

Mécanique et changement de phase à l'état solide

Les changements de phase ne sont pas l'apanage des transitions solide–liquide ou liquide–gaz. De tels changements peuvent avoir lieu tout en restant à l'état solide. Un arrangement périodique particulier des atomes dans un cristal correspond alors à la notion de phase. Par exemple, les atomes de fer pur à la température et à la pression ambiantes sont ordonnés dans une structure dite cubique centrée (phase *ferritique*) caractérisée par une maille élémentaire en forme de cube dont tous les sommets et le centre sont occupés par un atome de fer. A 912°C, à la pression ambiante, la ferrite se transforme en *austénite* dont la structure ordonnée est cubique à faces centrées, c'est-à-dire que les atomes de fer occupent désormais les sommets et les centres des faces du cube. Ce changement de structure s'accompagne d'un changement du volume du cube élémentaire et des distances inter-atomiques. Il s'agit d'une déformation de transformation. Dans les métaux et alliages, ces changements de phase se produisent en général avec une certaine cinétique de sorte que la phase initiale β ne se transforme pas instantanément et en masse en la nouvelle phase α . Au contraire, une multitude de précipités de phase α aux formes variées (sphériques, en plaquettes ou cubiques, comme sur la figure 1) se forment au sein de la matrice β . A la fin de la transformation, la phase α occupe le domaine Ω_α , de volume V_α , tandis que la phase résiduelle occupe le domaine Ω_β , au sein du solide Ω de volume V . On appelle $\phi = V_\alpha/V$ la fraction volumique de phase α formée.

La phase α est le siège d'une déformation libre $\underline{\varepsilon}^*$, appelée déformation de transformation. La déformation de transformation est prise nulle¹ dans la phase β . La déformation totale dans la phase α se décompose en une partie élastique et une partie due à la déformation de transformation :

$$\underline{\varepsilon}_\alpha = \underline{\varepsilon}_\alpha^e + \underline{\varepsilon}^* \quad (1)$$

tandis que la déformation au sein du domaine β est purement élastique. La déformation de transformation a le même statut de déformation libre que la déformation thermique en thermoélasticité. A ce titre, les déformations de transformation peuvent provoquer l'apparition de contraintes locales en raison des possibles incompatibilités de déformation entre phases. La déformation d'origine thermique, quant à elle, n'est pas considérée dans ce problème car on se place dans le cas isotherme à la température de transformation.

L'objectif du problème est d'estimer les contraintes qui se développent dans un solide élastique lorsqu'une transformation de phase $\beta \rightarrow \alpha$ se produit. Deux morphologies typiques sont considérées et conduisent à des distributions de contraintes internes différentes.

Dans tout le problème, on se place dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations, dans le cas statique. Le comportement élastique des deux phases est isotrope. Les propriétés élastiques des phases sont notées $E_\alpha, \nu_\alpha, \kappa_\alpha, \mu_\alpha, E_\beta, \nu_\beta, \kappa_\beta, \mu_\beta$. La déformation de transformation de la phase α est sphérique :

$$\underline{\varepsilon}^* = \varepsilon^* \mathbf{1}$$

On suppose qu'aucun phénomène de glissement ou de fissuration ne se produit aux interfaces entre les phases.

¹Cette hypothèse ne réduit pas la généralité du problème étudié. Si la phase β possède une déformation de transformation $\varepsilon_\beta^* \neq 0$, les expressions des contraintes calculées dans ce problème sont encore valables à condition de remplacer ε^* par $\varepsilon_\alpha^* - \varepsilon_\beta^*$, grâce à un changement de configuration initiale adéquat.

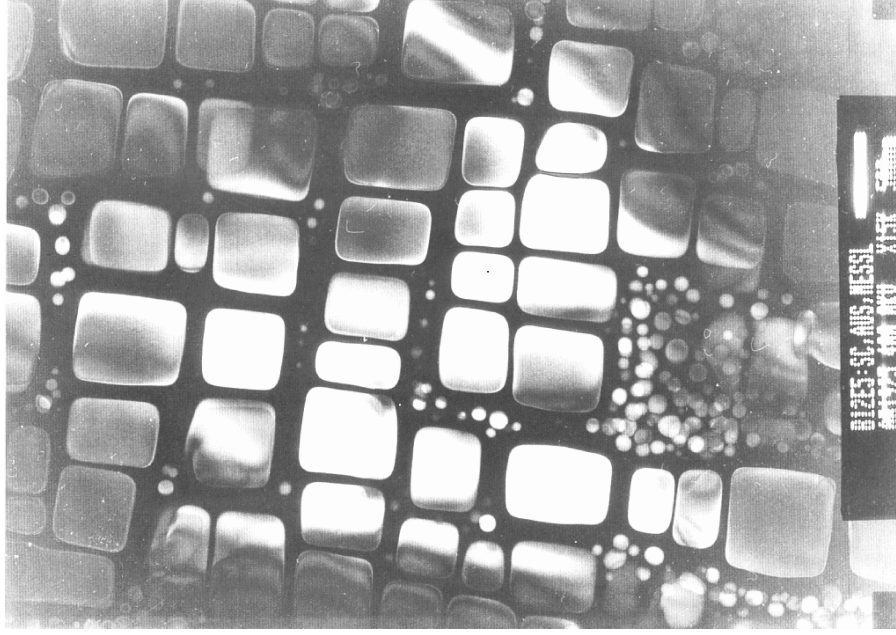


FIG. 1 – Microstructure biphase d’un superalliage à base de nickel vue au microscope électronique à transmission. On distingue des précipités carrés et de plus petits précipités sphériques (en blanc et en gris) au sein d’une matrice en noir. La fraction volumique de phase blanche/grise est de 68%. L’échelle est indiquée par la barre blanche verticale (à droite) qui mesure 500 nm.

1 Morphologie lamellaire

On considère le cas où les phases α et β apparaissent sous la forme de couches alternées d’épaisseurs respectives h_α et h_β comme sur la figure 2. On note $h = h_\alpha + h_\beta$.

L’alternance de couches est supposée infinie (périodique) dans la direction 2 et chaque couche est illimitée dans les directions 1 et 3. Dans cette section, le corps Ω est supposé libre de tout effort appliqué. Les symétries de cette répartition des phases assurent qu’un plan d’équation $X_1 = X_0$ se transforme en un plan parallèle. Il en va de même des plans d’équations $X_2 = X_0$ et $X_3 = X_0, \forall X_0$.

1.1 Contraintes et déformations résiduelles

Justifier que l’on recherche des déformations et contraintes homogènes dans chaque phase, de la forme :

$$[\underline{\varepsilon}_\alpha] = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2^\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\varepsilon}_\beta] = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2^\beta & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$[\underline{\sigma}_\alpha] = \begin{bmatrix} \sigma_\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_\alpha \end{bmatrix}, \quad [\underline{\sigma}_\beta] = \begin{bmatrix} \sigma_\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_\beta \end{bmatrix} \quad (3)$$

où $\varepsilon_1, \varepsilon_2^\alpha, \varepsilon_2^\beta, \sigma_\alpha$ et σ_β sont les inconnues du problème.

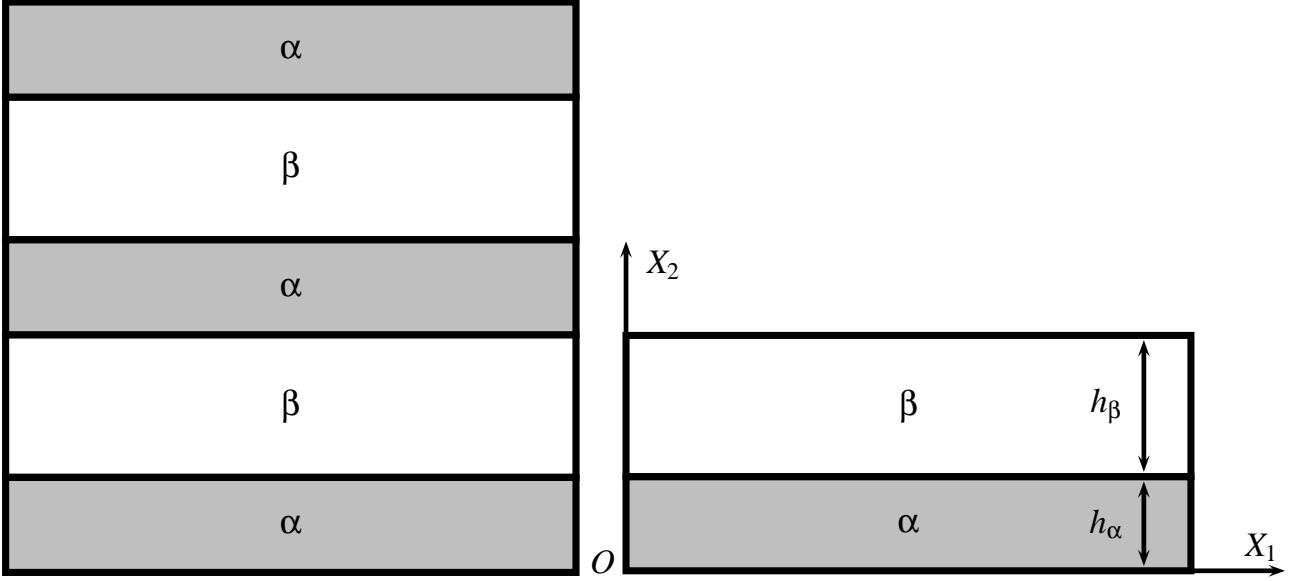


FIG. 2 – Multi-couches constitué d’une alternance de phases α et β (à gauche); motif élémentaire permettant d’étudier le comportement du multi-couches (à droite).

