

APPROCHES EXPERIMENTALES ET NUMERIQUES DU MECANISME DE LOCALISATION DYNAMIQUE PAR CISAILLEMENT ADIABATIQUE

P. Longère ISAE-SUPAERO / Institut Clément Ader (ICA EA814), 10 avenue Edouard Belin, BP54032, 31055 Toulouse Cedex 5. Téléphone : 05 61 33 81 15, Télécopie : 05 61 33 90 95, patrice.longere@isae.fr

Mots clés : Cisaillement adiabatique, Rupture, Dynamique

1. INTRODUCTION

Dans la plupart des matériaux ductiles, une localisation de la déformation dans une ou des bandes de cisaillement de très faible épaisseur précède généralement la rupture ultime. Lorsque la vitesse de chargement est suffisamment rapide (temps caractéristiques de l'ordre de la microseconde), les échanges thermiques entre les bandes en question et le matériau environnant sont limités (conditions locales quasi adiabatiques) : on parle alors de bandes de cisaillement adiabatique. Le cisaillement adiabatique par bande est un mécanisme de déformation localisée entretenu par le chargement (la concentration de la dissipation dans les bandes conduit à un adoucissement du matériau des bandes qui favorise la poursuite du processus) et qui rend précoce l'endommagement qui va conduire à la rupture ultime. Provoquant un affaiblissement progressif de la résistance structurale (tout en préservant la cohésion de la matière), le cisaillement adiabatique est donc généralement néfaste, voire catastrophique, provoquant p.ex une réduction importante de la tenue à l'impact de matériaux structuraux (métaux et alliages à haute résistance), voir Fig.1. Cependant, dans certaines applications il se révèle bénéfique, comme dans le cas de l'usinage grande vitesse où il va favoriser le festonnement du copeau et de fait réduire l'effort de coupe.

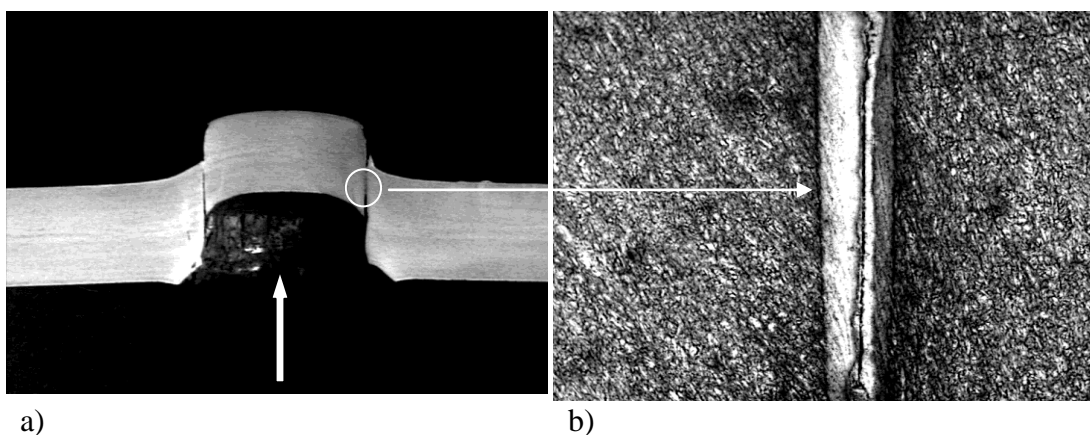


Figure 1: Rupture d'une plaque de protection en acier par impact, d'après Longère et al. (2003). a) Vue globale de la plaque montrant une rupture catastrophique par poinçonnage. b) Zoom sur la bande de cisaillement adiabatique (blanche après attaque chimique) et de la fissure qu'elle contient.

On se propose ici de présenter quelques approches expérimentales et numériques visant pour les unes à comprendre la formation (apparition, évolution) du cisaillement adiabatique par bande et pour les autres à en reproduire les conséquences. Il ne peut pas s'agir d'un inventaire exhaustif tant la littérature sur le sujet est abondante. Le lecteur intéressé devra donc compléter les informations données ici par une étude bibliographique plus approfondie, voir en particulier Bai et Dodd (1992) et

ses rééditions récentes. Dans la section 2 ci-dessous, on donne ainsi certains résultats expérimentaux, et dans la section 3 on présente différentes approches de modélisation numérique du cisaillement adiabatique par bande.

