

## Plan

1. Bref résumé du cours précédent sur les matrices de passage
2. Matrice d'orientation, distorsion et correspondance matrices
3. Application au maclage de déformation (mécanique)

## Objectif

Expliquer comment utiliser les matrices **d'orientation  $T$**  associée à une relation d'orientation. Introduire la matrice de **distorsion  $F$**  qui transforme un réseau de phase parent en réseau de phase fille. Montrer que  **$T$**  est passive et  **$F$**  active, et comment la combinaison des deux génère la matrice de **correspondance  $C$** .

Nous appliquerons ces concepts au cas du **maclage mécanique** (résultant de contraintes de cisaillement)

# 1. Résumé du cours antérieur: matrices

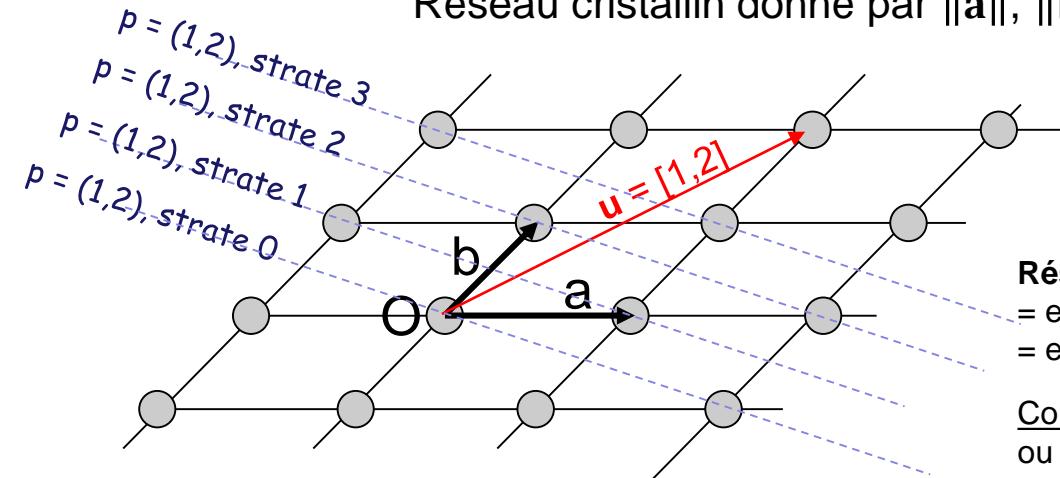
---

## Matrices de passage (*coordinate transformation matrices*)

- Définition  $[\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}']$  Ses colonnes sont les vecteurs de la base  $\mathbf{B}'$  écrites dans la base  $\mathbf{B}$
- Composition  $[\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}''] = [\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}'] [\mathbf{B}' \rightarrow \mathbf{B}'']$  Ce sont des matrices passives, elles se composent de gauche à droite.
- Inverse  $[\mathbf{B}' \rightarrow \mathbf{B}] = [\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}']^{-1}$
- Réiproque  $[\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}']^* = [\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}']^{-t}$  \* = réseau réiproque et  $-t$  = inverse de la transposé. A utiliser pour changer les coordonnées des plans.  
$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_{/1} = [\mathbf{B}_1 \rightarrow \mathbf{B}_2] \mathbf{u}_{/2} \text{ Directions} \\ \mathbf{g}_{/1} = [\mathbf{B}_1 \rightarrow \mathbf{B}_2]^* \mathbf{g}_{/2} \text{ Plans} \end{array} \right.$$

## 1. Résumé du cours précédent: espace réciproque

Réseau cristallin donné par  $\|\mathbf{a}\|$ ,  $\|\mathbf{b}\|$ ,  $\|\mathbf{c}\|$ , et  $\alpha = (\mathbf{b}, \mathbf{c})$ ,  $\beta = (\mathbf{a}, \mathbf{c})$ ,  $\gamma = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$



$$\mathbf{G} = [\mathbb{B}^* \rightarrow \mathbb{B}] = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^2 & \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{b}^2 & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{c}^2 \end{bmatrix}, \mathbf{G} = \mathbf{G}^t, \mathbf{G}^* = \mathbf{G}^{-1}$$

## Réseau

= ensemble des directions **u** à coordonnées entières (réseau direct)  
= ensemble de plans **p** à indices de Miller entiers (réseau réciproque)

Convention du cours: un vecteur  $\mathbf{u}$  ou  $\mathbf{p}$  est un vecteur colonne, et  $\mathbf{u}^t$  ou  $\mathbf{p}^t$  un vecteur ligne

Pour des vecteurs du **réseau direct**  $\mathbf{u}$  et  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^t \mathbf{G} \mathbf{v}$ , et  $\|\mathbf{u}\|^2 = \mathbf{u}^t \mathbf{G} \mathbf{u}$

⇒ calcul des normes et des angles entre directions cristallines

Un plan cristallin  $p = (h, k, l)$  indices de Miller, est assimilable à son vecteur normal dont les coordonnées sont  $p^t = (h, k, l)$  dans le **réseau réciproque**

La norme de ce vecteur est  $\|\mathbf{p}\| = \frac{1}{d_{hkl}}$  avec  $d_{hkl}$  distance interplanaire

Pour des vecteurs du réseau réciproque  $\mathbf{p}$  et  $\mathbf{g}$ ,  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{g} = \mathbf{p}^t \mathbf{G}^{-1} \mathbf{g}$ , et  $\|\mathbf{p}\|^2 = \mathbf{p}^t \mathbf{G}^{-1} \mathbf{p}$

⇒ calcul des normes et des angles entre plans

La normale à un plan  $\mathbf{p} = (h, k, l)$  a pour coordonnées dans le réseau direct  $\mathbf{G}^{-1}\mathbf{p}$

La loi de Laue donne la condition de diffraction, elle dit que les ondes diffusées sont en phase lorsque  $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{p}$

La loi de Bragg se déduit en égalisant les normes, sachant que  $\|\mathbf{k}\| = \|\mathbf{k}_0\| = 1/\lambda$

# 1. Résumé du cours antérieur

## Formules d'inversion de matrice

### Inversion des matrices 2×2

L'équation des cofacteurs ci-dessus permet de calculer l'inverse des matrices de dimensions 2×2 : si  $ad - bc \neq 0$ ,

