

Comportement thermomécanique des alliages mono- et polycristallins à mémoire de forme en transformation martensitique

Abdelaziz Ghazali, Mohammed Ouadi Bensalah*, Said Agouram

Laboratoire de mécanique et des matériaux, département de physique, faculté des sciences de Rabat, BP 1014, Rabat, Maroc

(Reçu le 10 juin 1998, accepté le 27 janvier 1999)

Abridged English version at the end of the text

Abstract — Thermomechanical behaviour of single and polycrystalline shape memory alloys in a martensitic transformation. In this paper, we describe the thermomechanical behaviour of the single and polycrystalline shape memory alloys. By means of an analysis founded on the Gibbs's free energy and by application of the thermodynamical second principle, we define a criterion of transformation and a law of out-flow associated to the martensitic transformation. This study introduces on one hand, in the case of the single crystal, a matrix of interaction between the martensite variants, and on the other hand, at the polycrystal level, a matrix of interaction in and between grains. By this approach, we describe the hysteretic behaviour of these alloys. © 1999 Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS.

thermomechanical behaviour / polycrystal / single crystal / SMA / approach / interaction / hysteresis

Résumé — Dans cet article, on décrit le comportement thermomécanique des alliages mono et polycristallins à mémoire de forme. Moyennant une analyse basée sur l'énergie libre de Gibbs et l'application du second principe de la thermodynamique, on définit un critère de transformation et une loi d'écoulement associée. Cette étude met en évidence, d'une part, une matrice d'interaction entre les variantes de martensite dans le cas du monocristal et, d'autre part, une matrice d'interactions intra- et intergranulaires à l'échelle du polycristal. Cette approche permet également de décrire le comportement hystérétique associé à ce type de matériau. © 1999 Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS.

comportement thermomécanique / polycristal / monocristal / AMF / approche / interaction / hystérésis

Nomenclature

A_f	température de fin de formation de l'austénite	K	M_s	température du début de formation de la martensite	°C
B	coefficient de proportionnalité	$\text{Pa}\cdot\text{K}^{-1}$	\vec{m}^h	direction de transformation de la variante h	
C	tenseur d'élasticité	Pa	\vec{n}^h	normale au plan d'habitat de la variante h	
E^{Tr}	déformation de transformation macroscopique		$(R^h)_J$	tenseur d'orientation de la variante h du grain J	
f	fraction volumique de la martensite formée		S	tenseur d'Eshelby	
F^J	fraction volumique du grain J		T	température	°C
f_J^h	fraction volumique de la variante h dans le grain J		T_0	température d'équilibre thermo-chimique	°C
g	amplitude de déplacement		V	volume de l'élément	m^3
I	tenseur identité		V_M	volume de la martensite	m^3
M	tenseur de compliance	Pa^{-1}	V_J^h	volume de la variante h du grain J	m^3
			V^J	volume du grain J	m^3
			V_A	volume de l'austénite	m^3

* Correspondance et tirés à part.
 M-bensal@fsr.ac.ma

W	énergie de déformation élastique..	J
W^e	énergie de déformation élastique associée à Σ	J
W_b	énergie de déformation élastique associée à σ	J
W_{sur}	énergie de surface	J
W_{diss}	énergie dissipée	J
<i>Symboles grecs</i>		
ΔG_{ch}	énergie libre chimique	J
ε^{Tr}	déformation de transformation locale	
$(\varepsilon^h)_J$	déformation de transformation de la variante h dans le grain J	
φ^1, φ et φ^2	angles d'Euler	
σ	tenseur de contrainte interne dans l'élément	Pa
σ^∞	tenseur de contrainte dans l'inclusion	Pa
Σ	tenseur de contrainte appliquée...	Pa
Ψ	énergie libre de Gibbs	J
τ_J^h	cission résolue appliquée sur la variante h du grain J	Pa
τ^0	cission critique	Pa
ν	coefficient de Poisson	
μ	module de cisaillement	Pa

1. INTRODUCTION

Les alliages à mémoire de forme (AMF) ont reçu récemment une attention particulière en raison de leurs utilisations potentielles dans les domaines industriels (robotique, aéronautique, biomécanique...). La mise en œuvre de ces matériaux nécessite cependant une bonne connaissance de leurs réponses aux chargements thermomécaniques appliqués. Selon le cycle thermomécanique envisagé et souvent en fonction de toute l'histoire de ce cycle, ces alliages présentent plusieurs types de comportements [1, 2] :

- la pseudoélasticité (superthermoélasticité) correspond à la formation réversible de la martensite à partir de l'austénite. Cet effet est caractérisé par la génération de déformations réversibles importantes de l'ordre de quelques pour-cent (10 % pour des monocristaux de type CuZnAl) ;
- l'effet mémoire de forme simple sens (EMSS) est associé à la réorientation des variantes de martensite sous l'effet des contraintes et à la transformation inverse sous l'effet d'une variation de température (chauffage) ;
- l'effet mémoire de forme double sens (EMDS) est associé à la formation d'une microstructure martensitique particulière provenant d'une éducation ; cet effet correspond à la capacité d'un AMF de passer de manière réversible d'une forme « basse température » à une forme « haute température » par simple chauffage ou refroidissement.

Dans ce travail, on focalisera notre attention sur l'effet pseudoélastique. Tout d'abord, on présente une étude cinématique associée à la plasticité de transformation parfaite. On s'intéressera par la suite à déterminer l'énergie bloquée dans le matériau en utilisant la solution d'Eshelby [3] et la théorie du self-consistent de Mori-Tanaka [4]. Cette énergie permet de décrire les interactions intra et intergranulaires pour un polycristal. On présentera ensuite une étude thermomécanique fondée sur un potentiel thermodynamique par l'intermédiaire de l'énergie libre de Gibbs associée à la transformation. Le comportement pseudoélastique est obtenu en appliquant le second principe de la thermodynamique, ce qui permet de tenir compte de la mobilité des interfaces intervariantes et de décrire l'hystérésis associée aux mécanismes de dissipation.

