

## Physique de la déformation : les polycristaux

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

## 4- Propriétés de polycristaux

## Objectifs

Comment calculer les propriétés moyennes du polycristal ?

- Rappels d'élasticité ;
- Autres quantités tensorielles ;
- Elasticité dans les polycristaux aléatoires ;
  - Calculs de moyennes ;
  - Moyennes de Reuss/Voigt/Hill ;
  - Autres modèles ;
- Elasticité dans les polycristaux orientés ;
  - Calcul ;
  - Exemples et applications.

## 4- Propriétés de polycristaux a- Rappels d'élasticité

Rappels :

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

## Elasticité

## Tenseurs des contraintes et déformations

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

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

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

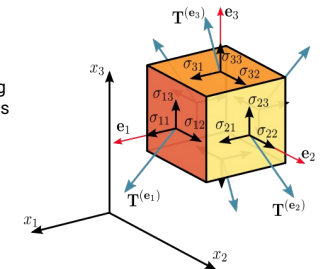


Image wikipédia

## Rotation de tenseurs

### Tenseur de rang 0 :

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

### Tenseur de rang 1 :

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

### Tenseur de rang 2 :

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

### Tenseur de rang 4 :

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

## Elasticité

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

## Questions

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

## Autres propriétés exprimées à l'aide de tenseurs

Property	Symbol	Field	Response	Type#
Tensors of Rank 0 (Scalars)				
Specific Heat	$C$	$\Delta T$	$T \Delta S$	E1
Tensors of Rank 1 (Vectors)				
Electrocaloric	$p_i$	$E_i$	$\Delta S$	E3
Magneto-caloric	$q_i$	$H_i$	$\Delta S$	E3
Pyroelectric	$p'_i$	$\Delta T$	$D_i$	E3
Pyromagnetic	$q'_i$	$\Delta T$	$B_i$	E3
Tensors of Rank 2				
Thermal expansion	$\alpha_{ij}$	$\Delta T$	$\epsilon_{ij}$	E6
Piezocaloric effect	$\alpha'_{ij}$	$\sigma_{ij}$	$\Delta S$	E6
Dielectric permittivity	$\kappa_{ij}$	$E_j$	$D_i$	E6
Magnetic permeability	$\mu_{ij}$	$H_j$	$B_i$	E6
Optical activity	$g_{ij}$	$l_j$	$G$	E6
Magnetoelastic polarization	$\lambda_{ij}$	$H_j$	$D_i$	E9
Converse magnetoelastic polarization	$\lambda'_{ij}$	$E_j$	$B_i$	E9
Electrical conductivity (resistivity)	$\sigma_{ij} (\rho_{ij})$	$E_j (j_j)$	$j_i (E_i)$	T6
Thermal conductivity	$K_{ij}$	$\nabla_j T$	$h_i$	T6
Diffusivity	$D_{ij}$	$\nabla_j c$	$m_i$	T6
Thermoelectric power	$\Sigma_{ij}$	$\nabla_j T$	$E_i$	T9
Hall effect	$R_{ij}$	$B_j$	$\rho_i^e$	T9

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

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

Tensors of Rank 3				
Piezoelectricity	$d'_{ijk}$	$\sigma_{jk}$	$D_i$	E18
Converse piezoelectricity	$d'_{ijk}$	$E_k$	$\epsilon_{ij}$	E18
Piezomagnetism	$Q'_{ijk}$	$\sigma_{jk}$	$B_i$	E18
Converse piezomagnetism	$Q'_{ijk}$	$H_k$	$\epsilon_{ij}$	E18
Electro-optic effect	$r_{ijk}$	$E_k$	$\Delta \beta_{ij}$	E18
Nernst tensor	$\Sigma_{ijk}$	$\nabla_j T B_k$	$E_i$	T27
Tensors of Rank 4				
Elasticity	$s_{ijkl} (c_{ijkl})$	$\sigma_{kl} (\epsilon_{kl})$	$\epsilon_{ij} (\sigma_{ij})$	E21
Electrostriction	$\gamma_{ijkl}$	$E_k E_l$	$\epsilon_{ij}$	E36
Photoelasticity	$q_{ijkl}$	$\sigma_{kl}$	$\Delta \beta_{ij}$	E36
Kerr effect	$p_{ijkl}$	$E_k E_l$	$\Delta \beta_{ij}$	E36
Magneto-resistance	$\zeta_{ijkl}$	$B_k B_l$	$\rho_{ij}^e$	T36
Piezoresistance	$\Pi_{ijkl}$	$\sigma_{kl}$	$\Delta \rho_{ij}^e$	T36
Magneto-thermoelectric power	$\Sigma_{ijkl}$	$\nabla_j T B_k B_l$	$E_i$	T54
Second order Hall effect	$\rho_{ijkl}$	$B_j B_k B_l$	$\rho_i^e$	T30
Tensors of Rank 6				
Third order elasticity	$c_{ijklmn}$	$\epsilon_{kl} \epsilon_{mn}$	$\sigma_{ij}$	E56

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

## Physique de la déformation : les polycristaux

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

## Propriétés moyennes

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

- Matériau isotrope ;
- 2 coefficients élastiques indépendants :
  - E et  $\nu$  ;
  - K et G ;
  - ...