2. INVESTIGATION EXPERIMENTALE

Les bandes de cisaillement adiabatique ont probablement été mises en évidence pour la première fois par Tresca dans ses études sur le forgeage de barres en platine, voir Tresca (1878). Mais c'est depuis les travaux de Zener et Hollomon sur le poinçonnage de plaques en acier, voir Zener et Hollomon (1944), que le cisaillement adiabatique est considéré comme le résultat d'une instabilité de l'écoulement plastique issue d'une compétition entre écrouissage plastique et adoucissement thermique. Pendant la seconde moitié du 20^{ème} siècle, le cisaillement adiabatique a ainsi fait l'objet de nombreuses études expérimentales. On classe ici certaines de ces études en fonction de l'essai de laboratoire utilisé :

- la torsion dynamique par double barre de Kolsky, voir p.ex. Marchand et Duffy (1988) ;
- le poinçonnage dynamique, voir p.ex. Mazeau et al. (1997) ;
- le double cisaillement dynamique, voir p.ex. Klepaczko (1994a) ;
- l'essai de cisaillement dynamique par compression, voir p.ex. Beatty et al. (1992) et Fig.2, et Rittel et Ravichandran (2002) ;
- l'essai d'impact du cylindre de Taylor, voir p.ex. Holt et al. (1994) ;
- l'effondrement radial d'anneau, voir p.ex. Nesterenko et al. (1998)
- l'impact sur la tranche de plaques entaillées, voir p.ex. Kalthoff et Winkler (1987)
- etc

L'échauffement induit par la dissipation plastique dans les bandes et/ou les gradients thermiques bandes/matrice qui en résultent sont tels que le matériau des bandes peut être le siège de modifications microstructurales importantes : fusion du matériau des bandes ; mise en solution au cours du cisaillement puis transformation martensitique au refroidissement ; recristallisation dynamique ; etc. On distingue ainsi les bandes de cisaillement adiabatique de transformation (martensitique p.ex., voir Fig.1.b) et les bandes de cisaillement adiabatique de déformation. Comme mentionné précédemment, la localisation de la déformation dans des bandes de cisaillement adiabatique est le résultat d'une instabilité matérielle thermomécanique provoquée selon le cas par adoucissement thermique (induit par l'échauffement plastique, comme suggéré par Zener et Hollomon (1944), voir également Derep (1987)) ou par adoucissement microstructural (p.ex. induit par une recristallisation dynamique, voir Rittel et al. (2006)). Les bandes se forment dans les plans de cisaillement maximal et leur largeur est fortement influencée par les propriétés thermo-physiques du matériau (chaleur spécifique, conductivité thermique) comme on peut s'y attendre – à noter que la largeur des bandes observée est généralement bien supérieure à la taille de la microstructure (grain p.ex.) du matériau.

Le cisaillement adiabatique étant un processus thermo-mécanique (couplé) par excellence, de nombreuses études se sont attachées à mesurer la température et le déplacement induits dans ou au voisinage de la bande. La pyrométrie par détecteurs infra-rouges a ainsi été largement utilisée pour obtenir des mesures de température ponctuelles résolues en temps, voir p.ex. Hartley et al. (1987) et Marchand et Duffy (1988). Les valeurs mesurées peuvent ainsi atteindre 1400°C dans une bande formée dans un acier, voir p.ex. Zhou et al. (1996). Des tentatives de mesure de champ de température par caméra CCD intensifiée ont également été menées, voir Ranc et al. (2008), mais des progrès restent encore à faire en particulier concernant la fréquence d'acquisition trop faible. L'ordre de grandeur de la déformation de cisaillement locale dans une bande peut être de 1000%, voir Marchand et Duffy (1988), et celui de la vitesse de déformation de cisaillement de 10^5 s^{-1} . La vitesse

de propagation des bandes, tout comme les paramètres précédents, dépend des conditions aux limites. Dans Zhou et al. (1996), des vitesses (non stabilisées) de 1200 m/s ont été mesurées.

