

C. Denoual, A. Vattré, *CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpaçon cedex, christophe.denoual@cea.fr*
Transitions de phase martensitique, plasticité, choc

1 INTRODUCTION

En raison des difficultés expérimentales liées aux sollicitations de type choc (fortes vitesses de déformation, hautes pressions, grandes transformations) un effort a été entrepris pour mieux comprendre et mieux prévoir le comportement et la rupture des métaux sous sollicitations extrêmes. Une modélisation fine du comportement a été proposée pour nourrir les simulations "mésoscopiques", pour lesquelles les échelles de temps et d'espace ont été réduites au strict minimum, au profit de la résolution spatiale. Ces simulations à grand nombre de mailles et utilisant les meilleurs modèles disponibles, permettent par exemple de mieux comprendre l'apparition de structures complexes et hiérarchisées, ou d'analyser l'influence d'une caractéristique microstructurale (par exemple la texture d'un polycristal) sur le comportement.

Parmi les mécanismes responsables d'une déformation irréversible, la plasticité et les changements de phases solide-solide jouent un rôle central, objet des modélisations décrites dans cet article.

Le premier mécanisme est causé par le mouvement de dislocations, lignes de défaut du cristal, qui glissent dans des directions et suivant des plans bien définis et contraints par la cristallographie. La vitesse de ces lignes peut dépendre de nombreux paramètres, comme la contrainte appliquée, le type du cristal considéré, la température, mais également son histoire. Le second mécanisme – les changements de phase solide-solide ou martensitiques – permet de grandes déformations de la matière, par mouvement coordonné (quelques fois appelé "militaire") d'un grand nombre d'atomes.

Ces deux mécanismes (plasticité et transformation de phase) interviennent lors de déformation de métaux, soit de façon concurrente (l'activation de la plasticité peut par exemple inhiber une transformation martensitique induite par la contrainte), soit de façon complémentaire (l'apparition de plaquettes d'une nouvelle phase est plus facile si elle est accompagnée d'une déformation plastique). Le développement d'un modèle fusionnant ces deux approches est une étape cruciale pour la modélisation des métaux.

Comme pour la plasticité, la cinétique des transformations martensitiques et les déformations résultantes sont intimement liée à la cristallographie, à la température, au paysage énergétique traversé, etc. Lors d'un changement de phase, plusieurs "variants" (même structure cristallographique, mais orientation différente) d'une même phase peuvent être créés simultanément (jusqu'à 24). L'existence de ces nombreux variants, qui ne diffèrent entre eux que par une opération de symétrie, sont une des raisons de la complexité de la modélisation des transitions de phase martensitiques. Enfin, pour de nombreux matériaux, de nombreuses phases cristallographiques doivent être considérées, entraînant une multiplication de ces variants. Dans la modélisation que nous proposons, une représentation originale du potentiel à minimiser, à l'aide d'un squelette appelé arbre des réactions, permet la prise en compte de plusieurs centaines de variants. Une attention particulière a été portée à la prise en compte de l'élasticité anisotrope et des variations de raideur lors des transitions, indispensable à la restitution précise des expériences de choc.

Ces modélisations, développées dans un cadre multiéchelle, sont très consommatrices de temps calcul pour deux raisons. Premièrement, le développement dans un cadre multiéchelle conduit à de forts couplages avec l'échelle de la structure électronique et donc à des calculs ab initio coûteux, souvent réalisés en balayant un ou plusieurs paramètres (par exemple la pression, un paramètre de maille, etc).

Ensuite, ces modélisations, conçues pour être représentatives de la matière à une échelle mésoscopique (entre l'échelle atomique et le grain cristallin), doivent permettre la modélisation de la matière à l'échelle de plusieurs grains, et donc en pratique sur plusieurs millions de mailles.

Ce qui est abordé dans cet article. La plupart des modélisations reposent sur une séparation de l'énergie en une part élastique une part d'énergie chimique (ou inélastique) :

$$\psi(\mathbf{F}, \mathbf{F}^t) = \psi_e(\mathbf{F}, \mathbf{E}e) + \psi_t(\mathbf{F}^t) \quad (1)$$

avec l'énergie élastique $\psi_e(\mathbf{F}, \mathbf{E}e)$ dépendant des déformations élastiques $\mathbf{E}e$ et l'énergie inélastique $\psi_t(\mathbf{F}^t)$ fonction de la distorsion transformationnelle \mathbf{F}^t (déformation imputable aux changements de phase). Dans cette représentation, l'énergie élastique dépend également de la déformation totale \mathbf{F} via la variation des modules d'élasticité. La difficulté essentielle pour représenter les transitions de phases avec de nombreux variants est de définir un potentiel $\psi_t(\mathbf{F}^t)$ possédant de très nombreux puits (autant que de variants, donc souvent plusieurs centaines) dans un espace de dimension élevé (\mathbb{R}^6 ou \mathbb{R}^9). La définition d'un tel potentiel est l'objet principal de cet article.