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \text{com } A = \begin{pmatrix} d & -c \\ -b & a \end{pmatrix}, \quad {}^t \text{com } A = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

#### Exemple

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{-2} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{pmatrix}.$$

### Inversion des matrices 3×3

De même, on obtient l'inverse d'une matrice  $A = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}$  de dimension 3×3 en calculant son déterminant (par la règle de Sarrus, par exemple) :

$$\det A = aei + bfg + cdh - ceg - fha - ibd,$$

puis en utilisant la formule :

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\det A} {}^t \begin{pmatrix} ei - fh & fg - di & dh - eg \\ ch - bi & ai - cg & bg - ah \\ bf - ce & cd - af & ae - bd \end{pmatrix} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} ei - fh & ch - bi & bf - ce \\ fg - di & ai - cg & cd - af \\ dh - eg & bg - ah & ae - bd \end{pmatrix}.$$

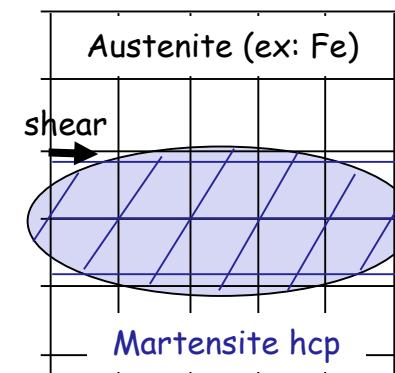
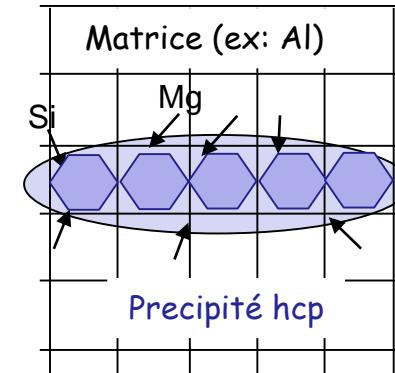


# 1. Résumé du cours antérieur: OR

La relation d'orientation (OR) qui peut être observée et déterminée en TEM ou en EBSD ne dit rien sur le mécanisme sous-jacent qui peut être **diffusif ou displacif**.

**Les précipités** ont souvent une OR avec la matrice pour minimiser les incompatibilités de réseau cristallins (*misfits*) et réduire ainsi l'énergie de d'interface. Les atomes de solutés initialement en solution solide vont migrer indépendamment les uns des autres (*civilian way*) et s'organiser pour former peu à peu le précipité et sa structure. Les phases nanométriques initiales sont souvent juste des clusters d'atomes qui ne forment pas nécessairement un réseau bien défini.

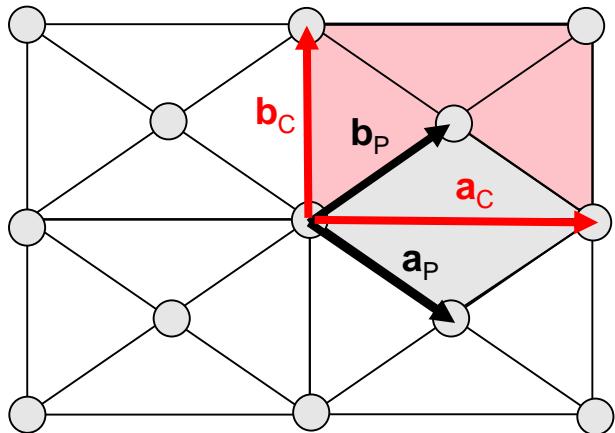
**Les transformations martensitiques et le maclage mécaniques** impliquent toujours une OR là encore pour minimiser l'énergie d'interface. La transformation se fait sans diffusion. Les atomes se déplacent collectivement (*militar way*). Le réseau de la phase parent est déformé (*distorted*) en un nouveau réseau, celui de la phase fille martensitique.



⇒ Deux mécanismes très différents, mais tous les deux avec une OR (ici la même)

## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

### Préambule: bases primaire et «conventionnelle»



Dans la figure à gauche, on préfère la maille rectangle centrée à deux atomes plutôt que la maille primitive (à un atome) losange. La raison, selon moi discutable, est la suivante: «les mailles conventionnelles sont représentatives de la symétrie totale, ses vecteurs directeurs étant parallèles aux axes de symétrie : on travaillera toujours dans ces dernières»

<https://culturesciences.chimie.ens.fr/thematiques/chimie-des-materiaux/solides-cristallins/un-siecle-de-cristallographie-de-la-maille-Q>

Les réseaux de Bravais (il y en a 5 en 2D et 14 en 3D) sont construits sur ces bases conventionnelles

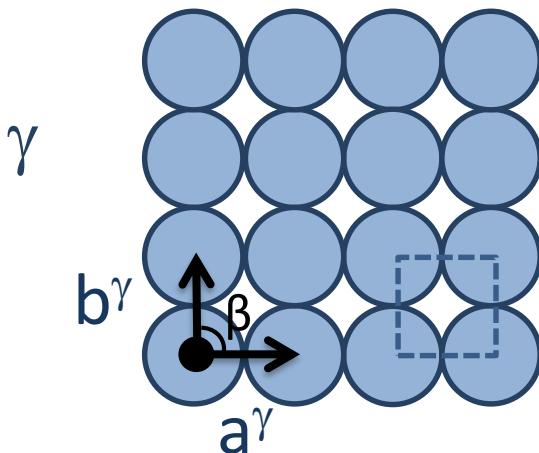
|                                | Triclinique<br>$a \neq b \neq c$<br>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ | Monoclinique<br>$a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ$ et $\gamma \neq 90^\circ$ | Hexagonal<br>$a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ$ et $\gamma = 120^\circ$ | Rhomboédrique<br>$a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ | Orthorhombique<br>$a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | Quadratique<br>$a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | Cubique<br>$a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |
|--------------------------------|---|--|--|---|---|--|--|
| Primitif<br>P                  |   |  |  |   |   |  |  |
| Maille<br>centrée<br>I         |   |  |  |   |   |  |  |
| Deux<br>faces<br>centrées<br>C |   |  |  |   |   |  |  |
| Faces<br>centrées<br>F         |   |  |  |   |   |  |  |

## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

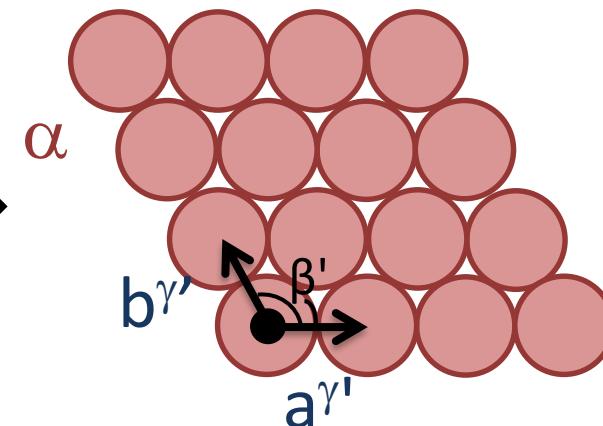
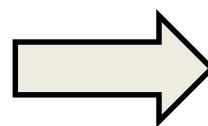
La matrice de distorsion transforme la base cristallographique « conventionnelle » de la phase parent  $\gamma$  notée  $\mathbf{B}^\gamma$  en une base distordue  $\mathbf{B}'_\gamma$  qui est une base cristallographique de la martensite  $\alpha$ , et donc  $\mathbf{F} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}'_\gamma]$ .

Si  $\mathbf{B}'_\gamma$  est elle-aussi une base « conventionnelle » pour la phase  $\alpha$ , càd  $\mathbf{B}'_\gamma = \mathbf{B}^\alpha$ , alors il n'y pas de distinction entre les matrices d'orientation et de distorsion,  $\mathbf{F} = \mathbf{T} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\alpha]$ . C'est le cas de l'exemple ci-dessous:

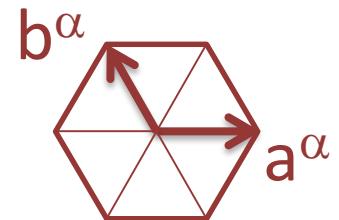
Exemple:  $\gamma$  carré P4mm  $\rightarrow$   $\alpha$  hexagone 6mm



Réseau de Bravais de la phase parente  $\gamma$  avant transformation



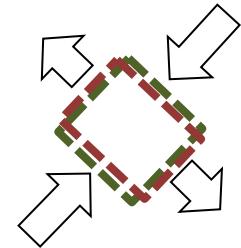
Réseau de Bravais de la phase parente  $\gamma$  après transformation



Réseau de Bravais de la phase fille  $\alpha$

## 2. Orientation, distortion et correspondance, et leurs matrices

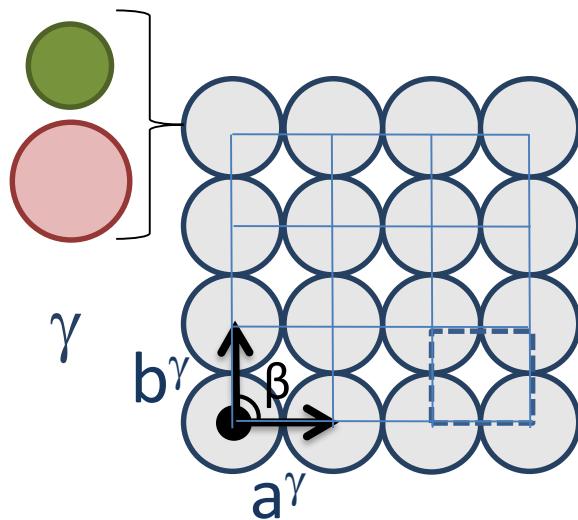
Mais attention, ce n'est pas toujours le cas, notamment quand le transformation implique du *shuffling* ou de la mise en ordre.



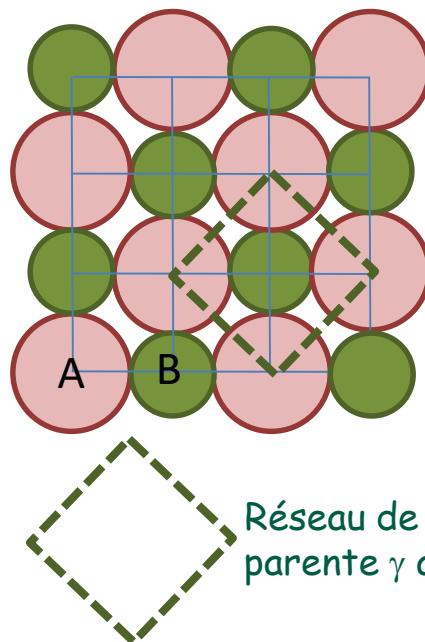
Contraction/extension le long d'axes orthogonaux entre eux

Exemple :  $\gamma$  square P4mm  $\rightarrow$   $\alpha$  rectangle Pmm

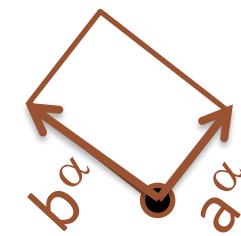
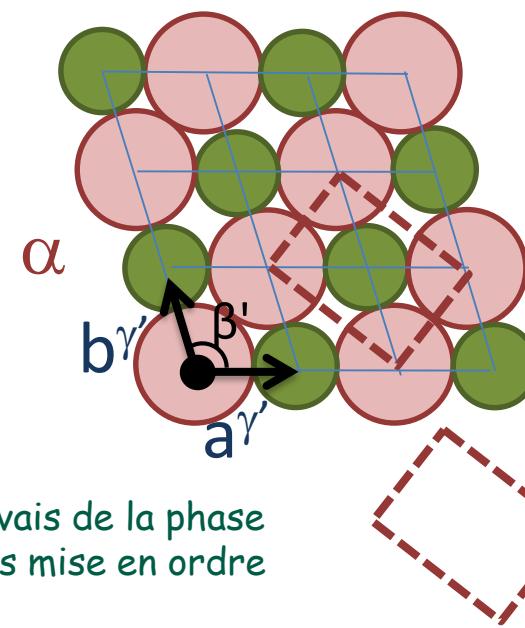
(a) Initial = désordonnée



(b) Mise en ordre (sans distortion, cas hypothétique intermédiaire)



(c) Distortion « stretch »



## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

La matrice de distorsion  $\mathbf{F}^\gamma = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^{\gamma'}]$ .