2. MODÉLISATION

2.1. Cinématique de la transformation

Considérons un élément macrohomogène élastique de volume V contenant uniquement la phase austénitique (phase mère) dans son état initial non chargé et à la température T . Sous l'action des contraintes appliquées et (ou) d'une variation de température, une partie V_M de V se transforme en martensite.

Nous supposons que les constantes d'élasticité sont homogènes dans les deux phases et que la seule source de déformation inélastique est la déformation de transformation (plasticité de transformation parfaite), la déformation de transformation totale macroscopique E^{Tr} s'obtient à partir de la moyenne volumique de toutes les déformations de transformation locales $\varepsilon^{Tr}(r)$:

$$E_{ij}^{Tr} = \frac{1}{\nu} \int_V \varepsilon_{ij}^{Tr}(r) d\nu \quad (1)$$

Pour considérer la structure granulaire des matériaux polycristallins et l'existence, dans la martensite, de 24 variantes cristallographiquement équivalentes [1, 5], on adopte comme échelle de description la variante de martensite. On considère donc comme élément de base, pour la modélisation du comportement global du polycristal, la déformation de transformation $(\varepsilon^h)_J$ associée à la formation d'une variante h de martensite dans un grain J . Cette déformation intrinsèque n'est fonction que de la transformation (variation de volume et amplitude de cisaillement associée au changement de phase) et de l'orientation de la variante considérée [6] :

$$(\varepsilon_{ij}^h)_J = g (R_{ij}^h)_J \quad (2)$$

où $(R_{ij}^h)_J$ est le tenseur d'orientation de la variante h dans un grain J et g est l'amplitude de déplacement dans la direction de transformation. g est identique pour toutes les variantes et pour tous les grains.

$$(R_{ij}^h)_J = \frac{1}{2} (n_i^h m_j^h + n_j^h m_i^h)_J \quad (3)$$

\bar{n}^h et \bar{m}^h sont respectivement la normale au plan d'habitat et la direction de transformation de la variante h .

En considérant les $(\varepsilon^h)_J$ comme éléments de base de la description, on a alors, pour chaque volume V_J^h occupé par une variante de martensite, les relations suivantes :

$$\begin{cases} \varepsilon^{\text{Tr}}(r) = (\varepsilon^h)_J & \text{si } r \in V_J^h \\ \varepsilon^{\text{Tr}}(r) = 0 & \text{si } r \notin V_J^h \end{cases} \quad (4)$$

En effectuant cette opération sur tous les grains et sur toutes les variantes, l'équation (1) devient :

$$E_{ij}^{\text{Tr}} = \sum_J \sum_h (\varepsilon_{ij}^h)_J f_J^h F^J \quad (5)$$

où $f_J^h (= V_J^h/V^J)$ est la fraction volumique occupée par la variante h , de volume V_J^h , dans le grain J de volume V^J et $F^J (= V^J/V)$ est la fraction volumique occupée par le grain J .

2.2. Énergie de déformation élastique

Lors du chargement thermomécanique d'un matériau polycristallin, la martensite se forme et se développe dans chaque grain du polycristal, selon de multiples variantes. Cette martensite crée au sein du matériau des contraintes internes $\sigma(r)$ et une énergie de déformation élastique W associée, qui a des effets importants sur la progression de la transformation. On détermine cette énergie en utilisant la solution d'Eshelby [3] et la théorie de Mori-Tanaka [4].

La solution d'Eshelby pour une inclusion de forme ellipsoïdale est :

$$\sigma_{ij}^\infty = C_{ijkl} (S_{klmn} - I_{klmn}) \varepsilon_{mn}^{\text{Tr}} \quad (6)$$

où C est le tenseur d'élasticité,

S est le tenseur d'Eshelby

et I le tenseur identité d'ordre 4.

La théorie de Mori-Tanaka donne les relations suivantes entre σ_{ij} et σ_{ij}^∞ , qui sont :

$$\begin{cases} \langle \sigma_{ij} \rangle_{V_A} = -f \langle \sigma_{ij}^\infty \rangle_{V_M} \\ \sigma_{ij}^\infty = \sigma_{ij} - \langle \sigma_{ij} \rangle_{V_A} \end{cases} \quad (7)$$

En notant $V_A (V = V_A + V_M)$ le volume de l'austénite, $\langle - \rangle_V$ la moyenne volumique et f la fraction volumique totale de la martensite formée, on écrit :

$$f = \frac{V_M}{V} = \sum_J \sum_h f_J^h F^J \quad (8)$$

L'énergie de déformation élastique par unité de volume est donnée par [7] :

$$W = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} M_{ijkl} \Sigma_{kl} - \frac{1}{2} \nu \int_V \sigma_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^{\text{Tr}}(r) d\nu \quad (9)$$

où Σ est la contrainte appliquée et M le tenseur de compliance.

W est constituée de deux termes d'origines physiques différentes : d'une part l'énergie de déformation élastique W^e due aux champs de contraintes appliquées,

$$W^e = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} M_{ijkl} \nu \Sigma_{kl} \quad (10)$$

d'autre part l'énergie de déformation élastique W_b associée aux champs de contraintes internes σ ,

$$W_b = -\frac{1}{2} \nu \int_V \sigma_{ij}(r) \varepsilon_{ij}^{\text{Tr}}(r) d\nu \quad (11)$$

À partir des équations (6), (7) et (8), on écrit W_b sous la forme :

$$\begin{aligned} W_b &= \frac{1}{2} C_{ijkl} \\ &\sum_J \left[\sum_h (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) (\varepsilon_{pq}^h)_J (\varepsilon_{ij}^h)_J f_J^h \right] F^J \\ &- \frac{1}{2} C_{ijkl} \left[\sum_J \sum_h (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) (\varepsilon_{pq}^h)_J f_J^h F^J \right] \\ &\cdot \left[\sum_I \sum_k (\varepsilon_{ij}^k)_I f_I^k F^I \right] \quad (12) \end{aligned}$$