Ce qui n'est pas abordé dans cet article. La dépendance des modules élastiques à la déformation totale permet d'introduire les équations d'état froides dans le formalisme (dépendance des modules à la variation de volume V/V_0). Cette méthode devient ainsi compatible avec les sollicitations de choc. Nous n'aborderons pas également la transition d'échelle permettant de définir l'énergie chimique d'un calcul microscopique (par exemple ab initio). Nous supposerons donc simplement cette énergie connue pour une transformation donnée. Le couplage avec la plasticité est obtenu en supposant que la déformation totale se décompose de la façon suivante :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}e \cdot \mathbf{F}^t \cdot \mathbf{F}p \quad (2)$$

avec $\mathbf{F}e$ la distorsion élastique, et $\mathbf{F}p$ la déformation plastique. Le cadre thermodynamique de ce couplage ainsi que les lois d'évolution de $\mathbf{F}p$ ne sera pas abordé ici.

Nous commencerons par la définition de l'arbre des chemins de réaction, en prenant pour exemple une transformation simple (réseau carré vers hexagonal). Nous définirons ensuite l'énergie pour un chemin, puis pour un ensemble de chemins. Un exemple final permettra de mettre en lumière quelques caractéristiques des transformations martensitiques impliquant un grand nombre de phases stables. L'essentiel des relations décrites ont été proposées par Denoual et al. (2010).

2 Notations

$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$	Produit scalaire
$ \mathbf{A} = (\mathbf{A} : \mathbf{A})^{\frac{1}{2}}$	Norme de Frobenius
\mathbf{T}	Distorsion le long d'un chemin
\mathbf{F}	Distorsion totale
\mathbf{F}^t	Distorsion transformationnelle
$\mathbf{F}e$	Distorsion élastique
\mathbf{X}	Un vecteur dans le référentiel initial
\mathbf{x}	Un vecteur dans le référentiel déformé
${}^b\mathbf{A}, {}^b\mathbf{A}^t, {}^b\mathbf{A}^{-t}$	Transformation vers une phase 'b' (dans le référentiel 'a'), sa transposée et transposée inverse.
${}^a\mathbf{A}$	Distorsion transformationnelle d'une phase 'a' dans le référentiel du labo.

Les doubles contractions précèdent les contraction simples : $\mathbf{A} : \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} = (\mathbf{A} : \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}$.

3.1 Création de l'arbre des réactions

Les distorsions sont habituellement exprimées dans le référentiel de référence. Cependant, les distorsions transformationnelles sont souvent données de façon incrémentale, en définissant les nouvelles phases relativement à la précédente phase stable. Nous définissons la transformation ${}^a\mathbf{T}$ qui déplace le réseau de Bravais depuis le réseau original $\{e_1, e_2, e_3\}$ vers le réseau déformé (ou variant) du cristal 'a' $\{e'_1, e'_2, e'_3\}_a$:

$$e'_i = {}^a\mathbf{T} \cdot e_i \quad (3)$$

avec les exposants indiquant la phase d'arrivée. Une seconde déformation incrémentale transformera la phase 'a' en une phase 'b', notée ${}^b\mathbf{T}$:

$$e''_i = {}^b\mathbf{T} \cdot e'_i, \quad (4)$$

avec l'indice 'a' indiquant le référentiel de départ et 'b' la phase d'arrivée. Ainsi, ${}^b\mathbf{T}$ représente une distorsion définie relativement à la phase 'a' qui transforme le réseau de Bravais de 'a' dans le référentiel de la phase 'b'. En notant ${}^b\mathbf{T}$ la même distorsion depuis le référentiel du laboratoire vers la phase 'b', nous tirons des éqns. (3, 4)

$${}^b\mathbf{T} = {}^b\mathbf{T} \cdot {}^a\mathbf{T}^{-1}. \quad (5)$$

Cette distorsion relative est le composant essentiel de l'arbre des chemins de réaction, décrit ci-après.

