

Surfaces seuil de début de transformation : modèle cristallin pour un Alliage à Mémoire de Forme.

K. LAVERNHE-TAILLARD^a, A. MAYNADIER^a, O. HUBERT^a

a. LMT Cachan, ENS Cachan / CNRS UMR 8535 / Univ. Paris 6 / PRES UniverSud Paris, 61
avenue du Président Wilson, 94235 CACHAN cedex

Résumé :

Les Alliages à Mémoire de Forme (AMF) ont des propriétés spécifiques dues à une transformation de phase solide-solide réversible pouvant être induite par la contrainte ou la température. Pour les AMF de type Ni_{49,75%}at-Ti, nous proposons un modèle micromécanique multiaxial à l'échelle du monocristal. Ce modèle est fondé sur les géométries locales des deux phases (austénite et martensite) et de la comparaison des énergies par variante. Des résultats en superélasticité (isothermes) en termes de surfaces seuil de début de transformation sur monocristal sont présentés ici. Le modèle pourra être étendu aux polycristaux isotropes et anisotropes.

Abstract :

The specific properties of Shape Memory Alloys (SMA) are due to a reversible solid-solid phase transformation that can be either induced by stress or temperature variations. For the Ni_{49,75%}at-Ti SMA, we introduce a multi-axial micro-mechanical model at the crystal scale. This model is based on the geometry of the two phases (austenite and martensite) and comparison between the energies of the variants. Some (isothermal) superelastic results are presented above in terms of yield stress surfaces of single crystals. Moreover, the model may be extended to isotropic and anisotropic polycrystalline aggregates.

Mots clefs : superélasticité ; comportement multiaxial ; Nickel-Titane

1 Introduction

Le comportement bien spécifique des AMF s'explique par la présence, à des températures proches de l'ambiante d'une transformation de phase appelée martensitique par analogie avec celle qui se produit dans les aciers. Néanmoins et contrairement aux aciers, le changement de volume associé à la transformation est infime, ce qui lui permet d'avoir lieu dans le sens direct comme inverse. Parmi les propriétés notables des AMF, nous allons nous intéresser ici plus particulièrement à la superélasticité. Il s'agit du comportement que l'on obtient pour des températures supérieures à A_s (Austenite Start) ; sollicité mécaniquement, au départ sous forme complètement austénitique, le matériau subit la transformation directe austénite vers martensite durant la charge, puis la transformation inverse durant la décharge, et revient ainsi à sa forme initiale sans déformation résiduelle [1].

Sous sollicitations multiaxiales proportionnelles et sur un polycristal, il a été constaté expérimentalement que le début de la transformation se produisait pour des seuils de contrainte très différents selon la direction de chargement [5]. Ainsi il existe déjà une dissymétrie sévère entre le comportement en traction et en compression. Ces observations expérimentales ont été modélisées tant à l'échelle macroscopique [4] qu'à l'échelle de la maille cristalline sur des monocristaux [8] et des agrégats polycristallins [3].

L'intérêt des modèles à l'échelle cristalline est, d'une part, de permettre une compréhension des mécanismes en jeu, et d'autre part, la possibilité de les utiliser comme "machine d'essais virtuels" afin

de tester des trajets de chargement multiaxiaux complexes difficiles à mettre en oeuvre expérimentalement. C'est par exemple ce qui a été réalisé dans [9] sur un AMF de type Cu-Al-Be à partir du modèle polycristallin proposé par Patoor *et al.* [3]. Ces modèles sont en revanche souvent plus complexes et lourds à mettre en oeuvre par rapport aux modèles phénoménologiques macroscopiques.

Dans ce papier, nous proposons de mettre en place une démarche de simulation d'un AMF de type Ni-Ti, à l'aide d'un modèle d'évolution à l'échelle du cristal fondé sur deux principes : le premier est la description cinématique de la transformation de la phase mère cubique (austénite) en 12 variantes monocliniques de martensite par les tenseurs de transformation, le second principe repose sur une répartition des différentes phases (austénite et 12 variantes de martensite) suivant une loi de type Boltzmann pour laquelle les phases favorisées sont celles qui possèdent une enthalpie libre plus faible. Ce type de modèle, non encore utilisé pour modéliser les AMF a été utilisé avec succès sur les matériaux magnéto-mécaniques [2].

