

# **Détermination du Comportement Thermomécanique des Alliages à Mémoire de Forme par Optimisation d'un Potentiel Thermodynamique**

L. Hessissen

Groupe de Mécanique des Solides, Laboratoire de Mécanique et des Matériaux,  
Département de Physique, Faculté des Sciences de Rabat, Université Mohammed V  
Avenue Ibn Batouta, Rabat, Maroc.

M. O. Bensalah

Groupe de Mécanique des Solides, Laboratoire de Mécanique et des Matériaux,  
Département de Physique, Faculté des Sciences de Rabat, Université Mohammed V  
Avenue Ibn Batouta, Rabat, Maroc.

S. Agouram

Groupe de mécanique des solides, Laboratoire de Mécanique et des Matériaux,  
Département de Physique, Faculté des Sciences de Rabat, Université Mohammed V  
Avenue Ibn Batouta, Rabat, Maroc.

## **Résumé**

Dans cet article nous présentons les éléments de base d'une modélisation micromécanique du comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme, et plus particulièrement, celui associé aux transformations martensitiques.

Nous réalisons ceci à partir d'une description cinématique des mécanismes physiques à l'origine du phénomène et par optimisation d'un potentiel thermodynamique quadratique sous contraintes cinématiques.

## **Abstract**

In this article, we present the basic elements of a micromechanical model of thermomechanical behavior of shape memory alloys, and more particularly, the one associated with martensitic transformations.

We realise this, from a kinematical description of physical mechanisms at the origin of the phenomenon, and by a definition of pseudoelastic potential.

## **1. INTRODUCTION**

Les alliages à mémoire de forme (AMF) ont reçu cette dernière décennie une attention particulière en raison de leurs utilisations potentielles dans différents domaines d'activités industrielles. En effet, le comportement thermomécanique des AMF confie à ces matériaux des propriétés fonctionnelles qui sont à la base de nombreuses applications technologiques et industrielles [1]. Pour cette classe de matériaux, la déformation de transformation est pratiquement la seule déformation inélastique observée.

La mise en œuvre de ces matériaux nécessite une bonne connaissance de leurs réponses aux chargements thermomécaniques appliqués. Ces matériaux présentent plusieurs types de comportements. Selon le cycle thermomécanique envisagé, on distingue:

- la pseudoélasticité correspondant à la formation réversible de la martensite à partir de l'austénite,
- l'effet de mémoire simple sens, associé à la réorientation des variantes de martensite sous l'effet des contraintes dû à la transformation inverse et sous l'effet d'une variation de la température (chauffage),
- l'effet de mémoire de forme double sens associé à la formation d'une microstructure martensitique particulière provenant d'une éducation : capacité des AMF à passer de manière réversible d'une forme « basse température » à une forme « haute température » par simple chauffage ou refroidissement.

Notre travail, qui se situe dans ce cadre, se base sur une description cinématique relativement simple et sur la détermination d'un potentiel thermodynamique quadratique associé à la transformation. Jusqu'à maintenant, la réponse à un chargement thermomécanique est obtenue par minimisation d'un potentiel linéaire, en négligeant la partie quadratique. La présente contribution, accorde une attention particulière aux termes quadratiques. Les développements théoriques sont menés dans le formalisme des petites déformations; qui est justifié par les faibles valeurs des déformations de transformation obtenues.

## 2. MODELISATION DE LA TRANSFORMATION

### 2.1 Cinématique de la transformation

Le choix de la description utilisée pour rendre compte de la microstructure est une étape importante de la modélisation.

Pour considérer la structure granulaire des matériaux polycristallins et l'existence, dans la martensite, de vingt quatre variantes cristallographiquement équivalentes, nous adoptons comme échelle de description la variante de martensite.

Nous considérons donc comme élément de base, pour la modélisation du comportement global du matériau, la déformation de transformation associée à la formation d'une variante de martensite (h) dans un grain (I). Cette déformation intrinsèque notée  $(\varepsilon_{ij})_I^h$  n'est fonction que de la nature de la transformation (variation de volume et amplitude de cisaillement associé au changement de phase) et de l'orientation de la variante considérée :

$$(\varepsilon_{ij})_I^h = g(\mathbf{R}_{ij})_I^h \quad (1)$$

où g est l'amplitude de la déformation supposée identique pour toutes les variantes et  $(\mathbf{R}_{ij})_I^h$  est le tenseur d'orientation de la variante (h) dans le grain (I).

