal. Le comportement superélastique de ce polycristal de 106 grains est déterminé en utilisant un modèle autocohérent faisant du chargement superélastique. Les résultats sont très parlants : les grains immergés dans un agrégat

CHAPITRE V : SIMULATION DE MICRO-SYSTEMES PAR E.F.

polycristallin se déforment beaucoup moins et avec une contrainte beaucoup plus forte que les même grains dans le film mince. Les courbes contrainte / déformation pour les 6 grains complètement transformés et noyés dans un polycristal sont en figure V.25 et elles sont à comparer qualitativement aux 6 courbes de la figure V.24.

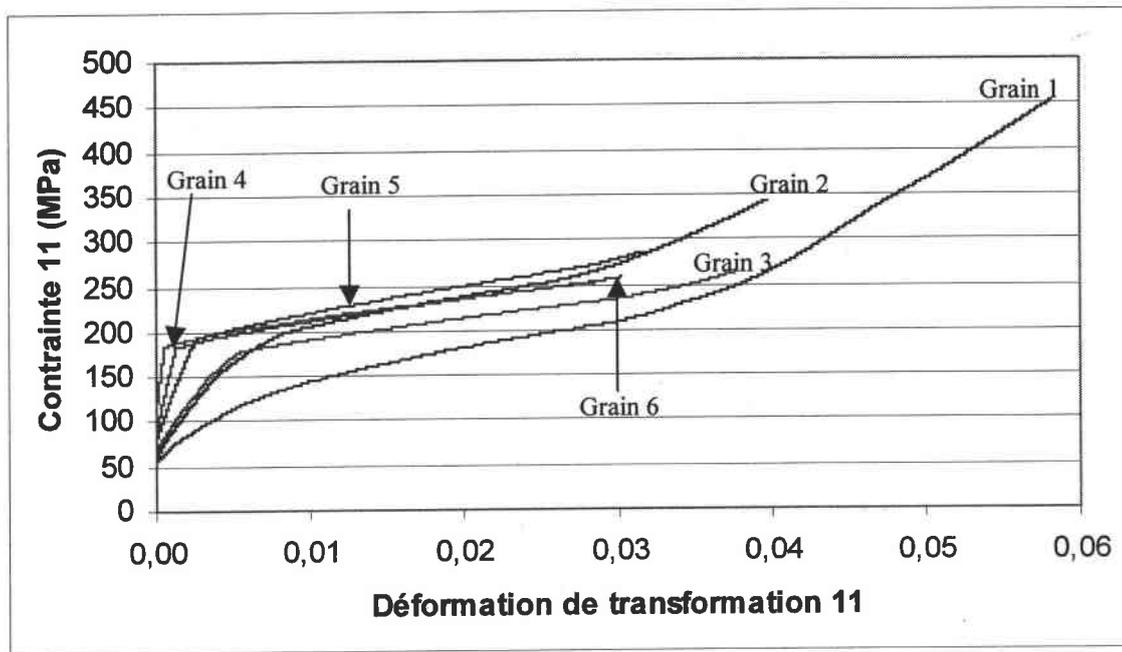


Fig. V.25 : Courbe contrainte / déformation pour les 6 grains du polycristal.

Le dernier résultat discuté concerne la géométrie finale de l'échantillon. La géométrie initiale parallélépipédique n'est pas conservée et on observe des reliefs reliés à la géométrie des grains (voir figure V.26).