2 Description du modèle à l'échelle du monocristal

Le modèle utilisé ainsi que la définition des paramètres utilisés sont décrits en détail dans [6]. On considère ici deux échelles, celle de la phase Φ (austénite ou une des 12 variantes de martensite) pour laquelle les contraintes et les déformations sont supposées homogènes, et celle du grain supposé soumis à un tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}_g$. Nous ne considérons pas la déformation élastique. Chaque phase Φ subit donc une déformation, soit nulle pour l'austénite, soit liée au gradient de la transformation F_Φ permettant de passer de l'austénite, cubique, à la variante de martensite, monoclinique, Φ . Ici comme F_Φ a un déterminant positif, on peut lui appliquer le théorème de décomposition polaire $F_\Phi = Q_\Phi U_\Phi$ où Q_Φ est une rotation et U_Φ une matrice symétrique définie positive appelée matrice de dilatation de transformation ou déformation de Bain. On a alors $U_\Phi U_\Phi = F_\Phi^T F_\Phi$ (voir figure 1 et tableau 1).

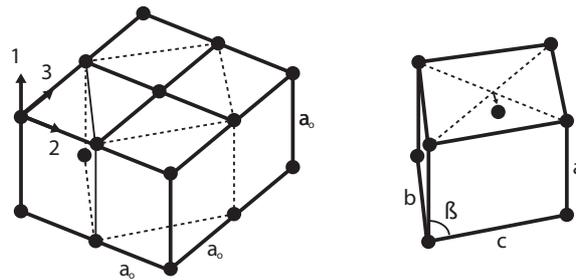


FIGURE 1 – Transformation de la phase mère austénite cubique en martensite monoclinique d'après [1]

$$\begin{aligned}
 U_1 &= \begin{pmatrix} \gamma & \varepsilon & \varepsilon \\ \varepsilon & \alpha & \delta \\ \varepsilon & \delta & \alpha \end{pmatrix} & U_2 &= \begin{pmatrix} \gamma & -\varepsilon & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \alpha & \delta \\ -\varepsilon & \delta & \alpha \end{pmatrix} & U_3 &= \begin{pmatrix} \gamma & -\varepsilon & \varepsilon \\ -\varepsilon & \alpha & -\delta \\ \varepsilon & -\delta & \alpha \end{pmatrix} & U_4 &= \begin{pmatrix} \gamma & \varepsilon & -\varepsilon \\ \varepsilon & \alpha & -\delta \\ -\varepsilon & -\delta & \alpha \end{pmatrix} \\
 U_5 &= \begin{pmatrix} \alpha & \varepsilon & \delta \\ \varepsilon & \gamma & \varepsilon \\ \delta & \varepsilon & \alpha \end{pmatrix} & U_6 &= \begin{pmatrix} \alpha & -\varepsilon & \delta \\ -\varepsilon & \gamma & -\varepsilon \\ \delta & -\varepsilon & \alpha \end{pmatrix} & U_7 &= \begin{pmatrix} \alpha & -\varepsilon & -\delta \\ -\varepsilon & \gamma & \varepsilon \\ -\delta & \varepsilon & \alpha \end{pmatrix} & U_8 &= \begin{pmatrix} \alpha & \varepsilon & -\delta \\ \varepsilon & \gamma & -\varepsilon \\ -\delta & -\varepsilon & \alpha \end{pmatrix} \\
 U_9 &= \begin{pmatrix} \alpha & \delta & \varepsilon \\ \delta & \alpha & \varepsilon \\ \varepsilon & \varepsilon & \gamma \end{pmatrix} & U_{10} &= \begin{pmatrix} \alpha & \delta & -\varepsilon \\ \delta & \alpha & -\varepsilon \\ -\varepsilon & -\varepsilon & \gamma \end{pmatrix} & U_{11} &= \begin{pmatrix} \alpha & -\delta & \varepsilon \\ -\delta & \alpha & -\varepsilon \\ \varepsilon & -\varepsilon & \gamma \end{pmatrix} & U_{12} &= \begin{pmatrix} \alpha & -\delta & -\varepsilon \\ -\delta & \alpha & \varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & \gamma \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

TABLE 1 – Forme des déformations de Bain U_Φ permettant de passer de l'austénite à la variante de martensite Φ d'après [1]. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha = 1.0243$, $\gamma = 0.9563$, $\varepsilon = -0.0427$ et $\delta = 0.058$.

