

# Modélisation polycristalline du comportement d'un Alliage à Mémoire de Forme (AMF) de type Ni-Ti sous sollicitations multiaxiales

A. Maynadier<sup>a</sup>, D. Depriester<sup>a</sup>, K. Lavernhe-Taillard<sup>a</sup>, O. Hubert<sup>a</sup>

a. Laboratoire de Mécanique et Technologie (LMT-Cachan), ENS de Cachan/CNRS UMR 8535/Univ. Paris 6/PRES UniverSud Paris, 61 Avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan

## Résumé :

*Les propriétés des AMF sont dues à une transformation de phase solide solide réversible induite par la contrainte ou la température. Pour les AMF de type Ni<sub>49,75%</sub>-Ti, c'est une transformation isochore qui, d'une phase cubique (austénite), forme une phase monoclinique (martensite) avec 24 orientations possibles (variantes). A partir des géométries locales et des énergies par variante, nous proposons un modèle polycristallin multiaxial qui rend compte du fort couplage thermomécanique lors de la transformation de phase. Des essais quasi statiques permettent de le valider.*

## Abstract :

*SMA's peculiar properties are due to a reversible solid to solid phase transformation which can be induced either by stress or temperature. For Ni<sub>49,75%</sub>-Ti SMA this isochoric transformation forms a monoclinic phase (martensite) from a cubic parent phase (austenite), with 24 possible orientations (variants). From the local geometries and the Gibbs energy of each variant, we propose a polycrystalline multiaxial model which reflects the strong thermomechanical coupling of the phase transformation. Quasi-static tests are performed for validation.*

**Mots clefs :** couplage thermo-mécanique ; modele micro-macro ; Alliage à Mémoire de Forme

## 1 Introduction

Les Alliages à Mémoire de Forme (AMF) présentent un comportement spécifique, appelé pseudo-élasticité, qui est la capacité à se déformer en grande proportion (jusqu'à 8% en traction) de façon réversible [1] [6]. La pseudo-élasticité est associée à l'apparition d'une phase dite martensite (M) à l'intérieur d'une phase mère appelée Austénite (A). Cette transformation peut être induite par un chargement thermique ou par un chargement mécanique multiaxial [1] [6] [2]. L'utilisation des AMFs pour les structures de plus en plus complexes a rendu nécessaire le développement de modèles thermomécaniques pour des volumes élémentaires représentatifs (VER) efficaces.

Il existe dans la littérature de nombreux modèles pour décrire le comportement des AMF. Deux approches différentes peuvent être dégagées. Les modèles phénoménologiques décrivent le comportement à une échelle macroscopique en se fondant sur des observations faites à la même échelle [3], [4]. Ces approches sont basées sur la thermodynamique des milieux continus, et sont donc capables de décrire les phénomènes thermo-mécaniques tels que la génération de chaleur et la diffusion associées à la transformation de phase [5]. Ils sont généralement limités aux sollicitations mécaniques uniaxiales et les informations microstructurales ne sont pas accessibles. Pour les approches micromécaniques, les variables internes sont définies à l'échelle de la microstructure [6] [7] : la transformation de phase correspond à une modification géométrique de la maille cristalline. Ce type de modélisation nécessite un

grand nombre de données expérimentales à l'échelle micro et / ou des observations microstructurales [1] [8]. Les calculs impliquent généralement la minimisation d'une fonctionnelle très coûteuse en temps.

Dans ce contexte, le développement d'un modèle micro-macro multiaxial, où le fort couplage thermo-mécanique est pris en compte, est pertinent. Le développement d'une telle approche repose sur deux points essentiels. Le premier est la définition des règles de passage d'une échelle à l'autre, en fonction de la microstructure du matériau étudié, et permettant d'estimer les fluctuations des champs locaux pour un chargement macroscopique donné. Le second est une description appropriée du comportement de chacun des constituants. Nous proposons d'utiliser des hypothèses simplificatrices pour une estimation plus rapide du comportement thermomécanique. Plusieurs échelles sont alors choisies pour définir ce comportement, conduisant à une stratégie de calcul multi-échelle. La première échelle pour laquelle les états chimique et mécanique peuvent être considérés comme homogènes, est l'échelle de la variante. L'échelle suivante est celle du monocristal. À cette échelle, la modification géométrique du réseau cristallin et l'énergie chimique permettent de définir l'énergie libre de la variante. Une approche statistique de type Boltzmann est alors appliquée pour estimer les fractions volumiques de chaque variante à l'intérieur du grain. On définit ensuite l'échelle polycristalline comme le volume élémentaire représentatif (VER). Les quantités macroscopiques sont alors estimées par homogénéisation.

