Physique de la déformation : les polycristaux

Sébastien Merkel
Professeur, département de Physique
Laboratoire UMET (Unité Matériaux et Transformations)
sebastien.merkel@univ-lille.fr

4- Propriétés de polycristaux

Objectifs

Comment calculer les propriétés moyennes du polycristal ?

- Rappels d'élasticité ;

- Autres quantités tensorielles ;

- Elasticité dans les polycristaux aléatoires :
  - Calculs de moyennes ;
  - Moyennes de Reuss/Voigt/Hill ;
  - Autres modèles ;

- Elasticité dans les polycristaux orientés ;
  - Calcul ;
  - Exemples et applications.

4- Propriétés de polycristaux
a- Rappels d'élasticité

Elasticité

Rappels :

- L'élasticité est une propriété fondamentale des matériaux ;
- Elle caractérise leur comportement mécanique aux faibles déformations ;
- Elle est en général linéaire : déformation α contrainte ;
- Elle est souvent anisotrope.

Tenseurs des contraintes et déformations

Tenseur : objet mathématique permettant de représenter des quantités dont les composantes changent par transformations de l'espace.

Tenseur des contraintes : tenseur de rang 2 caractérisant les contraintes appliquées à un matériau solide.

Tenseur des déformations : tenseur de rang 2 caractérisant les déformations appliquées à un matériau solide.

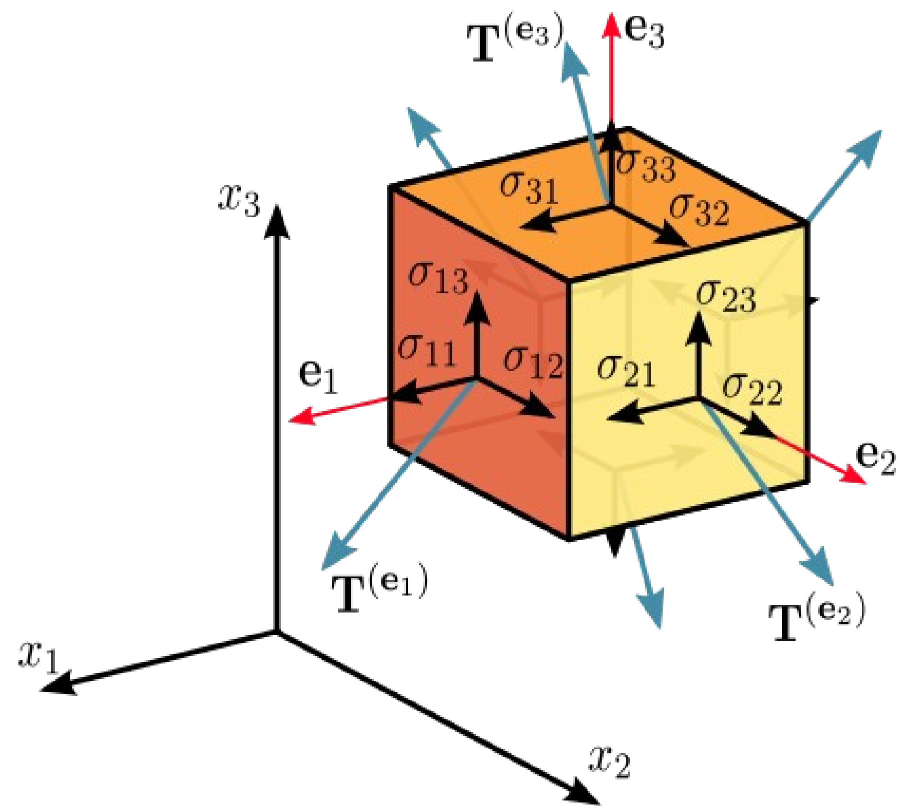


Image wikipédia

Rotation de tenseurs

Tenseur de rang 0 :

- Grandeur indépendante du repère choisi ;
- Exemples : pression, température...