Dans le cas d'un monocristal (grain J isolé), W_b s'écrit :

$$\begin{aligned} W_b &= \frac{1}{2} C_{ijkl} \sum_h (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) (\varepsilon_{pq}^h)_J (\varepsilon_{ij}^h)_J f_J^h \\ &- \frac{1}{2} C_{ijkl} \sum_h (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) (\varepsilon_{pq}^h)_J f_J^h \sum_k (\varepsilon_{ij}^k)_J f_J^k \end{aligned} \quad (13)$$

3. POTENTIEL PSEUDOÉLASTIQUE ASSOCIÉ À LA TRANSFORMATION

Il est bien établi que l'énergie libre de Gibbs est la mieux adaptée pour décrire le comportement

thermomécanique des matériaux à mémoire de forme. Pour un volume unitaire, cette énergie s'écrit [8–10] :

$$\Psi(\Sigma_{ij}, T, f_J^h) = \Sigma_{ij} E_{ij} - (\Delta G_{\text{ch}} + W_{\text{sur}} + W) \quad (14)$$

où ΔG_{ch} est l'énergie libre chimique :

$$\Delta G_{\text{ch}}(T, f) = B(T - T_0)f \quad (15)$$

B étant un coefficient de proportionnalité et T_0 la température d'équilibre thermochimique des deux phases.

W_{sur} est l'énergie de surface associée à la création d'interfaces au cours de la transformation. La forme allongée des plaquettes de martensite rend cette énergie négligeable devant l'énergie mécanique W . Cette énergie sera négligée dans la suite de cette étude.

À partir des équations (8) (10) (12) et (15), le potentiel pseudoélastique Ψ s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \Psi(\Sigma_{ij}, T, f_J^h) = & \frac{1}{2} \Sigma_{ij} M_{ijkl} \Sigma_{kl} - B(T - T_0) \sum_J \sum_h f_J^h F^J \\ & + \Sigma_{ij} \sum_J \sum_h (\varepsilon_{ij}^h)_J f_J^h F^J \\ & - \frac{1}{2} C_{ijkl} \sum_J \left[\sum_h (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) (\varepsilon_{pq}^h)_J (\varepsilon_{ij}^h)_J f_J^h \right] F^J \\ & + \frac{1}{2} C_{ijkl} \left[\sum_J \sum_h (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) (\varepsilon_{pq}^h)_J f_J^h F^J \right] \\ & \left[\sum_I \sum_k (\varepsilon_{ij}^k)_I f_I^k F^I \right] \quad (16) \end{aligned}$$

Le potentiel pseudoélastique Ψ décrit l'état du système austénite–martensite en fonction de la contrainte appliquée Σ , de la température T et des fractions volumiques des différentes variantes actives f_J^h . Il dépend également de la morphologie des variantes de martensite (tenseur $(S^h)_J$) et de leurs orientations dans les grains.

4. COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DES AMF

En général, le comportement pseudoélastique des alliages à mémoire de forme (AMF) se caractérise par la présence d'une hystérésis sur la courbe contrainte–déformation, lors d'un cycle charge–décharge. Cette particularité de comportement est en partie attribuée à des phénomènes dissipatifs intrinsèques [11–13], ou

encore à des variations de température accompagnant le changement de phase austénite–martensite.

Lors d'un chargement thermomécanique, la martensite se développe par déplacement des interfaces des variantes [14, 15]. Ceci s'exprime explicitement par la variation du tenseur $(S^h)_J$ associé à ces variantes.

En présence de phénomènes dissipatifs, le second principe de la thermodynamique impose [9] :

$$\begin{cases} \dot{\Psi}_{|\Sigma, T} = \frac{\partial \Psi}{\partial f_J^h} \dot{f}_J^h + \frac{\partial \Psi}{\partial S_J^h} \dot{S}_J^h \geq 0 \\ \dot{\Psi}_{|\Sigma, T} = \dot{W}_{\text{diss}} \end{cases} \quad (17)$$

où W_{diss} est l'énergie dissipée lors de la transformation.

Afin de modéliser l'énergie dissipée, Sun et al. [9] ont proposé un modèle où cette énergie est proportionnelle à la fraction volumique cumulée f . Ce modèle conduit à une sous-estimation des contraintes internes pour la courbe contrainte–déformation ; pour palier cette carence, Sun et al. rajoutent un terme correctif supplémentaire n'ayant aucune signification physique.

Sachant que l'énergie dissipée est due essentiellement, non seulement aux effets thermiques, mais aussi aux effets de frottement liés aux mouvements des interfaces et à la production des défauts [16, 17], on propose une modélisation de l'énergie dissipée sous la forme d'un polynôme d'ordre 2 en f :

$$W_{\text{diss}} = D_1 f + D_2 f^2 \quad (18)$$

où D_1 et D_2 sont des constantes du matériau.

Notre choix est motivé par l'égalité $(\dot{\Psi}_{|\Sigma, T} = \dot{W}_{\text{diss}})$ et par le fait que le potentiel pseudoélastique Ψ est d'ordre 2 en fraction volumique des variantes de martensite f_J^h .

La forme des variantes de martensite étant considérée ellipsoïdale de demi-axes $a_1(t)$, $a_2(t)$ et $a_3(t)$, l'évolution de $(S^h)_J$ par rapport au temps est décrite par :

$$\dot{S}_J^h = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial S_J^h}{\partial a_\alpha} \dot{a}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial S_J^h}{\partial a_\alpha} \frac{\partial a_\alpha}{\partial f_J^h} \dot{f}_J^h = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{a_\alpha}{f_J^h} \frac{\partial S_J^h}{\partial a_\alpha} \dot{f}_J^h \quad (19)$$

À partir des équations (17), (18) et (19), et en faisant l'hypothèse que toutes les variantes sont équiprobables, en l'absence de contraintes appliquées, et que la transformation se produit sur une seule variante de martensite par grain de contrainte résolue maximale $(\Sigma_{ij}(R_{ij}^h)_J)_{\text{max}}$ [18], on obtient, pour le polycristal, l'équation suivante :

$$\tau_J^h = (\tau^0)_P + (H_{JJ}^{hh})_P f_J^h + \sum_{I \neq J} (H_{JI}^{hk})_P f_I^k \quad (20)$$

avec :

$$\tau_J^h = \Sigma_{ij} (R_{ij}^h)_J \quad (21)$$

la cission résolue appliquée sur la variante h du grain J et

$$\begin{aligned}
 (\tau^0)_P &= \frac{B}{g} (T - T_0) + \frac{D_1}{g} \\
 &+ \frac{1}{2} g C_{ijkl} \left[(I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) \right. \\
 &\left. - \sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha \frac{\partial (S_{klpq}^h)_J}{\partial a_\alpha} \right] (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^h)_J \quad (22)
 \end{aligned}$$

la cission critique initiale du polycristal.