Le comportement particulier de notre AMF est mis en évidence dans la première partie de cet article, grâce des mesures de champs effectuées au cours de différents essais de traction. La deuxième partie décrit les principales caractéristiques du modèle multiaxial multi-échelles. Puis, dans une troisième partie, une application à un essai unidirectionnel sur un échantillon monocristallin montre la bonne adéquation entre les résultats de la modélisation et les expériences.

## 2 Comportement macroscopique d'un AMF polycristallin de type Ni-49, 6%<sub>at</sub> Ti

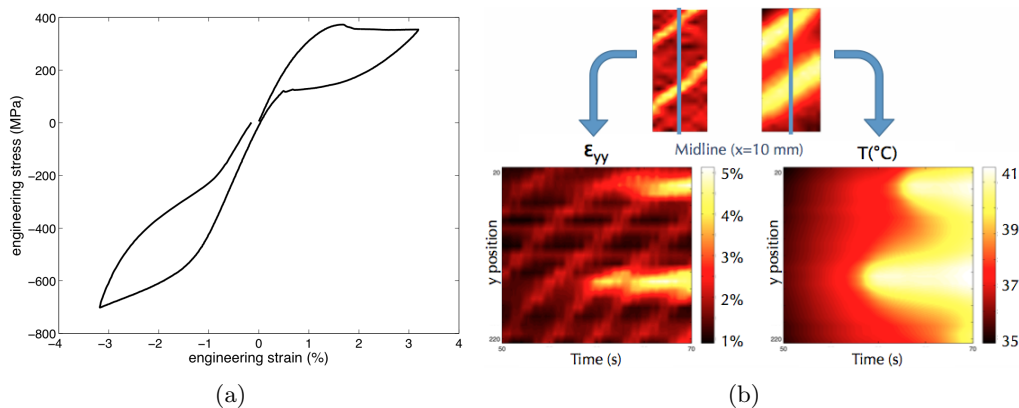


FIGURE 1 – (a) Relevé contrainte-allongement lors d'un essai uniaxial sur éprouvette tubulaire à  $1,1 \times 10^{-4} s^{-1}$  (b) Cartes spatio-temporelles de  $\epsilon_{longitudinal}$  et de  $T$  mesurées par corrélation d'images infrarouges (IRIC [11]), lors d'un essai de traction sur éprouvette plate à  $4,2 \times 10^{-4} s^{-1}$

Le matériau étudié est un alliage de nickel-titane en proportion quasi-stoechiométrique. Pour les essais, NiTiFrance fabrique les échantillons. Ils sont tréfilés et ont subi un recuit en bain de sel pendant deux minutes. Cela donne des échantillons polycristallins avec une taille de grain de l'ordre 30 microns. À température ambiante, le matériau est intégralement austénitique [11]. La courbe contrainte-déformation d'un essai de traction-compression effectué sur un échantillon tubulaire à  $28^{\circ}C$  est présentée figure 1-(a). En traction, on peut observer le plateau typique, associé à une génération de bandes de localisation. Des mesures de champs cinématiques et thermiques (fig. 1 (b) [11]) ont été effectués lors d'essais de traction sur des éprouvettes plates (20x2x120mm). On observe notamment que la température et la déformation augmentent de manière uniforme et simultanée jusqu'à ce que la déformation atteigne 1%, puis la localisation se produit. La déformation dans les bandes de

transformation augmente alors jusqu'à 5% avant qu'elle ne sature, à partir de cet instant les bandes s'élargissent. Simultanément, la température au front des bandes s'élève, localement elle peut être plus élevée de 7°C que dans les zones homogènes. Cela dépend évidemment des conditions thermiques (convection, vitesse de sollicitation...)