Tenseur de rang 1 :

- Ensemble de 3 quantités se transformant comme les vecteurs de base ;
- Mathématiquement : $T'_i = a_{ik}\, T_k$;
- Exemple : vecteur position ;

Tenseur de rang 2 :

- Mathématiquement : $T'_{ij} = a_{ik}\, a_{jl}\, T_{kl}$ (attention : ce n'est pas un produit de matrices) ;
- Notation matricielle : $T' = a\, T\, {}^t a$;
- Exemple : tenseurs des contraintes et des déformations ;

Tenseur de rang 4 :

- Mathématiquement : $T'_{ijkl} = a_{im}\, a_{jn}\, a_{ko}\, a_{lp}\, T_{mnop}$;
- Exemple : tenseurs des rigidités et des souplesses ;

- Relation linéaire entre tenseur des contraintes, $\boldsymbol{\sigma}$, et tenseur des déformations, $\boldsymbol{\varepsilon}$;
- Notation tensorielle :
  - $\boldsymbol{\sigma} = C{:}\boldsymbol{\varepsilon}$;
  - $\boldsymbol{\varepsilon} = S{:}\boldsymbol{\sigma}$;
- C : tenseur des rigidités - S : tenseur des souplesses ;
- $C = S^{-1}$ (plus facile à calculer en notation condensée);
- Notation par composantes :
  - $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\ \varepsilon_{kl}$;
  - $\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\ \sigma_{kl}$;
- Module d'Young anisotrope = contrainte en tension / déformation en tension ;
- Module d'Young anisotrope (2) : $1/S'_{1111}$, où le tenseur S' est exprimé dans le repère approprié ;
- Repère approprié : repère où la tension est dans la direction dans la direction *1*.

Questions

- Différencier le comportement plastique du comportement élastique.
- Définir le module d'Young.
- Qu'est-ce qu'un tenseur ?
- Définir le tenseur des contraintes, des déformations, des constantes élastiques.
- Qu'appelle-t-on la notation matricielle ?
- Effet de la symétrie du cristal ?
- Donner la forme de la matrice des constantes élastiques, en notation de Voigt pour un cristal cubique, hexagonal, orthorhombique...

Autres propriétés exprimées à l'aide de tenseurs

Property	Symbol	Field	Response	Type#
Tensors of Rank 0 (Scalars)				
Specific Heat	C	ΔT	$T\Delta S$	E1
Tensors of Rank 1 (Vectors)				
Electrocaloric	p_i	E_i	ΔS	E3
Magnetocaloric	q_i	H_i	ΔS	E3
Pyroelectric	p'_i	ΔT	D_i	E3
Pyromagnetic	q'_i	ΔT	B_i	E3
Tensors of Rank 2				
Thermal expansion	α_{ij}	ΔT	ϵ_{ij}	E6
Piezocaloric effect	α'_{ij}	σ_{ij}	ΔS	E6
Dielectric permittivity	κ_{ij}	E_j	D_i	E6
Magnetic permeability	μ_{ij}	H_j	B_i	E6
Optical activity	g_{ij}	$l_i l_j$	G	E6
Magnetoelectric polarization	λ_{ij}	H_j	D_i	E9
Converse magnetoelectric polarization	λ'_{ij}	E_j	B_i	E9
Electrical conductivity (resistivity)	σ_{ij} (ρ_{ij})	E_j (j_j)	j_i (E_i)	T6
Thermal conductivity	K_{ij}	$\nabla_j T$	h_i	T6
Diffusivity	D_{ij}	$\nabla_j c$	m_i	T6
Thermoelectric power	Σ_{ij}	$\nabla_j T$	E_i	T9
Hall effect	R_{ij}	B_j	ρ^a_i	T9

Source : T. Rollet – Source originale : M. De Graef

Autres propriétés exprimées à l'aide de tenseurs (2)