Elle transforme les vecteurs de la base conventionnelle de la phase parente  $\gamma$  en de nouveaux vecteurs qui forment une base (conventionnelle ou non) pour la phase fille  $\alpha$ . Un vecteur  $\mathbf{u}$  est transformé (tourné, allongé ou rétrécit) par la distorsion; son image est un **nouveau vecteur  $\mathbf{u}'$**  dont les coordonnées écrites dans  $\mathbf{B}^\gamma$  sont déduites de celles écrites dans  $\mathbf{B}^\gamma$  par  $\mathbf{u}'_{/\gamma} = \mathbf{F}^\gamma \mathbf{u}_{/\gamma}$ . La matrice  $\mathbf{F}$  n'a de sens que pour les transformations *displacives*.

La matrice d'orientation (passage)  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\alpha]$ .

Elle donne l'orientation de la base conventionnelle de la phase fille  $\alpha$  par rapport à celle de la phase parente  $\gamma$ . Elle ne contient pas d'information sur le mécanisme de transformation. Elle peut être utilisée pour des transformations *displacives ou diffusives*. Les coordonnées d'un **vecteur fixe  $\mathbf{u}$**  écrites dans la base conventionnelle de  $\alpha$  et celles dans la base conventionnelle de  $\gamma$  sont liées par l'équation  $\mathbf{u}_{/\alpha} = \mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} \mathbf{u}_{/\gamma}$ . Nous avons aussi  $\mathbf{u}_{/\alpha} = \mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{u}_{/\gamma}$  avec  $\mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} = (\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha})^{-1}$

La matrice de correspondance  $\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = [\mathbf{B}^\alpha \rightarrow \mathbf{B}^{\gamma'}]$ . Elle donne en quel vecteur de la phase fille un vecteur de la base conventionnelle de la phase parente est transformé. Elle peut se comprendre comme la combinaison de la distorsion suivie du changement de coordonnées  $\mathbf{u}'_{/\alpha} = \mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{u}'_{/\gamma} = \mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{F}^\gamma \mathbf{u}_{/\gamma}$  ce qui s'écrit  $\mathbf{u}'_{/\alpha} = \mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{u}_{/\gamma}$ .

$$\mathbf{F}^\gamma = \begin{bmatrix} \mathbf{a}'_{/\gamma} & \mathbf{b}'_{/\gamma} & \mathbf{c}'_{/\gamma} \end{bmatrix}$$

active

$$\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{/\gamma} & \mathbf{b}_{/\gamma} & \mathbf{c}_{/\gamma} \end{bmatrix}$$

passive

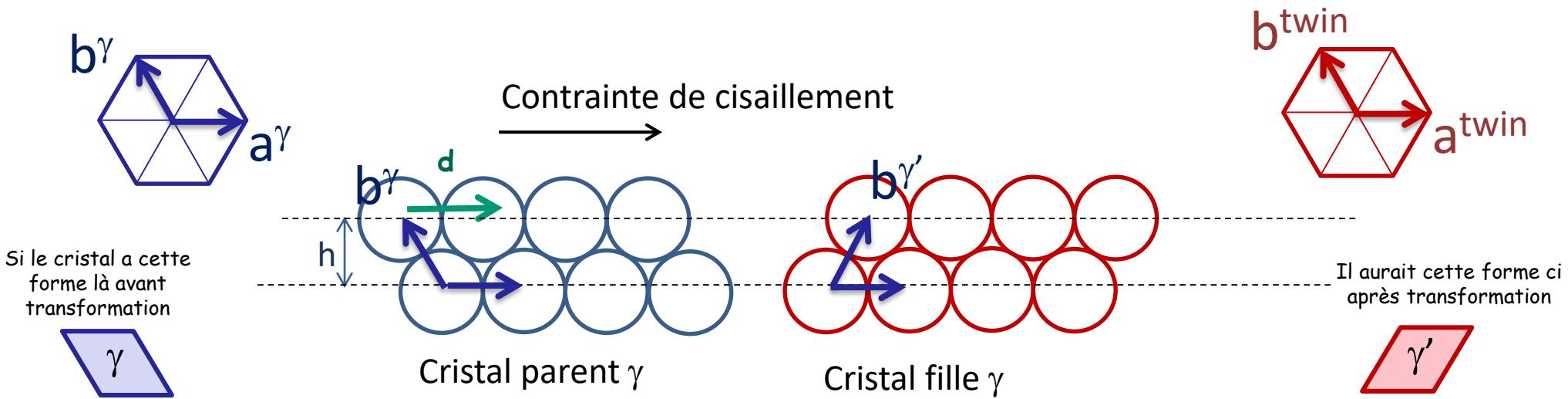
$$\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}'_{/\alpha} & \mathbf{b}'_{/\alpha} & \mathbf{c}'_{/\alpha} \end{bmatrix}$$

rationnelle



## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

Exemple :  $\gamma$  hexagonal P6mm  $\rightarrow$   $\gamma$  hexagonal P6mm (cas purement théorique, macle iso-orientation)



- Comme  $\mathbf{a}^{\gamma'} = \mathbf{a}^{\gamma}$  et  $\mathbf{b}^{\gamma'} = \mathbf{a}^{\gamma} + \mathbf{b}^{\gamma}$ . La matrice de distorsion est  $\mathbf{F}^{\gamma} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$   
( $\mathbf{F}$  est écrite dans la base hexagonale).
- Comme  $\mathbf{a}^{\text{twin}} = \mathbf{a}^{\gamma}$  et  $\mathbf{b}^{\text{twin}} = \mathbf{b}^{\gamma}$ . La matrice d'orientation est  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \text{twin}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
- Comme  $\mathbf{a}^{\gamma} \rightarrow \mathbf{a}^{\text{twin}}$  et  $\mathbf{b}^{\gamma} \rightarrow \mathbf{a}^{\text{twin}} + \mathbf{b}^{\text{twin}}$ . La matrice de correspondance est  $\mathbf{C}^{\text{twin} \rightarrow \gamma} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