Ces quantités s'obtiennent à partir de la cristallographie du changement de phase. La théorie phénoménologique de Wechsler, Lieberman et Read fournit de bons résultats [5]. Si V est le volume de l'échantillon considéré,  $V_I$  le volume occupé par un grain (I) et  $V_I^h$  le volume occupé par la variante (h) dans ce même grain, la déformation macroscopique de transformation  $E_{ij}^{Tr}$  (moyenne volumique des déformations de transformation locales  $\varepsilon_{ij}^{Tr}$ ) s'écrit :

$$E_{ij}^{Tr} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}^{Tr}(r) dv \quad (2)$$

avec

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{\text{Tr}}(\mathbf{r}) &= \varepsilon_{ij}^h & \text{si} & & \mathbf{r} \in V_I^h \\ \text{et} & & & & \\ \varepsilon_{ij}^{\text{Tr}}(\mathbf{r}) &= 0 & \text{si} & & \mathbf{r} \notin V_I^h \end{aligned} \quad (3)$$

$\varepsilon_{ij}^{\text{Tr}}$  est considérée uniforme au sein du grain (I). L'expression (2) devient alors :

$$E_{ij}^{\text{Tr}} = \frac{1}{V} \sum_I \left( \sum_h (\varepsilon_{ij})_I^h V_I^h \right) \quad (4)$$

En notant respectivement  $F^I = V_I/V$  et  $f_I^h = V_I^h/V_I$  les fractions volumiques occupées par le grain (I) et par la variante (h) dans ce même grain, l'expression (4) s'écrit:

$$E_{ij}^{\text{Tr}} = \sum_I \left( \sum_h (\varepsilon_{ij})_I^h f_I^h \right) F^I \quad (5)$$

## 2.2 Potentiel thermodynamique associé à la transformation

Pour un volume unitaire de la phase mère, l'énergie libre de Gibbs associée à une transformation martensitique thermoélastique se définit par [5]:

$$\Delta G(\Sigma_{ij}, T, f_I^h) = \Phi(E_{ij}, T, f_I^h) - \Sigma_{ij} E_{ij} \quad (6)$$

où  $\Phi(E_{ij}, T, f_I^h)$  est l'énergie libre d'Helmoltz, définie par [6]:

$$\Phi(E_{ij}, T, f_I^h) = \Delta G_{\text{ch}} + W_{\text{int}} + W_{\text{méc}} \quad (7)$$

$\Delta G_{\text{ch}}$  est l'énergie libre chimique,  $W_{\text{int}}$  est l'énergie interfaciale et  $W_{\text{méc}}$  est l'énergie mécanique.  $E_{ij}$  est la déformation totale,  $T$  la température de l'essai et  $f_I^h$  les variables internes décrivant l'état microstructural du matériau.  $\Delta G_{\text{ch}}$ , supposée dépendre linéairement de  $T$ , est définie par unité de volume par [4]:

$$\Delta G_{\text{ch}} = B(T - M_s)f \quad (8)$$

où  $B$  est un coefficient de proportionnalité,  $M_s$  est la température du début de la transformation et  $f$  la fraction volumique totale de martensite formée donnée par:

$$f = \sum_I \left( \sum_h f_I^h \right) F^I \quad (9)$$

La forme allongée des plaquettes de martensite permet de négliger l'énergie d'interface devant l'énergie mécanique [4]; sa contribution n'interviendra donc pas dans la suite de notre travail.  $W_{\text{méc}}$  est définie comme étant la somme des deux termes suivants:

$W_e$  : énergie de déformation élastique due aux contraintes appliquées,

$W_B$  : énergie élastique bloquée due aux contraintes internes associées à la transformation.

Ces deux termes ont pour expressions [7,8]:

$$W_e = \frac{1}{2} \sum_{ij} E_{ij}^e \quad (10)$$

$$W_B = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^e(r) dv = -\frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^{Tr}(r) dv \quad (11)$$

$\sigma(r)$  est le tenseur des contraintes internes d'incompatibilité au point  $r$ ,  $\varepsilon^e(r)$  et  $\varepsilon^{Tr}(r)$  sont respectivement la déformation élastique et la déformation de transformation au point  $r$ .

