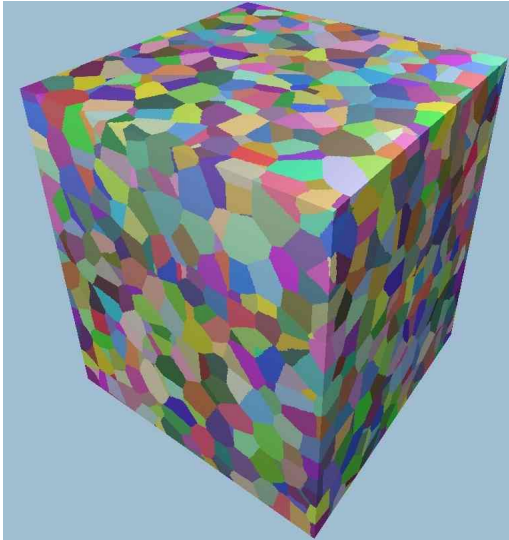


## PROPRIETES ELASTIQUES EFFECTIVES D'UN POLYCRISTAL DE CUIVRE



Microstructure d'un polycristal. La couleur de chaque grain désigne son orientation cristallographique.

Les alliages métalliques sont des matériaux hétérogènes car ils sont constitués de grains monocristallins ayant chacun une orientation cristalline distincte. Les monocristaux présentent en général un comportement élastique anisotrope (on s'en tiendra ici à la symétrie cubique propre aux cristaux de structure cristallographique cubique à faces centrées comme le cuivre considéré dans cet exercice). La différence d'orientation de grain à grain implique alors que chaque grain répond de façon différente à la sollicitation appliquée. On cherche ici, connaissant les propriétés élastiques cubiques du monocristal, à encadrer les propriétés macroscopiques du polycristal dans le cas où la distribution des orientations cristallines est purement aléatoire (on parle dans ce cas de texture isotrope).

1. Matrices d'élasticité : Ecrire la matrice  $C_{ij}$  des modules d'élasticité cubique en adoptant la notation dite de Voigt. Ecrire de même la matrice des souplesses  $S_{ij}$ . On introduira les constantes  $C_{11}, C_{12}$  et  $C_{44}$ . On définit les coefficients d'anisotropie :

$$a_c = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}, \quad a_s = \frac{2(S_{11} - S_{12})}{S_{44}}$$

Justifier cette dénomination. Montrer que  $a_c = a_s$ .

Ces matrices sont destinées à représenter le comportement du monocristal. Si la distribution des orientations cristallines est purement aléatoire au sein du polycristal, que pensez-vous de la symétrie de la matrice d'élasticité du polycristal ?

On rappelle que la notation de Voigt est introduite pour remplacer la forme générale de la loi d'élasticité

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

par la relation matricielle

$$\sigma_I = C_{IJ} \varepsilon_J$$

Les tenseurs de contraintes et de déformation sont identifiés à des vecteurs de  $\mathbb{R}^6$ . Dans le cas de l'élasticité cubique et dans la base orthonormée liée aux axes de symétrie, ces matrices et vecteurs s'écrivent :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}$$

Il faut faire attention au fait que, traditionnellement,  $\varepsilon_4$  est mis pour  $2\varepsilon_{23} = \gamma_{23}$ . Les relations entre les composantes de la matrice et celles du tenseur d'élasticité sont donc :

$$C_{11} = c_{1111} \quad C_{12} = c_{1122} \quad C_{14} = c_{1123} \quad C_{44} = c_{2323}$$

Il existe de même une matrice des souplesses

$$\varepsilon_I = S_{IJ} \sigma_J$$

La matrice des  $S_{IJ}$  est donc l'inverse de la matrice des  $C_{IJ}$  mais on fera attention au fait que l'identification avec le tenseur d'ordre 4 correspondant est alors la suivante :

$$S_{11} = s_{1111} \quad S_{12} = s_{1122} \quad S_{14} = 2s_{1123} \quad S_{44} = 4s_{2323}$$

Dans le cas cubique, les relations suivantes entre les  $C_{IJ}$  et  $S_{IJ}$  permettent de montrer aisément que les coefficients d'anisotropie  $a_c = a_s$  sont égaux :

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})} \quad S_{12} = \frac{-C_{12}}{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})} \quad S_{44} = \frac{1}{C_{44}}$$