Toutes les couches de phase α (resp. β) sont le siège des mêmes contraintes $\underline{\sigma}_\alpha$ (resp. $\underline{\sigma}_\beta$) homogènes, de la forme précédente. Il est donc suffisant de se ramener à l’étude du motif élémentaire de la figure 2 à droite, où le système de coordonnées choisi, cartésien orthonormé, est indiqué.

Justifier le terme de *contraintes résiduelles*.

L’homogénéité des contraintes et des déformations assure que les équations d’équilibre, en l’absence de forces de volume et dans le cas statique, et les équations de compatibilité sont satisfaites. Chaque plan d’équation $X_1 = X_0$, donc perpendiculaire à l’interface α/β se transforme en un plan parallèle, sans discontinuité à l’interface. Cela implique que la déformation ε_{11} est la même pour α et β . Le même raisonnement s’applique pour les plans $X_3 = X_0$ de sorte que $\varepsilon_{33}^\alpha = \varepsilon_{33}^\beta$. Pour des raisons de symétrie, les directions 1 et 3 sont indiscernables de sorte que $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{11}$, noté ε_1 .

Les plans parallèles à l’interface se transforment en des plans parallèles mais les déformations ε_{22} peuvent différer d’une phase à l’autre tout en respectant la continuité du déplacement à l’interface.

La cellule élémentaire de la figure 2 est un parallélépipède qui se transforme en un parallélépipède de sorte qu’aucun cisaillement $\varepsilon_{12}, \varepsilon_{23}$ ou ε_{31} ne peut apparaître. Cette cinématique est compatible avec le fait que la dilatation $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$ de la phase α est supposée isotrope. L’élasticité isotrope implique que les tenseurs de contraintes sont eux aussi décrits par des matrices diagonales, avec $\sigma_{11} = \sigma_{33}$. Le corps est libre d’efforts appliqués à l’infini. Cette condition est remplie en particulier en imposant :

$$\underline{\sigma} \cdot \underline{e}_2 = 0 \quad (4)$$

Cette condition implique que σ_{22} doit s’annuler. Or cette contrainte se transmet à l’interface :

$$\underline{\sigma}^\alpha \cdot \underline{e}_2 = \underline{\sigma}^\beta \cdot \underline{e}_2 = 0 \implies \sigma_{22}^\alpha = \sigma_{22}^\beta = 0 \quad (5)$$

Si l'on demande en outre que $\underline{\sigma} \cdot \underline{e}_1 = 0$, on obtient $\sigma_{11} = 0$ dans les deux phases de sorte qu'aucune contrainte ne peut se développer. On va donc satisfaire la condition d'absence d'efforts surfaciques appliqués à l'infini, au sens de Saint-Venant, en exigeant, dans la section suivante, que la résultante de ces efforts soit nulle sur le bord droit du motif élémentaire. On admet donc l'existence de contraintes $\sigma_{11}^\alpha, \sigma_{11}^\beta$ non nulles. En réalité il y aura un effet de bord là où les couches débouchent à la surface, avec des contraintes non homogènes. Il s'établit donc un champ de contraintes biaxiales au sein de l'empilement.

Il s'agit de contraintes internes ou résiduelles, à divergence et à résultante nulles.

1.2 Relations entre les contraintes

Montrer que les composantes σ_α et σ_β vérifient les deux relations suivantes :

$$h_\alpha \sigma_\alpha + h_\beta \sigma_\beta = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\sigma_\alpha}{M_\alpha} - \frac{\sigma_\beta}{M_\beta} = -\varepsilon^* \quad (7)$$

avec

$$M_\alpha = \frac{E_\alpha}{1 - \nu_\alpha}, \quad M_\beta = \frac{E_\beta}{1 - \nu_\beta} \quad (8)$$

Calculer alors ces contraintes.

En déduire enfin les déformations $\varepsilon_1, \varepsilon_2^\alpha, \varepsilon_2^\beta$.

On calcule la résultante des efforts sur le bord droit de la cellule élémentaire de la figure 2, prise d'épaisseur unitaire :

$$\int_S \sigma_{11} dS = \int_{S_\alpha} \sigma_\alpha dS + \int_{S_\beta} \sigma_\beta dS = h_\alpha \sigma_\alpha + h_\beta \sigma_\beta \quad (9)$$

Cette résultante doit être nulle en l'absence d'efforts appliqués, ce qui conduit à l'équation (6). Les relations d'élasticité isotrope peuvent être appliquées à partir de cet état de contraintes :

$$\varepsilon_1^\beta = \frac{1 + \nu_\beta}{E_\beta} \sigma_\beta - \frac{\nu_\beta}{E_\beta} 2\sigma_\beta = \frac{1 - \nu_\beta}{E_\beta} \sigma_\beta = \frac{\sigma_\beta}{M_\beta} \quad (10)$$

Dans la phase α , il faut introduire aussi la déformation de transformation :

$$\varepsilon_1^\alpha = \varepsilon^* + \frac{1 + \nu_\alpha}{E_\alpha} \sigma_\alpha - \frac{\nu_\alpha}{E_\alpha} 2\sigma_\alpha = \varepsilon^* + \frac{1 - \nu_\alpha}{E_\alpha} \sigma_\alpha = \varepsilon^* + \frac{\sigma_\alpha}{M_\alpha} \quad (11)$$

La compatibilité des déformations exige que $\varepsilon_1^\alpha = \varepsilon_1^\beta$, ce qui conduit à l'équation (7) recherchée. La résolution du système d'équations (6) et (7) conduit aux expressions suivantes des contraintes :

$$\sigma_\alpha = -\frac{\varepsilon^*}{h_\alpha} \left(\frac{1}{h_\alpha M_\alpha} + \frac{1}{h_\beta M_\beta} \right)^{-1}, \quad \sigma_\beta = \frac{\varepsilon^*}{h_\beta} \left(\frac{1}{h_\alpha M_\alpha} + \frac{1}{h_\beta M_\beta} \right)^{-1} \quad (12)$$

Les déformations en découlent :

$$\varepsilon_1 = \frac{\sigma_\beta}{M_\beta} = \varepsilon^* \left(1 + \frac{h_\beta M_\beta}{h_\alpha M_\alpha} \right)^{-1} \quad (13)$$

$$\varepsilon_2^\beta = -\frac{2\nu_\beta}{E_\beta} \sigma_\beta, \quad \varepsilon_2^\alpha = \varepsilon^* - \frac{2\nu_\alpha}{E_\alpha} \sigma_\alpha \quad (14)$$

1.3 Cadre infinitésimal

Indiquer sous quelles conditions la solution établie précédemment satisfait les hypothèses des petites perturbations.

Les transformations sont homogènes et conduisent à des champs de déplacements affines. Lors de l'intégration, une rotation homogène de l'ensemble de l'empilement apparaît. Cette rotation doit rester infinitésimale. Les déformations, quant à elles, restent infinitésimales tant que

$$|\varepsilon^*| \left(1 + \frac{h_\beta M_\beta}{h_\alpha M_\alpha} \right)^{-1} \ll 1 \quad (15)$$

La condition porte donc fondamentalement sur la déformation de transformation ε^* qui doit donc rester d'amplitude suffisamment petite.

1.4 Energie élastique

Montrer que la moyenne de l'énergie élastique du multi-couches se met sous la forme

$$W^e = \frac{9}{2} \phi (1 - \phi) \kappa^* \varepsilon^{*2} \quad (16)$$

avec

$$\frac{1}{\kappa^*} = \frac{1 - \phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3(1 - \phi)}{4\mu_\alpha} + \frac{3\phi}{4\mu_\beta} \quad (17)$$

où $\phi = h_\alpha/h$ est la fraction volumique de phase α dans le mélange. Les coefficients κ_α et κ_β sont les modules de compressibilité respectifs des deux phases, et μ_α, μ_β leurs modules de cisaillement.