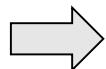
## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

### Relations utiles

$$\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{F}^{\gamma}$$

 $\Leftrightarrow$ 

$$\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \mathbf{F}^{\gamma} \mathbf{C}^{\gamma \rightarrow \alpha}$$



- La matrice **C** est l'identité ssi  $\mathbf{a}^{\gamma} \rightarrow \mathbf{a}^{\alpha}$ ,  $\mathbf{b}^{\gamma} \rightarrow \mathbf{b}^{\alpha}$ ,  $\mathbf{c}^{\gamma} \rightarrow \mathbf{c}^{\alpha}$ , càd si la base conventionnelle de la phase parente est distordue en une base conventionnelle de la phase fille.
- Les éléments de **C** sont entiers ou rationnels car **C** transforme nécessairement une direction cristallographique de la phase parente en une direction cristallographique de la phase fille.

### Transformations inverses

### Transformation dans l'espace réciproque

### Changement de volume molaire

$$\mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} = (\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha})^{-1}$$

$$\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = (\mathbf{C}^{\gamma \rightarrow \alpha})^{-1}$$

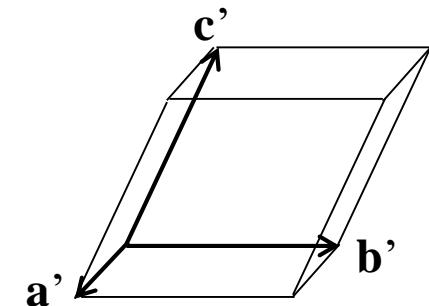
$\mathbf{F}^{\alpha} \neq (\mathbf{F}^{\gamma})^{-1}$  en général

$$(\mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma})^* = (\mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma})^{-t}$$

$$(\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma})^* = (\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma})^{-t}$$

$$(\mathbf{F}^{\gamma})^* = (\mathbf{F}^{\gamma})^{-t}$$

$$\det(\mathbf{F}^{\gamma}) = \frac{\mathcal{V}'}{\mathcal{V}}$$



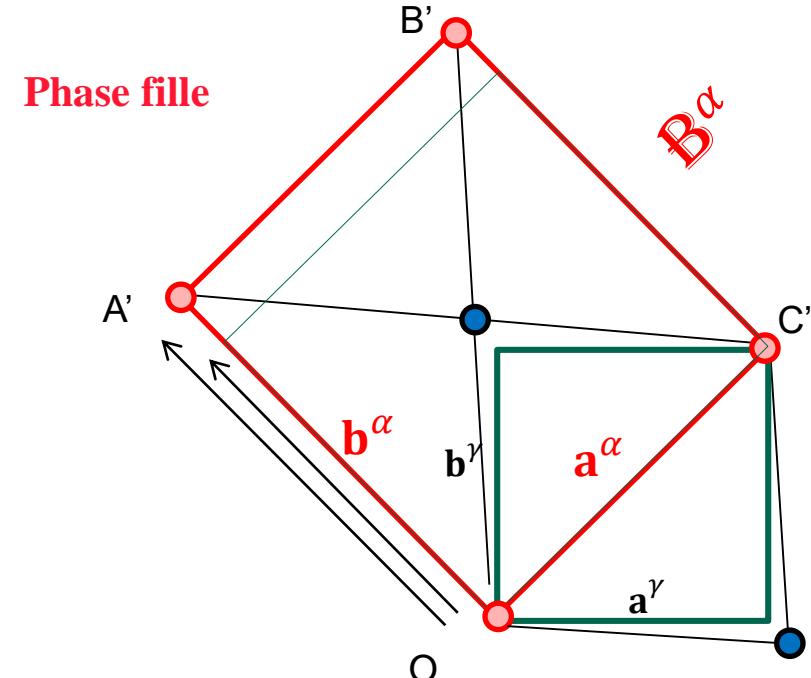
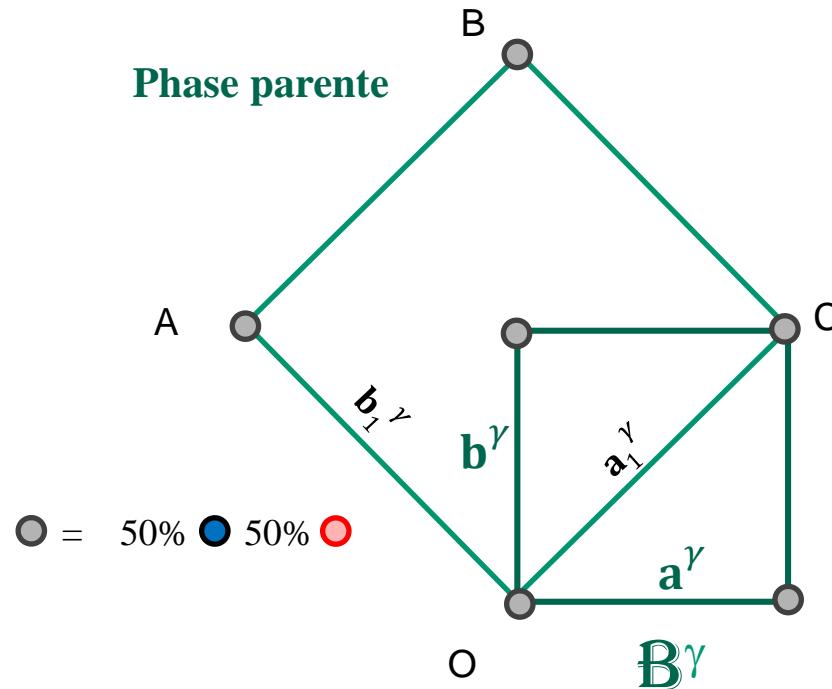
## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