$$\begin{aligned}
 (H_{JJ}^{hh})_P &= \frac{2 D_2}{g} F^J \\
 &+ \frac{1}{2} g C_{ijkl} \left[\sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha \frac{\partial (S_{klpq}^h)_J}{\partial a_\alpha} \right. \\
 &\left. - 2 (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) \right] (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^h)_J F^J \quad (23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (H_{JI}^{hk})_P &= \left\{ \frac{2 D_2}{g} - \frac{1}{2} g C_{ijkl} \left[(I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) \right. \right. \\
 &\left. \left. (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^k)_I + (I_{klpq} - (S_{klpq}^k)_I) (R_{pq}^k)_I (R_{ij}^h)_J \right. \right. \\
 &\left. \left. - \sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha \frac{\partial (S_{klpq}^h)_J}{\partial a_\alpha} (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^k)_I \right] \right\} F^I \quad (24)
 \end{aligned}$$

$(H)_P$, de composantes $(H_{IJ}^{hk})_P$, est la matrice décrivant les énergies propres des variantes de martensite (équation (23)) et les énergies d'interactions intergranulaires (équation (24)).

À partir des équations (10, 13–15, 17–19), on obtient, pour le cas du monocristal monovariant, l'équation suivante :

$$\tau_J^h = (\tau^0)_M + (H_{JJ}^{hh})_M f_J^h \quad (25)$$

où

$$\begin{aligned}
 (\tau^0)_M &= \frac{B}{g} (T - T_0) \\
 &+ \frac{D_1}{g} + \frac{1}{2} g C_{ijkl} \left[(I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) \right. \\
 &\left. - \sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha \frac{\partial (S_{klpq}^h)_J}{\partial a_\alpha} \right] (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^h)_J \quad (26)
 \end{aligned}$$

avec $(\tau^0)_M$ la cission critique initiale du monocristal.

$$\begin{aligned}
 (H_{JJ}^{hh})_M &= \frac{2 D_2}{g} + \frac{1}{2} g C_{ijkl} \left(\sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha \frac{\partial (S_{klpq}^h)_J}{\partial a_\alpha} \right. \\
 &\left. - 2 (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) \right) (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^h)_J \quad (27)
 \end{aligned}$$

$(H_{JJ}^{hh})_M$ est l'énergie propre de la variante h du grain J .

Pour décrire la transformation, la constante D_1 dans les équations (22) et (26) peut être déterminée en effectuant un refroidissement de l'austénite jusqu'à $T = M_s$ (M_s est la température du début de transformation) à $\Sigma_{ij} = 0$. A ce stade les f_J^h sont nulles.

Pour la transformation, on suppose que :

$$(\tau^0)_P = (\tau^0)_M = \tau_c^0 = \frac{B}{g} (T - M_s) \quad (28)$$

avec τ_c^0 la cission critique initiale de la transformation.

Les équations décrivant la transformation pour le polycristal et le monocristal sont :

$$(\tau_J^h)_c = \tau_c^0 + (H_{JJ}^{hh})_P f_J^h + \sum_{I \neq J} (H_{JI}^{hk})_P f_I^k \quad (29)$$

$$(\tau_J^h)_c = \tau_c^0 + (H_{JJ}^{hh})_M f_J^h \quad (30)$$

où

$$(\tau_J^h)_c = \Sigma_{ij}^c (R_{ij}^h)_J$$

est la cission résolue appliquée sur la variante h du grain J lors de la transformation.

À partir de l'équation (25), pour une contrainte résolue seuil $(\tau_J^h)_s$ suffisante pour initier la transformation (i.e. $f_J^h = 0$), on obtient :

$$(\tau_J^h)_s = (\tau^0)_M \quad (31)$$

et pour une contrainte résolue finale $(\tau_J^h)_f$, (i.e. $f_J^h = 1$), l'équation (25) devient :

$$(\tau_J^h)_f = (\tau^0)_M + (H_{JJ}^{hh})_M \quad (32)$$

La différence entre les contraintes résolues finale et seuil est positive. Ceci se traduit par :

$$\begin{aligned}
 \frac{2 D_2}{g} + \frac{1}{2} g C_{ijkl} \left(\sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha \frac{\partial (S_{klpq}^h)_J}{\partial a_\alpha} \right. \\
 \left. - 2 (I_{klpq} - (S_{klpq}^h)_J) \right) \cdot (R_{pq}^h)_J (R_{ij}^h)_J > 0 \quad (33)
 \end{aligned}$$

5. RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

On applique la modélisation proposée pour déterminer le comportement thermomécanique des AMF de type CuZnAl. Dans cette classe d'alliages les variantes

de martensite sont de la famille $\bar{n}(0,182, 0,669, 0,721)$ et $\bar{m}(0,165, 0,737, 0,655)$ [19]. Le choix de cet alliage comporte plusieurs avantages [18] :

- ces matériaux ne présentent pas de couplage entre la plasticité classique et la plasticité de transformation ;
- la transformation sous contrainte s'effectue principalement selon une seule variante par grain pour la traction uniaxiale ;
- la variation volumique due à la transformation est négligeable.

On suppose que le comportement élastique du polycristal non texturé de 100 grains de fractions volumiques $F^J = 1/100 (\forall J \in [1,100])$ est isotrope et homogène, avec un module de cisaillement μ égal à 40 000 MPa et un coefficient de Poisson ν de 0,333. Les formes des variantes de martensite sont ellipsoïdales aplaties de demi axes a, b, c tels que $a = b = 100c$.

