

Physique de la déformation : les polycristaux

Sébastien Merkel
Professeur, département de Physique
Laboratoire UMET (Unité Matériaux et Transformations)
sebastien.merkel@univ-lille.fr

2- Orientation d'un grain

Objectifs

Comment représenter l'orientation d'un grain ?

- Définition de repères appropriés.
- Représentation par angles d'Euler :
 - Présentation ;
 - Convention de Bunge.
- Représentation matricielle :
 - Définition ;
 - Propriétés.
- Représentation graphique :
 - Introduction aux figures de pôle ;
 - Exemples et applications.

2- Orientation d'un grain a- Angles d'Euler

Représentation des orientations

Besoin de définir plusieurs systèmes de coordonnées :

- Système de coordonnées de chaque cristal ;
- Système de coordonnées associé à l'échantillon.

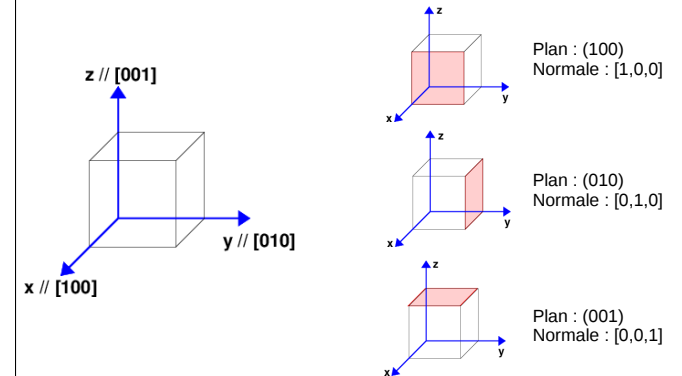
Représentation de l'orientation d'un grain :

- Opération de passage entre le système de l'échantillon et le système du grain.

En analyse de textures, on se base sur des systèmes de coordonnées cartésiennes, les opérations de passage d'un système à l'autre peuvent se représenter comme :

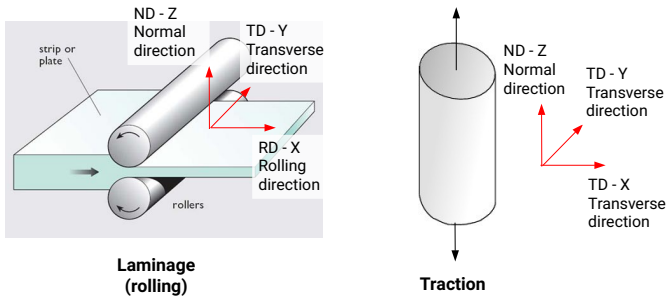
- Des matrices de rotation (en 3D) ;
- 3 rotations successives, définissant des angles d'Euler.

Coordonnées associées à un cristal cubique



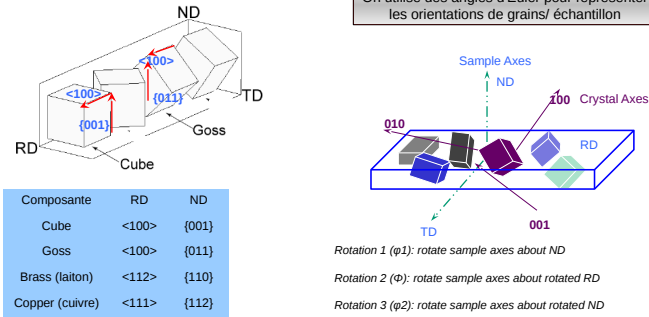
Coordonnées associées au polycristal

Dépend de l'environnement subi par le polycristal



Orientation cristallographique

On utilise des angles d'Euler pour représenter les orientations de grains/ échantillon