### 3 Modélisation multichelle d'une transformation de phase sous sollicitation thermique ou mécanique multiaxiale

La transformation décrite précédemment met en jeu trois échelles : l'échelle de la variante (de la phase), l'échelle du monocristal et celle du polycristal. Le milieu polycristallin subit à la fois le chargement thermique et mécanique qui peut être multiaxial. Dans une première approche, la température  $T$  est considérée homogène sur le milieu. Puisque le comportement élastique du monocristal est différent du comportement élastique du polycristal, la contrainte  $\sigma$  n'est pas homogène à l'échelle du polycristal. Les outils de localisation et d'homogénéisation, d'après les approches d'Eshelby et Hill [9], seront mis en oeuvre. Dans les grains, l'austénite et la martensite affichent des orientations cristallographiques, des symétries et des propriétés élastiques différentes. La contrainte est donc hétérogène à l'intérieur du grain. Enfin, nous faisons l'hypothèse usuelle d'homogénéité de la déformation de transformation à l'intérieur de chaque variante de martensite. Chaque phase, notée  $\Phi$ , est considérée comme une sous-structure d'un monocristal ou d'un grain notée  $g$  dans un milieu polycristallin considéré comme un volume élémentaire représentatif (VER). Chaque phase a une structure cristalline et une orientation propre, déduite de celles de la phase mère. Dans le reste du document une phase correspond soit à une variante M de martensite soit à la phase mère A. Chaque phase présente des propriétés élastiques et chimiques homogènes. Ainsi la déformation de transformation peut être calculée à partir des matrices de transformation de chaque variante. Elle est égale à zéro pour la phase A (phase de référence).

Cette communication présente un premier pas dans cette démarche, c'est à dire un modèle monocristallin qui prévoit la fraction volumique de chaque phase grâce à l'estimation de l'énergie libre de l'ensemble des variantes. Il est en effet fondé sur le simple fait que la phase la plus prompte à se développer est celle qui possède l'énergie libre la plus basse. Cette énergie (qui peut être vue comme l'énergie de Gibbs) est la somme des énergies élastiques et chimiques. Dans cette approche, nous négligeons le rôle des énergies interfaciales, car elles sont supposées avoir la même influence sur toutes les phases (augmentation globale de l'énergie). D'autre part, ces énergies sont fortement dépendantes de la topographie qui est ici inconnue. La transformation martensitique correspond à un profond changement dans le réseau cristallin. Elle se traduit par une distorsion (cisaillement) et une rotation du réseau, alors que le volume reste constant. Un opérateur gradient de transformation peut être utilisé pour décrire cette transformation. On considère  $n$  phases  $\Phi$  ( $\Phi = 0$  désigne l'Austénite). Les matrices  $U_{\Phi, \Phi=0\dots n}$  sont les gradients de transformation, assurant le passage de la configuration initiale  $\vec{r}_0$  (Austenitique) à la configuration déformée  $\vec{r}_\Phi$  :

$$\vec{r}_\Phi = U_\Phi \vec{r}_0 \quad (1)$$

La déformation de transformation est définie comme le tenseur de Green-Lagrange associé à la transformation :

$$\epsilon_\Phi^{tr} \simeq E_\Phi = \frac{1}{2}(\underline{U}_\Phi^T \underline{U}_\Phi - \underline{I}) \quad (2)$$

Par la suite, les phases  $\Phi$  subissent des chargements thermiques  $T$  et mécaniques  $\sigma_\Phi$  uniformes. On s'intéresse à  $W_\Phi^T$  l'énergie chimique et à  $W_\Phi^{el}$  l'énergie élastique. À chaque phase peut être associée une énergie de liaison, reliée à l'enthalpie  $H_\Phi$ . L'entropie  $S_\Phi$  doit aussi être prise en compte puisque nous nous intéressons aux équilibres d'énergie entre différentes phases à différentes températures. L'austénite a une enthalpie et une entropie différente de la martensite, ces deux grandeurs sont par contre les mêmes pour toutes les variantes, qu'elles soient thermiquement ou mécaniquement induites. L'énergie chimique considérée est donc l'enthalpie libre :

$$W_\Phi^T = H_\Phi - T.S_\Phi \quad (3)$$

L'énergie élastique est une fonction du tenseur local des contraintes  $\sigma_\Phi$  (il s'agit du tenseur des contraintes de Cauchy, ce qui suppose une approximation de petites perturbations pour l'expression du tenseur des déformations) :

