

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 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.

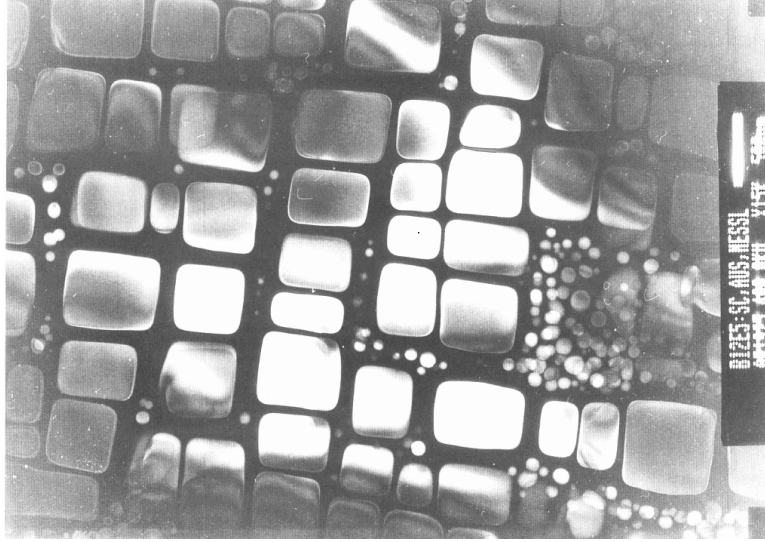


FIG. 1 – Microstructure biphasée d’un superalliage à base de nickel vue au microscope électronique à transmission. On distingue des précipités carrés et de plus petits précipités sphériques (en blanc et en gris) au sein d’une matrice en noir. La fraction volumique de phase blanche/grise est de 68%. L’échelle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

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,

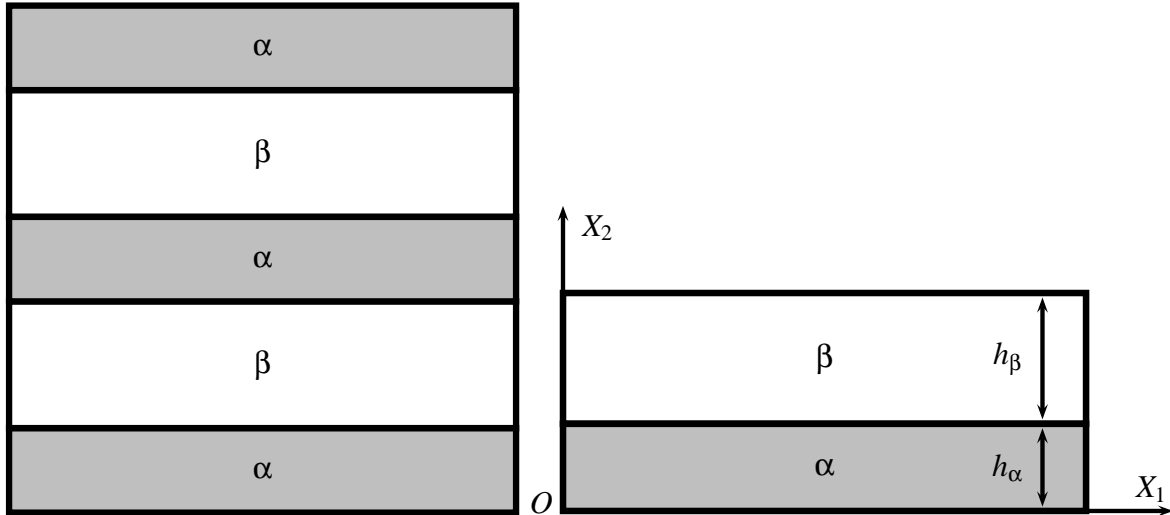


FIG. 2 – Multi-couches constitué d’une alternance de phases α et β (à gauche); motif élémentaire permettant d’étudier le comportement du multi-couches (à droite).

est indiqué.

Justifier le terme de *contraintes résiduelles*.

1.2 Relations entre les contraintes

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

$$h_\alpha \sigma_\alpha + h_\beta \sigma_\beta = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\sigma_\alpha}{M_\alpha} - \frac{\sigma_\beta}{M_\beta} = -\varepsilon^* \quad (5)$$

avec

$$M_\alpha = \frac{E_\alpha}{1 - \nu_\alpha}, \quad M_\beta = \frac{E_\beta}{1 - \nu_\beta} \quad (6)$$

Calculer alors ces contraintes.

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

1.3 Cadre infinitésimal

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

1.4 Énergie élastique

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

$$W^e = \frac{9}{2} \phi (1 - \phi) \kappa^* \varepsilon^{*2} \quad (7)$$

avec

$$\frac{1}{\kappa^*} = \frac{1 - \phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3(1 - \phi)}{4\mu_\alpha} + \frac{3\phi}{4\mu_\beta} \quad (8)$$

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.