5.1. Monocristal

La solution de l'équation (30) donnant f_j^h permet de déterminer la déformation de transformation macroscopique pour un monocristal. Nos résultats obtenus lors d'une transformation directe pour une traction uniaxiale, comparés à ceux obtenus par optimisation du potentiel pseudoélastique en négligeant W_b [20] sont présentés sur la *figure 1*. La transformation s'effectue avec une pente non nulle. Ceci est dû aux rôles joués par les contraintes internes d'incompatibilités et par la microstructure du matériau en transformation.

Des simulations faites sur des monocristaux du même alliage CuZnAl, d'orientations différentes, pour une température d'essai donnée $T = 10^\circ\text{C}$ sont représentées sur la *figure 2*. L'influence des orientations affecte la contrainte seuil de transformation et la déformation de transformation macroscopique à la saturation.

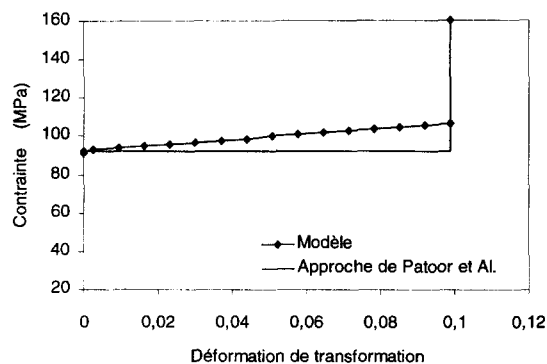


Figure 1. Comportement pseudoélastique d'un monocristal en traction uniaxiale comparé aux résultats de Patoor et al. [20]. Orientation : $\varphi^1 = 3,11^\circ$, $\varphi = 73,240^\circ$, $\varphi^2 = 335,88^\circ$.

Figure 1. Pseudoelastical behaviour of single crystal in uniaxial tension compared to the results of Patoor et al. [20]. Orientation : $\varphi^1 = 3.11^\circ$, $\varphi = 73.240^\circ$, $\varphi^2 = 335.88^\circ$.

Sur la *figure 3*, on présente la boucle d'hystérésis pour un monocristal d'orientation donnée. Les courbes de la charge et de la décharge pour une traction uniaxiale ont la même pente de transformation. L'épaisseur de l'hystérésis en contrainte s'écrit :

$$\Delta\Sigma_{ij}(R_{ij}^h)_J = \frac{B}{g}(A_f - M_s) = cste, \quad \Delta\Sigma_{ij} = \Sigma_{ij}^c - \Sigma_{ij}^d \quad (34)$$

où Σ_{ij}^c et Σ_{ij}^d sont respectivement les contraintes appliquées lors de la charge et de la décharge.

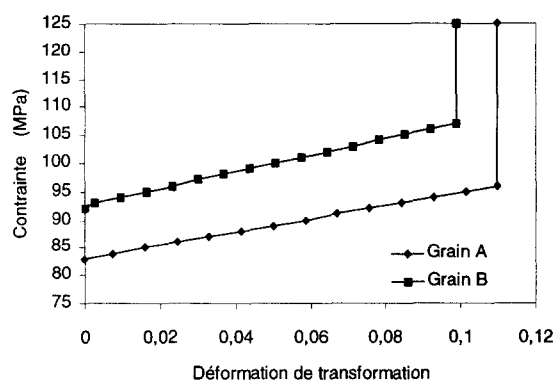


Figure 2. Influence de l'orientation cristallographique sur le comportement des monocristaux CuZnAl. Orientation A : $\varphi^1 = 8,36^\circ$, $\varphi = 17,45^\circ$, $\varphi^2 = 138,17^\circ$. Orientation B : $\varphi^1 = 3,11$, $\varphi = 73,240^\circ$, $\varphi^2 = 335,88^\circ$.

Figure 2. Influence of the crystallographic orientation on the CuZnAl single crystals behaviour. Orientation A : $\varphi^1 = 8.36^\circ$, $\varphi = 17.45^\circ$, $\varphi^2 = 138.17^\circ$. Orientation B : $\varphi^1 = 3.11$, $\varphi = 73.240^\circ$, $\varphi^2 = 335.88^\circ$.

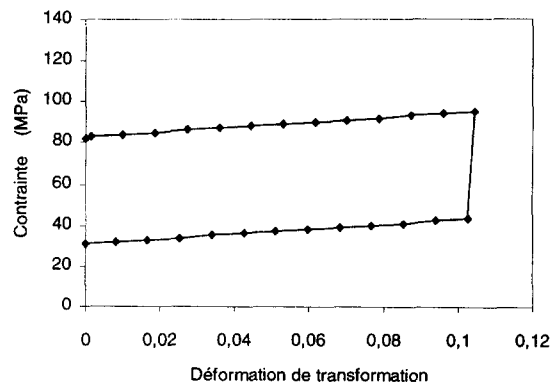


Figure 3. Comportement hystérétique du monocristal CuZnAl. Orientation $\varphi^1 = 232,37^\circ$, $\varphi = 23,29^\circ$, $\varphi^2 = 294,81^\circ$. $M_s = -30^\circ\text{C}$, $A_f = -5^\circ\text{C}$, $B = 0,23 \text{ MPa}\cdot\text{K}^{-1}$.

Figure 3. Hysteretic behaviour of CuZnAl single crystal. Orientation $\varphi^1 = 232.37^\circ$, $\varphi = 23.29^\circ$, $\varphi^2 = 294.81^\circ$. $M_s = -30^\circ\text{C}$, $A_f = -5^\circ\text{C}$, $B = 0.23 \text{ MPa}\cdot\text{K}^{-1}$.

Pour le cas particulier d'une sollicitation uniaxiale (Σ), l'épaisseur $\Delta\Sigma$ de l'hystérésis sera exprimée par :

$$\Delta\Sigma = \frac{cste}{E_{\max}^{Tr}} \quad (35)$$

où E_{\max}^{Tr} est la déformation de transformation macroscopique à la saturation.

5.2. Polycristal

Pour une température T donnée, la simulation des essais de traction uniaxiale pour un polycristal est obtenue en résolvant le système d'équation (29). À partir de l'équation (5), connaissant les f_j^h , le problème est totalement déterminé.