L'énergie élastique moyenne calculée sur le motif élémentaire de longueur et d'épaisseur unitaires, vaut :

$$\begin{aligned} W^e &= \frac{1}{h} \int_0^h \frac{1}{2} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^e dX_2 \\ &= \frac{1}{2h} \int_0^{h_\alpha} \boldsymbol{\sigma}_\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha^e dX_2 + \frac{1}{2h} \int_{h_\alpha}^{h_\alpha+h_\beta} \boldsymbol{\sigma}_\beta : \boldsymbol{\varepsilon}_\beta^e dX_2 \\ &= \frac{h_\alpha}{2h} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_\alpha : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\alpha^e + \frac{h_\beta}{2h} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_\beta : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\beta^e \\ &= \frac{h_\alpha}{h} \sigma_\alpha (\varepsilon_1 - \varepsilon^*) + \frac{h_\beta}{h} \sigma_\beta \varepsilon_1 \\ &= -\frac{h_\alpha}{h} \sigma_\alpha \varepsilon^* \end{aligned} \quad (18)$$

$$= \varepsilon^{*2} \left(\frac{h}{h_\alpha M_\alpha} + \frac{h}{h_\beta M_\beta} \right)^{-1} \quad (19)$$

$$= \varepsilon^{*2} \left(\frac{1}{\phi M_\alpha} + \frac{1}{(1 - \phi) M_\beta} \right)^{-1} = \phi (1 - \phi) \varepsilon^{*2} \left(\frac{1 - \phi}{M_\alpha} + \frac{\phi}{M_\beta} \right)^{-1} \quad (20)$$

Remarquons alors l'identité suivante entre les différents modules d'élasticité :

$$\frac{1 - \nu}{E} = \frac{1}{3} \frac{1 + \nu}{E} + \frac{2}{3} \frac{1 - 2\nu}{E} = \frac{1}{6\mu} + \frac{2}{9\kappa} \quad (21)$$

Par suite,

$$\frac{1-\phi}{M_\alpha} + \frac{\phi}{M_\beta} = (1-\phi)\left(\frac{1}{6\mu_\alpha} + \frac{2}{9\kappa_\alpha}\right) + \phi\left(\frac{1}{6\mu_\beta} + \frac{2}{9\kappa_\beta}\right) = \frac{2}{9} \left(\frac{1-\phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3(1-\phi)}{4\mu_\alpha} + \frac{3\phi}{4\mu_\beta} \right) = \frac{2}{9\kappa^*}$$

ce qui conduit à l'expression annoncée (17).

Les contraintes (12) s'écrivent alors sous la forme plus concise :

$$\sigma_\alpha = -\frac{9}{2}(1-\phi)\kappa^*\varepsilon^*, \quad \sigma_\beta = \frac{9}{2}\phi\kappa^*\varepsilon^* \quad (22)$$

1.5 Déformation moyenne

Si la phase α se déformait librement sans interagir élastiquement avec la phase β , la déformation moyenne de l'ensemble, ainsi désolidarisé, serait $\phi\varepsilon^*\mathbf{1}$. Il en va autrement dans le cas du multi-couches avec interface parfaite, c'est ce que l'on va établir dans cette section.

Montrer d'abord que la variation relative de volume du motif élémentaire bicouche est

$$3\phi\varepsilon^* \left(1 + \kappa^*(1-\phi) \left(\frac{1}{\kappa_\beta} - \frac{1}{\kappa_\alpha} \right) \right)$$

Commenter.

Montrer ensuite, en calculant le déviateur des déformations totales moyennes, que le multi-couches ne se contracte (ou dilate) pas de la même façon selon les directions 1 et 2. De quelle propriété mécanique dépend le signe de la composante selon la direction 1 du déviateur de la déformation moyenne ?

La variation relative de volume dans chaque phase est donnée par la trace du tenseur des déformations. Cette variation moyenne pour l'ensemble du biphasé s'obtient en calculant la moyenne de la trace des déformations :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{V} &= 2\varepsilon_1 + \phi\varepsilon_\alpha + (1-\phi)\varepsilon_\beta \\ &= \phi\varepsilon^* + \sigma_\beta \left(\frac{2}{M_\beta} + (1-\phi) \left(\frac{2\nu_\alpha}{E_\alpha} - \frac{2\nu_\beta}{E_\beta} \right) \right) \\ &= \phi\varepsilon^* + \frac{9}{2}\phi\varepsilon^*\kappa^* \left(\frac{2}{M_\beta} + (1-\phi) \left(\frac{2\nu_\alpha}{E_\alpha} - \frac{2\nu_\beta}{E_\beta} \right) \right) \\ &= \phi\varepsilon^* \left(3 - 2 + \frac{9}{2}\kappa^* \left(\frac{2}{M_\beta} + (1-\phi) \left(\frac{2\nu_\alpha}{E_\alpha} - \frac{2\nu_\beta}{E_\beta} \right) \right) \right) \\ &= \phi\varepsilon^* \left(3 + 9\kappa^*(1-\phi) \left(\frac{1-2\nu_\beta}{E_\beta} - \frac{1-2\nu_\alpha}{E_\alpha} \right) \right) \\ &= 3\phi\varepsilon^* \left(1 + (1-\phi)\kappa^* \left(\frac{1}{\kappa_\beta} - \frac{1}{\kappa_\alpha} \right) \right) \end{aligned} \quad (23)$$

On voit que la correction de variation de volume est entièrement due à la différence des modules de compressibilité des deux phases. Cette correction peut être négative ou positive selon le signe de cette différence. Si les modules de compressibilité sont égaux, alors la variation de volume

est la même que si les deux phases étaient indépendantes.
Le déviateur des déformations est défini comme

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{\alpha}^{\text{dev}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_{\alpha} - \frac{\text{trace } \underline{\underline{\varepsilon}}_{\alpha}}{3} \underline{\underline{\mathbf{1}}}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}}_{\beta}^{\text{dev}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_{\beta} - \frac{\text{trace } \underline{\underline{\varepsilon}}_{\beta}}{3} \underline{\underline{\mathbf{1}}}$$

Le déviateur moyen vaut

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{dev}} = \phi \underline{\underline{\varepsilon}}_{\alpha}^{\text{dev}} + (1 - \phi) \underline{\underline{\varepsilon}}_{\beta}^{\text{dev}}$$

Dans le cas présent, on trouve

$$[\underline{\underline{\varepsilon}}_{\alpha}^{\text{dev}}] = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2^{\alpha}}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad [\underline{\underline{\varepsilon}}_{\beta}^{\text{dev}}] = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2^{\beta}}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (24)$$

avec $\varepsilon_1 - \varepsilon_2^{\alpha} = \frac{\sigma_{\alpha}}{2\mu_{\alpha}}$ et $\varepsilon_1 - \varepsilon_2^{\beta} = \frac{\sigma_{\beta}}{2\mu_{\beta}}$. On en déduit la première composante déviatorique moyenne :

$$\varepsilon_{11}^{\text{dev}} = \frac{3}{2} \phi (1 - \phi) \kappa^* \varepsilon^* \left(\frac{1}{2\mu_{\beta}} - \frac{1}{2\mu_{\alpha}} \right) \quad (25)$$

les autres composantes étant $\varepsilon_{22}^{\text{dev}} = -2\varepsilon_{11}^{\text{dev}}$, $\varepsilon_{33}^{\text{dev}} = \varepsilon_{11}^{\text{dev}}$. C'est donc la différence de module de cisaillement qui règle l'anisotropie de déformation du multi-couches entre les directions 1 et 2. Si la phase β est moins rigide que la phase α et pour une déformation de transformation $\varepsilon^* > 0$, alors on a une dilatation dans le sens 1 et une contraction selon 2 (en plus de l'expansion isotrope calculée précédemment).

2 Assemblage de sphères concentriques

La phase α peut aussi se développer sous forme d'inclusions au sein d'une matrice β . On considère alors un motif élémentaire constitué d'un noyau sphérique de phase α , de rayon r_{α} et d'une coquille de phase β , de rayon r_{β} , comme sur la figure 3. Le rapport des rayons est lié à la fraction volumique ϕ de la phase α :

$$\frac{r_{\alpha}^3}{r_{\beta}^3} = \phi \quad (26)$$

Pour obtenir une fraction volumique visée de phase α , on peut imaginer une distribution dans l'espace de sphères concentriques élémentaires sans recouvrement. Les assemblages élémentaires sont de rayon extérieur variable, le rayon intérieur étant lié par (26), et sont tangents deux à deux. Une illustration de ce que pourrait être une telle répartition² est donnée sur la figure 3.

Le noyau du motif de sphères concentriques est constitué de la phase α qui subit la déformation de transformation $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \varepsilon^* \underline{\underline{\mathbf{1}}}$, comme dans la partie précédente. Les propriétés élastiques des phases sont comme indiquées dans la première partie. Le motif élémentaire étudié est libre de tout effort extérieur surfacique ou volumique appliqué.

²De tels assemblages ont été proposés par (Hashin, 1962) pour l'étude des propriétés des matériaux hétérogènes.