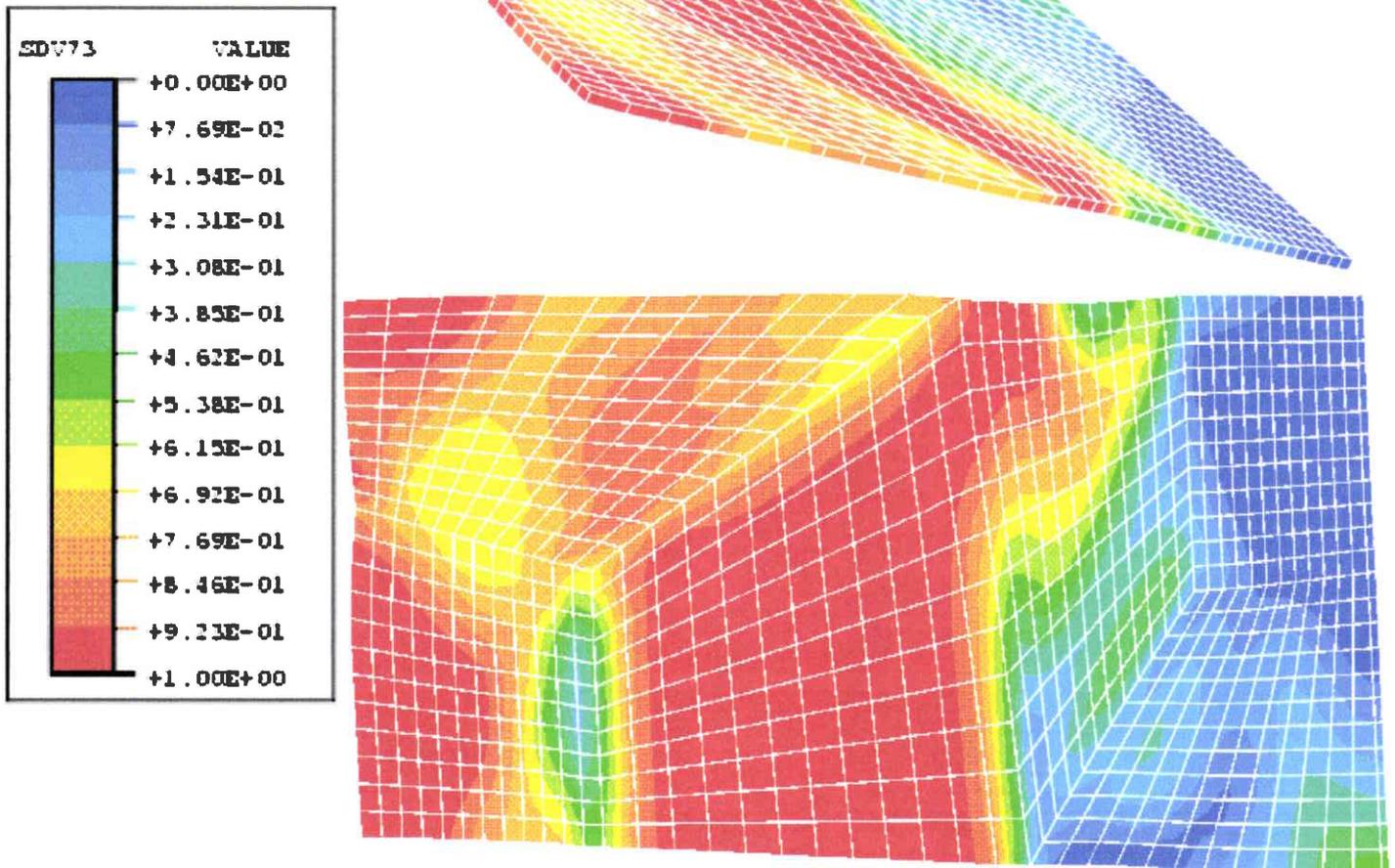


Fig. V.26 : Géométrie finale de l'échantillon, la transformation fait perdre sa planéité initiale au film mince

Cette déformation du relief liée à la transformation est bien connue. Elle est à l'origine de l'effet dit de peau d'orange observé sur les AMF au cours de la transformation.

- Raniecki B., Lexcellent C.** "R_L-models of pseudoelasticity and their specification for some shape memory solids". European Journal of Mechanics A/Solids, Vol. 13, pp. 21-50, 1994
- Saburi T, Wayman C.M.**, "Crystallographic similarities in shape memory martensites", Acta Metall, vol. 27, pp. 979-995, 1979.
- Siredey N., Patoor E., Berveiller M., Eberhardt A.**, "Constitutive equations for polycrystalline thermoelastic SMA. Part I : Intragranular interactions and behavior of the grain". Int. Journal of Solids and Structures 36, pp. 4298-4315, 1999.
- Stalmans R., Van Humbeeck J., Delaey L.** "Thermodynamic modelling of shape memory behavior: some examples". Journal de physique IV C8, pp. 203-208, 1995.
- Sun Q.P., Hwang K.C.** "Micromechanical modelling for the constitutive behavior of polycrystalline shape memory alloys, part I and II". J. of Mech. Phys. Solids, Vol. 41, pp. 1-17, and pp. 19-33, 1993.
- Tanaka K., Kobayashi S., Sato Y.** "Thermomechanics of transformation pseudoelasticity and Shape Memory effect in alloys" . Int. J. of Plas., Vol. 2, pp. 59-72, 1986.
- Wayman M.** "Phase transformation in NiTi shape memory alloys. Proceedings of the International Conference on Martensite Transformation", The Japan Institute of Metals, Vol. 6, pp. 45-652, 1986.
- Weschler M.S., Lieberman D.S., Read T.A.** "On the theory of the formation of martensite". Transactions of AIME 197, pp. 1503-1515, 1953.