Le tenseur de déformation de transformation de la phase Φ est alors défini comme le tenseur des déformations de Green-Lagrange :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_\Phi^{tr} \approx \underline{\underline{E}}_\Phi^{tr} = \frac{1}{2}(U_\Phi U_\Phi - I) \quad (1)$$

On peut alors calculer l'énergie libre de Gibbs W_Φ pour chacune des phases comme :

$$W_\Phi = H_\Phi - T.S_\Phi - \underline{\underline{\sigma}}_g : \underline{\underline{\varepsilon}}_\Phi^{tr} \quad (2)$$

où H_Φ est l'enthalpie, S_Φ l'entropie de la phase Φ et T la température. Le terme $-\underline{\underline{\sigma}}_g : \underline{\underline{\varepsilon}}_\Phi^{tr}$ représente l'énergie élastique associée à la transformation, définie à une constante près. On utilise une hypothèse de déformation homogène sur le grain. On se reportera à [2] pour la démonstration.

On en déduit alors f_Φ la fraction volumique de la phase Φ à partir de son énergie libre et de celle des autres phases possibles en utilisant une distribution de probabilité de type Boltzmann :

$$f_\Phi = \frac{\exp(-B_s W_\Phi)}{\sum_{\Phi=0}^n \exp(-B_s W_\Phi)} \quad (3)$$

où B_s est un paramètre d'ajustement.

Finalement, à l'échelle du grain ou du cristal, le tenseur des déformations de transformation est calculé par une loi des mélanges :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_g^{tr} = \sum_{\Phi=0}^n f_\Phi \underline{\underline{\varepsilon}}_\Phi^{tr} \quad (4)$$

3 Surfaces seuil d'un monocristal

3.1 Théorie

On se place à une température constante et égale à $310^\circ K$ qui est supérieure à A_s pour se mettre dans le cas superélastique. A partir du modèle précédent, on peut définir des surfaces seuil de début de transformation en contrainte comme étant les composantes des contraintes à partir desquelles la variante de martensite Φ la mieux orientée va apparaître. D'après l'équation 3, cette variante est telle que son énergie libre W_Φ est égale à celle de l'austénite W_a soit :

$$H_m - T.S_m - \underline{\underline{\sigma}}_g : \underline{\underline{\varepsilon}}_\Phi^{tr} = H_a - T.S_a \quad (5)$$

où H_m et S_m sont les enthalpie et entropie de la martensite (identiques pour toutes les variantes), H_a et S_a les enthalpie et entropie de l'austénite et T la température, constante ici. Dès lors :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g : \underline{\underline{\varepsilon}}_\Psi^{tr} = (H_m - H_a) + T(S_m - S_a) = \Delta H - T\Delta S = cte \quad (6)$$

Nous étudierons ici le cas de la traction et de la compression uniaxiales dans différentes directions par rapport aux directions matérielles de la maille cubique de l'austénite ainsi qu'un cas bi-axial : la bi-traction.

3.2 Surfaces seuils en traction et en compression

Le cristal cubique d'austénite est soumis à un état de contrainte uniaxial dans la direction $\vec{n} = [\cos \theta \sin \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \varphi]$ dans la base associée à la maille cubique d'austénite (\vec{x} étant la direction [100], \vec{y} la direction [010] et \vec{z} la direction [001]). Le tenseur des contraintes auquel est soumis le monocristal est alors $\underline{\underline{\sigma}}_g = \vec{n}^t \sigma_{nn} \vec{n}$.

Dans ce cas, $\underline{\underline{\sigma}}_g : \underline{\underline{\varepsilon}}_\Psi^{tr} = \sigma_{nn} \varepsilon_{nn}^{tr}$ et d'après la relation 6 la contrainte seuil de début de transformation $\sigma_{seuil}(\theta, \phi)$ vaut :

$$\sigma_{seuil}(\theta, \phi) = \frac{\Delta H - T\Delta S}{\max_\Phi(\varepsilon_{\Phi nn}^{tr})} \quad (7)$$

où $\max_{\Phi}(\varepsilon_{\Phi nn}^{tr}) = \max_{\Phi}(\vec{n}^t \underline{\underline{\varepsilon}}_{\Phi}^{tr} \vec{n})$ est la déformation de la variante de martensite Φ la mieux orientée, c'est à dire qui est maximale dans la direction de la traction.