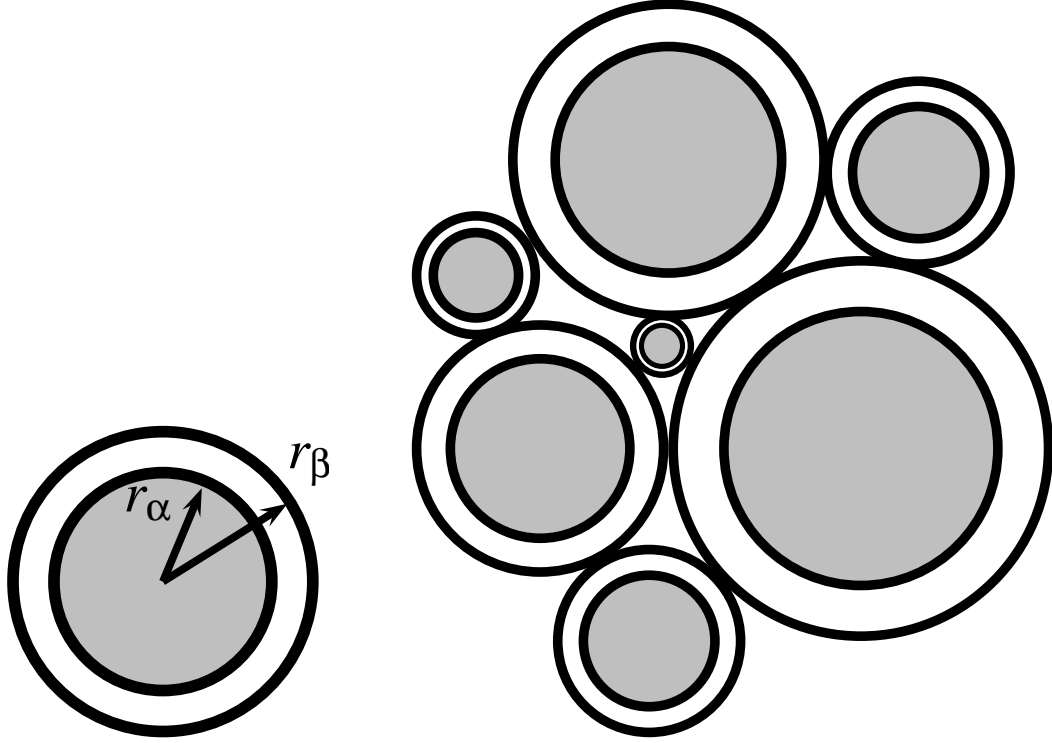


FIG. 3 – Assemblage élémentaire de sphères concentriques (à gauche). La phase α est en gris et la phase β en blanc. L’assemblage de Hashin représenté à droite correspond à un arrangement de motifs élémentaires sphériques concentriques de rayon extérieur variable, tangents deux à deux, les centres de ces sphères étant situés sur le même plan. Les disques concentriques remplissent le plan, de manière fractale, mais ils n’ont pas pu être tous représentés. L’empilement considéré dans le problème correspond au cas tridimensionnel non représenté ici. On peut aussi imaginer de tels arrangements de cylindres concentriques.

2.1 Champs des déplacements, déformations et contraintes

On propose une résolution par la méthode des déplacements. On choisit un système de coordonnées sphériques. La symétrie sphérique du problème invite à rechercher la seule composante non nulle de déplacement, à savoir le déplacement radial, $u_r(r)$. On note respectivement $u_r^\alpha(r)$ et $u_r^\beta(r)$ le déplacement radial dans les phases α et β .

Mettre en évidence l’équation différentielle régissant $u_r(r)$.

Trouver la forme générale de la solution dans chacune des phases.

Donner les expressions des contraintes et déformations faisant intervenir les constantes d’intégration.

Un champ de déplacement $\underline{\mathbf{u}} = u_r(r)\underline{\mathbf{e}}_r$ produit le champ des déformations

$$\varepsilon_{rr} = \frac{du_r}{dr}, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u_r}{r}$$

les autres composantes étant nulles. En vertu des lois de l’élasticité isotrope, ces déformations produisent les contraintes suivantes :

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}}_\beta = \lambda_\beta(\text{trace } \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_\beta)\underline{\mathbf{1}} + 2\mu_\beta\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}_\beta \quad (27)$$

$$\sigma_{rr}^\beta = (\lambda_\beta + 2\mu_\beta) \frac{du_r^\beta}{dr} + 2\lambda_\beta \frac{u_r^\beta}{r}, \quad \sigma_{\theta\theta}^\beta = \sigma_{\varphi\varphi}^\beta = \lambda_\beta \frac{du_r^\beta}{dr} + 2(\lambda_\beta + \mu_\beta) \frac{u_r^\beta}{r} \quad (28)$$

Les équations d'équilibre, en l'absence de forces de volume et dans le cas statique, se résument à

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{2}{r}(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}) = 0 \quad (29)$$

En insérant les expressions précédentes des composantes des contraintes pour la phase β , on obtient l'équation différentielle suivante :

$$(\lambda_\alpha + 2\mu_\alpha) \left(\frac{d^2 u_r^\beta}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_r^\beta}{dr} - 2 \frac{u_r^\beta}{r^2} \right) = 0 \quad (30)$$

dont une forme équivalente est

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{du_r^\beta}{dr} + \frac{2}{r} u_r^\beta \right) = 0 \quad (31)$$

Les solutions de cette équation sont de la forme

$$u_r^\beta(r) = A_\beta r + \frac{B}{r^2} \quad (32)$$

Dans l'inclusion de phase α , il ne faut pas oublier la déformation de transformation :

$$\underline{\sigma}_\alpha = \lambda_\alpha (\text{trace } \underline{\varepsilon}_\alpha - \text{trace } \underline{\varepsilon}^*) \underline{\mathbf{1}} + 2\mu_\alpha (\underline{\varepsilon}_\alpha - \underline{\varepsilon}^*) \quad (33)$$

$$\sigma_{rr}^\alpha = (\lambda_\alpha + 2\mu_\alpha) \frac{du_r^\alpha}{dr} + 2\lambda_\alpha \frac{u_r^\alpha}{r} - (3\lambda_\alpha + 2\mu_\alpha) \varepsilon^*, \quad \sigma_{\theta\theta}^\alpha = \sigma_{\varphi\varphi}^\alpha = \lambda_\alpha \frac{du_r^\alpha}{dr} + (\lambda_\alpha + \mu_\alpha) \frac{u_r^\alpha}{r} - (3\lambda_\alpha + 2\mu_\alpha) \varepsilon^* \quad (34)$$

Toutefois, il s'avère que le déplacement u_r^α vérifie finalement la même équation différentielle (31). La solution est donc de la forme (32), à ceci près que le terme en $1/r^2$ est nécessairement nul pour éviter une singularité peu plausible du déplacement en $r = 0$:

$$u_r^\alpha(r) = A_\alpha r \quad (35)$$

Il s'ensuit que les déformations et les contraintes sont sphériques dans l'inclusion :

$$\underline{\varepsilon}_\alpha = A_\alpha \underline{\mathbf{1}}, \quad \underline{\sigma}_\alpha = 3\kappa_\alpha (A_\alpha - \varepsilon^*) \underline{\mathbf{1}} \quad (36)$$

Au contraire, les composantes radiales et orthoradiales diffèrent dans la matrice :

$$\underline{\varepsilon}_\beta = \left(A_\beta - \frac{2B}{r^3} \right) \underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + \left(A_\beta + \frac{B}{r^3} \right) (\underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta + \underline{e}_\varphi \otimes \underline{e}_\varphi) \quad (37)$$

$$\underline{\sigma}_\beta = \left(3\kappa_\beta A_\beta - 4\mu_\beta \frac{B}{r^3} \right) \underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + \left(3\kappa_\beta A_\beta + 2\mu_\beta \frac{B}{r^3} \right) (\underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta + \underline{e}_\varphi \otimes \underline{e}_\varphi) \quad (38)$$

2.2 Conditions aux limites et d'interface; cas du fer ou de l'acier (ferrite/austénite)

A l'aide des conditions en $r = r_\alpha$ et en $r = r_\beta$, déterminer toutes les constantes d'intégration apparues lors de la résolution précédente.

Tracer les profils de déformations et de contraintes en fonction de r au sein de l'assemblage, dans le cas de l'austénite et de la ferrite dans le fer (ou plus généralement l'acier) pour lesquelles les modules d'élasticité peuvent être considérés comme identiques pour les deux phases. On prendra les valeurs suivantes :

$$E = 200000 \text{ MPa}, \quad \nu = 0.3, \quad \phi = 0.1, \quad \varepsilon^* = 0.01 \quad (39)$$

Commenter les discontinuités possibles à l'interface.

Les conditions aux limites et à l'interface sont les suivantes :

- *Continuité du déplacement en $r = r_\alpha$* , ce qui implique que

$$A_\alpha r_\alpha = A_\beta r_\alpha + \frac{B}{r_\alpha^2} \quad (40)$$

- *Condition de surface libre en $r = r_\beta$* . Le vecteur contrainte y est donc nul de sorte que $\sigma_{rr}^\beta = 0$. On en déduit la relation :

$$3\kappa_\beta A_\beta - \frac{4\mu_\beta}{r_\beta^3} B = 0 \quad (41)$$

- *Continuité du vecteur-contrainte en $r = r_\alpha$* . Cela signifie que

$$\underline{\sigma}_\alpha \cdot \underline{e}_r = \underline{\sigma}_\beta \cdot \underline{e}_r$$

dont on déduit la relation suivante :

$$3\kappa_\alpha (A_\alpha - \varepsilon^*) = 3\kappa_\beta A_\beta - \frac{4\mu_\beta}{r_\alpha^3} B \quad (42)$$

De l'équation (41), on tire

$$B = \frac{r_\beta^3}{4\mu_\beta} 3\kappa_\beta A_\beta \quad (43)$$

De l'équation (40), on tire alors $A_\alpha = A_\beta \left(1 + \frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} \frac{3\kappa_\beta}{4\mu_\beta}\right)$.