Tensors of Rank 3				
Piezoelectricity	d_{ijk}	σ_{jk}	D_i	E18
Converse piezoelectricity	d'_{ijk}	E_k	ϵ_{ij}	E18
Piezomagnetism	Q_{ijk}	σ_{jk}	B_i	E18
Converse piezomagnetism	Q'_{ijk}	H_k	ϵ_{ij}	E18
Electro-optic effect	r_{ijk}	E_k	$\Delta\beta_{ij}$	E18
Nernst tensor	Σ_{ijk}	$\nabla_j T B_k$	E_i	T27
Tensors of Rank 4				
Elasticity	s_{ijkl} (c_{ijkl})	σ_{kl} (ϵ_{kl})	ϵ_{ij} (σ_{ij})	E21
Electrostriction	γ_{ijkl}	$E_k E_l$	ϵ_{ij}	E36
Photoelasticity	q_{ijkl}	σ_{kl}	$\Delta\beta_{ij}$	E36
Kerr effect	p_{ijkl}	$E_k E_l$	$\Delta\beta_{ij}$	E36
Magnetoresistance	ξ_{ijkl}	$B_k B_l$	ρ^s_{ij}	T36
Piezoresistance	Π_{ijkl}	σ_{kl}	$\Delta\rho_{ij}$	T36
Magnetothermoelectric power	Σ_{ijkl}	$\nabla_j T B_k B_l$	E_i	T54
Second order Hall effect	ρ_{ijkl}	$B_j B_k B_l$	ρ^2_i	T30
Tensors of Rank 6				
Third order elasticity	c_{ijklmn}	$\epsilon_{kl}\epsilon_{mn}$	σ_{ij}	E56

Source : T. Rollet – Source originale : M. De Graef

4- Propriétés de polycristaux
b- Élasticité dans les polycristaux aléatoires

Propriétés moyennes

Polycristal, avec une infinité de grains orientés dans toutes les directions de l'espace

- Matériau isotrope ;
- 2 coefficients élastiques indépendants :
  - E et ν ;
  - K et G ;
  - ...

Forme matricielle :

$$S = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{bmatrix}$$

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$$

Calcul de propriétés moyennes

Contribution d'un grain du polycristal :

- $C'_{11} = C'_{1111} = a_{1i}a_{1j}a_{1k}a_{1l}\, C_{ijkl}$
- $C'_{11} = a_{11}a_{11}a_{11}a_{11}\, C_{1111} + a_{11}a_{11}a_{11}a_{12}\, C_{1112} + ...$
- $C'_{11} = (a_{11})^4\, C_{1111} + 2(a_{11})^2(a_{12})^2\, C_{1122} + 2(a_{11})^2(a_{13})^2\, C_{1133}$
  $+ 4(a_{11})^2 a_{12}a_{13}\, C_{1123} + ...$

Contribution de tous les grains :

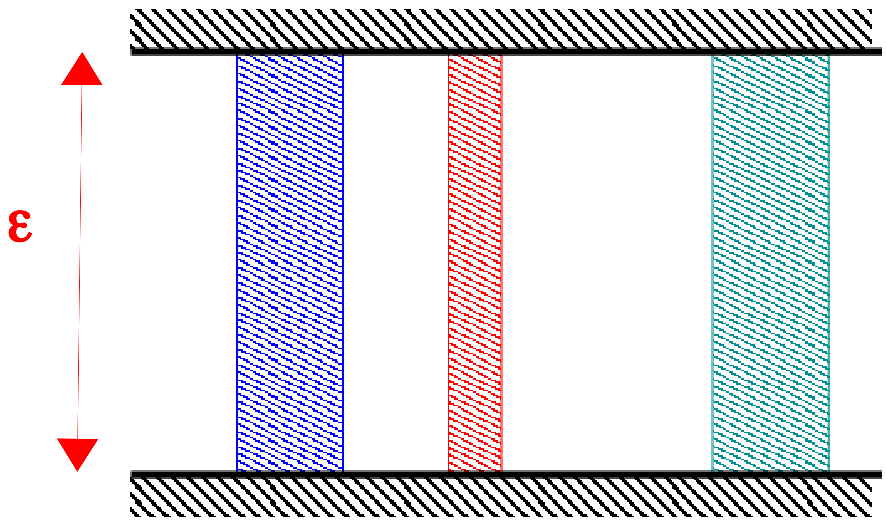
- $\langle C'_{11}\rangle = \langle (a_{11})^4\rangle\, C_{1111} + 2\langle (a_{11})^2(a_{12})^2\rangle\, C_{1122} +$
  $2\langle (a_{11})^2(a_{13})^2\rangle\, C_{1133} + 4\langle (a_{11})^2 a_{12}a_{13}\rangle C_{1123} + ...$
- Les signes <> indiquent une moyenne sur tous les angles d'Euler