On se place par exemple dans le plan tel que $\varphi = \frac{\pi}{2}$ soit dans le plan contenant les directions [100] et [010]. Dans ce cas $\vec{n} = [\cos \theta, \sin \theta, 0]$, et $\varepsilon_{\Phi nn}^{tr} = \varepsilon_{\Phi 11}^{tr} \cos^2 \theta + 2\varepsilon_{\Phi 12}^{tr} \cos \theta \sin \theta + \varepsilon_{\Phi 22}^{tr} \sin^2 \theta$. Cela permettrait par conséquent de tracer dans le plan contenant les directions [100] et [010], la contrainte seuil $\sigma_{seuil}(\theta, \pi/2)$.

On peut aussi envisager une démarche de type essai virtuel. Il s'agit de simuler avec le modèle différents chargements proportionnels dans les directions \vec{n} et de noter pour quelles valeurs de la contrainte σ_{nn} la déformation de transformation équivalente au sens de von Mises $\varepsilon_{eq}^{tr} = \sqrt{\frac{2}{3} \varepsilon_g^{tr} : \varepsilon_g^{tr}}$ atteint un offset déterminé à l'avance (ici $\varepsilon_{eq}^{tr} = 0.002$). On reporte alors dans les figures 2 et 3 en coordonnées polaires le rayon valant σ_{nn} en fonction de l'angle de la direction du chargement dans les plans considérés.

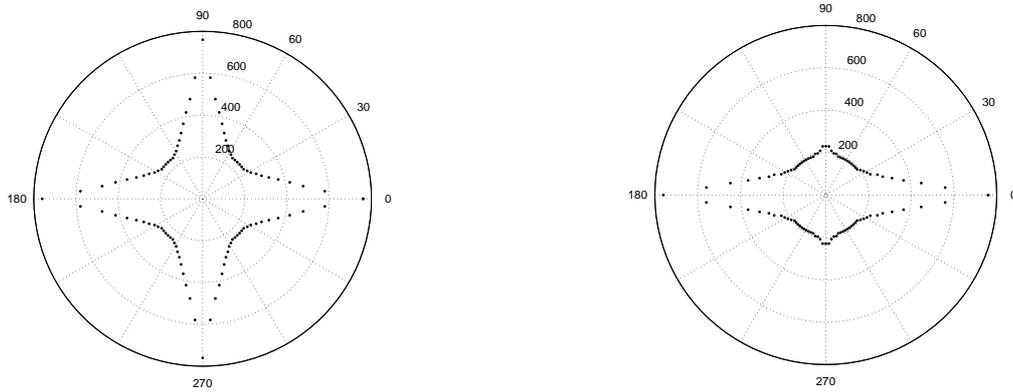


FIGURE 2 – Contrainte seuil de traction en MPa dans le plan([100], [010]) en fonction de l'angle θ , avec $\varphi = \frac{\pi}{2}$ -à gauche- et dans le plan([001], [110]) en fonction de l'angle φ , avec $\theta = \frac{\pi}{4}$ -à droite- du monocristal d'austénite