Exemple  $\gamma$  carré P4m  $\rightarrow$   $\alpha$  rectangle Pmm

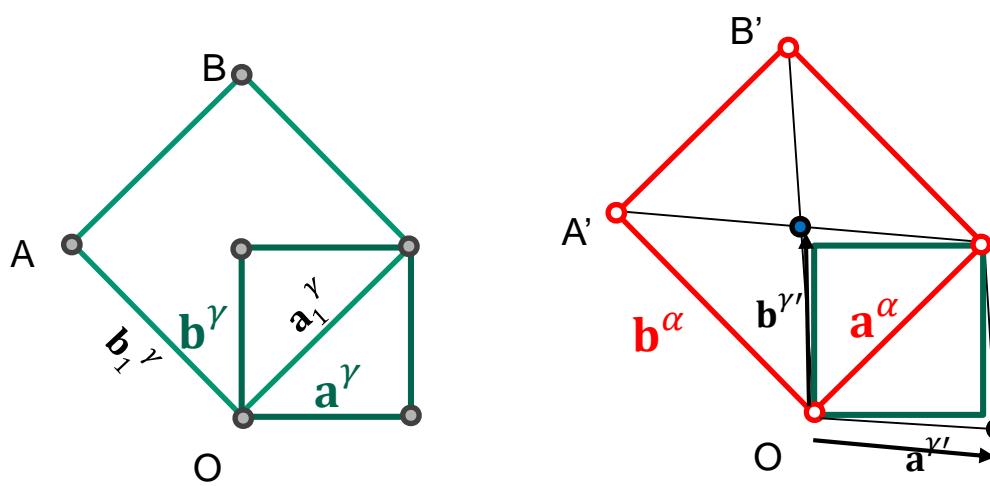
Revenons à l'exemple de la transformation de la phase parente carrée  $\gamma$  en phase ordonnée rectangle  $\alpha$ . Les bases conventionnelles sont  $\mathbf{B}^\gamma = (\mathbf{a}^\gamma, \mathbf{b}^\gamma)$  et  $\mathbf{B}^\alpha = (\mathbf{a}^\alpha, \mathbf{b}^\alpha)$ .

Les nœuds du réseau A, B et C deviennent  $A'$ ,  $B'$  et  $C'$  tels que  $OA' = \delta OA$  avec  $\delta > 1$  et nous simplifions le problème en prenant  $\mathbf{OC} = \mathbf{OC}'$ .

$\Rightarrow$  Calculez  $\mathbf{F}^\gamma$ ,  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha}$  et  $\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma}$



## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices



On utilise la base intermédiaire  $\mathbf{B}_1^\gamma = (\mathbf{a}_1^\gamma, \mathbf{b}_1^\gamma)$  et la matrice de passage associée  $[\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

Dans cette base  $\mathbf{B}_1^\gamma$  la matrice de distorsion est  $\mathbf{F}_1^\gamma = [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\gamma] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}$ .

Après distorsion de réseau,  $\mathbf{B}_1^\gamma = \mathbf{B}^\alpha$ .

La matrice de distorsion peut s'écrire dans  $\mathbf{B}^\gamma$  directement en écrivant  $\mathbf{F}^\gamma = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] \mathbf{F}_1^\gamma [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\gamma]^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \delta) & (1 - \delta) \\ (1 - \delta) & (1 + \delta) \end{pmatrix}$

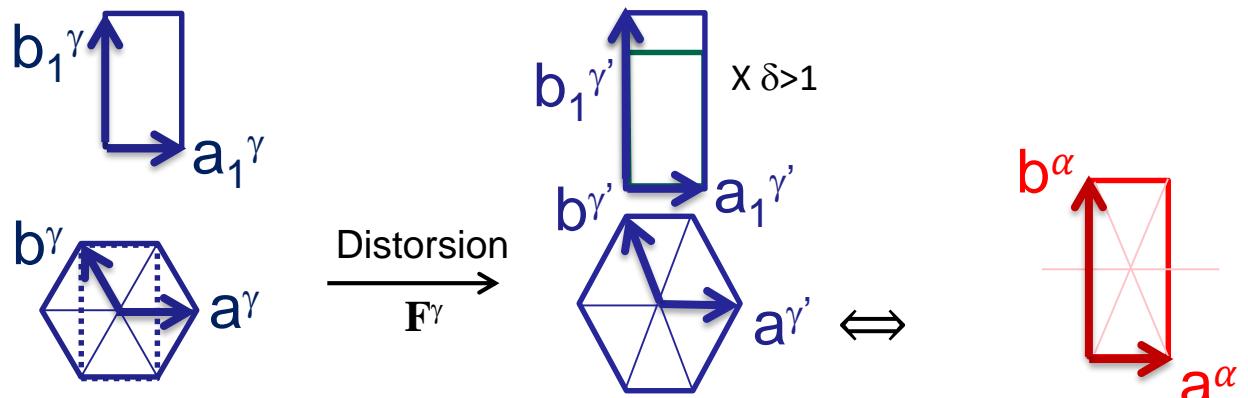
Suivons comment changent les directions  $\mathbf{a}^\gamma, \mathbf{b}^\gamma$ . Après transformation:

$$\mathbf{a}^\gamma \rightarrow \mathbf{a}^{\gamma'} = \frac{1}{2}(\mathbf{a}^\alpha - \mathbf{b}^\alpha) \text{ et } \mathbf{b}^\gamma \rightarrow \mathbf{b}^{\gamma'} = \frac{1}{2}(\mathbf{a}^\alpha + \mathbf{b}^\alpha) \Rightarrow \mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{C}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

La matrice d'orientation est  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\alpha] = \begin{pmatrix} 1 & -\delta \\ 1 & \delta \end{pmatrix}$  par calcul direct ou en appliquant  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \mathbf{F}^\gamma \mathbf{C}^{\gamma \rightarrow \alpha}$

## 2. Orientation, distorsion et correspondance, et leurs matrices

Exemple P6m  $\rightarrow$  Pmm



$\mathbf{B}^\gamma = (\mathbf{a}^\gamma, \mathbf{b}^\gamma)$ . On introduit la base intermédiaire  $\mathbf{B}_1^\gamma = (\mathbf{a}_1^\gamma, \mathbf{b}_1^\gamma)$ , avec  $[\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ .

Dans cette base la matrice de distorsion est  $\mathbf{F}_1^\gamma = [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}$  avec  $\delta > 1$ . La même distorsion écrite dans  $\mathbf{B}^\gamma$  est  $\mathbf{F}^\gamma = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}(\delta - 1) \\ 0 & \delta \end{pmatrix}$

La matrice de correspondance se détermine en considérant  $\mathbf{a}^\gamma \rightarrow \mathbf{a}^\gamma = \mathbf{a}^\alpha$ ,  $\mathbf{b}^\gamma \rightarrow \mathbf{b}^\gamma = -\frac{1}{2} \mathbf{a}^\alpha + \frac{1}{2} \mathbf{b}^\alpha$ . Donc  $\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ . Et son inverse est  $\mathbf{C}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ .

La matrice d'orientation est  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \mathbf{F}^\gamma \mathbf{C}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \begin{pmatrix} 1 & \delta \\ 0 & 2\delta \end{pmatrix}$

Elle pourrait être obtenue par  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}^\alpha]$  avec  $\mathbf{B}_1^\gamma = \mathbf{B}^\alpha$ ,

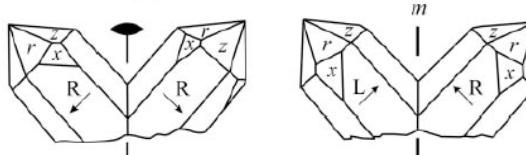
et donc  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = [\mathbf{B}^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] [\mathbf{B}_1^\gamma \rightarrow \mathbf{B}_1^\gamma] = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \delta \\ 0 & 2\delta \end{pmatrix}$

### 3. Maclage de déformation

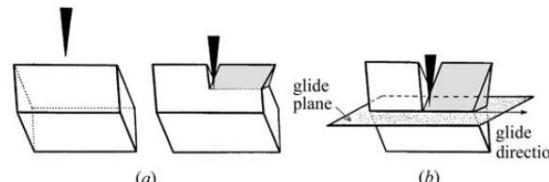
Définition: D'une manière générale, une macle est une désorientation particulière (non due au hasard) entre deux cristaux de même phase

Trois sortes de macles:

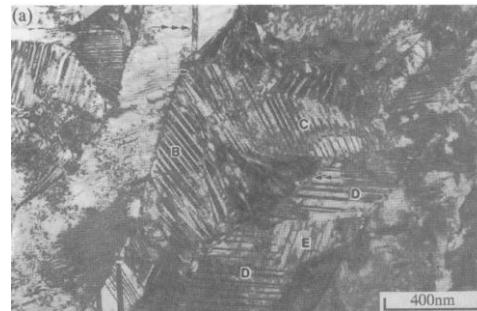
- **Les macles de croissance ou de recuit** qui apparaissent pendant la croissance d'un cristal depuis le liquide ou pendant une recristallisation.
- **Les macles de déformation** qui résultent d'une distorsion de réseau sous contrainte.
- **Les macles de transformation** qui sont les relations entre variants générés par le même grain parent.



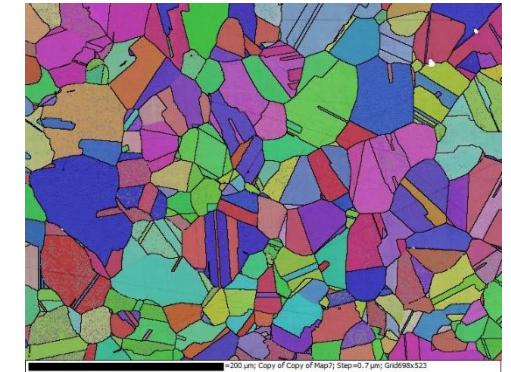
Japanese (growth) twins of quartz (Hanz & Klapper, 2003)



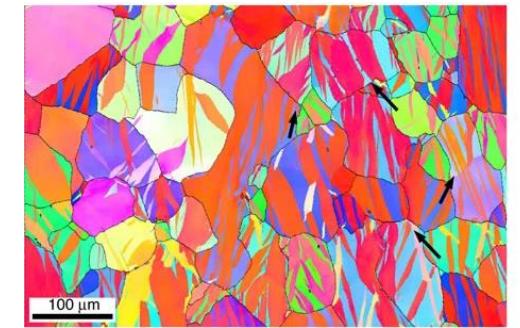
Deformation twinning of calcite



Transformation «twins» in NiTi



$\Sigma 3$  annealing twins in a 304 steel

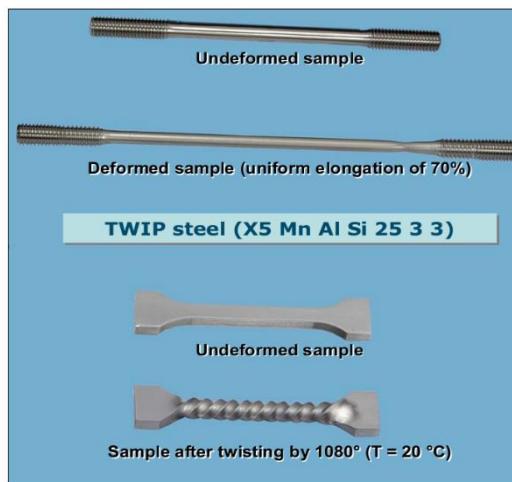
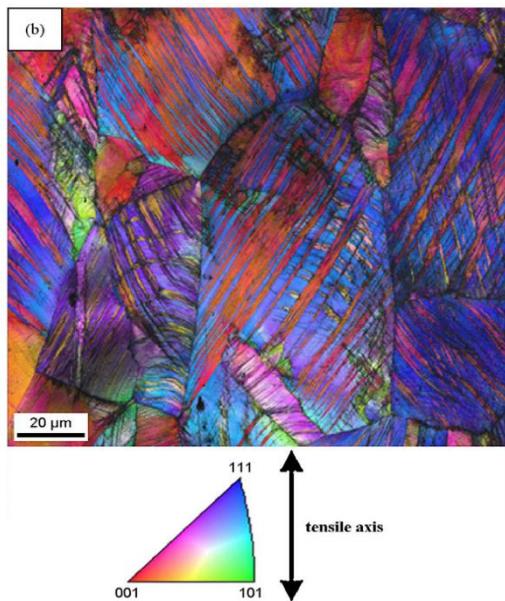