La figure 4 présente une contrainte seuil de transformation $\Sigma_s = 100$ MPa et une saturation pour une déformation de transformation maximale de l'ordre de

3,01 %. Le comportement obtenu par notre approche présente la même allure que celui de l'expérience [8], mais la déformation de fin de transformation est faible, comparée à la valeur expérimentale (4 %). Ceci est lié au fait que nous n'avons pas tenu compte de la phase de germination et de la multiplicité des variantes de martensite dans les grains transformés. L'étude du comportement thermomécanique du polycristal par l'approche de Sachs [21] donne une pente de transformation faible comparée à l'expérience avec une déformation de fin de transformation importante (9 %), ce qui met en évidence l'effet des interactions intergranulaires sur un tel comportement.

L'effet de la température pour les chargements mécaniques du polycristal affecte essentiellement la contrainte seuil de transformation [$\tau^0 = (B/g)(T - M_s)$] (figure 5). Cette contrainte correspond à l'initiation de la transformation dans les grains les plus favorablement orientés par rapport à l'axe du chargement uniaxial. Pour le cas du polycristal, du fait du grand nombre d'orientations cristallines possibles, il existe toujours des grains possédant un facteur de Schmidt proche de 0,5. La valeur de Σ_s sera donc directement reliée à la cission critique de transformation τ_0 par la relation suivante :

$$\Sigma_s = 2\tau^0 \quad (36)$$

Les pentes et les déformations de transformation à la saturation ne dépendent pas de la température T .

Les études expérimentales montrent que le comportement des AMF présente une dissymétrie importante entre la traction et la compression uniaxiales [22]. Les simulations de ces deux modes de sollicitation la confirment (figure 6). Cette dissymétrie, accompagnée d'une faible diminution de la déformation de fin de transformation pour le cas du polycristal (importante pour le cas du monocristal (figure 7)), provient du fait que la

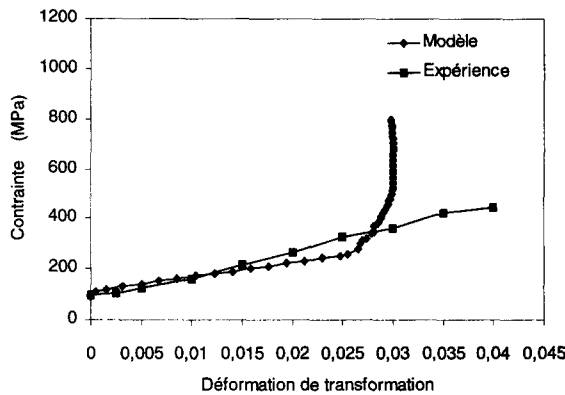


Figure 4. Comportement du polycristal en traction uniaxiale. $T = 20$ °C, $g = 0,23$, $B = 0,23$ MPa·K⁻¹, $M_s = -30$ °C.

Figure 4. Polycrystal behaviour in uniaxial tension. $T = 20$ °C, $g = 0.23$, $B = 0.23$ MPa·K⁻¹, $M_s = -30$ °C.

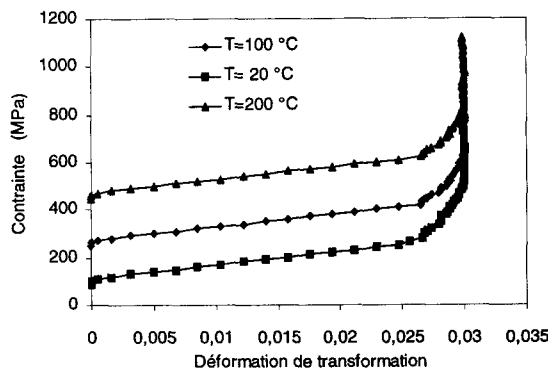


Figure 5. Effet de la température sur le comportement du polycristal en traction uniaxiale.

Figure 5. Effect of the temperature on the polycrystal behaviour in uniaxial traction.

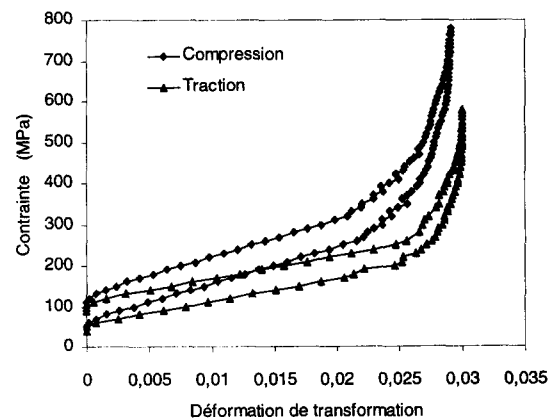


Figure 6. Comportement pseudoélastique du polycristal en traction et en compression uniaxiale.

Figure 6. Pseudoelastic behaviour of the polycrystal in uniaxial tension and compression.

transformation se produit selon des variantes de martensite différentes lors de la traction et de la compression uniaxiales.

La simulation de l'essai de refroidissement par ce modèle est obtenue en variant la température dans l'équation (29) à des contraintes imposées constantes. Les inconnues sont les fractions volumiques des différentes variantes de martensite dans les grains transformés. La *figure 8* illustre le comportement thermique d'un polycristal à différentes contraintes de traction et de compression uniaxiales. Du fait des interactions entre les grains transformés, les températures du début et de fin de transformation sont distinctes. Ce résul-

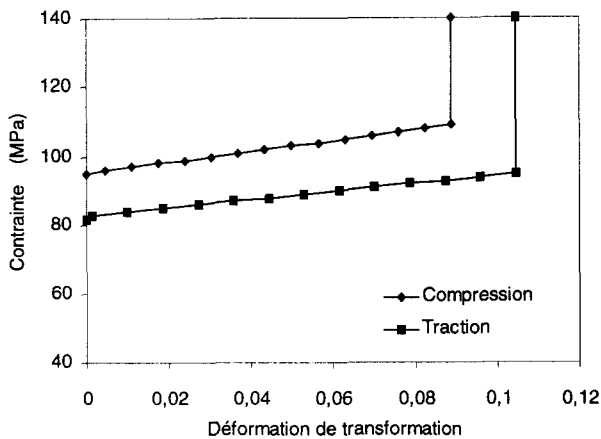


Figure 7. Comportement pseudoélastique du monocristal en traction et en compression uniaxiale.