- Moran S.** "Flexible elements in minimal access surgery". Proc. SMST'94, pp. 411-416, 1994.
- Müller I., Xu H.**, "On the pseudo-elastic hysteresis". Acta Metall. and Materialia 39, pp. 263-271, 1991.
- Muller D.**, "Influence de l'écroûissage non local et de l'hétérogénéisation intragranulaire sur le comportement des aciers polycristallins", Thèse de l'Université de Metz, 1994.
- Niclaeys C., Ben Zineb T., Arbab Chirani S., Patoor E.**, "Determination of the interaction energy in martensitic state", Int. J. of Plas., 18, pp. 1619-1647, 2002.
- Nishiyama Z.** Martensite transformation. Academic Press, 1978.
- Ono, N., Sato A.** "Plastic deformation governed by the stress induced martensitic transformation in polycrystals". Transactions of the Japan Institute of Metals, Vol. 29, N° 4, pp. 267-273, 1988.
- Norme Française NF A51-080** pour les alliages à mémoire de forme, vocabulaire et mesures, Avril 1991, ISSN 0335-3931.
- Patel J.R. et Cohen M.**, "Criterion for the action of applied stress in the martensitic transformation", Acta Metall., Vol. 1, pp. 531, 1953
- Patoor E.**, "Contribution à l'étude de la plasticité de transformation dans les mono et polycristaux métalliques", thèse université de Metz, 1986.
- Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M.** "Potentiel pseudoélastique et plasticité de transformation martensitique dans les mono- et polycristaux métalliques", Acta metall, Vol. 35, N° 11, pp. 2779-2789, 1987.
- Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M.**, "Thermomechanical behavior of shape memory alloys". Arch. Mech. 40, 5-6, pp. 775-794, 1988.
- Patoor E. et Berveiller M.**, "Les Alliages à Mémoire de forme", collection "Technologies de pointe", Hermes 1990.
- Patoor E., Bensalah M.O., Eberhardt A., Berveiller M.** "Micromechanical aspects of the shape memory behaviour". Proceedings of the Int. Conf. on Martensitic Transformation, pp. 401-406, 1992.
- Patoor E.**, "Comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme", thèse d'habilitation, Université de Metz, 1995.
- Patoor E., El Amrani M., Eberhardt A., Berveiller M.** "Détermination of the origin for the dissymmetry observed between tensile and compression tests on shape memory alloys", Colloque C2, supplément au journal de physique III, Vol. 5, pp. 495-500, 1995.
- Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M.** "Micromechanical Modelling of Superelasticity in Shape Memory Alloys". Colloque C1, supplément au Journal de Physique III, vol. 6, pp. 277-292, 1996.
- Patoor, E., and Berveiller, M.** "Micromechanical modeling of thermoelastic behavior of shape memory alloys", in CISM lecture notes n° 368 Mechanics of Solids with phase change, edited by F. D. Fischer and M. Berveiller, pp. 121-188, 1997.
- Peralta J.**, Projet de fin d'étude, ENSAM Metz, « Simulation par éléments finis de la mise en forme de micro-composants », 2001.
- Qidwai, M.A., Lagoudas, D.C.** "On thermomechanics and transformation surfaces of polycrystalline NiTi shape memory materials". International Journal of Plasticity. 16 (10-11), pp. 1309-1343, 2000.
- Raabe D., Sachtleber M., Zhao Z., Roters F., Zaefferer S.**, "Micromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation", Acta Mater., Vol. 49, pp. 3433-3441, 2001.
- Raniecki B., Lexcelent C et Tanaka K.**, "thermodynamic models of pseudoelastic behaviour of shape memory alloys", Arch. Mech., Vol. 44, pp. 261-284, 1992.