En raison des symétries cristallines, un groupe de rotations $\{{}^1\mathbf{R}, \dots, {}^n\mathbf{R}\}$ (groupe ponctuel de rotation, GP) laisse invariant le réseau cristallin. Par exemple, un réseau carré sera laissé invariant par des rotations de 90° , 180° , etc. Les indices de gauches indiquent la phase de référence (ici 'a'), et les exposants gauches le numéro de la phase. L'invariance de l'énergie relativement aux rotations du GP implique que les distorsions des variants 'bi' peuvent être engendrés par la rotation d'une distorsion représentative ${}^{b1}\mathbf{T}$:

$${}^{bi}\mathbf{T} = {}^i\mathbf{R}^t \cdot {}^{b1}\mathbf{T} \cdot {}^i\mathbf{R}, \quad (6)$$

avec l'exposant de gauche 'bi' indiquant que ${}^{bi}\mathbf{T}$ se termine sur le variant i^{th} . Les distorsions de départ et d'arrivée sont exprimées dans le référentiel du labo (voir éqn. (5)) :

$${}^{bi}\mathbf{T} = {}^i\mathbf{R}^t \cdot {}^b\mathbf{T} \cdot {}^a\mathbf{T}^{-1} \cdot {}^i\mathbf{R} \cdot {}^a\mathbf{T}. \quad (7)$$

Dans la plupart des cas, les GP des phases partagent de nombreuses rotations, laissant ainsi inchangées les distorsions (précisément : pour de nombreux ${}^i\mathbf{R}$, on a ${}^{bi}\mathbf{T} = {}^{b1}\mathbf{T}$). Le nombre de nouvelles phases ${}^{bi}\mathbf{T}$ produites est donc égale au nombre de rotations de la phase mère qui n'est pas dans le GP de la phase fille. L'ensemble des rotations du GP $\{{}^1\mathbf{R} \dots {}^j\mathbf{R} \dots {}^n\mathbf{R}\}$ des phases ainsi dupliquées 'bi' doivent également être exprimées dans le repère du nouveau chemin :

$${}^j\mathbf{R}_{bi} = {}^i\mathbf{R}^t \cdot {}^j\mathbf{R}_{b1} \cdot {}^i\mathbf{R} \quad (8)$$

Les équations (7, 8), utilisées récursivement, engendre un ensemble non borné de variants et de groupes ponctuels de rotations. Un exemple d'une telle construction est proposée en section (3.3).

Nous définissons un chemin comme l'ensemble des déformations permettant une déformation continue entre des phases stables ou métastables, définies par leur distorsion dans le repère de référence. De nombreuses études ont été proposées pour déterminer précisément la forme de ces chemins (voir par exemple Caspersen and Carter (2005) pour une méthode permettant de définir ces chemins ou Dupe et al. (2013) pour une analyse des chemins de transition $\alpha - \epsilon$ dans le fer). Gardant en mémoire notre objectif d'utiliser un grand nombre de chemins de réaction, nous considérons une interpolation linéaire entre distorsions comme approximation du chemin :

$${}^{ab}\widehat{\mathbf{T}}(s) = \left(1 - \frac{s}{s_{ab}}\right) {}^a\mathbf{T} + \frac{s}{s_{ab}} {}^b\mathbf{T} \quad (9)$$

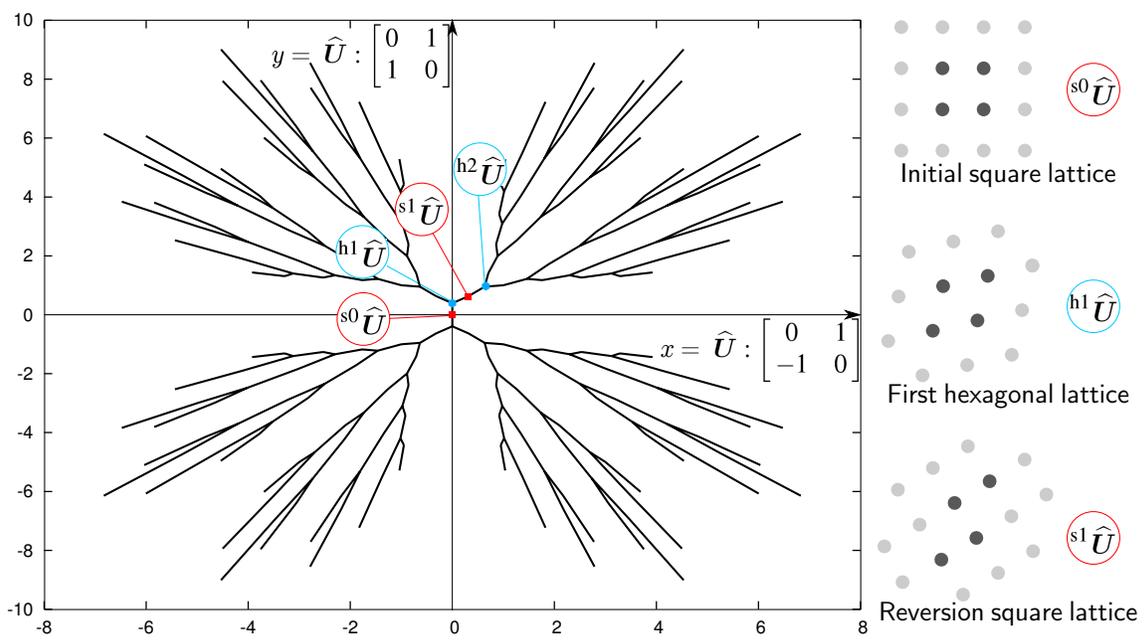


FIG. 1 – Représentation de l’arbre des réactions pour les 5 premiers cycles d’une transformation carré \Rightarrow hexa. Droite : représentation de 4 arrangements atomiques (phase initiale ‘S0’ et 3 variants ‘h1’, ‘s1’, et ‘h2’).