Quelques résultats :

- $\langle a_{11}\rangle = 0$; $\langle (a_{11})^2\rangle = 1/3$; $\langle (a_{11})^4\rangle = 1/5$; $\langle (a_{11})^2(a_{12})^2\rangle = 1/15$

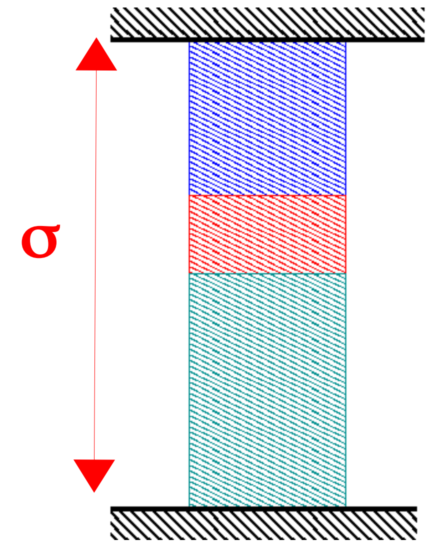
Moyennes de Reuss-Voigt-Hill

Moyenne de Voigt



Déformation égale sur tous les cristaux
« iso-strain average »

Moyenne de Reuss



Contrainte égale sur tous les cristaux
« iso-stress average »

Moyenne de Hill

Hill, en 1967, démontre que le moyennes de Reuss et Voigt sont des bornes entre lesquelles se situent les propriétés du polycristal réel. Il propose une nouvelle estimation, la moyenne des valeurs obtenues par Voigt et Reuss.

Calcul de Voigt

Hypothèse de Voigt : continuité des déformations, les déformations sont les mêmes dans chacun des cristaux.

On applique la loi de Hooke dans ce sens : $\sigma = C{:}\varepsilon$ car le tenseur des déformations est connu.

On calcule donc la moyenne des rigidités.

Résultat :

$$\langle C'_{11}\rangle = \frac{3}{15}(C_{11}+C_{22}+C_{33})+\frac{2}{15}(C_{12}+C_{13}+C_{23})+\frac{4}{15}(C_{44}+C_{55}+C_{66})$$

$$\langle C'_{12}\rangle = \frac{1}{15}(C_{11}+C_{22}+C_{33})+\frac{4}{15}(C_{12}+C_{13}+C_{23})-\frac{2}{15}(C_{44}+C_{55}+C_{66})$$

$$\langle C'_{44}\rangle = \frac{1}{15}(C_{11}+C_{22}+C_{33})-\frac{1}{15}(C_{12}+C_{13}+C_{23})+\frac{3}{15}(C_{44}+C_{55}+C_{66})$$

On vérifie que $\langle C'_{44}\rangle = (\langle C'_{11}\rangle - \langle C'_{12}\rangle)/2$ (matériau isotrope).

Autre paramètres isotropes (E, K, G, ν) calculés à l'aide des formules précédentes.

Calcul de Reuss

Hypothèse de Reuss: continuité des contraintes, les contraintes sont les mêmes dans chacun des cristaux.

On applique la loi de Hooke dans ce sens : $\varepsilon = S{:}\sigma$ car le tenseur des contraintes est connu.

On calcule donc la moyenne des souplesses.

Résultat :

$$\langle S'_{11} \rangle = \frac{3}{15}(S_{11}+S_{22}+S_{33}) + \frac{2}{15}(S_{12}+S_{13}+S_{23}) + \frac{4}{15}(S_{44}+S_{55}+S_{66})$$

$$\langle S'_{12} \rangle = \frac{1}{15}(S_{11}+S_{22}+S_{33}) + \frac{4}{15}(S_{12}+S_{13}+S_{23}) - \frac{2}{15}(S_{44}+S_{55}+S_{66})$$

$$\langle S'_{44} \rangle = \frac{1}{15}(S_{11}+S_{22}+S_{33}) - \frac{1}{15}(S_{12}+S_{13}+S_{23}) + \frac{3}{15}(S_{44}+S_{55}+S_{66})$$

On calcule ensuite le tenseur des rigidités moyennes en inversant le tenseur des souplesses moyennes.