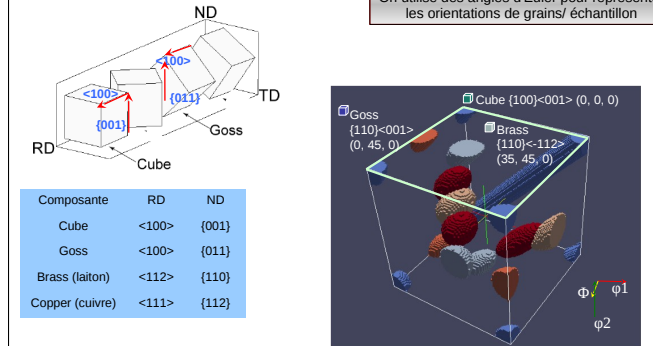


Rotation 1 (ϕ_1): rotate sample axes about ND
Rotation 2 (Φ): rotate sample axes about rotated RD
Rotation 3 (ϕ_2): rotate sample axes about rotated ND

C. N. Tomé and R. A. Lebensohn, Crystal Plasticity, presentation at Pohang University of Science and Technology, Korea, 2009

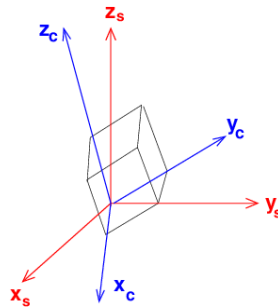
Espace des orientations

On utilise des angles d'Euler pour représenter les orientations de grains/ échantillon



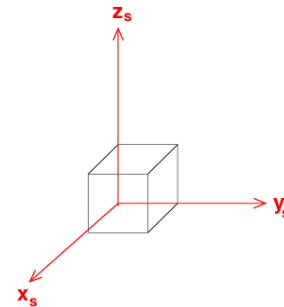
Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

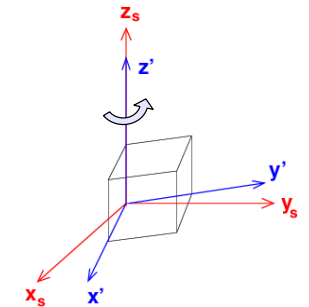
Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

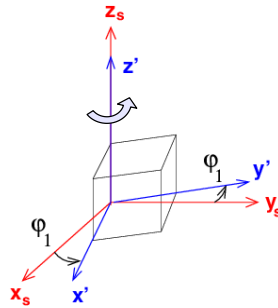
- première rotation



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

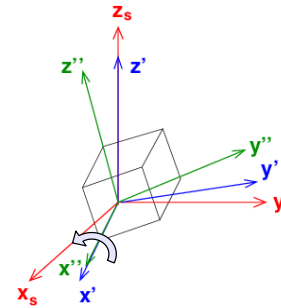
- première rotation φ_1 -- rotation autour de z_s ;



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

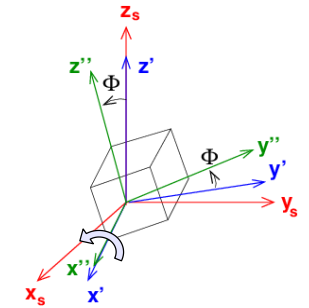
- première rotation φ_1 -- rotation autour de z_s ;
- deuxième rotation



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

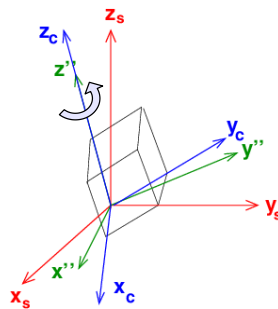
- première rotation φ_1 -- rotation autour de z_s ;
- deuxième rotation Φ -- rotation autour de x' ;



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

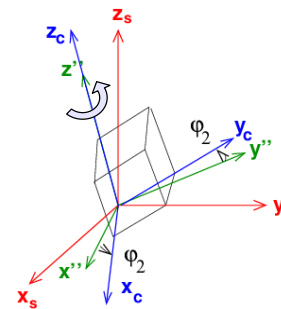
- première rotation φ_1 -- rotation autour de z_s ;
- deuxième rotation Φ -- rotation autour de x' ;
- troisième rotation



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

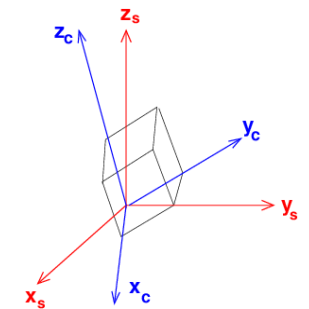
- première rotation φ_1 -- rotation autour de z_s ;
- deuxième rotation Φ -- rotation autour de x' ;
- troisième rotation φ_2 -- rotation autour de z'' ;



Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

- première rotation φ_1 -- rotation autour de z_s ;
- deuxième rotation Φ -- rotation autour de x' ;
- troisième rotation φ_2 -- rotation autour de z'' ;



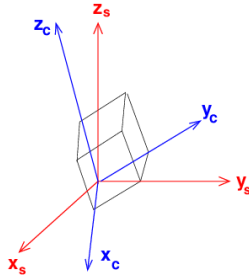
Orientation du cristal définie par les 3 angles d'Euler φ_1 , Φ , et φ_2 .
Convention de Bunge (il y en a d'autres)

Pourquoi 3 angles ?

- φ_1 -- rotation autour de z_s ;
- Φ -- rotation autour de x' ;
- φ_2 -- rotation autour de z'' ;

Les angles φ_1 et Φ permettent de localiser la direction [001] (z_c) par rapport aux axes de l'échantillon.

L'angle φ_2 donne la rotation supplémentaire à appliquer pour placer les axes x_c et y_c



Physique de la déformation : les polycristaux

2- Orientation d'un grain b- Représentation matricielle

Représentation matricielle

En mathématiques, on peut représenter les rotations sous forme matricielle :

$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Rotation directe de θ
autour de X

Rotation directe de θ
autour de Y

Rotation directe de θ
autour de Z

Pour combiner plusieurs rotations, on multiplie les matrices correspondantes. Par exemple, la matrice correspondant à une rotation de α autour de z , suivie par une rotation β autour de x , puis par une rotation γ autour de z sera :

$$g(\alpha, \beta, \gamma) = g_z(\gamma) * g_x(\beta) * g_z(\alpha)$$

Attention à l'ordre ! La première rotation est à droite !

Propriétés des matrices de rotations

L'inverse d'une matrice de rotation est sa transposée

$$g^{-1} = {}^t g$$

Le produit de deux rotations est une rotation

$$g_3 = g_2 * g_1$$

En dimension >2, la multiplication de matrices de rotation n'est pas commutative

$$g_1 * g_2 \neq g_2 * g_1$$

Ce sont des matrices orthogonales (ne changent pas la longueur des vecteurs)

$$\det(g) = 1$$

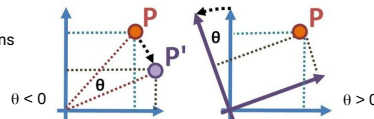
$$\sqrt{(g_{11}^2 + g_{12}^2 + g_{13}^2)} = 1$$

$$\sqrt{(g_{21}^2 + g_{22}^2 + g_{23}^2)} = 1$$

$$\sqrt{(g_{31}^2 + g_{32}^2 + g_{33}^2)} = 1$$

Rotations passive -- rotations actives

Rotation active :
Le point tourne dans
un référentiel fixe



Rotation passive :
Le point est fixe, le
référentiel tourne...

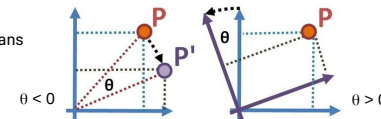
En sciences de matériaux, on cherche à exprimer les propriétés dans différents systèmes de coordonnées (constantes élastiques dans le système du grain, contraintes dans le système de l'échantillon...), par contre, le matériau ne bouge pas.

En mécanique du solide, on étudie des mouvements : on utilise des rotations actives.