avec s entre 0 et $s^{ab} = |{}^b\mathbf{T} - {}^a\mathbf{T}|$ et les exposants de gauches a et b distinguant les phases de départ et d’arrivée. Le chapeau sera utilisé par la suite pour définir les variables exprimées sur ce chemin. Comme pour les notations précédentes, ${}^{ab}\hat{\mathbf{T}}(s)$ représente l’évolution progressive depuis la phase ‘a’ jusqu’à la phase ‘b’ dans le référentiel du laboratoire, sans indice gauche.

3.2 Arbre des élongations

Les tenseurs ${}^{ab}\mathbf{T}$ sont non-symétriques en général et peuvent être séparés en élongation et rotation par une décomposition polaire : ${}^{ab}\mathbf{T} = \mathbf{R} \cdot {}^{ab}\mathbf{U}$. La rotation \mathbf{R} , que nous considérons après l’élongation ${}^{ab}\mathbf{U}$, permet de distinguer des variants d’orientation différente mais ayant subi la même déformation. L’évolution des phases est un processus dissipatif obtenu par l’évolution $\dot{\mathbf{F}}t$ le long des chemins de l’arbre. Nous faisons l’hypothèse que cette dissipation n’est pas couplée avec les rotations, c-à-d que $\dot{\mathbf{F}}t$ est symétrique. Ceci peut être garanti en construisant l’arbre à partir des distorsions ${}^{ab}\hat{\mathbf{U}}(s)$:

$${}^{ab}\hat{\mathbf{T}}(s) = {}^{ab}\hat{\mathbf{U}}(s) \cdot \mathbf{R}(s) \quad (10)$$

avec ${}^{ab}\hat{\mathbf{U}}(s)$ l’élongation de ${}^{ab}\hat{\mathbf{T}}(s)$ et $\mathbf{R}(s)$ sa rotation. Utiliser ${}^{ab}\hat{\mathbf{U}}(s)$ pour les chemins au lieu de ${}^{ab}\hat{\mathbf{T}}(s)$ retire toutes les rotations de $\dot{\mathbf{F}}t$. Dans ce qui suit, nous ne considérerons que les chemins construits sur des élongations.

3.3 Exemple d’arbre : la transition école carré/hexa

Nous considérons à titre d’exemple la transition école d’un arrangement 2D d’atomes, depuis un réseau carré vers un réseau hexagonal (Fig. 1). La distorsion associée est une combinaison de cisaillement simple et d’élongation, à surface constante (l’exposant ‘h’ indique la phase hexagonale) :

$${}^h\mathbf{T} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}}} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Un sous-ensemble des GP de rotations est $\{z^{90^\circ}, z^{180^\circ}, z^{270^\circ}\}$ pour le réseau carré et $\{z^{60^\circ}, z^{120^\circ}, z^{180^\circ}, z^{240^\circ}, z^{300^\circ}\}$ pour la phase hexagonale. Ce sous-ensemble est dupliqué et tourné en utilisant

l'éqn. (8), de même que l'ensemble des distorsions (ou chemin) conduisant à cette transformation 'carré' vers 'hexa' (noté 'ch') :

$$\text{ch } \widehat{\mathbf{U}}(s) = \left(1 - \frac{s}{s^{\text{ch}}}\right) \mathbf{I} + \frac{s}{s^{\text{ch}}} \mathbf{U}^{\text{h}} . \quad (12)$$

Pour représenter ces chemins sur un graphe à 2 dimensions (Fig. (1)), nous définissons les coordonnées x et y :

$$x = \text{ch } \widehat{\mathbf{U}}(s) : \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$y = \text{ch } \widehat{\mathbf{U}}(s) : \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (14)$$

L'arbre engendré par le cycle des transformations et réversions est un graph simple sans cycle : tous les variants "feuilles" sont le produit d'un seul ensemble de transformations intermédiaires. Dans le paragraphe suivant, nous définissons le potentiel construit sur cet arbre.

4 DÉFINITION D'UN POTENTIEL

Dans la figure (1), les phases stables sont représentées par des connexions et les chemins comme des lignes reliant ces noeuds. Dans cette section, nous définissons un paysage énergétique valable pour toutes les déformations possibles, en utilisant ce squelette. Pour cette construction, nous posons que l'arbre représente les états d'énergie minimale du système, pour les phases stables ou métastables. Quand une distorsion \mathbf{F}^{t} ne tombe pas sur cet arbre, une énergie supplémentaire est ajoutée. Cette définition pour un chemin est ensuite étendue à un ensemble de chemins, par une opération comparable à une interpolation. Bien que les chemins soit définis sur des elongations (\mathbf{U}), nous construirons ce potentiel sur \mathbf{F} pour garder la généralité de l'approche.