A un état avancé du cisaillement adiabatique, l'endommagement par croissance de cavités va prendre place, voir Fig.2, dont l'évolution sera d'autant plus inhibée que la pression sera élevée, voir p.ex. Xue et al. (2002) – de façon plus marginale, on peut observer une coalescence des cavités par cisaillement localisé adiabatique, voir p.ex. Chevrier et Klepaczko (1999). A vitesse de déformation élevée, il y a donc un couplage fort entre cisaillement adiabatique et endommagement dynamique, et le trajet de chargement, mécanique et thermique, joue un rôle essentiel dans la succession et l'évolution de ces deux mécanismes de détérioration qui vont mener à la rupture ultime.

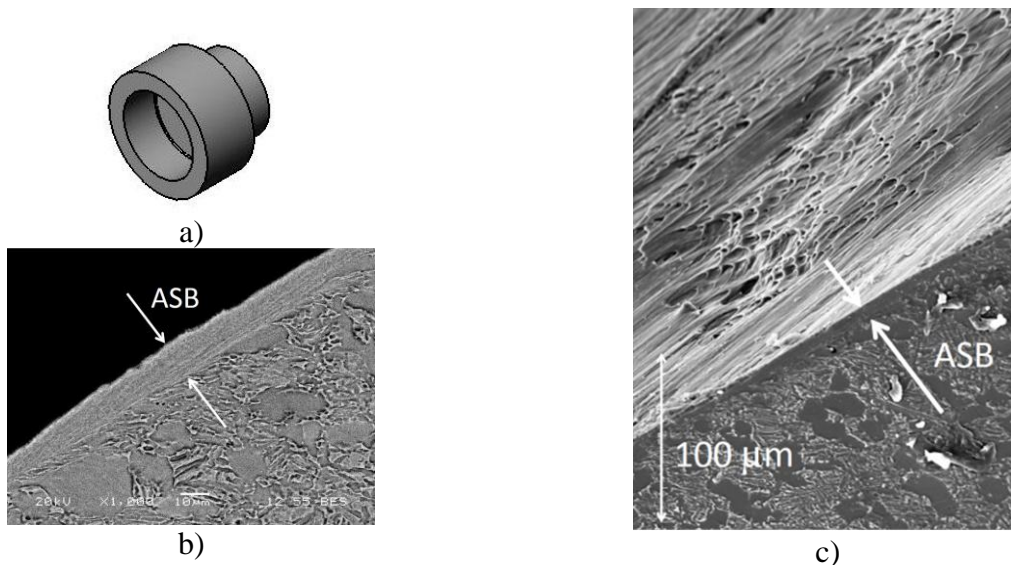


Figure 2: Rupture par cisaillement adiabatique et endommagement ductile d'une éprouvette de cisaillement par compression de type chapeau en Ti-6Al-4V, d'après Longère et Dragon (2014). a) Vue en perspective de l'éprouvette chapeau. b) Vue 2D en coupe de la bande. c) Vue 3D montrant l'épaisseur de la bande et l'endommagement ductile que la bande a concentré dans son plan et qui a mené à la rupture de la structure

3. MODELISATION NUMERIQUE

Les premiers travaux analytiques avaient principalement pour objet la détermination des conditions thermomécaniques de formation des bandes de cisaillement adiabatique (BCA). La définition d'un critère d'amorçage en déformation de ces bandes a ainsi fait l'objet de nombreuses études analytiques, la plupart basée sur la méthode des perturbations appliquée au cisaillement simple et parmi lesquelles on peut citer Bai (1982), Clifton et al. (1984), Molinari (1985), Shawki et Clifton (1989), Klepaczko (1994b). Pour étendre à d'autres cas de chargement, d'autres approches (expérimentales) visaient à définir un critère d'amorçage en énergie, voir p.ex. Mazeau et al. (1997) et Rittel (2009).