Ces relations sont finalement substituées dans la condition (42) pour fournir :

$$A_\beta \left(\kappa_\alpha \left(1 + \frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} \frac{3\kappa_\beta}{4\mu_\beta}\right) + \kappa_\beta \left(\frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} - 1\right) \right) = \kappa_\alpha \varepsilon^* \quad (44)$$

Enfin, les constantes recherchées sont :

$$A_\alpha = \varepsilon^* \left(1 + \frac{\kappa_\beta \frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} - 1}{\kappa_\alpha \frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} \frac{3\kappa_\beta}{4\mu_\beta} + 1} \right)^{-1} \quad (45)$$

$$A_\beta = \varepsilon^* \left(1 + \frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} \frac{3\kappa_\beta}{4\mu_\beta} + \frac{\kappa_\beta}{\kappa_\alpha} \left(\frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} - 1\right) \right)^{-1} \quad (46)$$

$$B = \varepsilon^* r_\alpha^3 \left(1 + \frac{r_\alpha^3}{r_\beta^3} \frac{4\mu_\beta}{3\kappa_\beta} + \frac{4\mu_\beta}{3\kappa_\alpha} \left(1 - \frac{r_\alpha^3}{r_\beta^3}\right) \right)^{-1} \quad (47)$$

Les profils de déformations et de contraintes ont été tracés sur la figure 4. La composante de déformation $\varepsilon_{\theta\theta}$ doit être continue pour des raisons de compatibilité à l'interface. Par contre, la composante ε_{rr} est discontinue. En raison de la continuité du vecteur–contrainte à l'interface, la composante σ_{rr} est continue. Il n'en va pas de même pour $\sigma_{\theta\theta}$.

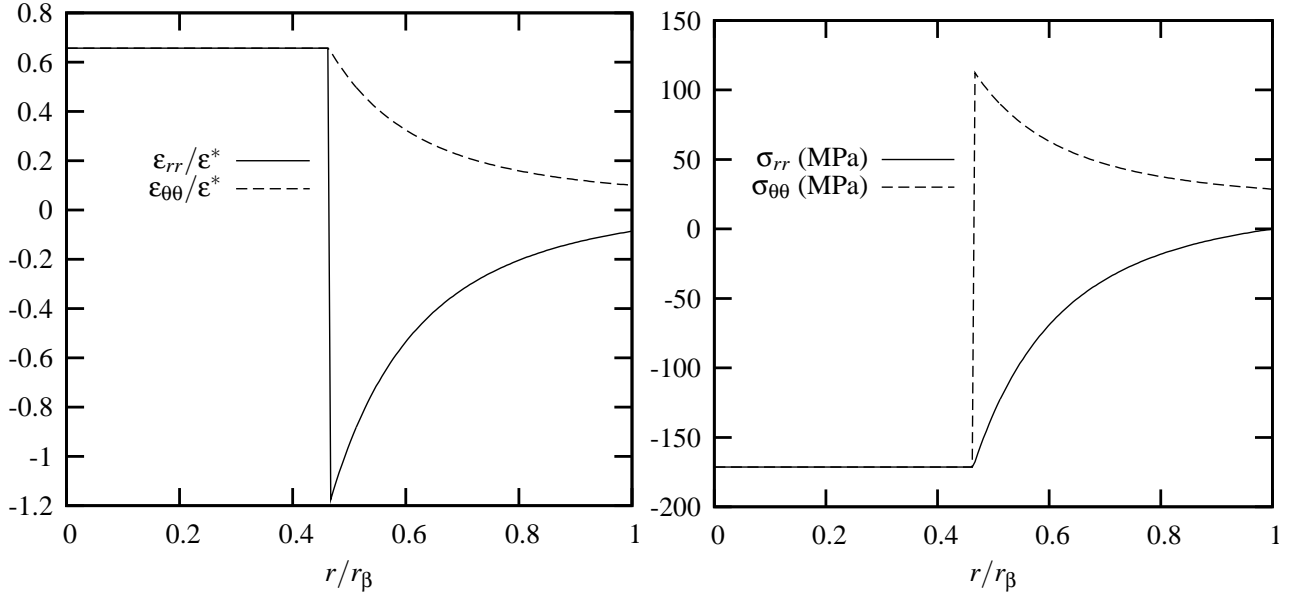


FIG. 4 – Profils de déformation et de contrainte dans un assemblage de sphères concentriques, la ferrite étant au cœur et l'austénite autour. La fraction volumique de ferrite est de 10%.

2.3 Energie élastique

Montrer que l'énergie élastique moyenne du motif élémentaire d'assemblage de sphères se met sous la forme :

$$\bar{W}^e = \frac{9}{2}\phi(1-\phi)\bar{\kappa}^*\varepsilon^{*2} \quad (48)$$

avec

$$\frac{1}{\bar{\kappa}^*} = \left(\frac{1-\phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3}{4\mu_\beta} \right) \quad (49)$$

Montrer que lorsque les modules d'élasticité des deux phases prennent les mêmes valeurs, alors la moyenne de l'énergie élastique est la même pour l'assemblage de sphères concentriques que pour le multi–couches.

Montrer qu'il n'en va pas de même lorsque les propriétés élastiques diffèrent, en calculant le rapport des énergies élastiques moyennes des deux microstructures.

Quelle est la propriété élastique qui discrimine les deux types de microstructures ?

L'énergie élastique moyenne stockée dans le motif élémentaire vaut :

$$\begin{aligned}
\bar{W}^e &= \frac{3}{4\pi r_\beta^3} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^e dV \\
&= \frac{3}{8\pi r_\beta^3} \int_0^{r_\beta} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^e r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \\
&= \frac{3}{2r_\beta^3} \int_0^{r_\beta} \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^e r^2 dr \\
&= \frac{3}{2r_\beta^3} \left(\int_0^{r_\alpha} \underline{\sigma}_\alpha : \underline{\varepsilon}_\alpha^e r^2 dr + \int_{r_\alpha}^{r_\beta} \underline{\sigma}_\beta : \underline{\varepsilon}_\beta^e r^2 dr \right)
\end{aligned} \tag{50}$$

On calcule successivement

$$\underline{\sigma}_\alpha : \underline{\varepsilon}_\alpha^e = 9\kappa_\alpha (A_\alpha - \varepsilon^*)^2 \tag{51}$$

$$\underline{\sigma}_\beta : \underline{\varepsilon}_\beta^e = 9\kappa_\beta A_\beta^2 + 12\mu_\beta \frac{B^2}{r^6} \tag{52}$$

à l'aide des expressions des contraintes établies à la question 2.1. Ensuite,

$$\int_0^{r_\alpha} \underline{\sigma}_\alpha : \underline{\varepsilon}_\alpha^e r^2 dr = 3\kappa_\alpha (A_\alpha - \varepsilon^*)^2 r_\alpha^2 \tag{53}$$

$$\int_{r_\alpha}^{r_\beta} \underline{\sigma}_\beta : \underline{\varepsilon}_\beta^e r^2 dr = 3\kappa_\beta A_\beta^2 (r_\beta^3 - r_\alpha^3) - 4\mu_\beta B^2 \left(\frac{1}{r_\beta^3} - \frac{1}{r_\alpha^3} \right) \tag{54}$$

En sommant ces contributions,

$$\bar{W}^e = \frac{9}{2} \kappa_\alpha (A_\alpha - \varepsilon^*)^2 \frac{r_\alpha^3}{r_\beta^3} + \frac{9}{2} \kappa_\beta A_\beta^2 \left(1 - \frac{r_\alpha^3}{r_\beta^3} \right) - 6\mu_\beta \frac{B^2}{r_\beta^3} \left(\frac{1}{r_\beta^3} - \frac{1}{r_\alpha^3} \right) \tag{55}$$

On peut exprimer les constantes A_α et B en fonction de A_β en utilisant les relations (42) et (43) dont on tire en particulier

$$\kappa_\alpha (A_\alpha - \varepsilon^*) = \kappa_\beta A_\beta \left(1 - \frac{r_\beta^3}{r_\alpha^3} \right)$$

L'expression précédente de l'énergie élastique moyenne se met alors sous la forme :

$$\begin{aligned}
\bar{W}^e &= \frac{9}{2} \frac{\kappa_\beta^2}{\kappa_\alpha} A_\beta^2 \frac{(1 - \phi)^2}{\phi} + \frac{9}{2} \kappa_\beta A_\beta^2 (1 - \phi) - \frac{27}{8} \frac{\kappa_\beta^2}{\mu_\beta} A_\beta^2 \frac{1 - \phi}{\phi} \\
&= \frac{9}{2} A_\beta^2 \frac{1 - \phi}{\phi} \kappa_\beta^2 \left(\frac{1 - \phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3}{4\mu_\beta} \right)
\end{aligned} \tag{56}$$

A ce stade, on reprend l'expression (44) donnant A_β que l'on met sous la forme

$$A_\beta \left(\frac{1 - \phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3}{4\mu_\beta} \right) = \frac{\phi \varepsilon^*}{\kappa_\beta}$$

en faisant apparaître ainsi le même facteur que dans (56). On aboutit de la sorte à l'expression de l'énergie moyenne sous la forme recherchée :

$$\bar{W}^e = \frac{9}{2} \phi (1 - \phi) \varepsilon^{*2} \left(\frac{1 - \phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3}{4\mu_\beta} \right)^{-1} \tag{57}$$

Cette énergie ne dépend pas de la taille du motif élémentaire mais seulement de la fraction volumique.