Forme matricielle :

$$S = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G} \end{bmatrix} \quad G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

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

## Calcul de propriétés moyennes

Contribution d'un grain du polycrystal :

- $C'_{11} = C'_{1111} = a_{11}^4 a_{12}^2 a_{13}^2 C_{1111} + a_{11}^2 a_{12}^2 a_{13}^2 C_{1122} + \dots$
- $C'_{11} = a_{11}^4 a_{12}^2 a_{13}^2 C_{1111} + a_{11}^2 a_{12}^2 a_{13}^2 C_{1122} + \dots$
- $C'_{11} = (a_{11}^4) C_{1111} + 2(a_{11}^2)^2 C_{1122} + 2(a_{11}^2)(a_{12}^2) C_{1133} + 4(a_{11}^2)a_{12}^2 a_{13}^2 C_{1123} + \dots$

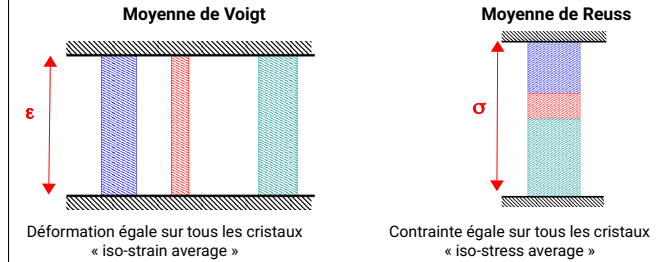
Contribution de tous les grains :

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

Quelques résultats :

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

## Moyennes de Reuss-Voigt-Hill



### Moyenne de Hill

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

## Calcul de Voigt

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

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

On calcule donc la moyenne des rigidités.

Résultat :

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

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

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

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

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

## Calcul de Reuss

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

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

On calcule donc la moyenne des souplesses.

Résultat :

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

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

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

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

## Autres bornes

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

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

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

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

## Exemples

Modules d'Young et de cisaillement pour différents métaux.

Bornes de Reuss et Voigt.  
Moyenne de Hill.  
Valeurs expérimentales.

En GPa.

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

Physique de la déformation : les polycristaux

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

## Élasticité dans les polycristaux orientés

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

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

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

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

Moyenne de Voigt

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

Moyenne de Reuss

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

- 81  $C_{ijkl}$  sans simplification
- Avec un découpage de l'espace en boîtes de  $5^\circ \times 5^\circ \times 5^\circ$  : 186 000 coefficients pour l'ODF.

On utilise des algorithmes optimisés.

## Symétrie du tenseur obtenu

Attention :

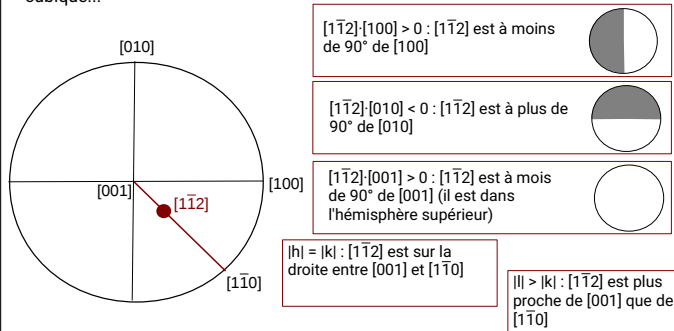
- Un polycristal aléatoire est isotrope.
- Un polycristal orienté est anisotrope.
- L'anisotropie dépend de l'anisotropie du monocristal ET de la texture.

$\begin{bmatrix} 230 & 135 & 135 \\ & 230 & 135 \\ & & 230 \end{bmatrix}$	$C_{44} = (C_{11} - C_{12})/2$	Polycristal aléatoire	$\begin{bmatrix} 275 & 113 & 113 \\ & 275 & 113 \\ & & 275 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 81 \\ & 81 \\ & & 81 \end{bmatrix}$
		Isotrope		
$\begin{bmatrix} 116 \\ & 116 \\ & & 116 \end{bmatrix}$	$C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$	Fer $\alpha$ Après 100 % traction	$\begin{bmatrix} 279 & 114 & 107 \\ & 279 & 107 \\ & & 285 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 76 \\ & 76 \\ & & 82 \end{bmatrix}$
		Hexagonal		

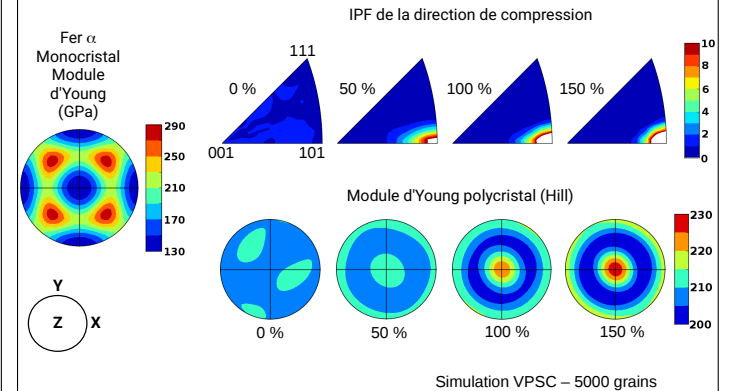
Constantes élastiques Fer  $\alpha$  - monocristal

## Interlude : retour sur la projection stéréographique

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



## Illustration : fer $\alpha$ en tension



## Résumé du cours jusqu'à présent

### 1- Orientation d'un grain :

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

### 2- Orientations dans un polycristal :

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

### 3- Propriétés de polycristaux :

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