4.1 Distance d'un chemin

Nous définissons la distance d^{ab} d'un chemin liant la phase 'a' à la phase 'b' à une distorsion \mathbf{F} comme

$$d^{\text{ab}}(\mathbf{F}) = \min_{s_{\perp} \in [0, s^{\text{ab}}]} \left| \mathbf{F} - {}^{\text{ab}}\widehat{\mathbf{T}}(s) \right| \quad (15)$$

avec s_{\perp} l'abscisse le long du chemin qui minimise la distance. L'argument s_{\perp} s'obtient en posant $\partial d^{\text{ab}} / \partial s = 0$ pour $s \in [0, s^{\text{ab}}]$. Pour cela, il est pratique de définir l'abscisse s^{∞} qui minimise $d^{\text{ab}}(s) > 0$ pour un chemin infini, c-à-d, avec $s \in] - \infty ; \infty [$:

$$s^{\infty} = \Delta : (\mathbf{F} - {}^{\text{a}}\mathbf{T}) . \quad (16)$$

On nomme $\Delta = \partial {}^{\text{ab}}\widehat{\mathbf{T}}(s) / \partial s = ({}^{\text{b}}\mathbf{T} - {}^{\text{a}}\mathbf{T}) / s^{\text{ab}}$ la direction normalisée du chemin ($|\Delta| = 1$). Puis on défini s_{\perp} comme la restriction s^{∞} à l'intervalle $[0, s^{\text{ab}}]$:

$$\begin{cases} s^{\infty} < 0 & : s_{\perp} = 0 \\ s^{\infty} \in [0, s^{\text{ab}}] & : s_{\perp} = s^{\infty} \\ s^{\infty} > s^{\text{ab}} & : s_{\perp} = s^{\text{ab}} \end{cases} \quad (17)$$

Cette définition de d^{ab} est celle d'une distance Euclidienne d'un point à un segment dans \mathbb{R}^9 .

La dérivation de d^{ab} relativement aux déformations totales \mathbf{F} définit la normale \mathbf{N} au chemin (on notera que s_{\perp} est une fonction de \mathbf{F}) :

$$\mathbf{N} = \frac{\partial d^{\text{ab}}}{\partial \mathbf{F}} = \frac{1}{d^{\text{ab}}} \left[\mathbf{F} - \widehat{\mathbf{T}}(s_{\perp}) \right] . \quad (18)$$

Notons que s_{\perp} est limité à l'intervalle $[0, s^{\text{ab}}]$, les iso- d surfaces sont donc arrondies aux deux extrémités du chemin. Une représentation schématique Δ, \mathbf{N} est proposée en fig. (2). Pour $s \in [0, s^{\text{ab}}]$, nous pouvons vérifier que $\mathbf{N} : \Delta = 0$, c-à-d les directions des normales et de la direction de chemin sont orthogonales.

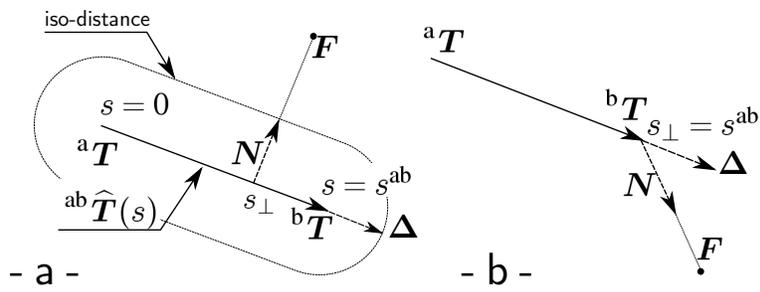


FIG. 2 – Représentation du tenseur de direction Δ , du tenseur normal N , et du chemin ${}^{ab}\widehat{T}(s)$ dans l'espace des distortions. Gauche : quand s_{\perp} est dans $[0, s^{ab}]$, la normale N est orthogonale à Δ car nous avons $\Delta : N = 0$. Droite : aux extrémités, les iso-distances sont des sphères.