Lorsque les modules d'élasticité des deux phases coïncident, les énergies stockées correspondantes sont égales et valent

$$\bar{W}^e = W^e = \frac{9}{2}\phi(1-\phi)\varepsilon^{*2} \left(\frac{1}{\kappa} + \frac{3}{4\mu} \right) \quad (58)$$

de sorte que les morphologies multi-couches et assemblages de sphères concentriques conduisent à la même énergie stockée. Aucune de ces deux morphologies n'est donc à privilégier du point de vue de l'énergie dans le cas de l'élasticité homogène, c'est-à-dire lorsque les deux phases ont le même comportement élastique.

Au contraire, une différence d'énergie apparaît dans le cas de l'élasticité hétérogène :

$$\frac{\bar{W}^e}{W^e} = \frac{\bar{\kappa}^*}{\kappa^*} = \frac{\langle \frac{1}{\kappa} \rangle + \frac{3}{4} \langle \frac{1}{\mu} \rangle}{\langle \frac{1}{\kappa} \rangle + \frac{3}{4\mu_\beta}} \quad (59)$$

où l'on a introduit la notation³ :

$$\langle \frac{1}{\kappa} \rangle = \frac{1-\phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta}, \quad \langle \frac{1}{\mu} \rangle = \frac{1-\phi}{\mu_\alpha} + \frac{\phi}{\mu_\beta} \quad (60)$$

Ce ratio d'énergie se met sous la forme :

$$\frac{\bar{W}^e}{W^e} - 1 = \frac{1-\phi}{\frac{4}{3} \langle \frac{1}{\kappa} \rangle + \langle \frac{1}{\mu} \rangle} \left(\frac{1}{\mu_\alpha} - \frac{1}{\mu_\beta} \right) \quad (61)$$

qui est du signe de la différence $\mu_\beta - \mu_\alpha$ entre les modules de cisaillement des deux phases. On obtient donc le résultat peu intuitif *a priori* que la configuration multi-couches emmagasine moins d'énergie élastique que l'assemblage sphérique lorsque le module de cisaillement de la matrice β est plus rigide que celui de l'inclusion. Le facteur discriminant est le module de cisaillement de chaque phase. Le module de compressibilité, quant à lui, n'affecte pas le signe de la différence entre les deux microstructures considérées.

2.4 Stabilité élastique lors de la précipitation

Déduire de la discussion précédente une indication sur la stabilité de la forme des précipités dans une matrice, lors d'un changement de phase.

On sait qu'en thermodynamique, les états observés dans les solides correspondent à un minimum de l'énergie libre dont une partie est l'énergie d'origine élastique. Par conséquent, la configuration sphérique sera plus stable lorsque la matrice est moins rigide que l'inclusion (en terme de module de cisaillement). Au contraire, des précipités croissant dans une matrice plus rigide auront tendance à adopter la forme de plaquettes, voire d'aiguilles.

³Remarquer qu'il ne s'agit pas de l'opérateur moyenne des propriétés élastiques car la fraction volumique de phase α est ϕ et non $1-\phi$.

2.5 Variation de volume

Calculer la variation relative de volume de l'assemblage élémentaire de sphères concentriques lors du changement de phase.

La variation de volume est donnée par

$$\Delta V = \int_{\Omega} \operatorname{div} \underline{\mathbf{u}} dV = \int_{\Omega} \left(\frac{du_r}{dr} + \frac{2u_r}{r} \right) dV = 4\pi r_{\alpha}^3 A_{\alpha} + 4\pi (r_{\beta}^3 - r_{\alpha}^3) A_{\beta} \quad (62)$$

car $\operatorname{div} \underline{\mathbf{u}}_{\alpha} = 3A_{\alpha}$ et $\operatorname{div} \underline{\mathbf{u}}_{\beta} = 3A_{\beta}$. Pour obtenir une expression plus concise, on introduit une formulation alternative de A_{β} :

$$A_{\beta} = \phi \varepsilon^* \frac{\bar{\kappa}^*}{\kappa_{\beta}} \quad (63)$$

pour finalement obtenir

$$\frac{\Delta V}{V} = 3\phi \varepsilon^* \bar{\kappa}^* \left(\frac{1}{\kappa_{\beta}} + \frac{3}{4\mu_{\beta}} \right) = 3\phi \varepsilon^* \left(1 + \bar{\kappa}^* (1 - \phi) \left(\frac{1}{\kappa_{\beta}} - \frac{1}{\kappa_{\alpha}} \right) \right) \quad (64)$$

L'expression du membre de droite a le mérite de mettre en évidence la correction apportée par l'hétérogénéité élastique à la dilatation libre moyenne $3\phi \varepsilon^*$. Cette correction est nulle si les deux phases ont le même module de compressibilité.

3 Plasticité dans la matrice

Les contraintes internes induites par un changement de phase peuvent être suffisamment grandes pour que la limite d'élasticité soit franchie au cours de la transformation. Calculer la déformation de transformation critique ε_0^* pour laquelle la limite d'élasticité σ_0 est atteinte dans la phase β . On adoptera le critère de Tresca. On donnera cette expression successivement dans le cas de la morphologie lamellaire et pour l'assemblage de sphères.

Commenter.

Calculer numériquement ε_0^* dans le cas de l'austénite et de la ferrite pour $\phi = 0.1$ et en prenant $\sigma_0 = 100$ MPa.

Le multi-couches est dans un état de contraintes biaxiales. Le critère de plasticité est satisfait dans la phase β lorsque

$$|\sigma_{\beta}| = \sigma_0$$

ce qui conduit à

$$|\varepsilon_0^*| = \frac{2\sigma_0}{9\phi\bar{\kappa}^*} \quad (65)$$

Dans le cas de l'assemblage de sphères, c'est la différence des contraintes orthoradiale et radiale qui importe :

$$|\sigma_{\theta\theta}^{\beta} - \sigma_{rr}^{\beta}| = 6\mu_{\beta} \frac{|B|}{r^3} = \frac{r_{\alpha}^3}{r^3} \frac{9}{2} \left(\frac{1 - \phi}{\kappa_{\alpha}} + \frac{\phi}{\kappa_{\beta}} + \frac{3}{4\mu_{\beta}} \right)^{-1} = \sigma_0 \quad (66)$$

La plasticité débute donc en $r = r_{\alpha}^+$ pour

$$\varepsilon_0^* = \frac{2\sigma_0}{9\bar{\kappa}^*} \quad (67)$$

Dans le cas de la ferrite et de l'austénite, $\kappa^* = \bar{\kappa}^*$ et on trouve $\varepsilon_0^* = 0.0035$ pour le multi-couches et $\varepsilon_0^* = 0.00035$ pour l'assemblage de sphères. La différence vient du fait que les contraintes sont homogènes dans les lamelles du multi-couches alors qu'il y a une concentration de contrainte en $r = r_\alpha^+$ pour le motif inclusion-matrice. Ces valeurs critiques de déformation de transformation sont très faibles. Dans la pratique, le changement de phase est donc nécessairement accompagné de plasticité ou de viscoplasticité à haute température.

4 Prise en compte de l'énergie d'interface

L'interface entre les deux phases α et β représente un surcoût énergétique en raison de l'arrangement atomique local différent de celui qui règne en volume. L'énergie d'interface γ est mesurée en J.m^{-2} . L'objet de cette section est de comparer les énergies élastique et d'interface en jeu lors d'un changement de phase, dans le cas d'une inclusion isolée de phase α de rayon r_α dans une matrice infinie de phase β . Les propriétés élastiques et de transformation des phases sont les mêmes que dans les parties précédentes. Aucun chargement extérieur n'est appliqué.

4.1 Energie élastique d'une inclusion dans une matrice

Montrer que l'énergie élastique totale dans le domaine Ω constitué de l'inclusion Ω_α entourée de la matrice Ω_β peut se calculer de la manière suivante :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi}^e dV = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_\alpha} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi}^* dV \quad (68)$$

Pour établir ce résultat, valable pour un domaine Ω fini ou infini, quelle que soit la forme de l'inclusion Ω_α , on utilisera le fait que, en l'absence de chargement extérieur appliqué :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi} dV = 0 \quad (69)$$

propriété que l'on établira ou que l'on admettra.

Utiliser le champ de contrainte dans une inclusion sphérique établi à la question 2.1 en le particularisant au cas d'une matrice Ω_β infinie, pour calculer l'intégrale du membre de droite de l'équation (68), en fonction des propriétés élastiques des phases, de la déformation de transformation ε^* et du rayon r_α de l'inclusion sphérique.