Les deux phases, austénitique et martensitique, sont supposées à comportement élastique homogène et isotrope caractérisé par le tenseur compliance  $M$ . Ainsi, l'expression (6) devient:

$$\Delta G(\sum_{ij}, T, f_1^h) = B(T - M_s) f - \sum_{ij} E_{ij}^{Tr} - \frac{1}{2} \sum_{ij} M_{ijkl} \sum_{kl} - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^{Tr}(r) dv \quad (12)$$

On considère également la variante (h) comme une inclusion ellipsoïdale caractérisée par un tenseur d'Eschelby  $S_1^h$ , où la contrainte  $(\sigma_{ij})_1^h$  est homogène et définie par [5]:

$$\sigma_{ij}^h = C_{ijkl} \left( I_{klmn} - (S_{klmn})_1^h \right) \left( E_{mn}^{Tr} - (\varepsilon_{mn})_1^h \right) \quad (13)$$

$I$  et  $C$  sont respectivement le tenseur identité d'ordre quatre et le tenseur d'élasticité du matériau. Le milieu est considéré linéaire homogène et isotrope caractérisé par les constantes d'élasticité  $\lambda$ ,  $\mu$  et le coefficient de Poisson  $\nu$ . Le potentiel (12) prend la forme d'une fonctionnelle quadratique en  $f_1^h$  qui doit respecter les contraintes cinématiques suivantes :

$$f_1^h \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_h f_1^h \leq 1 \quad \text{dans chaque grain} \quad (14)$$

Ce potentiel s'écrit :

$$\begin{aligned} \Delta G(\sum_{ij}, T, f_1^h) = & B(T - M_s) \sum_I \left( \sum_h f_1^h \right) F^I - \frac{1+\nu}{2E} \sum_{ij} \sum_{ij} + \frac{\nu}{2E} \sum_{mm} \sum_{mm} - \sum_{ij} \sum_I \left( \sum_h (\varepsilon_{ij})_1^h f_1^h \right) F^I \\ & - \frac{1}{2} \sum_I \left[ \sum_h \left\{ \lambda \delta_{ij} \left( I_{kkmn} - (S_{kkmn})_1^h \right) \left( E_{mn}^{Tr} - (\varepsilon_{mn})_1^h \right) + 2\mu \left( I_{ijmn} - (S_{ijmn})_1^h \right) \left( E_{mn}^{Tr} - (\varepsilon_{mn})_1^h \right) \right\} (\varepsilon_{ij})_1^h f_1^h \right] F^I \end{aligned} \quad (15)$$

$\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker.

L'optimisation de cette fonctionnelle permet d'établir l'état de contrainte et de déformation du matériau pour lequel l'énergie libre de Gibbs est minimale. La méthode de résolution utilisée est celle du gradient conjugué. Elle consiste à encadrer le minimum par un intervalle  $[a, b]$  et à évaluer la fonctionnelle en un point intermédiaire  $x$ . On obtient ainsi un nouveau intervalle  $[a, x]$  ou  $[x, b]$ . Le

gradient déterminera si le prochain point à tester appartient au premier intervalle ou au second. Le processus itératif continue jusqu'à ce que ce dernier soit acceptablement petit [9].

### 3. APPLICATION DU MODELE

Pour un chargement thermomécanique donné, nous déterminons les variantes actives dans chaque grain ainsi que leurs fractions volumiques respectives. La déformation macroscopique de transformation est alors obtenue à partir de la relation (5).