$$W_\Phi^{el} = \frac{1}{2}(\sigma_\Phi : C_\Phi^{-1} : \sigma_\Phi) \quad (4)$$

$C_\Phi$  représente le tenseur de rigidité, il est différent pour chaque phase  $\Phi$ . Dans cette expression, le couplage avec la transformation de phase n'apparaît pas directement car la contrainte locale est une fonction complexe de la contrainte macroscopique appliquée et de la contrainte interne associée à la déformation de transformation. D'après Hill [9], la contrainte localisée vaut :

$$\sigma_\Phi = \sigma_g + C^* : (\epsilon_\Phi - \epsilon_g) \quad (5)$$

$\sigma_g$  est le tenseur des contraintes défini à l'échelle du grain.  $\epsilon_\Phi$  et  $\epsilon_g$  sont les tenseurs de déformations à l'échelle de la phase et du grain.  $C^*$  est le tenseur d'influence de Hill. En supposant les déformations uniformes, il a été montré dans [10] que l'énergie élastique peut se réduire à :

$$W_\Phi^\sigma = W_g^\sigma - \sigma_g : \epsilon_\Phi^{tr} \quad (6)$$

$W_g^\sigma$  est un terme énergétique homogène par grain. Il n'est pas discriminant dans la comparaison des énergies. On le choisira nul. L'énergie libre totale à l'échelle de la phase vaut donc :

$$W_\Phi = H_\Phi - T.S_\Phi - \sigma_g : \epsilon_\Phi^{tr} \quad (7)$$

À cette expression générale on ajoute un terme énergétique, noté  $L_\Phi$ , modélisant le retard dû à la germination d'une phase dans l'autre (chaleur latente). Il dépend notamment de l'histoire de chargement. A chaque phase  $\Phi$ , il est maintenant possible d'associer une fraction volumique  $f_\Phi$ , calculée à partir de son énergie libre et de celle des autres phases. On utilise une distribution de probabilité de Boltzmann, souvent utilisée dans les problèmes de magnéto-mécanique [10] :

$$f_\Phi = \frac{\exp(-A_S.W_\Phi)}{\sum_{\Phi=0}^n \exp(-A_S.W_\Phi)} \quad (8)$$

Le paramètre  $A_S$  permet d'ajuster le ratio des énergies de différentes natures lors de la comparaison. Le tenseur des déformations de transformation d'un monocristal est calculé par une loi des mélanges :

$$\epsilon_g^{tr} = \langle \epsilon_\Phi^{tr} \rangle = \sum_{\Phi=0}^n f_\Phi \cdot \epsilon_\Phi^{tr} \quad (9)$$

La modélisation du comportement d'un polycristal est envisageable dès lors que l'on décrit l'agrégat de monocristaux par une fonction de distribution d'orientation (ODF). Une première étape majeure consistera à calculer la contrainte à l'échelle du grain à partir de la contrainte macroscopique appliquée par une procédure de localisation [9]. Une méthode auto-cohérente peut être utilisée. La seconde étape sera une procédure d'homogénéisation qui permettra d'atteindre les déformations de transformation macroscopiques.

## 4 Simulation d'un essai de traction-compression sur monocristal

La transformation martensitique qui a lieu dans le  $Ni - 49.6\%_{at}Ti$  correspond à une transformation de la phase cubique (Austenite (A)) en 24 variantes monocliniques (Martensite (M)), par 12 transformations géométriques distinctes [1]. Les tenseurs de transformation peuvent être calculés à partir des paramètres de maille et de l'orientation cristalline (voir [1], [8], [2]).