Pour alléger le propos, les études sur l'espacement des bandes et le comportement collectif des bandes ne sont pas évoquées ici, voir p.ex. Molinari (1997) et Batra et Wei (2006).

La question qui se pose dans toute modélisation analytique (et numérique) est celle de l'évaluation de l'échauffement induit par la dissipation plastique puisqu'elle va conditionner l'adoucissement thermique. Pour simplifier l'analyse, on fait généralement deux hypothèses : les conditions sont adiabatiques et le rapport de transformation du taux de travail plastique en chaleur (appelé couramment coefficient de Taylor-Quinney, voir Taylor et Quinney (1934)) est constant. En réalité, on montre que la diffusion thermique joue un rôle notamment sur la largeur de bande, voir p.ex.

Grady et Kipp (1987) et Dinzart et Molinari (1998), et sur la vitesse de propagation du front des bandes, voir McVeigh et Liu (2010)). De la même façon, le coefficient de Taylor-Quinney n'est pas constant, voir p.ex. Mason et al. (1994) et Rosakis et al. (2000), et son évaluation a des conséquences sur l'amorçage du cisaillement adiabatique, voir p.ex. Longère et Dragon (2009a) et Fig.3.

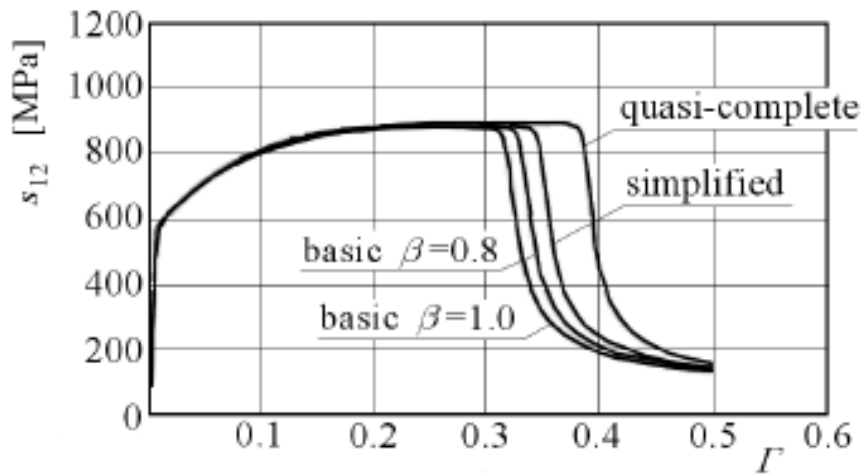
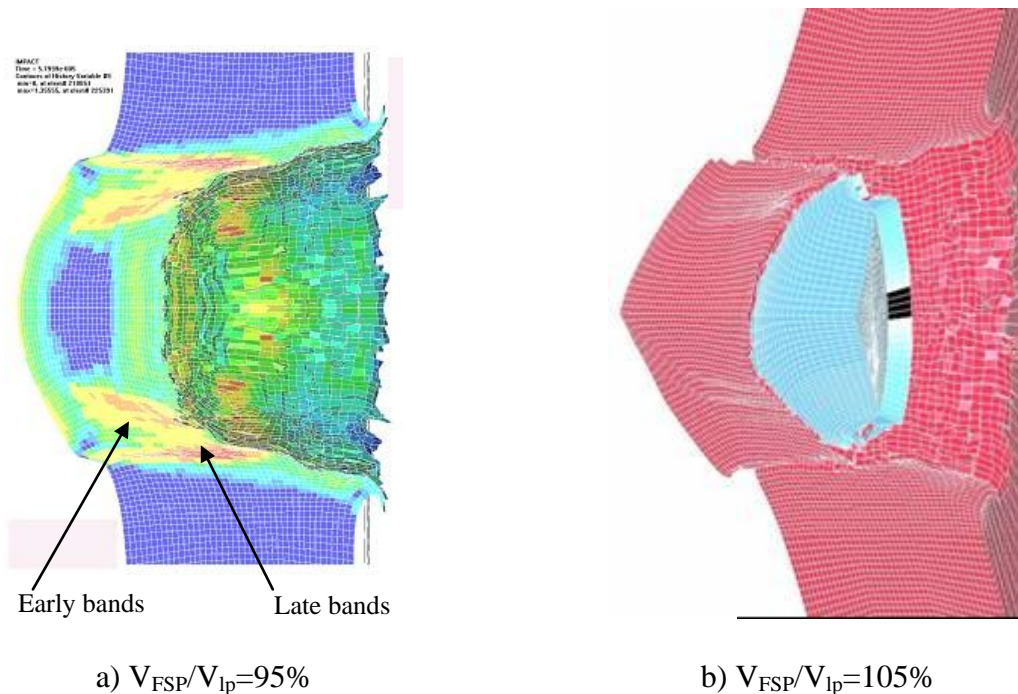