- Fassi-Fehri O., Hihhi A., Berveiller M.** "Elastic interactions between variants in pseudoelastic single crystals". *Scripta Met.*, Vol. 21, pp. 771, 1987.
- Feyel F., Calloch S., Marquis D., Cailletaud G.**, "F.E. computation of a triaxial specimen using a polycrystalline model", *Computational Materials Science*, vol. 9, pp. 141-157, 1997.
- Gall K. et Sehitoglu H.** "The role of texture in tension-compression asymmetry in polycrystalline NiTi". *Int. J. of Plas.* Vol. 15, pp. 69-92, 1999.
- Gao X., Huang M., Brinson, C.** "A multivariant micromechanical model for SMAs. Part I. Crystallographic issues for single crystal model". *Int. J. of Plas.*, Vol. 16, pp. 1345-1369, 2000.
- Gilbert E.N.**, "Random subdivisions of space into crystal", *Ann. Math. Stat.*, Vol. 33, 1962.
- Gillet Y.**, "Dimensionnement d'éléments simples en alliage à mémoire de forme", thèse de l'Université de Metz, 1994.
- Gillet Y., Patoor E. et Berveiller M.**, "Du micro au calcul de structure, le cas de la superélasticité", *Revue européenne des éléments finis*. Vol. 7 – n° 8, pp. 137-164, 1998.
- Gobin, G. F. P., Guenin, G., Morin, M. et Robin, M.**, "Transformation de phase à l'état solide. Transformations martensitiques". Ecole d'été Aussois, 1978.
- Hill R.**, "A self consistent mechanics of composite materials", *Z. Mech. Phys. Solids*, vol. 13, pp. 213-222, 1965.
- Huang M., Brinson L.C.**, "A multivariant model for single crystal shape memory alloy behavior", *J. of Mech. Phys. Solids*, Vol. 46 (8), pp. 1379-1409, 1998.
- Huang M., Gao X., Brinson L.C.**, "A multivariant micromechanical model for SMAs Part 2. Polycrystal model. *International Journal of Plasticity*". 16 (10-11), pp.1371-1390, 2000.
- Kröner E.**, "Kontinuums theories das versetzungen und eigenspannungen", *Z. Phys.*, vol 151, pp. 504, 1958.
- Kröner E.**, "Zur plastischen Verformung des Vielkristalls", *Acta Metall. Mater.*, Vol. 9, pp. 155-161, 1961.
- Kröner E.**, *J. Phys. F., Metal Phys.*, vol. 8, pp. 2261, 1978
- Leclercq S., Lexcellant C.**, "A general macroscopic description of thermomechanical behavior of SMA". *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 44, pp. 953-980, 1996.
- Lemoine X.**, "Analyse micromécanique de la formation des cellules de dislocations et conséquences sur le comportement des aciers", thèse de l'université de Metz, 1995
- Lipinski P.**, "Modélisation du comportement des métaux en transformation élastoplastique finies à partir des méthode de transition d'échelle", thèse d'habilitation, LPMM, ISGMP, université de Metz, 1992.
- Li D. F., Zhang X. M., Gautier E. et Zhang J.S.**, "Morphology transitions of deformation induced thin-plate martensite in Fe-Ni-C alloys.", *Acta Mater.*, Vol. 46, N°. 13, pp. 4827-4834, 1998.
- Madangopal K. and Banerjee R.**, "The lattice invariant shear in NiTi shape memory alloy martensites", *Scripta Metallurgica et Metarials*, Vol. 27, pp. 1627-1632, 1992.
- Madangopal K.** "The self-accommodating martensite microstructure of NITI Shape Memory Alloys". *Acta mater.* Vol. 45, N°. 12, pp. 5347-5365, 1997.
- Madangopal K., Krishnan, and Singh J. B.** "A novel B19' Martensite in Nickel Titanium Shape Memory Alloys", *Acta mater.*, Vol. 48, pp.1325-1344, 2000.
- Miyazaki S., Otsuka K. et Wayman M.** "The shape memory mechanism associated with the martensitic transformation in Ni-Ti alloys I: Self accommodation". *Acta Metal.* Vol. 37, N°.7, pp. 1873-1884, 1989.

References :