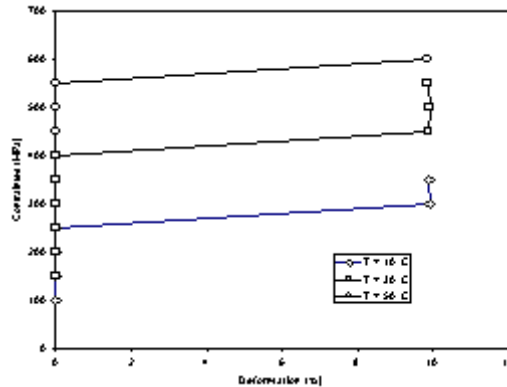
#### 3.1 Comportement thermomécanique du monocristal

Dans un premier temps, le monocristal est considéré comme étant monovariant et la variation de volume est négligée devant les autres termes dans l'énergie bloquée  $W_B$ . L'expression du potentiel correspondant à ce cas est

$$\begin{aligned} \Delta G(\Sigma_{ij}, T, f_I^h) = & B(T - M_s) f_I^h - \frac{1+\nu}{2E} \Sigma_{ij} \Sigma_{ij} + \frac{\nu}{2E} \Sigma_{mm} \Sigma_{mm} - \Sigma_{ij} g(\mathbf{R}_{ij})_I^h f_I^h \\ & - \mu \left\{ I_{ijmn} - (S_{ijmn})_I^h \right\} \left\{ (\epsilon_{mn})_I^h f_I^h - (\epsilon_{mn})_I^h \right\} g(\mathbf{R}_{ij})_I^h f_I^h \end{aligned} \quad (16)$$

Dans un second temps, le monocristal est considéré polyvariant, le potentiel s'écrit alors:

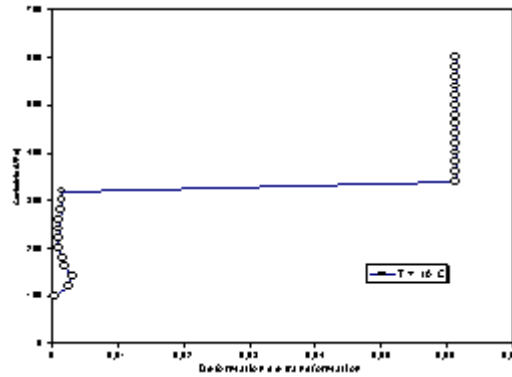
$$\begin{aligned} \Delta G(\Sigma_{ij}, T, f_I^h) = & B(T - M_s) \sum_h f_I^h - \frac{1+\nu}{2E} \Sigma_{ij} \Sigma_{ij} + \frac{\nu}{2E} \Sigma_{mm} \Sigma_{mm} - \Sigma_{ij} \sum_h (\epsilon_{ij})_I^h f_I^h \\ & - \frac{1}{2} \sum_h \left[ \lambda \delta_{ij} \left\{ I_{kkmn} - (S_{kkmn})_I^h \right\} + 2\mu \left\{ I_{ijmn} - (S_{ijmn})_I^h \right\} \right] \left\{ E_{mn}^{Tr} - (\epsilon_{mn})_I^h \right\} (\epsilon_{ij})_I^h f_I^h \end{aligned} \quad (17)$$



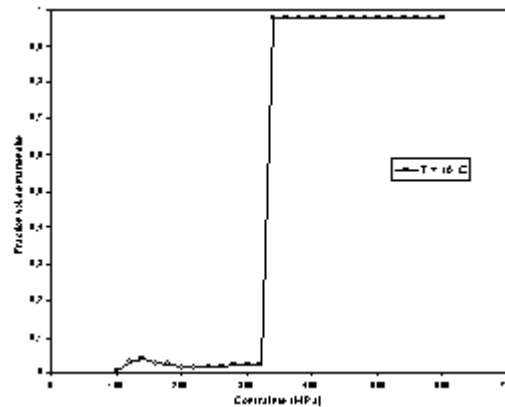
**Figure 1:** Influence de la température sur le comportement d'un monocristal CuZnAl sollicité en traction uniaxiale,  $B=0.23$  Mpa,  $M_s=-30^\circ\text{C}$  ; grain d'orientation ( $\Phi_1=3.11$  ;  $\Phi_2=73.22$  ;  $\Phi_3=335.88$ ).

Les résultats obtenus en simulant des essais de traction uniaxiale d'un monocristal (CuZnAl) dont les variantes sont considérées comme des inclusions ellipsoïdales d'axes (a,b,c) avec  $a=b$  et  $c/a=0.01$  de la

famille  $\bar{m}(0.165, 0.737, 0.655)$  et  $\bar{n}(0.182, 0.669, 0.721)$  d'amplitude de déplacement  $g = 0.23$  sont représentés sur les figures 1, 2 et 3.