Département de Physique
Unité Matériaux et Transformations

Autres bornes

Depuis, d'autres bornes et calculs de moyennes on été développés :

- Bornes de Hashin & Shtrickman, 1967
- Moyenne géométrique : Moraviec, 1989, Matthies et Humbert, 1987

Elles offrent des solutions moins éloignées que les bornes de Reuss et Voigt.

Ceci dit, dans la pratique, la moyenne de Hill est beaucoup plus facile à calculer et est très peu différente de ces calculs plus avancés...

Exemples

Modules d'Young et de cisaillement pour différents métaux.

Bornes de Reuss et Voigt.

Moyenne de Hill.

Valeurs expérimentales.

En GPa.

Module	Cuivre	Or	Fer α
E_R	109	69	193
E_V	144	87	229
E_H	127	78	211
E_{exp}	123	79	213
G_R	40	24	74
G_V	54	31	86
G_H	47	27	80
G_{exp}	46	28	83

4- Propriétés de polycristaux
b- Élasticité dans les polycristaux orientés

Élasticité dans les polycristaux orientés

Propriétés élastiques du polycristal : moyenne des propriétés élastiques de chacun des grains.

Dans un polycristal aléatoire : moyenne sur toutes les directions de l'espace.

Dans un polycristal orienté : moyenne pondérée par l'ODF.

$$\langle C \rangle = \int C(g) f(g) dg$$

Moyenne de Voigt

$$\langle S \rangle = \int S(g) f(g) dg$$

Moyenne de Reuss

Dans les faits : le calcul n'est pas si simple

- 81 C_{ijkl} sans simplification
- Avec un découpage de l'espace en boites de 5°x5°x5° : 186 000 coefficients pour l'ODF.

On utilise des algorithmes optimisés.

Symétrie du tenseur obtenu

Attention :

- Un polycristal aléatoire est isotrope.
- Un polycristal orienté est anisotrope.
- L'anisotropie dépend de l'anisotropie du monocristal ET de la texture.

$$\begin{bmatrix} 230 & 135 & 135 & & & \\ & 230 & 135 & & & \\ & & 230 & & & \\ & & & 116 & & \\ & & & & 116 & \\ & & & & & 116 \end{bmatrix}$$

Constantes élastiques
Fer α - monocristal

Fer α
Polycristal aléatoire

$C_{44} = (C_{11}-C_{12})/2$
Isotrope

$$\begin{bmatrix} 275 & 113 & 113 & & & \\ & 275 & 113 & & & \\ & & 275 & & & \\ & & & 81 & & \\ & & & & 81 & \\ & & & & & 81 \end{bmatrix}$$