Figure 3: Influence de la méthode d'évaluation de l'échauffement plastique sur l'amorçage du cisaillement adiabatique (chute de la courbe contrainte-déformation), d'après Longère et Dragon (2007). La quantité β représente le rapport de transformation du taux de travail plastique en chaleur. Pour les méthodes 'simplified' et 'quasi-complete' des couplages thermo-mécaniques sont pris en compte.

En ce qui concerne la simulation numérique, l'approche classique de traitement numérique du cisaillement adiabatique dans un code de calculs par éléments finis consiste à prendre une taille de maille plus petite que la largeur de bande, voir p.ex. Bonnet-Lebouvier et al. (2002), Batra et Romano (2007), et Peirs et al. (2010). A l'échelle d'une structure, ceci implique notamment un nombre élevé de mailles et/ou la connaissance a priori de la trajectoire du cisaillement adiabatique. En outre, comme dans toute tentative de résolution numérique d'un problème impliquant une localisation de la déformation associée à un adoucissement, ce traitement se heurte à la dépendance pathologique des résultats numériques au maillage (taille et orientation), voir p.ex. Lopez Cela et Diaz (2005), qui peut être réduite par l'introduction explicite d'une (de) longueur(s) interne(s) dans une démarche de modélisation non locale, voir McVeigh et Liu (2010).

Une méthode alternative consiste à adopter une taille de maille plus grande que la largeur de bande. La détérioration des propriétés mécaniques induite par l'évolution du cisaillement adiabatique dans la structure peut alors être vue comme un mécanisme d'endommagement isotrope, comme dans Dolinski et al. (2010). Il manque néanmoins la description de l'anisotropie induite par le caractère fortement orienté des bandes. Ainsi, l'approche la plus pertinente consiste à incorporer la bande dans l'élément fini ou le volume élémentaire représentatif en enrichissant respectivement la formulation de l'élément fini, voir p.ex. Ortiz et al. (1987), Belytschko et al. (1988), Oliver et Huespe (2004), ou les équations constitutives du modèle, voir p.ex. Longère et al. (2003, 2005, 2009b) et Fig.4. Dans cette dernière approche, les conséquences cinématiques et matérielles de la présence de bandes au sein du volume élémentaire représentatif, et par suite de l'élément fini, sont décrites via resp. une variable cinématique et une variable de détérioration anisotrope. Les effets régularisants de la viscosité et du taux de détérioration contrôlé contribuent à réduire la dépendance au maillage.



a) $V_{FSP}/V_{lp}=95\%$

b) $V_{FSP}/V_{lp}=105\%$

Figure 4: Simulation numérique de la pénétration assistée par le cisaillement adiabatique d'une plaque de protection en acier par un projectile 20FSP, d'après Longère et al. (2009b). La modélisation enrichie proposée permet de reproduire la dégradation partielle ou la perforation de la plaque selon que la vitesse du projectile est en-deçà (a) ou au-delà (b) de la vitesse limite de protection.

Des résultats récents issus de l'approche variationnelle, voir p.ex. Su et al. (2014) et Su et Stainier (2014), inspirés des travaux de Leroy et Molinari (1992) et Mercier et Molinari (1998), capables d'obtenir des lois d'évolution explicites contrainte-saut de déplacement, devraient permettre d'alimenter ces approches d'enrichissement, tant de la cinématique de l'élément fini (par des éléments finis de type interface p.ex.) que de la loi de comportement elle-même.