2. Ecriture des tenseurs d'élasticité isotrope : On introduit ici des opérateurs d'ordre 4 permettant de manipuler simplement les tenseurs d'élasticité isotrope. L'opérateur  $\underline{\underline{J}}$  appliqué à un tenseur d'ordre 2 symétrique  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  fournit son déviateur  $\underline{\underline{e}}$ . L'opérateur  $\underline{\underline{K}}$ , quant à lui, appliqué à  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  donne sa partie sphérique :

$$\underline{\underline{J}} : \underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{e}}, \quad \underline{\underline{K}} : \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{3}(\text{Tr} \underline{\underline{\varepsilon}}) \underline{\underline{1}}$$

Il s'ensuit que

$$\underline{\underline{J}} + \underline{\underline{K}} = \underline{\underline{I}}$$

où  $\underline{\underline{I}}$  est le tenseur identité d'ordre 4 opérant sur les tenseurs d'ordre 2 symétriques. En terme de composantes, on a, pour information :

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \quad K_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}$$

Vérifier que tout tenseur des modules d'élasticité isotrope se met sous la forme

$$\underline{\underline{C}} = 2\mu\underline{\underline{J}} + 3k\underline{\underline{K}}$$

où  $\mu$  et  $k$  sont respectivement les modules de cisaillement et de compressibilité. Montrer que le tenseur des souplesses correspondant s'écrit :

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{C}}^{-1} = \frac{1}{2\mu} \underline{\underline{J}} + \frac{1}{3k} \underline{\underline{K}}$$

On remarque que  $\underline{\underline{J}} : \underline{\underline{K}} = \underline{\underline{K}} : \underline{\underline{J}} = 0$  et on vérifie alors que l'inverse d'un tenseur isotrope s'obtient directement en prenant l'inverse des coefficients devant  $\underline{\underline{J}}$  et  $\underline{\underline{K}}$ . Cela vient simplement du fait que  $2\mu$  et  $3k$  sont les valeurs propres du tenseur isotrope  $\underline{\underline{C}}$ , les tenseurs propres associés constituant respectivement une base des tenseurs déviatoriques et sphériques.

3. Borne de Voigt pour le polycristal,  $\underline{\underline{C}}^V = \langle \underline{\underline{c}} \rangle$  : Justifier que si la distribution des orientations cristallines est isotrope, alors la borne supérieure de Voigt  $\underline{\underline{C}}^V$  est un tenseur isotrope :

$$\underline{\underline{C}}^V = 2\mu^V \underline{\underline{J}} + 3k^V \underline{\underline{K}}$$

Pour accéder à  $\mu^V$  et  $k^V$ , il faudrait calculer la moyenne sur les matrices d'élasticité tournées pour toutes les orientations possibles. Un tel calcul est possible mais fastidieux. On peut s'en sortir plus efficacement en utilisant les invariants du tenseur  $c_{ijkl}$  du monocristal.

On appelle invariant une fonction des composantes d'un tenseur dont la valeur ne dépend pas du repère choisi pour les exprimer. La trace et le déterminant sont des invariants d'un tenseur d'ordre 2 car ils s'expriment en fonction des valeurs propres uniquement. Calculer les invariants suivants du tenseur d'ordre 4  $\underline{c}$  :

$$c_{iikk}, \quad c_{ijij}$$

Calculer aussi les invariants  $J_{iijj}, J_{ijij}, K_{iijj}, K_{ijij}$ . Calculer enfin la valeurs des invariants  $C_{iijj}^V, C_{ijij}^V$  pour le tenseur  $\underline{C}^V$  en fonctions de  $\mu^V$  et  $k^V$ . En déduire les bornes supérieures  $\mu^V$  et  $k^V$  en fonction des  $C_{ij}$  du monocristal.

On trouve successivement

$$c_{iikk} = 3C_{11} + 6C_{12}, \quad c_{ijij} = 3C_{11} + 6C_{44}$$

$$J_{iijj} = 0, \quad J_{ijij} = 5, \quad K_{iijj} = 3, \quad K_{ijij} = 1$$

$$C_{iikk}^V = 9k^V, \quad C_{ijij}^V = 10\mu^V + 3k^V$$

On fait valoir ensuite le fait que les invariants de  $\underline{C}^V$  sont liés à ceux des modules locaux  $\underline{c}$  par

$$C_{iijj}^V = \langle c_{iijj} \rangle = c_{iijj}, \quad C_{ijij}^V = \langle c_{ijij} \rangle = c_{ijij}$$