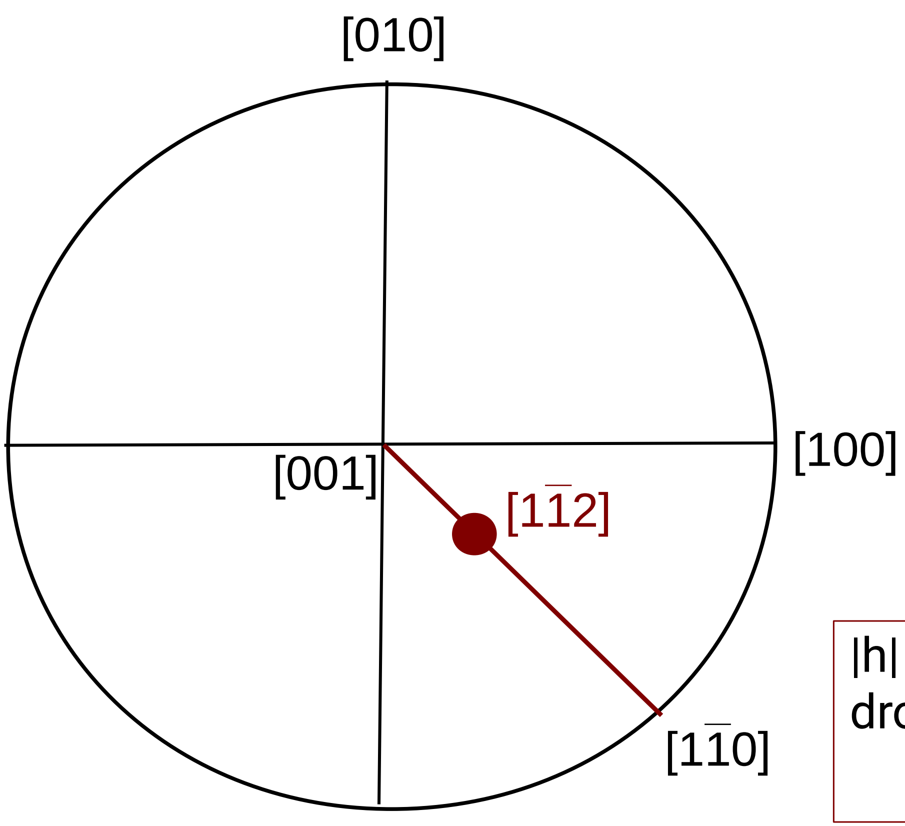
Fer α
Après 100 % traction

$C_{66} = (C_{11}-C_{12})/2$
Hexagonal

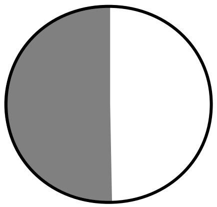
$$\begin{bmatrix} 279 & 114 & 107 & & & \\ & 279 & 107 & & & \\ & & 285 & & & \\ & & & 76 & & \\ & & & & 76 & \\ & & & & & 82 \end{bmatrix}$$

Interlude : retour sur la projection stéréographique

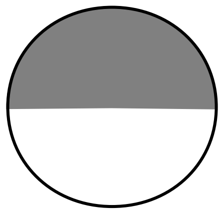
Exercice : placer la direction $[1\bar{1}2]$ sur une projection stéréographique d'un cristal cubique...



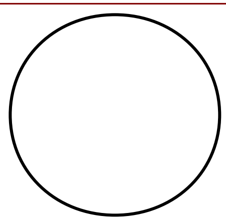
$[1\bar{1}2]\cdot[100] > 0$: $[1\bar{1}2]$ est à moins de 90° de [100]



$[1\bar{1}2]\cdot[010] < 0$: $[1\bar{1}2]$ est à plus de 90° de [010]



$[1\bar{1}2]\cdot[001] > 0$: $[1\bar{1}2]$ est à mois de 90° de [001] (il est dans l'hémisphère supérieur)

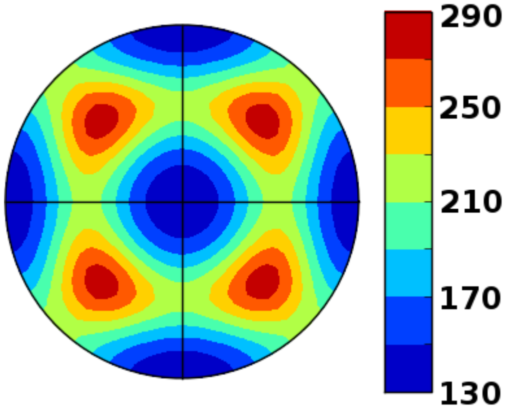


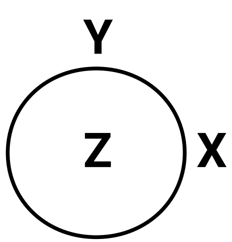
$|h| = |k|$: $[1\bar{1}2]$ est sur la droite entre [001] et $[1\bar{1}0]$