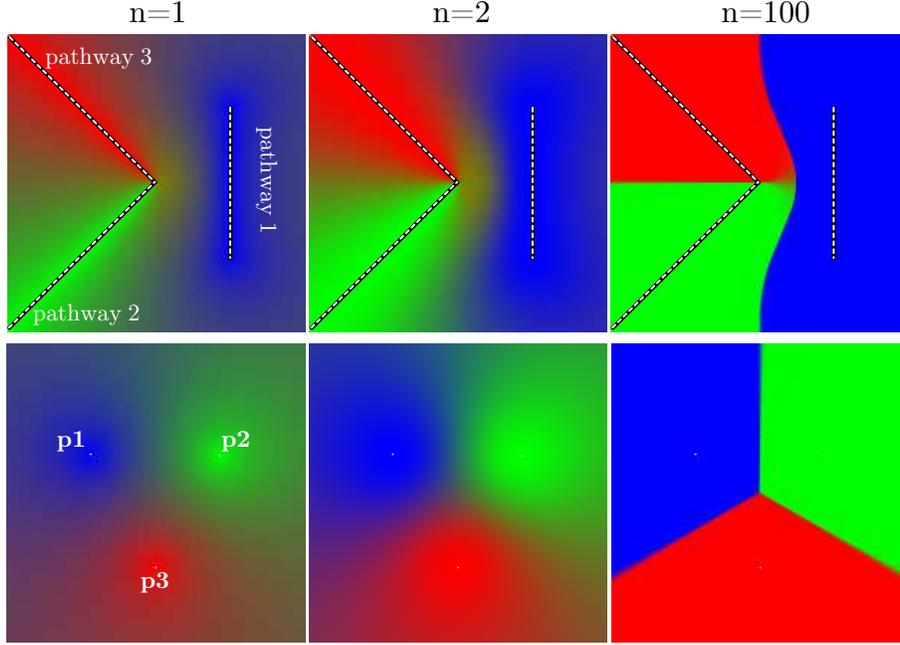


FIG. 3 – Fonctions de poids w_1, w_2, w_3 représentées comme des composantes rouge-verte-bleue. De gauche à droite, en haut : fonction de poids pour différents exposants n , en bas : les mêmes fonctions pour trois points équi-distants.

4.2 Extrapolation de l'énergie inélastique autour d'un chemin

Dans les sections précédentes, l'énergie inélastique est définie sur un chemin, c'est à dire pour $\mathbf{F}t = \mathbf{F}t(s)$. Nous étendons la définition de $\psi_t^{ab}(s)$ à tout l'espace des transformations en ajoutant une énergie proportionnelle à la distance au chemin :

$$\psi_t^{ab}(\mathbf{F}t) = \psi_t^{ab}[s(\mathbf{F}t)] + \sigma d^{ab}(\mathbf{F}t) \quad (19)$$

avec $d^{ab}(\mathbf{F}t)$ la distance au chemin 'ab', $s(\mathbf{F}t)$ l'abscisse qui minimise la distance entre $\mathbf{F}t$ et le chemin, et σ un scalaire. Le paramètre σ , comparable à une contrainte à appliquer pour quitter le chemin, est un paramètre phénoménologique de l'énergie inélastique $\psi_t^{ab}(\mathbf{F}t)$.

4.3 Interpolation d'un ensemble de chemins

Une transition entre deux chemins (par exemple entre deux feuilles de l'arbre représenté en Fig. (1)) peut être observé lors du mouvement de l'interface entre variants non-directement reliés par un chemin. Dans cette section, nous définissons le potentiel d'énergie inélastique $\psi_t(\mathbf{F}t)$ comme une interpolation des potentiels de chemins $\psi_t^k(\mathbf{F}t)$.