On part du calcul suivant, réalisé en coordonnées cartésiennes orthonormées :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi} dV = \int_{\Omega} \sigma_{ij} u_{i,j} dV = \int_{\Omega} (\sigma_{ij} u_i)_{,j} dV = \int_{\partial\Omega} \sigma_{ij} u_i n_j dS = \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{t}} \cdot \underline{\mathbf{u}} dS = 0 \quad (70)$$

On a utilisé successivement le fait que le tenseur des contraintes est à divergence nulle en l'absence d'efforts de volume, puis que le vecteur-contrainte est nul sur le bord $\partial\Omega$ en l'absence d'efforts surfaciques appliqués. Le passage volume \leftrightarrow surface résulte du théorème de la divergence. Il s'agit en fait de l'expression du théorème des travaux virtuels en absence d'efforts extérieurs. Par suite,

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi}^e dV = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}^*) dV = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi}^* dV = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_\alpha} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\xi}^* dV \quad (71)$$

La dernière étape du calcul tient compte du fait que $\varepsilon^* = 0$ dans la phase β . L'énergie élastique totale est donc fournie par le résultat d'un calcul sur la seule inclusion Ω_α .

Pour évaluer cette intégrale, on se restreint au cas d'une inclusion sphérique au sein d'une matrice infinie. D'après les calculs réalisés au paragraphe 2.1, la contrainte, constante au sein de l'inclusion, est donnée par la seconde relation (36). Dans le cas d'une matrice infinie, i.e. $\phi = 0$, le coefficient A_α , donné par (45), devient :

$$A_\alpha = \varepsilon^* \left(1 + \frac{4\mu_\beta}{3\kappa_\alpha} \right)^{-1}$$

On en déduit l'expression recherchée :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^e dV = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_\alpha} \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^* dV = 4\pi r_\alpha^3 \frac{6\kappa_\alpha \mu_\beta}{3\kappa_\alpha + 4\mu_\beta} \varepsilon^{*2} \quad (72)$$

4.2 Energie de surface de l'inclusion

Calculer l'énergie d'interface inclusion–matrice en fonction de r_α et de γ .

Justifier que l'énergie d'interface est prépondérante pour les petits précipités tandis que c'est l'énergie élastique calculée précédemment qui domine pour les gros précipités.

Montrer que le rayon de transition autour duquel énergie d'interface et énergie élastique sont du même ordre de grandeur, s'exprime comme :

$$r_\alpha = \gamma \frac{3\kappa_\alpha + 4\mu_\beta}{6\kappa_\alpha \mu_\beta \varepsilon^{*2}} \quad (73)$$

Calculer numériquement ce rayon critique dans le cas de l'acier en supposant que les deux phases ont les mêmes caractéristiques élastiques et que $\varepsilon^* = 0.01$. On prendra une valeur typique de l'énergie $\gamma = 1 \text{ J.m}^{-2}$.

L'énergie d'interface vaut $4\pi r_\alpha^2 \gamma$. L'énergie élastique, quant à elle, est proportionnelle au cube du rayon de l'inclusion. C'est donc l'énergie d'interface qui domine pour les petites tailles d'inclusions, i.e. pour les germes de phase α . Au contraire, les effets élastiques sont plus importants pour les inclusions de grande taille. Le rayon de transition (73) s'obtient en calculant le rapport de l'énergie élastique (72) divisée par l'énergie de surface.

Pour obtenir la valeur numérique, penser à utiliser l'unité $\gamma = 10^{-6} \text{ J.mm}^{-2}$ si les modules d'élasticité sont exprimés en MPa. On trouve

$$r_\alpha = 10^{-7} \text{ m} = 100 \text{ nm}$$

valeur tout à fait réaliste de précipités en phase de croissance ou de maturation. On peut comparer cette dimension à la taille des précipités de la figure 1.

4.3 Stabilité et précipitation

Revenir sur la discussion de la question 2.4 en tenant compte de l'existence d'une énergie de surface.

Considérons le cas d'un précipité sphérique au sein d'une matrice plus rigide (en terme de module de cisaillement). D'après la discussion de la question 2.4, la forme sphérique n'est pas stable et une forme sphéroïdale aplatie ou allongée (plaquettes ou aiguilles) est sans doute préférable du point de vue de la minimisation de l'énergie élastique. La forme sphérique minimise toutefois l'énergie d'interface et va donc avoir tendance à stabiliser la forme sphérique au moins pour les petites tailles de précipités. Au-delà d'une certaine taille, les formes en cigares ou en plaquettes seront moins coûteuses du point de vue énergétique.

5 Effet d'une charge appliquée

Lors du changement de phase, une charge extérieure est appliquée et maintenue, sous la forme d'un effort surfacique imposé \underline{t}^d sur le contour extérieur :

$$\underline{t} = \underline{t}^d = \underline{\Sigma} \cdot \underline{n}, \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega \quad (74)$$

où $\underline{\Sigma}$ est un tenseur symétrique donné uniforme et constant.

5.1 Travail des efforts appliqués

On note W^{ext} le travail des efforts extérieurs appliqués ramené à l'unité de volume :

$$W^{\text{ext}} = \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega} \underline{t}^d \cdot \underline{u} \, dS \quad (75)$$

Montrer que

$$W^{\text{ext}} = \underline{\Sigma} : \frac{1}{V} \int_{\Omega} \underline{\varepsilon} \, dV \quad (76)$$

C'est à nouveau une application du théorème de la divergence :

$$W^{\text{ext}} = \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega} \Sigma_{ij} n_j u_i \, dV = \frac{1}{V} \Sigma_{ij} \int_{\Omega} u_{i,j} \, dV = \frac{1}{V} \Sigma_{ij} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij} \, dV \quad (77)$$

en vertu de la symétrie de Σ_{ij} .

5.2 Assemblage de sphères soumis à une pression hydrostatique.

Le motif élémentaire de sphères concentriques est soumis, pendant le changement de phase, à une pression hydrostatique

$$\underline{\Sigma} = -p_0 \underline{1} \quad (78)$$

appliquée en $r = r_\beta$. Calculer les champs de contraintes et de déformations à l'issue du changement de phase, la pression p_0 étant maintenue.

Montrer, en calculant l'énergie élastique résultante \widehat{W}^e , que cette pression induit une énergie élastique supplémentaire sans couplage avec l'énergie due au changement de phase proprement dit.

La solution du problème s'obtient en utilisant le théorème de superposition. La solution du problème d'un biphasé, sans déformation libre supplémentaire, soumis à une pression extérieure

p_0 s'ajoute à la solution trouvée pour le changement de phase sans effort extérieur appliqué. Cela donne :

$$\varepsilon_{rr}^\alpha = \varepsilon_{\theta\theta}^\alpha = \varepsilon_{\varphi\varphi}^\alpha = A_\alpha - \frac{p_0}{3\kappa_\alpha}, \quad \sigma_{rr}^\alpha = \sigma_{\theta\theta}^\alpha = \sigma_{\varphi\varphi}^\alpha = -p_0 + 3\kappa_\alpha(A_\alpha - \varepsilon^*) \quad (79)$$

$$\varepsilon_{rr}^\beta = A_\beta - \frac{2B}{r^3} - \frac{p_0}{3\kappa_\beta}, \quad \sigma_{rr}^\beta = -p_0 + 3\kappa_\beta A_\beta - 4\mu_\beta \frac{B}{r^3} \quad (80)$$

$$\varepsilon_{\theta\theta}^\beta = \varepsilon_{\varphi\varphi}^\beta = A_\beta + \frac{B}{r^3} - \frac{p_0}{3\kappa_\beta}, \quad \sigma_{\theta\theta}^\beta = \varepsilon_{\varphi\varphi}^\beta = -p_0 + 3\kappa_\beta A_\beta + 2\mu_\beta \frac{B}{r^3} \quad (81)$$

On reprend le calcul de l'énergie élastique réalisé au paragraphe 2.3 en mettant en évidence les termes supplémentaires induits par la présence du terme de pression p_0 :

$$\underline{\sigma}_\alpha : \underline{\xi}_\alpha^e = 9\kappa_\alpha(A_\alpha - \varepsilon^*)^2 - 6p_0(A_\alpha - \varepsilon^*) + \frac{p_0^2}{\kappa_\alpha} \quad (82)$$

$$\underline{\sigma}_\beta : \underline{\xi}_\beta^e = 9\kappa_\beta A_\beta^2 + 12\mu_\beta \frac{B^2}{r^6} - 6p_0 A_\beta + \frac{p_0^2}{\kappa_\beta} \quad (83)$$

L'intégration sur l'assemblage élémentaire conduit en fait à la disparition des termes de couplage et l'énergie moyenne vaut alors :

$$\widehat{W}^e = \bar{W}^e + \frac{p_0^2}{2} \left(\frac{\phi}{\kappa_\alpha} + \frac{1-\phi}{\kappa_\beta} \right)$$