En analyse de texture, on cherche donc toujours à transformer les axes : **on utilise toujours des rotations passives.**

Rotations passive -- rotations actives

Rotation active :
Le point tourne dans
un référentiel fixe



Rotation passive :
Le point est fixe, le
référentiel tourne...

$$\begin{cases} x' = x \cos \theta - y \sin \theta \\ y' = x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} x' = x \cos \theta + y \sin \theta \\ y' = -x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases}$$

$$g = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

$$g = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

Angles de Bunge – Matrices de rotation

Rotation 1 (φ_1) : tourne les axes autour de l'axe 3 (z) de l'échantillon (rotation directe, inverse des aiguilles d'une montre)

$$g_1 = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Rotation 2 (Φ) : tourne les axes autour de l'axe 1 (x) du repère intermédiaire (rotation directe, inverse des aiguilles d'une montre)

$$g_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Phi & \sin \Phi \\ 0 & -\sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix}$$

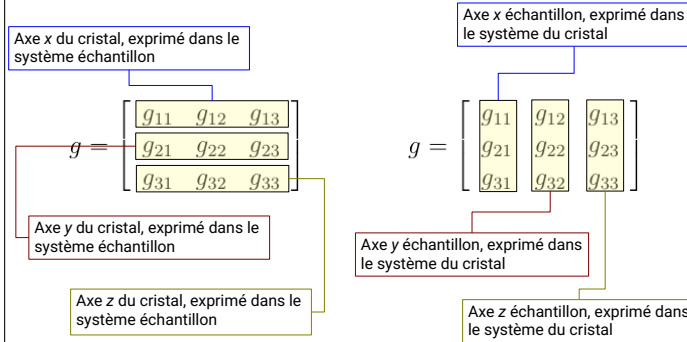
Rotation 3 (φ_2) : tourne les axes autour de l'axe 3 (z) du repère intermédiaire (rotation directe, inverse des aiguilles d'une montre)

$$g_3 = \begin{bmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$g(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = g_3 \cdot g_2 \cdot g_1$$

$$= \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_2 \sin \Phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & \cos \varphi_2 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \sin \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix}$$

Interprétation géométrique



Physique de la déformation : les polycristaux

2- Orientation d'un grain c- Représentation graphique – Figures de pôle

Problèmes de représentation

Personne (ou presque) n'arrive à visualiser les angles d'Euler.

Comment représenter des rotations, dans un espace à 3 dimensions, en 2 dimensions ?

Un polycristal est constitué de milliers de grains : impossible (ou presque) de regarder les triplets d'angles d'Euler pour chacun des grains.

Solution : **figures de pôle**.

Qu'est qu'un pôle ?

Définition importante en texture

- Pôle = normale à un plan cristallographique ;
- Orientation d'un plan repérée par son pôle.

Dans un cristal cubique :

- plans sont orthogonaux aux directions de mêmes indices
- (001) orthogonal à [001]

Attention !!!

Cette relation n'est pas vraie pour les cristaux autres que cubiques !
La direction $[kkl]$ n'est pas nécessairement orthogonale au plan (hkl) .

Pôles dans la structure cubique

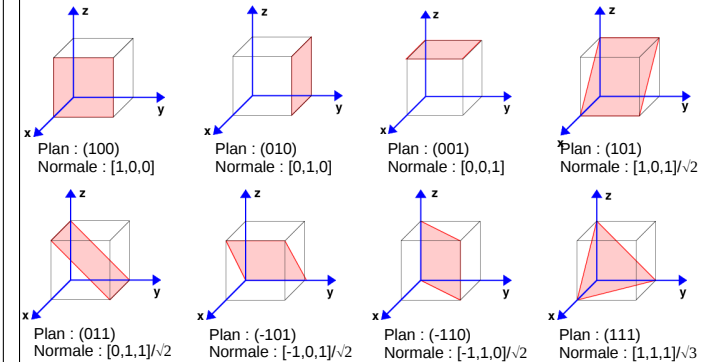
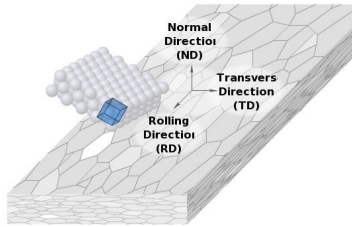
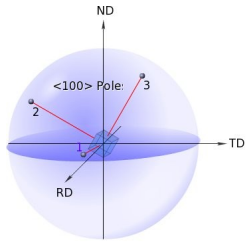