Figure 7. Pseudoelastical behaviour of the single crystal in uniaxial tension and compression.

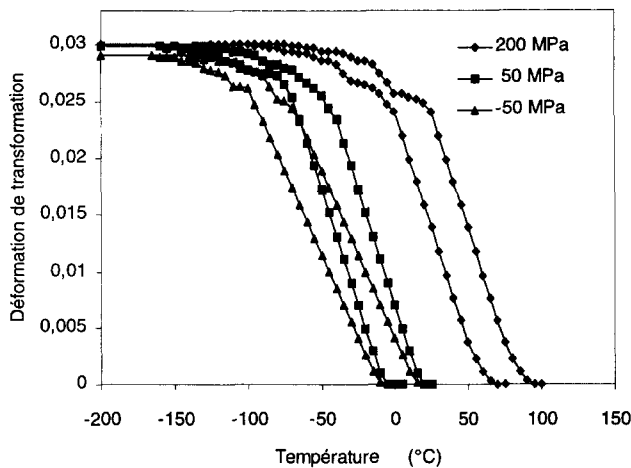


Figure 8. Courbes de refroidissement-chauffage à des contraintes imposées constantes pour le polycristal.

Figure 8. Cooling-heating curves at constant imposed stresses for the polycrystal.

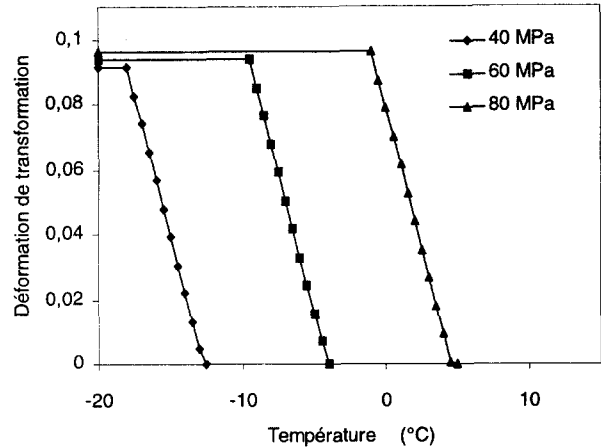


Figure 9. Courbes de refroidissement du monocristal à des contraintes imposées constantes.

Figure 9. Single crystal cooling curves at constant imposed stresses.

tat est conforme aux prévisions expérimentales. La différence entre ces deux températures croît aussi avec ces contraintes. La dissymétrie se présente aussi pour les essais de refroidissement. Cependant, la déformation de transformation à la saturation reste indépendante du niveau de contrainte (en revanche, cette déformation dépend de la contrainte imposée pour le cas du monocristal, *figure 9*). Ce désaccord avec la réalité expérimentale peut être dû à l'état microstructural du polycristal et à la sous-estimation des contraintes internes provenant des interactions intragranulaires (hypothèse d'une seule variante active par grain).

6. CONCLUSION

L'approche développée dans ce travail met en évidence l'importance du choix des variables internes qui décrivent l'état microstructural du matériau et le rôle joué par les contraintes internes d'incompatibilités dans le comportement thermomécanique des AMF. La loi de comportement de ces alliages a été obtenue en utilisant la solution d'Eshelby et la méthode de Mori-Tanaka. L'approche proposée pour l'énergie dissipée donne déjà des indications utiles sur la réponse thermomécanique des matériaux pendant une transformation martensitique. Les résultats de cette étude sont en accord avec les données expérimentales. Cependant, l'hypothèse d'une seule variante de martensite active par grain est loin d'être une règle générale. Il est nécessaire d'étendre ce modèle au cas de plusieurs variantes actives et d'étudier l'influence de la variation volumique sur le comportement global de ces alliages.

RÉFÉRENCES

- [1] Warlimont H., Delaey L., Krishnan R.V., Tass H., Thermoelasticity, pseudoelasticity and memory effects associated with martensitic transformation III. Thermodynamics and kinetics, *J. Mater. Sci.* 9 (1974) 1536.
- [2] Patoor E., Berveiller M., Les alliages à mémoire de forme, Hermès, Paris, 1990.
- [3] Eshelby J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proc. Roy. Soc. London A* 241 (1957) 376–396.
- [4] Mori T., Tanaka K., Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metall. Mater.* 21 (1973) 571–574.
- [5] Saburi T., Wayman C.M., Tanaka K., Nenno S., The shape memory mechanism in 18R martensitic alloys, *Acta Metall. Mater.* 28 (1980) 15.
- [6] Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M., Thermomechanical behaviour of shape memory alloys, *Arch. Mech.* 40 (1988) 775–794.
- [7] Mura T., *Micromechanics of defects in solids.*, Martinus Nijhoff, The Hague, 1987.
- [8] Bensalah M.O., Contribution à l'étude des comportements thermomécaniques des mono- et polycristaux en plasticité de transformation, thèse, université Mohammed-V, Rabat, Maroc, 1992.
- [9] Sun Q.P., Hwang K.C., Micromechanics modelling for the constitutive behaviour of polycrystalline shape memory alloys, *J. Mech. Phys. Solids* 41 (1) (1993) 1–17.
- [10] Agouram S., Abdous L., Bensalah M.O., Comportement thermomécanique en plasticité de transformation, *Eur. Phys. J. AP.* 1 (1998) 341–346.
- [11] Frémond M., Matériaux à mémoire de forme, *C. R. Acad. Sci. Paris, série II* 304 (1987) 239–245.
- [12] Lexcelent C., Licht C., Some remarks on the modelling of the thermomechanical behaviour of shape memory alloys, *J. Phys. Appl. IV C4* (1) (1991) 35–39.
- [13] Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M., Potentiel pseudoélastique et plasticité de transformation martensitique dans les mono et polycristaux métalliques, *Acta Metall. Mater.* 38 (11) (1987) 2779–2789.
- [14] Berveiller M., Dominiak S., Eberhardt A., Patoor E., Plasticité des matériaux solides, ATP, Mat. 4, Metz, 1985.
- [15] Sabar H., Problèmes d'inclusions à frontière mobile et applications, thèse, université de Metz, France, 1990.
- [16] Lexcelent C., Torra V., Raniecki B., Hystérésis d'alliages thermoélastiques, étude comparative de quelques modèles de comportement des alliages à mémoire de forme, *J. Phys. III* 3 (1993) 1463–1477.
- [17] Delaey L., Ortin J., Van Humbeek J., in : Lorimer G.W. (Ed.), *Proc. of phase transformations '87*, The Institute of Metals, 1988, p. 60.
- [18] Patoor E., Contribution à l'étude de la plasticité de transformation dans les mono- et polycristaux métalliques, thèse, université de Metz, France, 1986.
- [19] Devos J., Delaey L., Aernoudt E., Theoretical analysis and physical transformation model for a self accommodating group of 9R martensite variant, Academic Press, 1978, p. 438.
- [20] Patoor E., Bensalah M.O., Eberhardt A., Berveiller M., Détermination du comportement thermomécanique des AMF par optimisation d'un potentiel thermodynamique, *La Revue de Métallurgie CIT/SGM* 12 (1993) 1587–1592.
- [21] Abdous L., Sebbani M.J.E., Bensalah M.O., Comportement micromécanique des alliages à mémoire de forme, *Rev. Métall. Paris CIT/SGM* 2 (1998) 243–249.
- [22] Vacher P., Etude du comportement pseudoélastique d'alliages à mémoire de forme CuZnAl polycristallins, thèse, université de Franche-Comté, Besançon, 1991.