- Aeby-Gautier E.**, cours n° 1 IPSI, "Déformation par transformation Martensitique: Application aux alliages à mémoire de forme et aux TRIP", Paris 16-18 octobre 2001.
- Adachi K., Perkins J., Wayman C. M.**, "The crystallography and boundary structure of interplate-group combinations of 18R martensite variants in Cu-Zn-Al Shape Memory Alloys". *Acta Metall.* Vol. 36, N° 5, pp. 1343-1364, 1988.
- Agouram S., Abdou L., and Bensalah M. O.** "Comportement thermomécanique en plasticité de transformation". *Eur. Phys. J. AP.*, pp. 341-346, 1998.
- Bain E. C.**, *Trans. AIME*, 70, pp. 25, 1924.
- Barbe F., Decker L., Jeulin D., Cailletaud G.**, "Intergranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model", *Int. J. of Plas.*, vol. 17, pp. 513-536, 2001a
- Barbe F., Forest S., Cailletaud G.**, "Intergranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results.", *Int. J. of Plas.*, vol. 17, pp. 537-563, 2001b
- Bhattacharya K.** "Self Accommodation in Martensite". *Arch. Rational Mech. Anal.*, Vol. 120, pp. 201-244, 1992.
- Bensalah M.O.**, "contribution à l'étude des comportements thermomécaniques des des mono et polycristaux en plasticité de transformation", thèse d'état, Université Mohamed V, Rabat, Maroc, 1992.
- Bekker A., Brinson L.C.** "Temperature induced phase transformation in a SMA: phase diagram based kinetics approach". *J. of Mech. Phys. Solids*, Vol. 45, pp. 949-988, 1997.
- Berveiller M., Zaoui A.**, "An extension of self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals", *J. of Mech. Phys. Solids*, Vol. 26, pp. 325-344, 1979.
- Berveiller M., Zaoui A.**, "Modelling of the plastic behavior of inhomogeneous media", *J. Eng. Mat. And Tech.*, vol. 106, pp. 295-299, 1984.
- Berveiller M., Zaoui A.**, "Modélisation du comportement mécanique des solides microhétérogène", *Introduction à la mécanique des polymères*, édité par Christian G'sell et Jean-Marc Haudin, pp. 225-250, 1993.
- Bouvet C.**, " De l'uniaxial au multiaxial : comportement pseudoélastique des alliages à mémoire de forme", thèse de l'Université de Franche-comté, 2001
- Boyd J.G., Lagoudas D.C.**, "Thermodynamique constitutive model for SMA, part I : the monolithic SMA". *Int. J. of Plas.* 12, pp. 805-842, 1996.
- Cohen M., Olson G.B., Clapp P.C.**, " On the classification of displacive phase transformation ", *proc. ICOMAT 79, cambridge (MA), MIT*, pp.1-11, 1979.
- Contardo L.**, " Etude des traitements d'éducation, de la stabilité et de l'origine de l'effet mémoire double sens dans un alliage Cu-Zn-Al ", thèse, INSA de Lyon, 1988.
- Delaire F., Raphanel J.L., Rey C.**, "Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension : experimental study and finite element simulations", *Acta Mater.*, vol. 48, pp. 1075-1087, 2000.
- El Amrani M.**, "Contribution à l'étude micromécanique des transformations martensitiques thermoélastiques", thèse, université de Metz, 1994.
- Entemeyer D.**, "Etude micromécanique du comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme", thèse, université de Metz, 1996.
- Entemeyer D., Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M.** "Strain rate sensitivity in superelasticity". *Int. J. of Plas.*, 16, pp. 1269-1288, 2000.
- Eshelby J.D.**, "Elastic inclusion and inhomogeneities", *Prog. In Solids Mech.*, vol. 2, pp. 89-140, 1961.
- Falk F.**, "Pseudoelastic stress-strain curves of polycrystalline shape memory alloys calculated from single crystal data", *Int. J. Engng. Sci.*, vol. 27, n°. 3, pp. 277-284, 1989.