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 ?

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 :

$$\frac{r_\alpha^3}{r_\beta^3} = \phi \quad (9)$$

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 (9), et sont tangents deux à deux. Une illustration de ce que pourrait être une telle répartition 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 $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \varepsilon^* \mathbf{1}$, 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.

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.

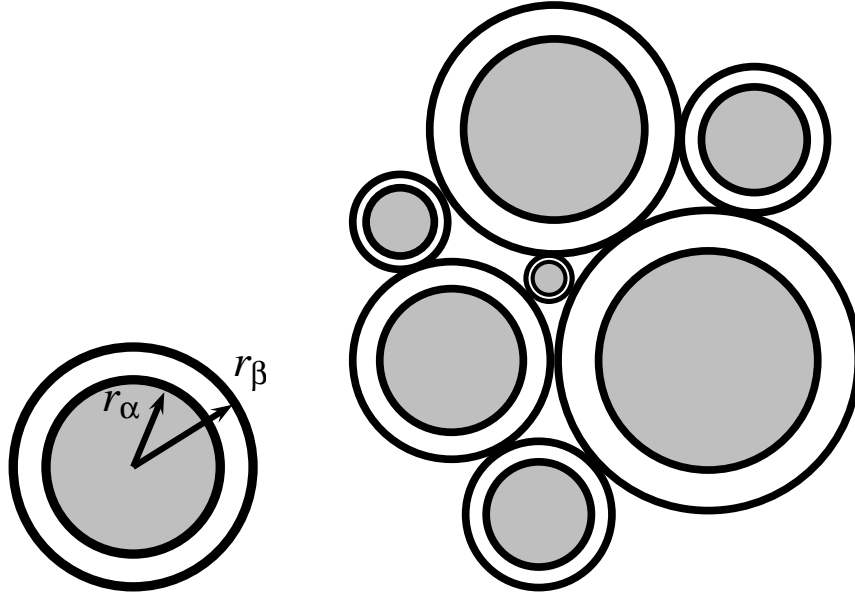


FIG. 3 – Assemblage élémentaire de sphères concentriques (à gauche). La phase α est en gris et la phase β en blanc. L’assemblage représenté à droite correspond à un arrangement de motifs élémentaires sphériques concentriques de rayon extérieur variable, tangents deux à deux, les centres de ces sphères 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.

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 (matrice β) et de la ferrite (inclusion α) 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 :

$$E = 200000 \text{ MPa}, \quad \nu = 0.3, \quad \phi = 0.1, \quad \varepsilon^* = 0.01 \quad (10)$$

Commenter les discontinuités possibles à l’interface.

2.3 Energie élastique

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

$$\bar{W}^e = \frac{9}{2} \phi (1 - \phi) \bar{\kappa}^* \varepsilon^{*2} \quad (11)$$

avec

$$\frac{1}{\bar{\kappa}^*} = \left(\frac{1 - \phi}{\kappa_\alpha} + \frac{\phi}{\kappa_\beta} + \frac{3}{4\mu_\beta} \right) \quad (12)$$

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 ?

2.4 Stabilité élastique lors de la précipitation

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

2.5 Variation de volume

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

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.

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 :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^e dV = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_\alpha} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^* dV \quad (13)$$

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 :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} dV = 0 \quad (14)$$

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 particulier au cas d'une matrice Ω_β infinie, pour calculer l'intégrale du membre de droite de l'équation (13), en fonction des propriétés élastiques des phases, de la déformation de transformation $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ et du rayon r_α de l'inclusion sphérique.

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, toujours pour une matrice infinie.

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

$$r_\alpha = \gamma \frac{3\kappa_\alpha + 4\mu_\beta}{6\kappa_\alpha\mu_\beta\varepsilon^{*2}} \quad (15)$$

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 $\gamma = 1 \text{ J.m}^{-2}$.

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.

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 $\underline{\mathbf{t}}^d$ sur le contour extérieur :

$$\underline{\mathbf{t}} = \underline{\mathbf{t}}^d = \underline{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \underline{\mathbf{n}}, \quad \forall \underline{\mathbf{x}} \in \partial\Omega \quad (16)$$

où $\underline{\boldsymbol{\Sigma}}$ 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 :

$$W^{\text{ext}} = \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{t}}^d \cdot \underline{\mathbf{u}} dS \quad (17)$$

Montrer que

$$W^{\text{ext}} = \frac{1}{V} \underline{\boldsymbol{\Sigma}} : \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} dV \quad (18)$$

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

$$\underline{\Sigma} = -p_0 \mathbf{1} \quad (19)$$

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.

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 :

$$W_p = \widehat{W}^e - W^{\text{ext}} \quad (20)$$

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.

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 :

$$[\underline{\Sigma}] = \begin{bmatrix} -\Sigma/2 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\Sigma/2 \end{bmatrix} \quad (21)$$

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 (21). 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.

* * *