**Figure 2:** Simulation numérique du comportement pseudoélastique du monocristal polyvariant sollicité en traction uniaxiale à  $T=10^{\circ}\text{C}$  ; grain d'orientation ( $\text{Ph}1=3.11$  ;  $\text{Phi}=73.22$  ;  $\text{Ph}2=335.88$ ).

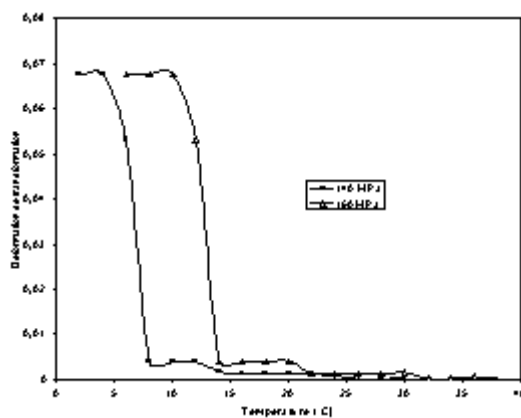


**Figure 3:** Simulation numérique de l'évolution de la fraction volumique totale de martensite en fonction de la contrainte appliquée pour un monocristal polyvariant d'orientation ( $\text{Ph}1=3.11$  ;  $\text{Phi}=73.22$  ;  $\text{Ph}2=335.88$ ).

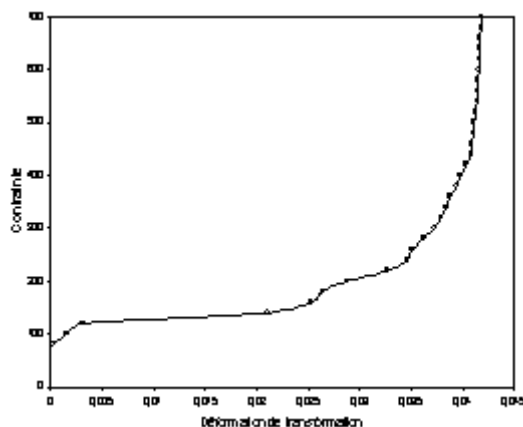
La température du début de la transformation est  $M_s = -30^{\circ}\text{C}$ , et la constante  $B = 0.23\text{MPa/K}$ .

### 3.2 Comportement thermomécanique du polycristal

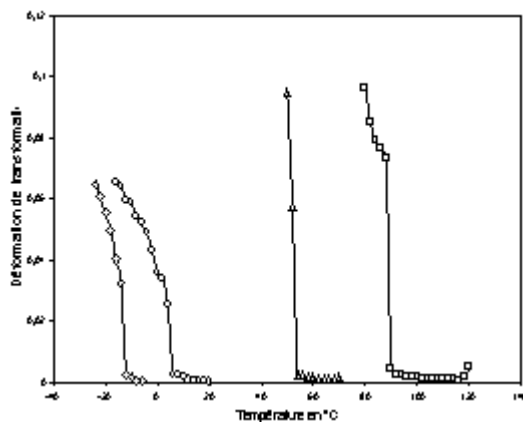
De même que précédemment, le polycristal est d'abord considéré monovariant, (une variante est considérée active par grain), et ensuite polyvariant. Les résultats représentés sur les figures 4, 5 et 6 ont été obtenus par minimisation du potentiel (15) pour un polycristal non texturé constitué de quinze grains.



**Figure 4:** Simulation numérique de la déformation de transformation d'un monocristal polyvariant subissant un essai de refroidissement à contraintes appliquées constantes.



**Figure 5:** Simulation numérique du comportement pseudoélastique d'un polycristal polyvariant (16 grains) soumis à un essai de traction uniaxiale à  $T=10^{\circ}\text{C}$ .



**Figure 6:** Simulation numérique de l'essai de refroidissement sous contraintes imposées constantes d'un polycristal polyvariant .

## 4. RESULTATS ET DISCUSSIONS

### 4.1 Monocristal

Pour un monocristal d'orientation ( $\varphi_1 = 3.11^\circ$ ,  $\varphi = 73.24^\circ$ ,  $\varphi_2 = 335.88^\circ$ ), les résultats obtenus en simulant des essais de traction uniaxiale pour différentes températures d'une part et le comportement du monocristal polyvariant d'autre part sont représentés respectivement sur les figures 1 et 2.