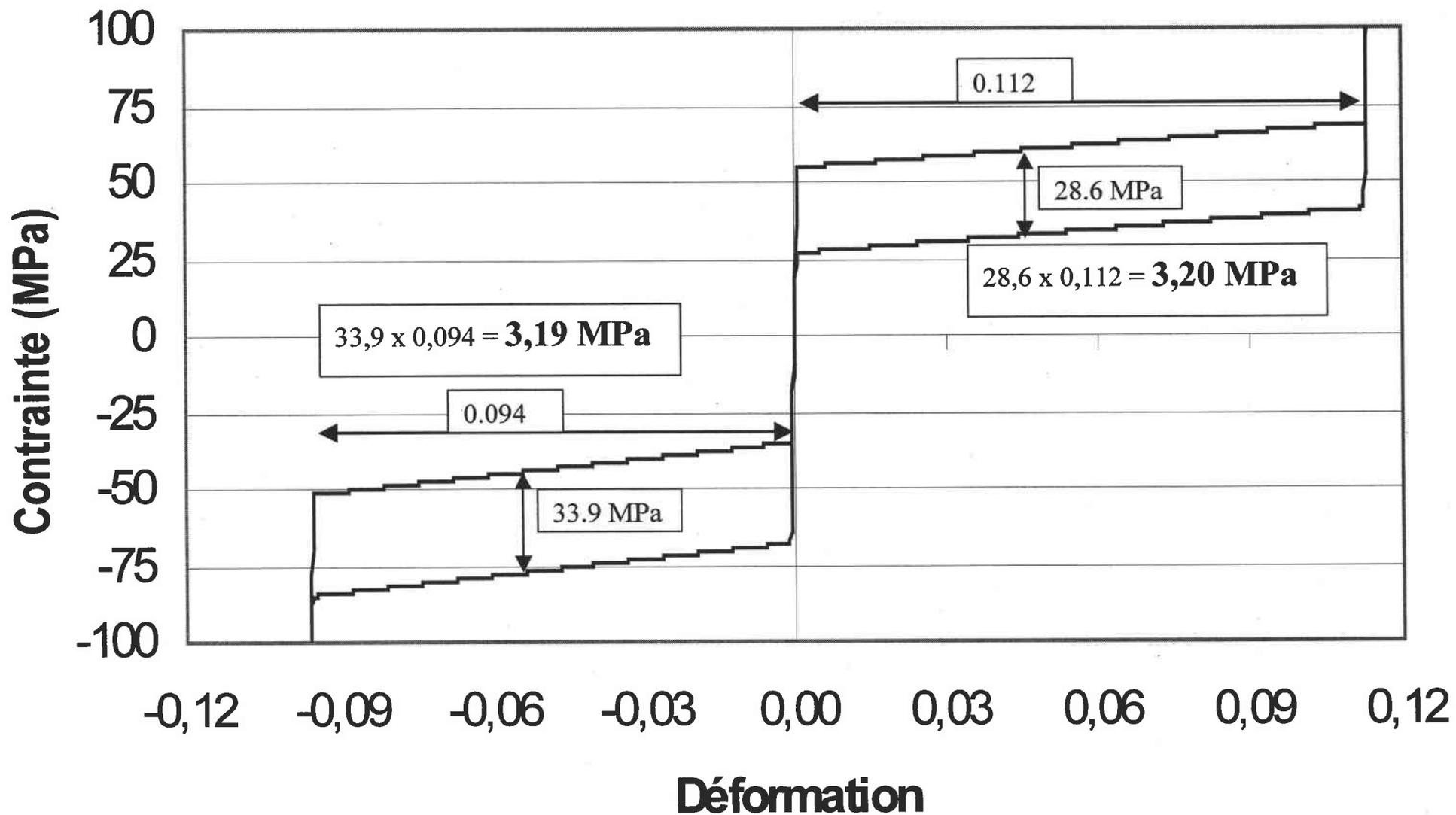
ANNEXE 4

Renseignements techniques et numériques sur le calcul par E.F.

<u>Machine utilisée :</u>	Digital Personalworkstation 533 MHz OSF 4.0D
<u>Temps de calcul :</u>	Environs 6 heures en ne stockant qu'un dixième des résultats
<u>Éléments utilisés :</u>	Éléments parallélépipédiques à 8 nœuds à intégration réduite, (1 seul point de gauss par élément).
<u>Nb. d'incrémentes :</u>	939
<u>Pas mini :</u>	0,00001 (pour un chargement allant de 0 à 1)
<u>Pas maxi :</u>	0,002 (pour un chargement allant de 0 à 1)
<u>Nb. d'itérations par inc. :</u>	De 1 à 14 (en général inférieur à 5)
<u>Nb. d'ATT par inc. :</u>	De 1 à 2