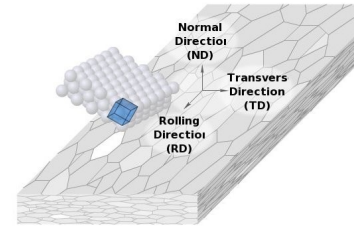
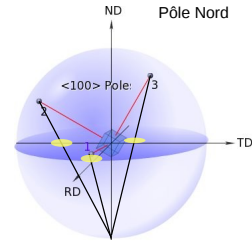
Figure de pôle



Grain de structure cubique dans un échantillon déformé

Illustrations : aluMatter

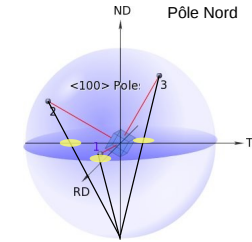
Figure de pôle



Droites entre pôles <100> et le pôle sud
Intersection avec le plan équatorial

Illustrations : aluMatter

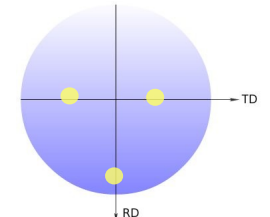
Figure de pôle



Droites entre pôles <100> et le pôle sud
Intersection avec le plan équatorial

Illustrations : aluMatter

Figure de pôle <100>



Vue depuis le pôle Nord

Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- [100] // RD
- [010] // TD
- [001] // ND

Tracer la figure de pôle <100>
Tracer la figure de pôle <111>

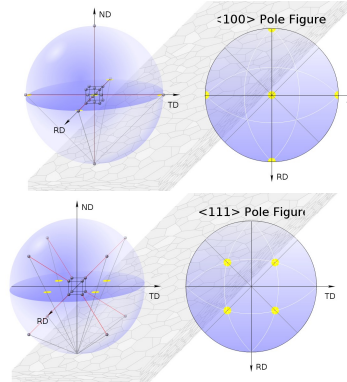
Illustrations : aluMatter

Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- [100] // RD
- [010] // TD
- [001] // ND

Tracer la figure de pôle <100>
Tracer la figure de pôle <111>



Illustrations : aluMatter

Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- [100] // RD
- [010] // TD
- [001] // ND

Tournez le de 45° autour de ND

Tracer la figure de pôle <100>
Tracer la figure de pôle <111>

Illustrations : aluMatter

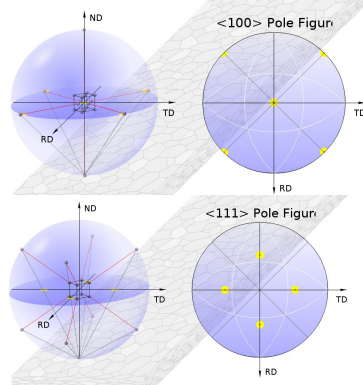
Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100] \parallel \text{RD}$
- $[010] \parallel \text{TD}$
- $[001] \parallel \text{ND}$

Tournez le de 45° autour de ND

Tracer la figure de pôle $\langle 100 \rangle$
Tracer la figure de pôle $\langle 111 \rangle$



Illustrations : aluMatter

Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100] \parallel \text{RD}$
- $[010] \parallel \text{TD}$
- $[001] \parallel \text{ND}$

Tournez le de 45° autour de TD

Tracer la figure de pôle $\langle 100 \rangle$
Tracer la figure de pôle $\langle 111 \rangle$

Illustrations : aluMatter

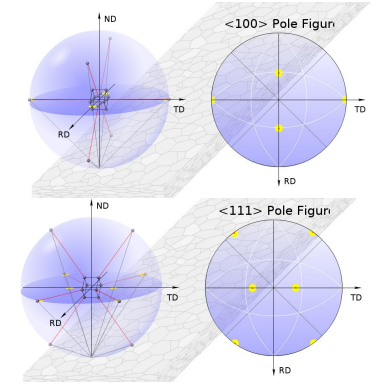
Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100] \parallel \text{RD}$
- $[010] \parallel \text{TD}$
- $[001] \parallel \text{ND}$

Tournez le de 45° autour de TD

Tracer la figure de pôle $\langle 100 \rangle$
Tracer la figure de pôle $\langle 111 \rangle$



Illustrations : aluMatter