On peut enfin citer l'utilisation de méthodes sans maillage pour traiter numériquement la propagation de bandes de cisaillement adiabatique, voir p.ex. Li et al. (2001).

La transition depuis le cisaillement adiabatique vers l'endommagement et la rupture ultime est un problème encore ouvert. Quelques tentatives ont été menées mais elles reposent sur des critères empiriques souvent simplistes, voir p.ex. Teng et al. (2007). En effet, le cisaillement adiabatique évolue généralement dans des structures soumises à des chargements engendrant des taux de triaxialité nuls et négatifs qui ont tendance à inhiber la croissance de cavités. Des études récentes montrent cependant que l'endommagement ductile par croissance de cavités peut être actif même dans de telles conditions, voir p.ex. Longère et Dragon (2014).

4. CONCLUSION

Le dimensionnement des structures aux surcharges à grande vitesse (crash, impact) impose de considérer le mécanisme de localisation dynamique par cisaillement adiabatique comme une source possible de perte progressive de résistance de la structure et comme précurseur de la ruine ultime.

L'amorçage et l'évolution (géométrie, microstructure, propagation, ...) des bandes de cisaillement adiabatique dépend fortement des conditions aux limites mécaniques et thermiques du problème et des couplages thermomécaniques qui s'opèrent au sein du matériau.

Pour modéliser numériquement les conséquences du cisaillement adiabatique dans un problème dynamique aux limites complexe (structure et chargement complexes), les méthodes consistant à

incorporer la bande dans l'élément fini ou le volume élémentaire représentatif en enrichissant respectivement la formulation de l'élément fini ou les équations constitutives du modèle semblent les plus prometteuses.

REMERCIEMENTS

L'auteur tient tout particulièrement à adresser ses remerciements à André Dragon, Hervé Trumel, Alain Molinari, Sébastien Mercier, Laurent Stainier et Daniel Rittel pour les discussions fructueuses qu'il a eues avec eux sur le sujet.