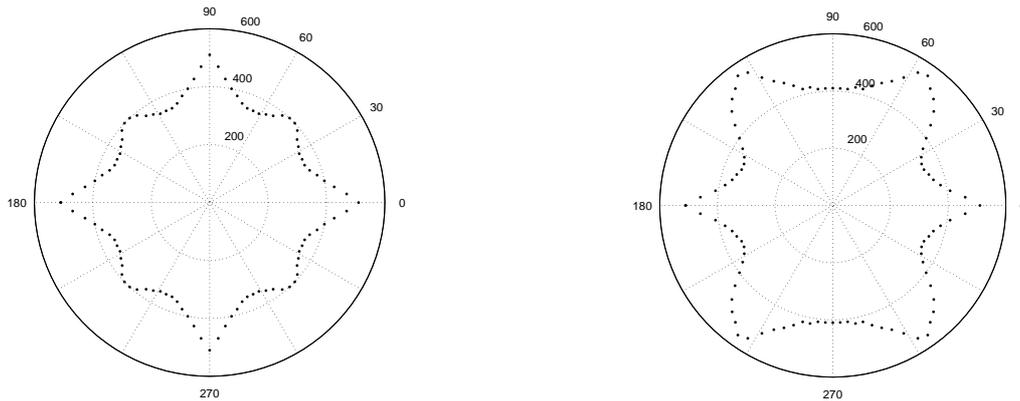


FIGURE 3 – Contrainte seuil de compression en MPa dans le plan([100], [010]) en fonction de l'angle θ , avec $\varphi = \frac{\pi}{2}$ -à gauche- et dans le plan([001], [110]) en fonction de l'angle φ , avec $\theta = \frac{\pi}{4}$ -à droite- du monocristal d'austénite

On peut noter que les figures dans les plans (100, 010) ont un axe de symétrie dû à la symétrie du cristal cubique. Par ailleurs, on constate que les contraintes seuil dans les directions de type [100] (axes

de la maille cubique) sont près de 3 fois plus grandes en traction que pour une direction de type [110]. La direction de type [111] présente elle aussi un comportement bien spécifique.

3.3 Surfaces seuils en chargement biaxial

Considérons maintenant un cas de chargement biaxial, par exemple en bitraction. On a alors un tenseur des contraintes de la forme :

$$\sigma_g = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

exprimé dans la base $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ liée au monocristal cubique d'austénite.

Si l'on reprend la même démarche que précédemment, l'équation 6 devient :

$$\sigma_{11}\varepsilon_{\Phi 11}^{tr} + \sigma_{22}\varepsilon_{\Phi 22}^{tr} = \Delta H - T\Delta S \quad (9)$$

Si l'on se place dans le cas $\sigma_{22} > \sigma_{11} > 0$, les variantes de martensite qui minimisent W_{Ψ} sont les variantes 9, 10, 11 et 12 dont les composantes ont pour propriété $\varepsilon_{11}^{tr} = \varepsilon_{22}^{tr}$. Cela implique une équation pour la surface seuil du type :

$$\sigma_{11} + \sigma_{22} = \frac{\Delta H - T\Delta S}{\varepsilon_{11}^{tr}} = cte \quad (10)$$

Une démarche similaire dans le cas $\sigma_{22} > \sigma_{11}$ et $\sigma_{11} < 0$, conduit à identifier que les variantes qui apparaissent sont 1, 2, 3 et 4, pour lesquelles $\varepsilon_{11}^{tr} = -2\varepsilon_{22}^{tr}$ ce qui implique une équation de surface seuil du type :

$$-2\sigma_{11} + \sigma_{22} = \frac{\Delta H - T\Delta S}{\varepsilon_{22}^{tr}} = cte \quad (11)$$

D'autre part, on peut simuler avec le modèle, comme à la figure 4 (a), la surface seuil de début de transformation, pour la même valeur d'offset, pour le même de tenseur des contraintes. On retrouve ainsi les formes calculées analytiquement précédemment, avec une symétrie attendue par rapport à la première bissectrice.