$|l| > |k|$: $[1\bar{1}2]$ est plus proche de [001] que de $[1\bar{1}0]$

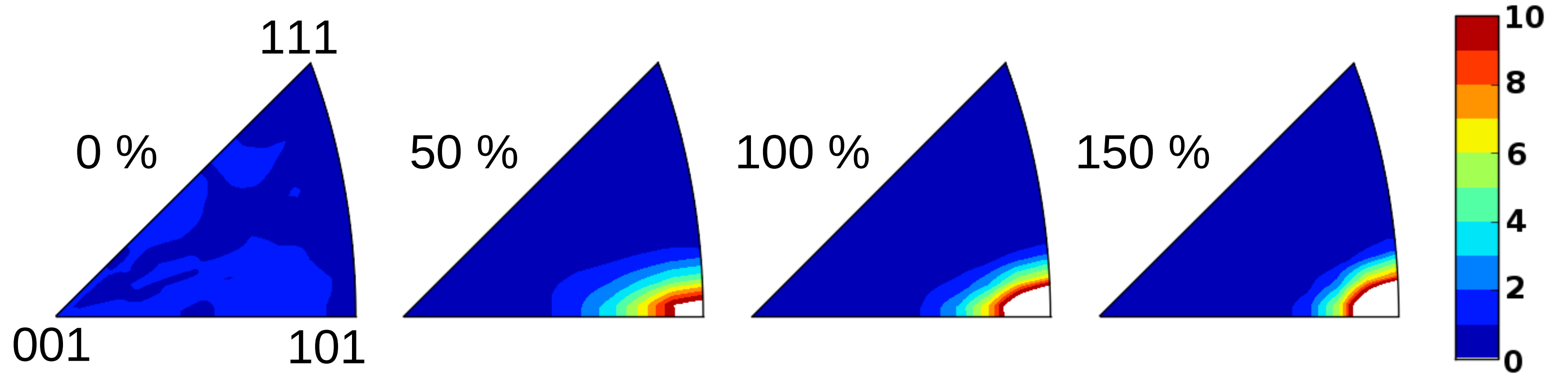
Illustration : fer α en tension

Fer α
Monocristal
Module
d'Young
(GPa)

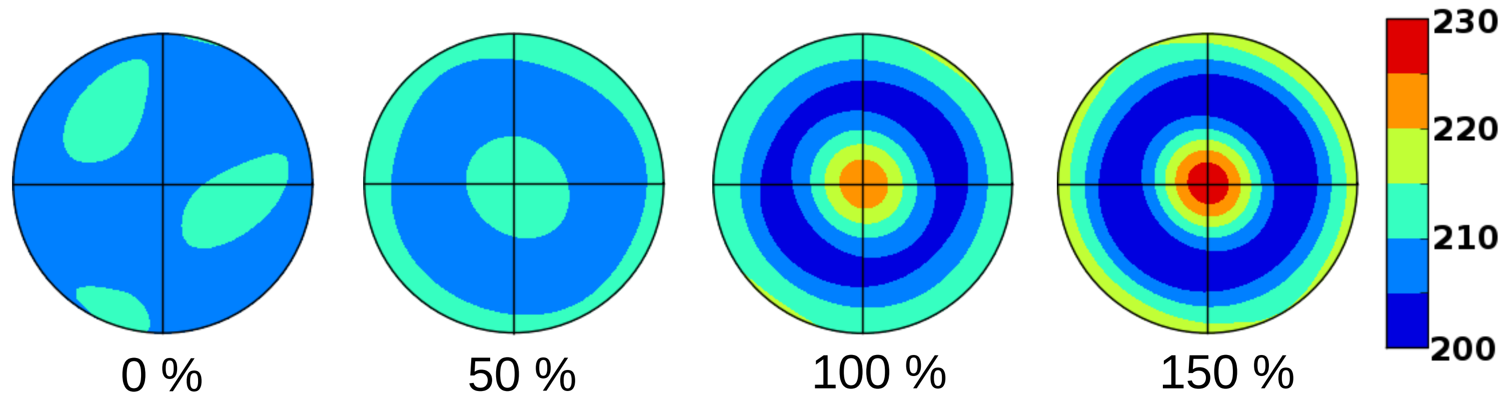




IPF de la direction de compression



Module d'Young polycristal (Hill)



Simulation VPSC – 5000 grains

Département de Physique
Unité Matériaux et Transformations

Résumé du cours jusqu'à présent

1- Orientation d'un grain :

- Systèmes de coordonnées ;
- Angles d'Euler, représentation matricielle, représentation graphique.

2- Orientations dans un polycristal :

- Mesure par diffraction, mesure par EBSD ;
- Fonction de distribution des orientations ;
- Représentation graphique : figure de pôle, figure de pôle inverse.

3- Propriétés de polycristaux :

- Rappels d'élasticité ;
- Élasticité dans un polycristal aléatoire, moyennes de Reuss-Voigt-Hill ;
- Élasticité dans un polycristal orienté : moyennes pondérées par l'ODF.