Abridged English Version

Thermomechanical behaviour of single and polycrystalline shape memory alloys in a martensitic transformation

Phase transitions occurring in solids produce a large change in their thermomechanical behaviour. In most cases, these effects are coupled with other inelastic strain mechanisms such as plasticity moving dislocation. Shape memory alloys (SMA) are a very interesting case. In addition with their potential applications, they exhibit a pure transformation plasticity behaviour. At first approximation, the phase transition is the only inelastic strain mechanism in these materials.

SMA present a large variety of behaviour depending on the thermomechanical loading paths and the microstructural states of the material. These responses are

due to the existence of different physical mechanisms of deformation, which are associated to the thermoelastic martensitic transformation : stress-oriented growth of martensitic plates and mobility of interfacial plane between variants. To take these mechanisms into account, the choice of the microstructural state parameters is of prime importance.

In order to consider the granular structure of polycrystalline material and the existence of 24 martensite variants crystallographically equivalent [1, 5], we take, as a description scale, the martensite variant. We consider as element of basis, for the ma-

terial global behaviour modelling, the transformation strain associated to the formation of a martensite variant h in the grain labelled J — equation (2). This deformation depends on the nature of the transformation and on the orientation of the considered variant [6]. The macroscopic deformation of transformation — equation (5) — is equal to the sum of these deformations over all grains and over all variants.

In order to describe the thermomechanical behaviour of SMA, we define a thermodynamic potential (free energy of Gibbs). This potential — equation (14) — is the sum of the variation of chemical free energy ΔG_{ch} , of the interfacial free energy W_{sur} and of the elastic deformation energy (mechanical energy) [8–10]. The observed elongation shape of the martensite plates shows that W_{sur} is negligible compared to the mechanical energy. Computation shows that the mechanical energy is composed of two terms: the elastic energy of deformation caused by the field of the external stresses W^e — equation (10) —, and the stored energy related to the internal stresses W_b — equation (12) for the polycrystal and equation (13) for the single crystal. The theories of Eshelby [3] and Mori-Tanaka [4] are used to compute W_b .

Shape memory alloys present in their thermomechanical behaviour an hysteresis on the stress-strain and strain-temperature curves in the course of load-unload and cooling-heating cycles. This particularity of behaviour is partly attributed to the intrinsic phenomena of dissipation related to the transformation [11–13]. In order to take into account these phenomena, we apply the thermodynamic second principle — equation (17). We chose the energy dissipation W_{diss} as a quadratic function of the total volume fraction of martensite f — equation (18). Experimental observations show that the change of the martensite variants shape is described by the displacement of their boundaries [14, 15]. This variation of shape is expressed explicitly by the variation of Eshelby's tensor S_j^h associated to each variant h in each grain J (equation (19)). From the second equality of equation (17) and by considering that the transfor-

mation is produced according to only one martensite variant in each grain [18], we obtain the laws describing the transformation of polycrystal — equation (29) — and single crystal — equation (30) — respectively. These laws take into account the material microstructure (orientations of grains and martensite variants, its morphology and variation of its shape).

The results obtained by simulating some tests of uniaxial tension, for the single crystal, show that the transformation occurs with a slope that reflects the effects of the microstructure (*figures 1, 2 and 3*). The width of the hysteresis depends on the characteristic temperatures of the material (M_s (martensite start) and A_f (austenite finish)) — equation (34).

In the case of polycrystal, *figure 4* represents a test of uniaxial tension, with imposed temperature, compared to the experimental data. This calculation shows a good variation with this data, but the total transformation strain obtained by this model is weak. The effect of the imposed temperatures on the test of uniaxial tension (*figure 5*) appears on the start transformation stresses — equation (28).

Some experimental studies show that the behaviour of the SMA presents an important dissymetry between the uniaxial tension and compression [22]. The simulations of these two modes of solicitation confirm this (*figures 6 and 7*). This dissymetry comes from the fact that the transformation is produced according to the different martensite variants in the course of uniaxial tension and compression.

In simulations of the tests of cooling under imposed stresses (*figure 8 and 9*), the martensite start and finish temperatures (M_s and M_f) are not confused. The total transformation strain is independent of the imposed stresses (in the case of the polycrystal).

The above results allow us to conclude that this work constitutes an attempt modelling of the SMA behaviour. However, these results could be improved by taking into account the multiplicity of the transformed martensite variants in each transformed grain.