Ces résultats montrent l'existence "classique" du seuil en contrainte au-delà duquel la martensite se développe jusqu'à envahir tout le volume de l'échantillon. On note l'influence de l'interaction intervariantes qui se traduit par une pente d'écrouissage pratiquement nulle, comme le montre l'expérience [10,11] et établie récemment par Agouram et al. [12]; cet effet est dû à la faible contribution de certaines variantes en comparaison avec les plus favorablement orientées (par rapport aux directions de chargement). La déformation de la fin de la transformation (de l'ordre de 6%) reste cependant légèrement faible ( $\approx 8\%$ ) comparée à celle obtenue par l'expérience [13]. La simulation de l'essai de refroidissement du monocristal représenté dans la figure 3, montre que les températures du début et de la fin de la transformation ne coïncident plus du fait de l'interaction intervariante au sein d'un même grain, ce résultat est plus conforme à la réalité.

### 4.2 Polycristal

Nous avons également considéré un polycristal non texturé de quinze grains. Les résultats de la simulation d'un essai de traction uniaxiale à la température  $10^\circ\text{C}$  sont représentés sur la figure 5. Nous constatons que la contrainte de la fin de la transformation coïncide avec la valeur expérimentale ( $\approx 400$  MPa) [14]. Il en est de même pour la déformation de la fin de la transformation qui coïncide avec la valeur expérimentale ( $\approx 4\%$ ) [14]. La figure 6 représente les résultats de simulation d'un essai de refroidissement à contraintes imposées constantes. Elle souligne le fait que la déformation de la fin de la transformation dépend du niveau de la contrainte appliquée, ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux [15].

## 5. CONCLUSION

Dans ce travail, l'approche micromécanique utilisée nous a permis de mettre en évidence le rôle joué par les interactions entre les variantes de martensite au sein d'un même grain et le rôle joué par les interactions entre les variantes de martensite de grains différents. Ceci veut dire que nous avons tenu compte dans l'expression du potentiel pseudoélastique, des termes relatifs aux interactions intra et intergranulaires.

L'optimisation de ce potentiel, qui a permis de déterminer le comportement du matériau, a été réalisée en considérant comme uniformes les déformations de transformation locales et en négligeant l'énergie d'interface. Malgré ces approximations, ce travail fournit des résultats intéressants qui peuvent cependant être améliorés par la prise en compte des effets de dissipation négligés dans cette contribution.

## REFERENCES

1. Patoor E., Berveiller M., Hermès, Paris, (1990).
2. Warlimont H., Delaey L., Krishnan R. V., Tass H. J., Mater Sci, 9, p. 1536, (1974).



3. Saburi T., Wayman C. M., Tanaka K., Nenno S., *Acta Metall*, 28, p. 15, (1980).
4. Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M. *Arch. Mech*, 40, pp 775, (1988).
5. Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M., *Acta Metall*, 11, p. 35, (1987).
6. Rice J. R., *J.Mech. Phys. Solids*, 19, p. 433, (1971).
7. Mura T. *Martinus Nijhoff*, The Hague, (1987).
8. François D., Pineau A., Zaoui A., Hermès, Paris, (1991).
9. William H., Brian P., Saul A., William T. *Numerical Recipes*.
10. Lu li, Aernoudt E, Delaey L., *Scripta. Metall*, 22, pp. 1435-1440, (1988).
11. Muller I, XU H., *Acta meta. Mater*, 39, 3, pp. 263-271, (1991).
12. Agouram S., Abdous H., Bensalah M. O., *European Physical Journal, Applied Physics*. 1, pp. 341-346, (1998).
13. Bensalah M. O. Thèse d'état, Université Md. V, Rabat, (1992).
14. Abdous L., Sebbani M. J. E., Bensalah M. O., *Rev. de métall CIT/Science et génie des matériaux*, pp. 243-249, (1998).
15. Humbeeck J Van, Delaey L., *Journal de Physique, colloque C5, supplément au numéro 10, Tome 42*, p. 1009, (1981).