En fait cette absence de couplage est générale. Pour le voir, appelons $\underline{\sigma}, \underline{\xi}$ les champs solutions du problème de changement de phase en l'absence de chargement extérieur et $\underline{\tilde{\sigma}}, \underline{\tilde{\xi}}$ les solutions du problème sans changement de phase mais à chargement extérieur surfacique imposé. La solution $\underline{\hat{\sigma}}, \underline{\hat{\xi}}$ du problème de changement de phase sous charge est la superposition de ces champs :

$$\underline{\hat{\sigma}} = \underline{\sigma} + \underline{\tilde{\sigma}}, \quad \underline{\hat{\xi}} = \underline{\xi} + \underline{\tilde{\xi}} \quad (84)$$

Remarquer que $\underline{\tilde{\xi}}^e = \underline{\tilde{\xi}}$. L'énergie élastique vaut donc :

$$2\widehat{W}^e = \int_\Omega \underline{\hat{\sigma}} : \underline{\hat{\xi}}^e dV = \int_\Omega \underline{\sigma} : \underline{\xi}^e dV + \int_\Omega \underline{\tilde{\sigma}} : \underline{\tilde{\xi}} dV + \int_\Omega \underline{\sigma} : \underline{\tilde{\xi}} dV + \int_\Omega \underline{\tilde{\sigma}} : \underline{\xi}^e dV \quad (85)$$

Le premier terme de couplage est nul :

$$\int_\Omega \underline{\tilde{\sigma}} : \underline{\tilde{\xi}} dV = \int_{\partial\Omega} \underline{t}^d \cdot \underline{\tilde{u}} dS = 0 \quad (86)$$

Le second terme de couplage s'avère égal au premier ! En effet,

$$\int_\Omega \underline{\tilde{\sigma}} : \underline{\xi}^e dV = \int_\Omega \underline{\tilde{\xi}} : \underline{\Lambda} : \underline{\xi}^e dV = \int_\Omega \underline{\tilde{\xi}} : \underline{\sigma} dV = 0 \quad (87)$$

d'où le résultat $\widehat{W}^e = \bar{W}^e + \tilde{W}^e$. Il s'agit d'un exemple d'application du théorème dit de réciprocité de Maxwell–Betti.

5.3 Energie potentielle de l'assemblage de sphères concentriques

Calculer le travail des efforts appliqués en distinguant la contribution due au changement de volume associé au changement de phase et la contribution associée à la variation de volume due à la pression appliquée.

On appelle énergie potentielle la différence entre l'énergie élastique stockée et le travail des efforts appliqués :

$$W_p = \widehat{W}^e - W^{\text{ext}} \quad (88)$$

On admet que la forme optimale du précipité doit conduire à une diminution de l'énergie potentielle. Montrer que l'application d'une pression $p_0 > 0$ est effectivement favorable, au premier ordre en p_0 , à la croissance de l'inclusion α sphérique, à condition que le module de compressibilité de la matrice β soit supérieur à celui de l'inclusion.

Le travail des efforts extérieurs vaut

$$W^{\text{ext}} = -p_0 \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{u}} \cdot \underline{\mathbf{n}} \, dS = -p_0 \frac{1}{V} \int_{\Omega} \text{div } \underline{\mathbf{u}} \, dV = -p_0 \frac{\Delta V}{V} \quad (89)$$

La variation de volume a deux origines. La première est liée au changement de phase et a été calculée au paragraphe 2.5. La seconde est due à la superposition de la pression appliquée ce qui conduit à la variation de volume supplémentaire :

$$\Delta \tilde{V} = \frac{-p_0}{\kappa_\alpha} \frac{4\pi}{3} r_\alpha^3 + \frac{-p_0}{\kappa_\beta} \frac{4\pi}{3} (r_\beta^3 - r_\alpha^3) \quad (90)$$

ce qui donne

$$\frac{\Delta \tilde{V}}{V} = -p_0 \left(\frac{\phi}{\kappa_\alpha} + \frac{1-\phi}{\kappa_\beta} \right) \quad (91)$$

Finalement, le travail moyen des efforts extérieurs vaut

$$W^{\text{ext}} = -p_0 3\phi \varepsilon^* \left(1 + (1-\phi) \bar{\kappa}^* \left(\frac{1}{\kappa_\beta} - \frac{1}{\kappa_\alpha} \right) \right) + p_0^2 \left(\frac{\phi}{\kappa_\alpha} + \frac{1-\phi}{\kappa_\beta} \right) \quad (92)$$

Au premier ordre en p_0 , c'est-à-dire en négligeant les termes en p_0^2 dans les expressions de \widehat{W}^e et de W^{ext} , le travail des efforts extérieur introduit une contribution linéaire en p_0 . Lorsque $\kappa_\beta > \kappa_\alpha$, la contribution $-W^{\text{ext}}$ fait diminuer l'énergie potentielle lorsque $p_0 > 0$ augmente. L'application de cette pression est donc favorable à la croissance de l'inclusion sphérique de phase α .

5.4 Stabilisation de la microstructure lamellaire par superposition d'une charge appliquée

On soumet maintenant le motif multi-couches au chargement extérieur purement déviatorique suivant :

$$[\underline{\underline{\Sigma}}] = \begin{bmatrix} -\Sigma/2 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\Sigma/2 \end{bmatrix} \quad (93)$$

où Σ est la constante de chargement donnée.

Le calcul des contraintes supplémentaires induites par ce chargement extérieur, en plus des

contraintes résiduelles de changement de phase, ne pose pas de difficulté majeure mais n'est pas demandé ici. On se contente d'évaluer le travail des efforts extérieurs pour estimer dans quel cas le chargement extérieur est favorable à la formation de plaquettes de phase α .

Calculer W^{ext} pour le chargement (93). Montrer que lorsque la phase β est moins rigide que la phase α et que le chargement dans la direction perpendiculaire est de compression ($\Sigma < 0$), alors le travail des efforts extérieurs est positif (pour une déformation de transformation $\varepsilon^* > 0$). Commenter.

On part du résultat (76) obtenu précédemment et, en remarquant que le chargement appliqué est purement déviatorique, on obtient :

$$\begin{aligned} W^{\text{ext}} &= \frac{1}{V} \underline{\Sigma} : \int_{\Omega} \underline{\varepsilon} dV = \underline{\Sigma} : \int_{\Omega} \underline{\varepsilon}^{\text{dev}} dV \\ &= \begin{bmatrix} -\Sigma/2 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\Sigma/2 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{\text{dev}} & 0 & 0 \\ 0 & -2\varepsilon_{11}^{\text{dev}} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{11}^{\text{dev}} \end{bmatrix} = -3\Sigma\varepsilon_{11}^{\text{dev}} \end{aligned} \quad (94)$$

On a vu au paragraphe 1.5 que lorsque la phase β est moins rigide que la phase α , la déformation déviatorique $\varepsilon_{11}^{\text{dev}}$ est positive ($\varepsilon^* > 0$). Si la charge appliquée Σ est négative, le travail des efforts extérieurs est positif et vient donc diminuer l'énergie potentielle W_p , favorisant ainsi le changement de phase.

6 Epilogue

La mécanique joue donc un rôle dans la formation d'une nouvelle phase. Le problème a permis de distinguer les morphologies lamellaire et inclusionnaire. En fait l'énergie élastique moyenne correspondante ne diffère que si les propriétés élastiques des deux phases sont distinctes. On montre en fait plus généralement que lorsque les propriétés élastiques des phases sont homogènes et isotropes et si les déformations de transformations sont isotropes, l'énergie élastique stockée en raison du changement de phase ne dépend pas de la répartition particulière des phases, mais seulement des fractions volumiques des phases, des modules d'élasticité et de la déformation de transformation. La démonstration de ce résultat important n'est pas donnée ici et le lecteur est renvoyé à la référence (Fratzl et al., 1999). Ce théorème est parfois appelé théorème de Bitter–Crum. En conséquence de ce théorème, la mécanique ne peut affecter la morphologie des précipités que dans les cas suivants :

- l'élasticité est hétérogène ; c'est le cas abordé dans ce chapitre ;
- l'élasticité ou la déformation de transformation sont anisotropes.

Un exemple important est celui de la stabilité d'une inclusion sphérique ou ellipsoïdale dans une matrice caractérisée par une élasticité cubique. En effet, les aubes de turbine de moteur d'avion sont réalisées en monocristal de superalliage à base de nickel, de symétrie cubique. Ils ont la structure biphasée présentée sur la figure 1. Leur forme à l'équilibre, sphérique ou cuboïdale, résulte d'une minimisation d'énergies dues à l'élasticité, au chargement appliqué, et à l'anisotropie de l'élasticité et de l'énergie d'interface (Pineau, 1976).

Références

- Fratzl P., Penrose O., and Lebowitz J.L. (1999). *Modeling of phase separation in alloys with coherent elastic misfit*. Journal of Statistical Physics, vol. 95, pp 1429–1503.
- Hashin Z. (1962). *The elastic moduli of heterogeneous materials*. Journal of Applied Mechanics, vol. 29, pp 143–150.
- Pineau A. (1976). *Influence of uniaxial stress on morphology of coherent precipitates during coarsening - Elastic energy considerations*. Acta metallurgica, vol. 24, pp 559–564.