$\Delta H = H_A - H_M$ ( $J/m^3$ )	$\Delta S = S_A - S_M$ ( $J/m^3/K$ )	$L_M$ ( $J/m^3$ )	$L_A$ ( $J/m^3$ )	$A_S$ ( $m^3/J$ )
$80 \times 10^6$	$0,38 \times 10^6$	$10 \times 10^6$	$5 \times 10^6$	$4 \times 10^{-7}$

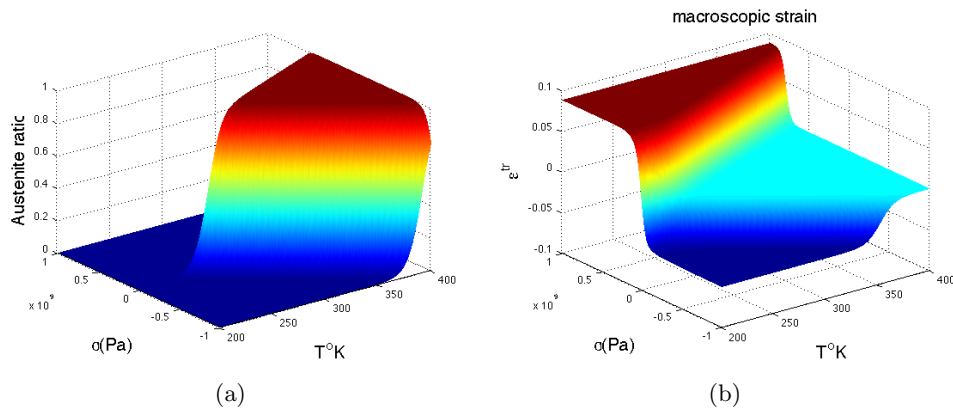


FIGURE 2 – (a) Fraction volumique d’A pour chaque  $(\sigma, T)$  (b) Déformation macro sur l’axe de sollicitation. (Cas de transformation  $A \rightarrow M$ )

Pour d’évidentes raisons de concision, seule la simulation d’un essai de traction-compression est présentée ici. Cependant, ce modèle à caractère multiaxial peut être appliqué à des essais à chargements complexes ou non-proportionnels. Pour l’heure, on considère un monocristal. La contrainte est appliquée sur l’axe [110] de l’A. Les fractions volumiques sont calculées pour chaque  $(\sigma, T)$  exploré. À cause des différences entre transformations directe et inverse, deux jeux de fractions volumiques sont calculés. La figure 2.(a) montre par exemple la fraction volumique de A pour la transformation directe ( $A \rightarrow M$ ). La figure 2.(b) représente la déformation de transformation macroscopique dans l’axe de chargement. Grâce à  $L_\Phi$ , la chaleur latente de germination introduite (retard entre  $A \rightarrow M$  et  $M \rightarrow A$ ), les transformations directe et inverse font apparaître les variantes à des niveaux de température et de contrainte différents, induisant des boucles d’hystérésis. Un tel essai uniaxial, en condition quasi-isotherme (faible vitesse) est donné figure 3.(a). La contrainte varie arbitrairement entre  $1000\text{MPa}$  et  $-1000\text{MPa}$ . La dissymétrie traction/compression du monocristal s’obtient automatiquement car les variantes de M favorisées ne sont pas les mêmes (fig 3.(b)). Comme les éprouvettes présentent une forte texture, le comportement assymétrique du polycristal découlera naturellement du comportement assymétrique du monocristal correspondant à la direction prépondérante [12]. Le modèle donne donc une bonne description qualitative des différents comportements selon les conditions de chargement, ainsi que des informations intéressantes sur les répartitions de phases.

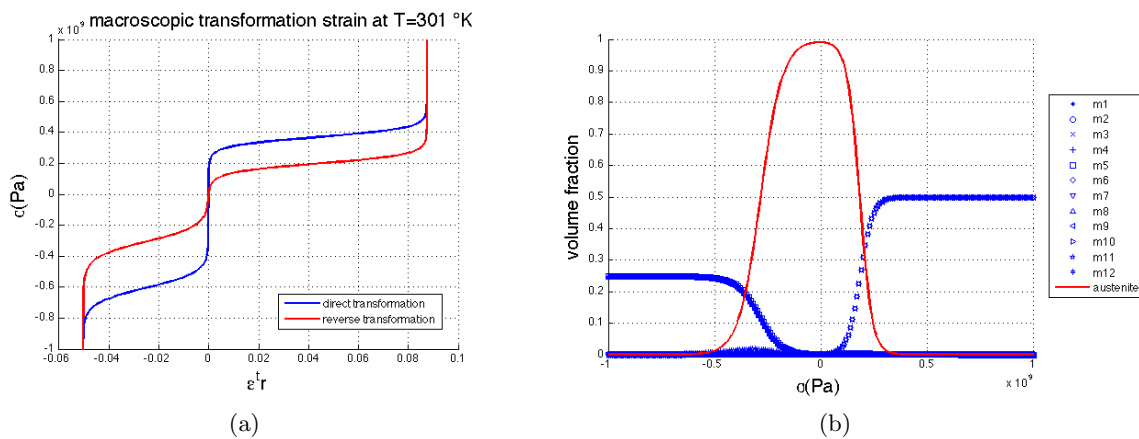


FIGURE 3 – (a) Déformation macro Vs contrainte appliquée : simulation de traction-compression isotherme (b) Fractions volumiques de chaque phase