REFERENCES

- Gens A., Alonso E. E. et Hight D. W., "Special problem soils: general review", *Int. J. of Something*, **35**, 2, (2004), pp. 152-859.
- Wu Y. & Zhong X., "The mathematics of telephone numbers", *Annals of Improbable Research*, **1**, 5, (1995), pp. 162-163.
- Bai Y.L., 1982, Thermo-plastic instability in simple shear, *J. Mech. Phys. Solids*, **30** (4), 195-207.
- Bai Y.L., Dodd B., 1992, Adiabatic shear localisation, Oxford: Pergamon Press.
- Batra R.C., Romano S., 2007, Failure of dynamically loaded thermoelastoviscoplastic rectangular plate, *AIAA Journal*, Vol.45-8, pp. 2015-2023.
- Batra R.C., Wei Z.G., 2006, Shear band spacing in thermoviscoplastic materials, *Int. J. Impact Eng.*, **32**, 947-967.
- Beatty J.H., Meyer L.W., Meyers M.A., Nemat-Nasser S., 1992, Formation of controlled adiabatic shear bands in AISI 4340 high strength steel, In Shock-wave and high-strain-rate phenomena in materials, Ed. by M.A. Meyers, L.E. Murr et K.P. Staudhammer, Marcel Dekker Inc, pp.645-656.
- Belytschko T., Fish J., Engelman E., 1988, A finite element with embedded localization zones, *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, **70**, 59-89.
- Bonnet-Lebouvier A.-S., Molinari A., Lipinski P., 2002, Analysis of the dynamic propagation of adiabatic shear bands, *Int. J. Solids Struct.*, **39**, 4249-4269.
- Chevrier P, Klepaczko J.R., 1999, Spall fracture: mechanical and microstructural aspects, *Eng. Fract. Mech.*, **63**, 273-294.
- Clifton R.J., Duffy J., Hartley K.A., Shawki T.G., 1984, On critical conditions for shear band formation at high strain rates, *Scripta Met.*, **18**, 443-448.
- Derep J.L., 1987, Microstructure transformation induced by adiabatic shearing in armour steel, *Acta Metall.*, **35** (6), 1245-1249.
- Dinzart F., Molinari A., 1998, Structure of adiabatic shear bands in thermo-viscoplastic materials, *Eur. J. Mech. A/Solids*, **17**, 923-938.
- Dolinski M., Rittel D., Dorogoy A., 2010, Modeling adiabatic shear failure from energy considerations, *J. Mech. Phys. Solids*, **58** (11), 1759-1775.
- Grady D.E., Kipp M.E., 1987, The growth of unstable thermoviscoplastic shear with application to steady-wave shock compression in solids, *J. Mech. Phys. Solids*, **35** (1), 95-118.
- Hartley, K.A., Duffy, J., Hawley, R.H., 1987. Measurement of the temperature profile during shear band formation in steels deforming at high strain rates. *J. Mech. Phys. Solids* **35** (3), 283-301.
- Holt W.H., Mock W., Zerilli F.J., Clark J.B., 1994, Experimental and computational study of the impact deformation of titanium Taylor cylinder specimens, *Mech. Mat.*, **17**, pp.195-201.
- Kalthoff J.F., Winkler S., 1987, Failure mode transition of high rates of shear loading. In: Chiem C.Y., Kunze H-D, Meyer L.W, editors. Proceedings of the International Conference on Impact Loading and Dynamic Behavior of Materials, Germany: Deutsche Gesellschaft für Metallkunde, DGM-Verlag, Oberursel, pp.185-195.
- Klepaczko J.R., 1994a, An experimental technique for shear testing at high and very high strain rates. The case of a mild steel, *Int. J. Impact Eng.*, **15**-1, pp.25-39.
- Klepaczko J.R., 1994b, Some results and new experimental technique in studies of adiabatic shear bands, *Arch. Mech.*, **46**-1-2, pp.201-229.
- Leroy Y.M., Molinari A., 1992, Stability of steady states in shear zones, *J. Mech. Phys. Solids*, **40**, 181-212.