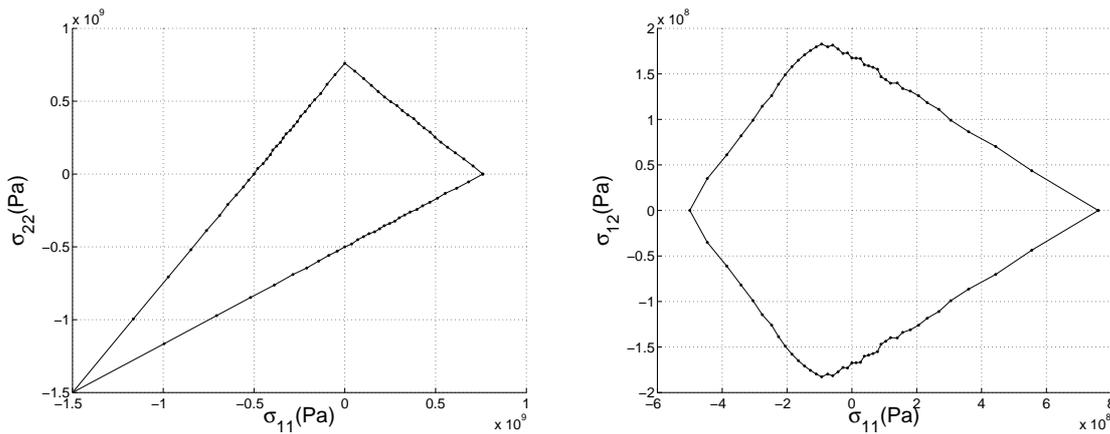


FIGURE 4 – Surfaces seuil de début de transformation directe dans les plans $(\sigma_{11}, \sigma_{22})$ et $(\sigma_{11}, \sigma_{12})$

Cette démarche peut aussi être répétée pour un tenseur des contraintes de type (voir figure 4 (b)) :

$$\sigma_g = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

toujours exprimé dans la base $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{x})$ liée au monocristal cubique d'austénite.

4 Conclusions et perspectives

Le modèle présenté ici est un modèle cristallin, multiaxial et anisotherme (même si ce dernier aspect n'a pas été évoqué ici, voir [6]). Il repose sur la modélisation de la géométrie du réseau cristallin, sous l'effet de la contrainte (ou de la température). Les fractions volumiques des différentes phases sont déterminées par une approche statistique de type Boltzmann, fonction des énergies des phases mises en oeuvre. Ne sont présentés ici essentiellement que les aspects "surfaces seuil de début de transformation" du modèle, avec la mise en évidence de certains comportements sur un monocristal de NiTi.

La démarche présentée ici, très générale, peut s'appliquer à tout type d'AMF dont les géométries des phases sont connues, mais est aussi envisageable pour modéliser d'autres phénomènes, à l'image du magnétisme [2]. Nous prévoyons d'étendre la modélisation aux polycristaux isotropes et anisotropes, en les décrivant comme un agrégat de monocristaux avec une fonction de distribution d'orientation (ODF) et en utilisant des outils de localisation/homogénéisation usuels. Les résultats ainsi obtenus pourront ensuite être comparés à des essais de détection de surface seuil en traction-compression-torsion déjà réalisés sur un NiTi anisotrope [4]. Par ailleurs, des campagnes d'essais pour mesurer certains des paramètres utilisés ici (dimensions des mailles cristallines, enthalpie et entropie) sont également prévues [6].

Références

- [1] Battacharya, K. 2003 Microstructure of martensite *In Oxford series on Materials Modeling (Oxford University Press)*
- [2] Daniel, L., Hubert, O., Buiron, N., Billardon, R. 2008 Reversible magneto-elastic behavior : A multiscale approach *J. Mech. Phys. of Sol.* **56** 1018-1042
- [3] Entemeyer, D., Patoor, E., Eberhardt, A., Berveiller, M. 2000 Strain rate sensitivity in superelasticity *Int. J. of Plast* **16** 1269-1288
- [4] Lavernhe-Taillard, K., Calloch, S., Arbab-Chirani, S., Lexcelent, C. 2009 Multiaxial Shape Memory Effect and Superelasticity *Strain* **45** 77-84
- [5] Lexcelent, C., Blanc, P. 2004 Phase transformation yield surface determination for some shape memory alloys *Acta Mater.* **52** 2317-2324
- [6] Maynadier, A., Depriester, D., Lavernhe-Taillard, K., Hubert, O. 2011 Modélisation polycristalline du comportement d'un Alliage à Mémoire de Forme (AMF) de type Ni-Ti sous sollicitations multiaxiales *In Proc. 20^{ème} Congrès Français de Mécanique*
- [7] Pitteri, M., Zanzotto, G. 1998 Generic and non-generic cubic to monoclinic transition and their twins *Acta Mater.* **46** 225-237
- [8] Patoor, E., Lagoudas, D.C., Entchev, P.B., Brinson, L.C., Gao, X. 2006 Shape memory alloys, Part I : General properties and modeling of single crystals *Mechanics of Materials* **38** 391-429
- [9] Taillard, K., Arbab Chirani, S., Calloch, C., Lexcelent, C. 2008 Equivalent transformation strain and its relation with martensite volume fraction for isotropic and anisotropic shape memory alloys *Mechanics of Materials* **40** 151-170