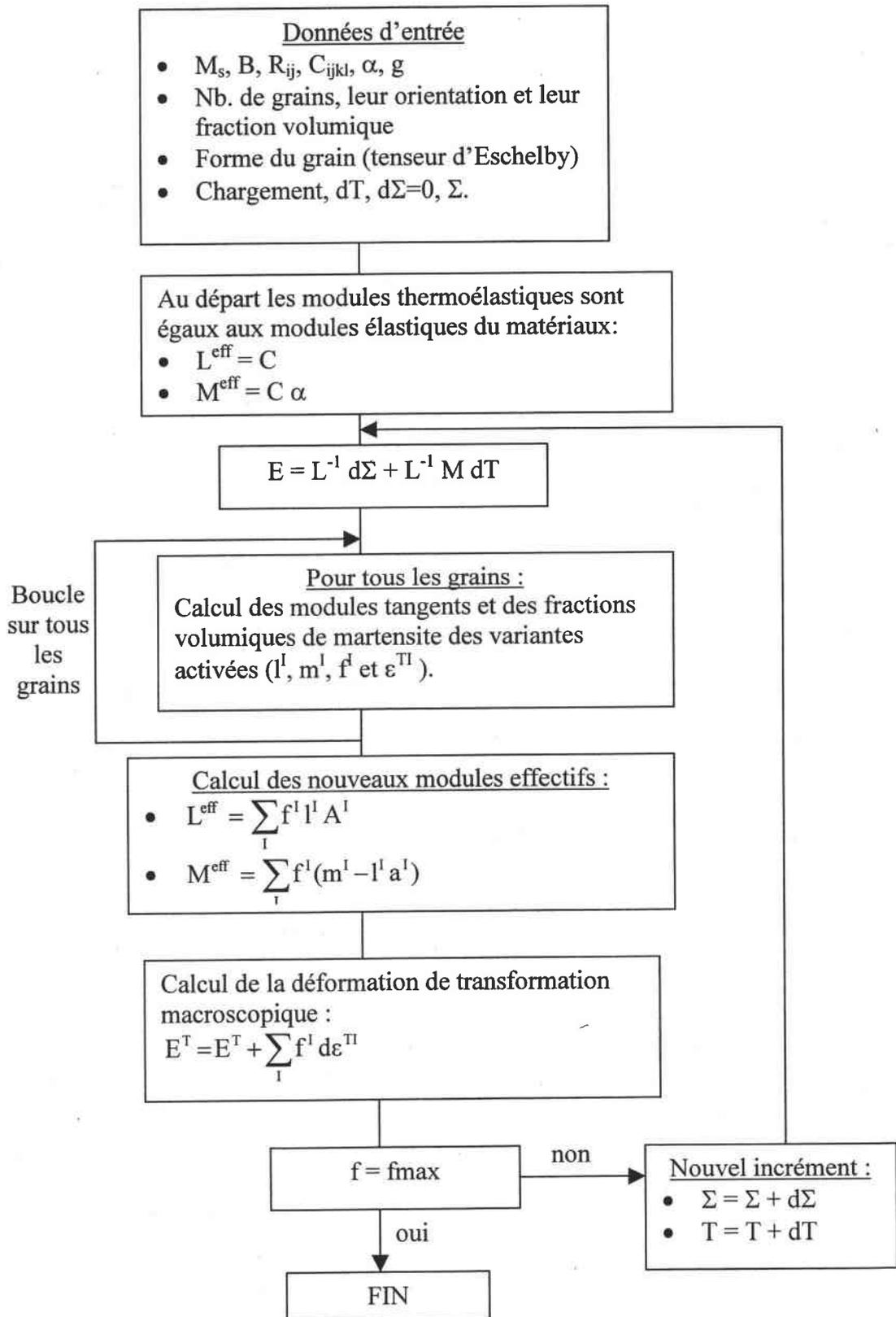
ANNEXE 3

Les aires délimitées par les courbes charge et décharge, en traction comme en compression, sont quasi égales



ANNEXE 2

(Organigramme du schéma de résolution numérique pour la superthermoélasticité des AMF)



ANNEXE 1

correspondances entre les groupes et les variantes qui les composent

numéro groupe	var.1	var.2
1	1	1
2	2	2
3	3	3
4	4	4
5	5	5
6	6	6
7	7	7
8	8	8
9	9	9
10	10	10
11	11	11
12	12	12
13	13	13
14	14	14
15	15	15
16	16	16
17	17	17
18	18	18
19	19	19
20	20	20
21	21	21
22	22	22
23	23	23
24	24	24
25	1	2
26	1	3
27	1	4
28	1	7
29	1	9
30	1	11
31	1	14
32	1	20
33	1	21
34	2	3
35	2	4
36	2	8
37	2	10
38	2	12
39	2	13
40	2	19
41	2	22
42	3	4
43	3	5
44	3	9
45	3	11
46	3	16

numéro groupe	var.1	var.2
47	3	18
48	3	23
49	4	6
50	4	10
51	4	12
52	4	15
53	4	17
54	4	24
55	5	6
56	5	7
57	5	8
58	5	9
59	5	14
60	5	16
61	5	17
62	5	22
63	6	7
64	6	8
65	6	10
66	6	13
67	6	15
68	6	18
69	6	21
70	7	8
71	7	11
72	7	14
73	7	16
74	7	19
75	7	24
76	8	12
77	8	13
78	8	15
79	8	20
80	8	23
81	9	10
82	9	11
83	9	12
84	9	16
85	9	20
86	9	21
87	10	11
88	10	12
89	10	15
90	10	19
91	10	22
92	11	12