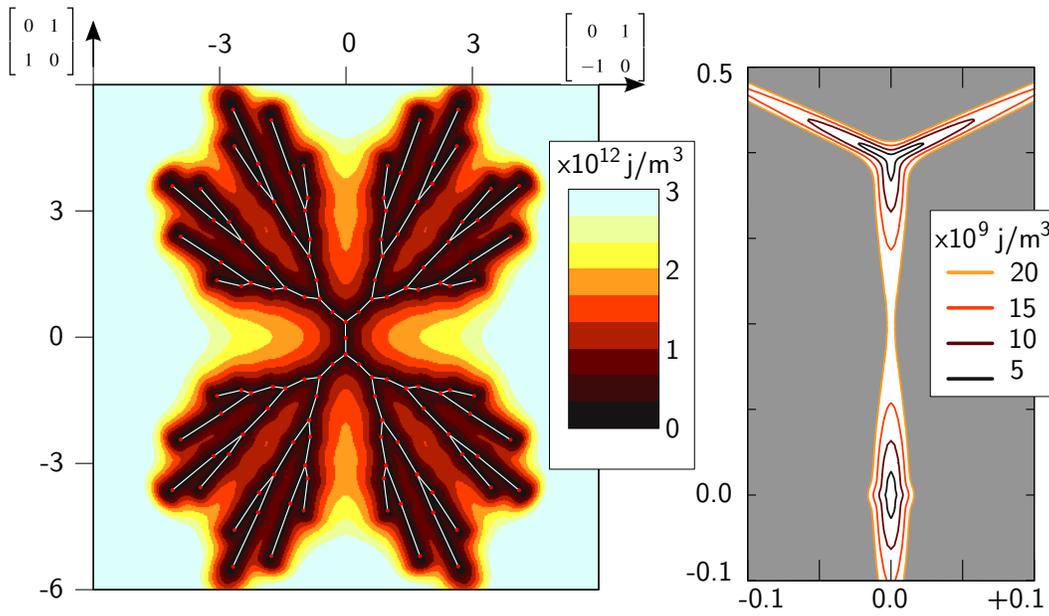


FIG. 4 – Gauche : paysage énergétique $\psi_t(\mathbf{F}t)$, chemins (lignes blanches) et phases stables (points rouges) avec $\sigma = 1TPa$ et $n = 2$. Droit : détail de l'énergie au voisinage des deux premières phases stables (les contours ne sont pas tracés dans les zones grises).

Considérant une déformation $\mathbf{F}t$, nous utilisons la distance d_i au chemin i pour définir une partition de l'unité :

$$w_i(\mathbf{F}t) = \frac{d_i^{-n}(\mathbf{F}t)}{\sum_k d_k^{-n}(\mathbf{F}t)} \quad (20)$$

avec $n \geq 0$. Quand $\mathbf{F}t$ est proche du chemin i , nous avons $d_i \approx 0$, et $w_i = 1$ et $w_k = 0$ pour $k \neq i$. Une pondération des énergies $\psi_t^k(\mathbf{F}t)$ défini le potentiel attendu

$$\psi_t(\mathbf{F}t) = \sum_k w_k(\mathbf{F}t) \psi_t^k(\mathbf{F}t) . \quad (21)$$

Pour $n = 0$, l'équation précédente donne une simple moyenne sur les chemins, alors qu'une valeur infinie pour n rend $\psi_t(\mathbf{F}t)$ égale au chemin le plus proche. Dans ce dernier cas, cette partition est comparable à une partition de Voronoi, définie sur des lignes (Aurenhammer, 1991) (voir fig. (3)). Une valeur de 1.9 a été proposée par Denoual et al. (2010) pour reproduire des calculs de dynamique moléculaires (pour un alliage de fer-nickel) ; cette valeur permet d'obtenir une interpolation particulièrement douce entre les chemins.

Un exemple d'interpolation est donné en Fig. (4) pour notre transformation modèle, avec

$$\mathbf{F}t = x \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} + y \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + z \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + \mathbf{I} \quad (22)$$

en prenant $x \in [-6; 6]$, $y \in [-6; 6]$ et z déterminés tels que $\det(\mathbf{F}t) = 1$.

5 EXEMPLE : TRACTION SUR UN MONOCRISTAL

Une plaque carrée de notre matériau école est soumise à une traction uniaxiale monotone. Les conditions aux limites sont périodiques en x et libre en y (la déformation est imposée en modifiant les conditions de périodicité en x). Le calcul est réalisé avec un code de type Element-free Galerkin, avec une résolution en explicite en temps. Le caractère quasi-statique de la traction quasi-statique est cependant garanti par un chargement très lent. L'arbre des chemins de réactions contient environ 300 variants (environ 5 cycles de transformations carré→hexa→carré).