## 5 Conclusion et Perspectives

Dans cette communication, nous proposons un modèle multiaxial et multi-échelle afin de rendre compte du fort couplage thermo-mécanique dans les Alliages à Mémoire de Forme. À l'échelle microscopique, le modèle est basé sur les modifications géométriques du réseau cristallin, sous l'effet de la température ou de la contrainte. Les fractions volumiques de chaque phase sont évaluées grâce à une comparaison statistique, de type Boltzmann, des énergies. Les estimations numériques des indicateurs pour le monocristal, tels que la déformation macroscopique de transformation ou la répartition des variantes, sont en accord avec les observations expérimentales. La prochaine étape est l'introduction de ce modèle mono-cristallin dans un système polycristallin. La prédiction des bandes de localisation et la diffusion de la chaleur, pour une éprouvette sollicitée en traction uniaxiale nécessite d'une part, l'introduction d'une loi de comportement pour un Volume Elementaire Représentatif (VER) dans un code élément fini, et d'autre part une résolution en temps réel de l'équation de la diffusion de la chaleur.

Pour l'heure, de nombreux paramètres sont choisis arbitrairement. Nous envisageons des campagnes d'essais afin de mesurer certains d'entre eux (paramètres de maille, enthalpie et entropie). Des essais particuliers, instrumentés avec des outils de mesure de champs cinématiques et thermiques devraient nous permettre d'identifier les paramètres thermiques locaux et structuraux, ainsi que la variable d'ajustement  $\Delta S$ . Évidemment, la démarche scientifique développée ici peut être appliquée à tout autre type d'AMF.

## Références

- [1] Battacharya, K. 2003 Microstructure of Martensite *In Oxford series on materials modelling (Oxford University Press)*
- [2] James, R. D., Haines, K.F. 2000 Martensitic transformation and shape-memory materials *Acta Mater* **48** 197-222
- [3] Bouvet C, Calloch S, Lexcellent C. 2004 A phenomenological model for pseudoelasticity of shape memory alloys under multiaxial proportional and nonproportional loadings *Eur. J. of Mech. A/Solids* **23** 37-61
- [4] Zaki W, Moumni Z 2007 A three-dimensional model of the thermomechanical behavior of shape memory alloys *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **55** 2455-2490
- [5] Peyroux R, Chrysochoos A, Licht C., Löbel M 1998 Thermomechanical couplings and pseudoelasticity of shape memory alloys *Int. J. of Engineering Science* **36** 489-509
- [6] Patoor et al. 2006 Shape memory alloys, Part I : General properties and modeling of single crystals *Mechanics of Materials* **38** 391-429
- [7] Lagoudas, D.C. et al. 2006 Shape memory alloys, Part II : Modeling of polycrystals *Mechanics of Materials* **38** 430-462
- [8] Pitteri, M., Zanzotto, G. 1997 Generic and non-generic cubic to monoclinic transition and their twins *Acta Mater* **46** 225-237
- [9] Hill, R. 1965 A self-consistent mechanics of composite materials *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **13** 213-222
- [10] Daniel L, Hubert O, Buiron N, Billardon R 2008 Reversible magneto-elastic behavior : A multiscale approach *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **56** 1018-1042
- [11] Maynadier A, Poncelet M, Lavernhe-Taillard K, Roux S 2011 One Shot measurement of thermal and kinematic fields : Infra-Red Image Correlation (IRIC) *Experimental Mechanics* DOI : 10.1007/s11340-011-9483-2
- [12] Gall K, et al 2001 On the mechanical behaviour of single crystal NiTi Shape Memory alloys and related polycrystalline phenomenon *Material Science and Engineering* **A317** 85-92