- Li S., Liu W.K., Qian D., Guduru P.R., Rosakis A.J., 2001, Dynamic shear band propagation and micro-structure of adiabatic shear band, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 191, 73-92.
- Longère P., Dragon A., Trumel H., de Ressaiguiet T., Deprince X., Petitpas E., 2003, Modelling adiabatic shear banding via damage mechanics approach, *Arch. Mech.*, 55 (1), 3-38.
- Longère P., Dragon A., Trumel H., Deprince X., 2005, Adiabatic shear banding induced degradation in a thermo-elastic/viscoplastic material under dynamic loading, *Int. J. Impact Eng.*, 32, 285-320.
- Longère P., Dragon A., 2007, Adiabatic heat evaluation for dynamic plastic localization, *J. Theor. Appl. Mech.*, 45, 203-223.
- Longère P., Dragon A., 2009a, Inelastic heat fraction evaluation for engineering problems involving dynamic plastic localization phenomena, *J. Mech. Mat. Struct.*, 4-2, pp.319-349.
- Longère P., Dragon A., Deprince X., 2009b, Numerical study of impact penetration shearing employing finite strain viscoplasticity model incorporating adiabatic shear banding, *J. Eng. Mat. Tech.*, ASME, 131, pp.011105.1-14.
- Longère P., Dragon A., 2014, Dynamic vs. quasi-static shear failure of high strength metallic alloys: Experimental issues, *Mech. Mat.*, In press.
- Lopez Cela J.J., Munoz Diaz I., 2005, Numerical study of strain localisation in plane strain thermo-viscoplastic solids under dynamic conditions, *Comput. Struct.* 83, 1824–1833.
- Marchand A., Duffy J., 1988, An experimental study of the formation process of adiabatic shear bands in a structural steel, *J. Mech. Phys. Solids*, 36 (3), 251-283.
- Mason J.J., Rosakis A.J. and Ravichandran G., 1994, On the strain and strain rate dependence of the fraction of plastic work converted to heat: an experimental study using high speed infrared detectors and the Kolsky bar, *Mech. Mat.*, 17, pp.135-145.
- Mazeau C., Beylat L., Longère P., Louvigné P.F., 1997, On the quantitative evaluation of adiabatic shear banding sensitivity of various titanium alloys, *J. Phys. IV*, 7, pp.429-434.
- McVeigh C., Liu W.K., 2010, Multiresolution continuum modeling of micro-void assisted dynamic adiabatic shear band propagation, *J. Mech. Phys. Solids*, 58, 187-205.
- Mercier S., Molinari A., 1998, Steady-state shear band propagation under dynamic conditions, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.46-8, pp.1463-1495
- Molinari A., 1985, Instabilité thermoviscoplastique en cisaillement simple, *J. Méc. Théor. Appl.*, 4 (5), 659-684.
- Molinari A., 1997, Collective behavior and spacing of adiabatic shear bands, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.45-9, pp.1551-1575
- Nesterenko V.F., Meyers M.A., Wright T.W., 1998, Self-organization in the initiation of adiabatic shear bands, *Acta Mater.*, 46 (1), 327-340.
- Oliver J., Huespe A.E., 2004, Continuum approach to material failure in strong discontinuity settings, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 193, 3195–3220
- Ortiz M., Leroy Y., Needleman A., 1987, A finite element method for localized failure analysis, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 61, 189-214.
- Peirs J., Verleysen V., Degrieck J., Coghe F., 2010, The use of hat-shaped specimens to study the high strain rate shear behaviour of Ti–6Al–4V, *Int. J. Impact Eng.* 37, 703–714.
- Ranc N., Taravella L., Pina V., Hervé P., 2008, Temperature field measurement in titanium alloy during high strain rate loading—Adiabatic shear bands phenomenon, *Mech. Mat.* 40, 255–270.
- Rittel D., 2009, A different viewpoint on adiabatic shear localization, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42, 214009
- Rittel D., Lee S., Ravichandran G., 2002, A shear-compression specimen for large strain testing, *Exp. Mech.*, 42, pp.58-64
- Rittel D., Wang Z.G., Merzer M., 2006, Adiabatic shear failure and dynamic stored energy of cold work, *Phys. Rev. Letters*, 96, 07552.
- Rosakis P., Rosakis A.J., Ravichandran G. and Hodowany J., 2000, A thermodynamic internal variable model for the partition of plastic work into heat and stored energy in metals, *J. Mech. Phys. Solids*, 48, pp.581-607.
- Shawki T.G., Clifton R.J., 1989, Shear band formation in thermal viscoplastic materials, *Mech. Mat.*, 8, 13-43.
- Su S., Stainier L., Mercier S., 2014, Energy-based variational modeling of fully formed adiabatic shear Bands, *Eur. J. Mech. A/Solids*, 47, 1-13.
- Su S., Stainier L., 2014, Energy-based variational modeling of adiabatic shear bands structure evolution, *Mech. Mat.*, In press.
- Taylor, G.I., Quinney, H., 1934. The latent energy remaining in a metal after cold working. Proc. Royal Soc. London 143, 607-326.

- Teng X., Wierzbicki T., Couque H., 2007, On the transition from adiabatic shear banding to fracture, *Mech. Mat.*, 39, 107-125.
- Tresca H., 1878, On further application of the flow of solids, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, Vol. 30, pp. 301-345.
- Xue Q., Meyers M.A., Nesterenko V.F., 2002, Self-organization of shear bands in titanium and Ti-6Al-4V alloy, *Acta Mater.*, 50, 575-596.
- Zener C., Hollomon J.H., 1944, Effect of strain rate upon plastic flow of steel, *J. Appl. Phys.*, 15 (1), 22-32.
- Zhou, M., Rosakis, A.J., Ravichandran, G., 1996, Dynamically propagating shear bands in impact-loaded prenotched plates – I. experimental investigations of temperature signatures and propagation speed. *J. Mech. Phys. Solids* 44 (6), 981–1006