numéro groupe	var.1	var.2
93	11	14
94	11	18
95	11	23
96	12	13
97	12	17
98	12	24
99	13	14
100	13	15
101	13	16
102	13	18
103	13	21
104	14	15
105	14	16
106	14	17
107	14	22
108	15	16
109	15	20
110	15	23
111	16	19
112	16	24
113	17	18
114	17	19
115	17	20
116	17	22
117	17	24
118	18	19
119	18	20
120	18	21
121	18	23
122	19	20
123	19	22
124	19	24
125	20	21
126	20	23
127	21	22
128	21	23
129	21	24
130	22	23
131	22	24
132	23	24

CONCLUSION GENERALE

d'interaction plus complète que la matrice habituelle est proposée. Cette matrice fait maintenant apparaître tous les groupes autoaccommodants donnés par Miyasaki (Miyasaki et al., 1989).

Le dernier chapitre de ce mémoire concerne l'étude par éléments finis d'un film mince en AMF. Cette étude a été réalisée en implémentant dans le code d'éléments finis ABAQUS une loi de comportement superélastique par l'intermédiaire de la routine User Material (UMAT). Les résultats qualitatifs obtenus sont très corrects. Nous avons une évolution de la fraction volumique de martensite partant du grain le mieux orienté au grain le moins bien orienté. Nous avons également observé sur notre film mince l'effet dit de «peau d'orange». Nous avons aussi comparé le comportement des grains lorsqu'ils sont noyés dans un agrégat polycristallin et lorsqu'ils appartiennent au film mince. Nous observons ainsi l'effet « film mince ».

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au problème du fluage anisotherme des alliages à mémoire de forme soumis à de faibles taux de contrainte. D. Entemeyer, en 1996, a simulé ce type d'essai et a montré que les résultats obtenus ne sont pas satisfaisants pour des contraintes appliquées en dessous de 100 MPa. Or ces alliages sont souvent utilisés en dessous de 100 MPa.

Pour pallier ce problème, nous sommes partis de la microstructure réellement observée lors de ces essais, où un nombre important de variantes de martensite s'activent. Nous avons proposé une nouvelle formulation qui prend en compte ce nombre important de variantes activées, en considérant des groupes composés de deux variantes compatibles. Cette approche nous a amenés à proposer une nouvelle matrice d'interaction qui prend en compte ces groupes de variantes de martensite.

Cette approche associée à un nouveau critère de sélection des variantes est implémentée dans un modèle simulant des refroidissements à contraintes imposées sur des AMF à base cuivre. Les résultats obtenus sont très satisfaisants : nous avons une diminution de la déformation de transformation finale lorsque la contrainte diminue. Ce résultat n'est pas obtenu avec les formulations classiques.

Nous avons ensuite implémenté notre approche dans un modèle autocohérent simulant des refroidissements sous contraintes imposées, et comparé nos résultats à ceux obtenus par D. Entemeyer. Ces résultats ne sont qu'en partie satisfaisants. En effet, nous diminuons bien la déformation de transformation finale, comme pour les monocristaux, mais cette diminution n'est pas assez prononcée.

Nous sommes sévèrement limités par le temps de calcul (l'analyse combinatoire prend énormément de temps : plus on descend en contrainte, plus il y a de variantes potentiellement actives et plus l'analyse combinatoire est longue) et le nombre de grains pris pour l'étude des polycristaux a dû être limité à 10.

Il faudrait pour la suite, trouver le moyen de diminuer ce temps de calcul pour pouvoir travailler avec au moins 100 grains et descendre la contrainte imposée en dessous de 50 MPa.

Nous avons étendu notre nouvelle formulation à l'étude des alliages Nickel-Titane. Dans ce cas, les groupes considérés sont composés de deux variantes correspondantes et chaque groupe correspond à une variante à plan d'habitat. Là encore une nouvelle matrice

CONCLUSION GENERALE

V.3 Conclusion

N'ayant pas de résultats expérimentaux sur des films minces permettant de valider la simulation proposée, tous les résultats de ce chapitre sont purement qualitatifs. L'élaboration de films minces de quelques dizaines de microns d'épaisseur est en cours de réalisation au LPMM. L'acquisition en janvier 2002 d'un laminoir Quarto permettra de conforter cette activité. La détermination des orientations cristallographiques locales par EBSD et des essais de traction in situ, permettront d'obtenir la base expérimentale nécessaire à une étude quantitative ultérieure.