On en déduit que les modules effectifs  $\mu^{eff}, k^{eff}$  du polycristal à texture isotrope sont bornés par  $\mu^V$  et  $k^V$ , c'est-à-dire :

$$k^{eff} \leq k^V = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}, \quad \mu^{eff} \leq \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5}$$

4. Borne de Reuss pour le polycristal,  $\underline{S}^V = \langle \underline{s} \rangle$  : Justifier que si la distribution des orientations cristallines est isotrope, alors la borne inférieure de Reuss  $\underline{S}^R$  est un tenseur isotrope :

$$\underline{S}^R = \frac{1}{2\mu^R} \underline{J} + \frac{1}{3k^R} \underline{K}$$

Pour calculer  $\underline{S}^R$  on utilise à nouveau les invariants des tenseurs d'ordre 4 impliqués. On note  $\underline{s} = \underline{c}^{-1}$  le tenseur des souplesses du monocristal. Calculer successivement  $s_{iijj}, s_{ijij}, S_{iijj}^R, S_{ijij}^R$ . En déduire les bornes inférieures  $\mu^R, k^R$ .

On trouve successivement

$$s_{iijj} = 3S_{11} + 6S_{12}, \quad s_{ijij} = 3S_{11} + \frac{3}{2}S_{44}$$

On fait attention pour ce dernier calcul que  $s_{2323} = S_{44}/4$ .

$$S_{iijj}^R = \frac{1}{k^R}, \quad S_{ijij}^R = \frac{5}{2\mu^R} + \frac{1}{3k^R}$$

Il s'agit formellement du même calcul que pour  $\underline{C}^V$  en remarquant que  $1/3k^R$  et  $1/2\mu^R$  jouent le rôle de  $3k^V$  et  $2\mu^V$  respectivement. On obtient finalement

$$3k^{eff} \geq 3k^R = \frac{1}{S_{11} + 2S_{12}}, \quad \mu^{eff} \geq \mu^R = \frac{5}{4S_{11} - 4S_{12} + 3S_{44}}$$

5. Encadrement des modules effectifs : Exprimer  $k^R$  en fonction des  $C_{ij}$ . Que remarquez-vous ? Qu'en déduisez-vous sur la valeur de  $k^{eff}$  ? Etait-ce prévisible ? Donner enfin un encadrement de  $\mu^{eff}$  en fonction de  $C_{44}$  et du coefficient d'anisotropie  $a_c = a_s = a$ .

En utilisant les relations liant les  $C_{ij}$  et les  $S_{ij}$  qui ont été rappelées, on trouve les relations suivantes entre les modules de compressibilité :

$$3k^R = \frac{1}{S_{11} + 2S_{12}} = C_{11} + 2C_{12}$$

$$k^R = k^V = k^{eff}$$

Le module de compressibilité effectif d'un agrégat de grains à symétrie cubique est donc connu de manière unique en fonction des  $C_{ij}$  du monocristal. Cela est simplement dû au fait que la réponse d'un monocristal cubique à une sollicitation sphérique est indépendante de son orientation. Ce n'est pas le cas si la symétrie du cristal est quadratique ou orthotrope. Il n'en va pas de même de  $\mu^{eff}$  dont la valeur exacte dépend de l'arrangement particulier et de la morphologie des grains. On peut simplement donner l'encadrement

$$\frac{5C_{44}}{3+2a} \leq \mu^{eff} \leq \frac{3a+2}{5a} C_{44}$$

6. Application numérique : Pour le cuivre pur monocristallin, on a

$$C_{11} = 168400 \text{MPa}, \quad C_{12} = 121400 \text{MPa}, \quad C_{44} = 75390 \text{MPa}$$

Calculer  $a, k^{eff}, \mu^V, \mu^R$ . Trouver dans un manuel ou un site de propriétés mécaniques des matériaux le module de cisaillement du cuivre polycristallin isotrope usuel et vérifier que cette valeur est comprise entre les bornes de Voigt et Reuss.

On trouve une anisotropie importante,  $a = 3.21$  (en comparaison, l'aluminium monocristallin par exemple donnerait une valeur proche de 1.1). Dans le cas du cuivre, il vient :

$$k^{eff} = 137067 \text{MPa}, \quad \mu^V = 54634 \text{MPa}, \quad \mu^R = 40032 \text{MPa}$$

On trouve usuellement des valeurs expérimentales de l'ordre de 50000 MPa pour le module de cisaillement du cuivre pur polycristallin isotrope.