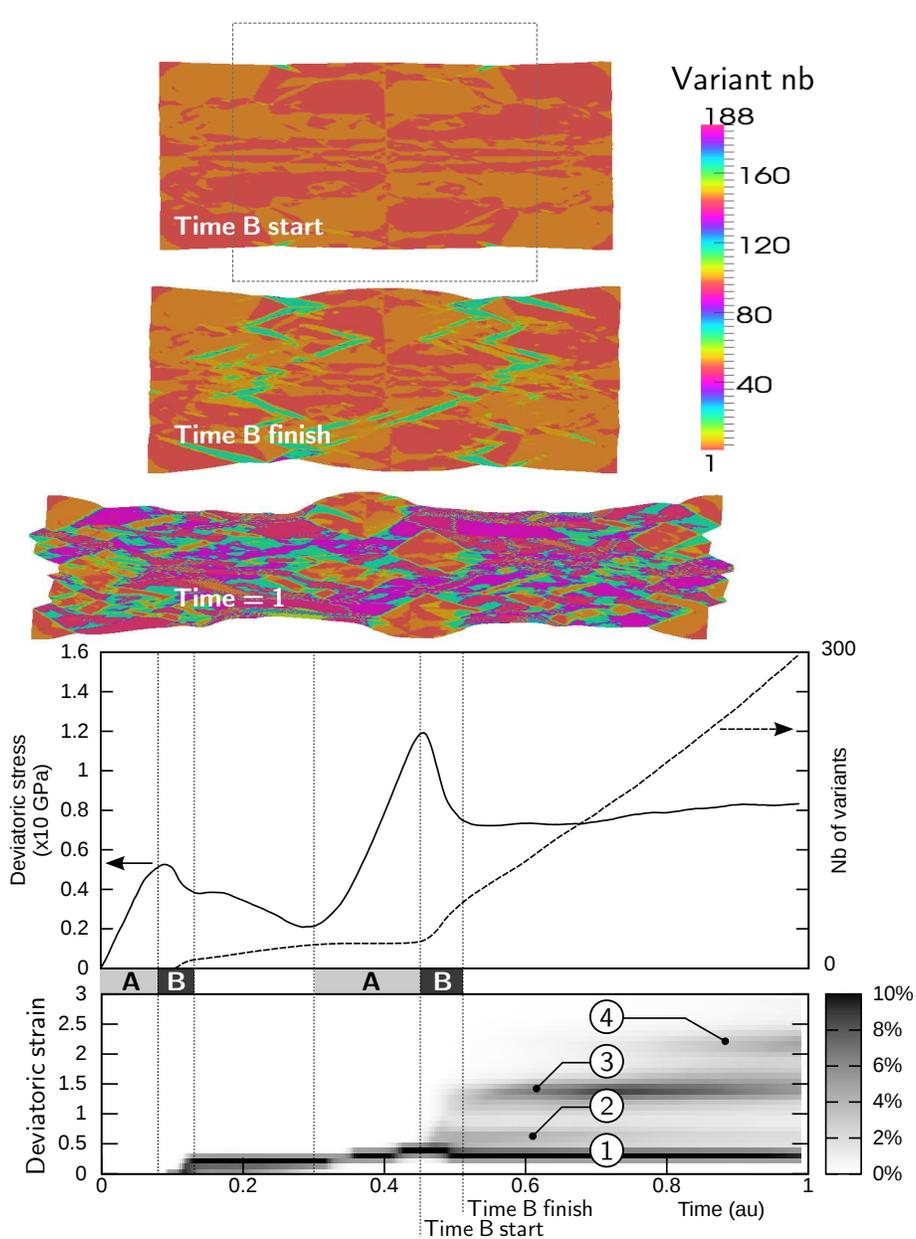


FIG. 5 – Traction sur un monocristal (matériau école ‘carré/hexa’). L’abscisse est adimensionnée par le temps final. En haut : éprouvette avant et après le burst de transformation (B-start et B-finish) et à la fin du calcul. La forme initiale de l’éprouvette est tracée en pointillés. Au milieu : contrainte déviatorique en fonction du temps et évolution du nombre de variants. L’évolution de la contrainte fait apparaître de larges sur-contraintes (zones gris clair ‘A’) suivies par des chutes brutales (zones gris foncé, ‘B’). En bas : L’histogramme correspondant (le mode correspondant à la phase de départ n’est pas représenté). Jusqu’à quatre modes peuvent être séparés, correspondant à quatre niveaux de nucléation : les variants du mode 4 ont été nucléés à partir des variants du niveau 3, etc.

Dans une première phase, la réponse est élastique (phase ‘A’, Fig.(5)). A $T = 0.1$, les premiers noyaux de phase hexa apparaissent, entraînant une chute importante de la contrainte (phase ‘B’). Cette contrainte chute jusqu’à ce que l’ensemble de la plaque soit transformée en phase hexagonale (début de la seconde phase ‘A’, à $T = 0.3$). La contrainte augmente alors de nouveau, sans création de nouveaux variants, puis chute lors de la production des noyaux de réversions (variants ‘carré’). La microstructure est alors composée essentiellement de nombreux variants hexa et carré, avec des orientations variables. Les transformations successives, qui conduisent à des déformations déviatoriques importantes, apparaissent sur l’histogramme de la figure (5) en bas comme de nouveaux modes ($T > 0.5$). On notera que malgré une évolution sans à-coup du nombre de variants pour $T > 0.5$, la déformation reste modale.

Références

- Aurenhammer, F. (1991). Voronoi diagrams - a survey of a fundamental geometric data structure. *ACM-COMPUTING SURVEYS*, 23(3) :345–405.
- Caspersen, K. and Carter, E. (2005). Finding transition states for crystalline solid-solid phase transformations. *PNAS*, 102(19) :6738–6743.
- Denoual, C., Caucci, A. M., Soulard, L., and Pellegrini, Y.-P. (2010). Phase-field reaction-pathway kinetics of martensitic transformation in model Fe_3Ni alloy. *Phys. Rev. Lett.*, 105 :035703.
- Dupe, B., Amadon, B., Pellegrini, Y.-P., and Denoual, C. (2013). Mechanism for the $\alpha \rightarrow \epsilon$ phase transition in iron. *Phys. Rev. B*, 87(2).