Deformation twins in Mg at 3% strain

### 3. Maclage de déformation

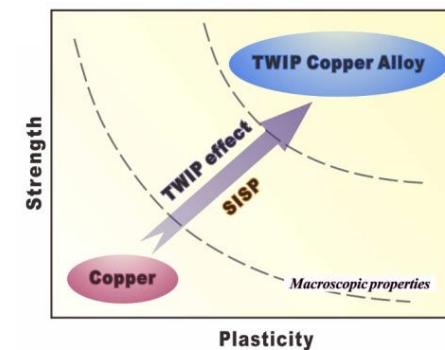
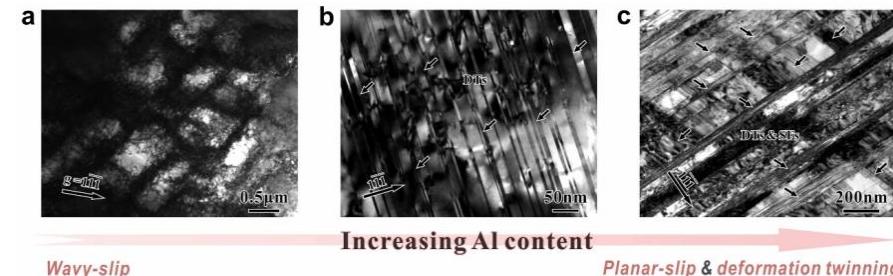
Le maclage mécanique est un mode de déformation plastique très important dans les **métaux hcp** comme Mg (car peu de systèmes de glissement), et dans les **acières TWIP** (*Twinning Induced Plasticity*) dont la grande quantité de Mn aréduit l'énergie de faute d'empilement. Le concept «TWIP» a été étendu ces dernières années aux **alliages cuivre** avec Al ou Ti, et aux **alliages de titane** avec Mo ou Nb.

Acier TWIP



The effect of grain size and grain orientation on deformation twinning in a Fe-22 wt.% Mn-0.6 wt.% C TWIP steel, I. Gutierrez-Urrutia, S. Zaefferer, D. Raabe, 2010.

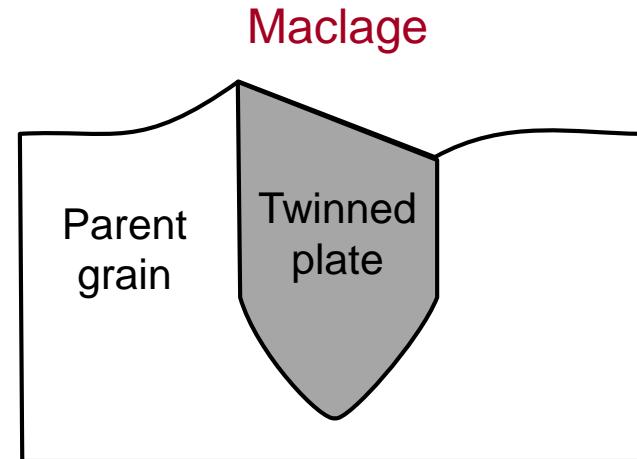
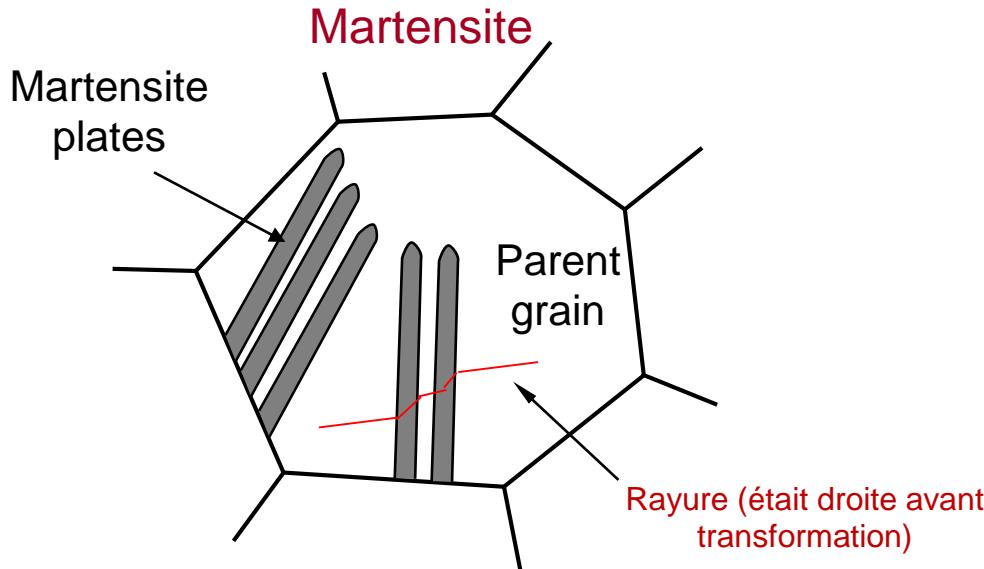
Cuivre TWIP



Microscopic mechanisms contributing to the synchronous improvement of strength and plasticity (SISP) for TWIP copper Alloys, R. Liu, Z. J. Zhang, L. L. Li, X. H. An & Z. F. Zhang, Sci. Rep (2014)

### 3. Maclage de déformation

La transformation martensitique et le maclage mécanique sont **displacifs**.

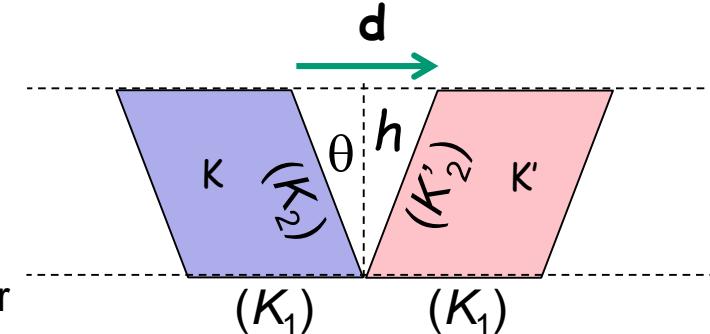


- **Déflexion** des rayures de surface faites préalablement à la transformation.
- Formation d'un **relief en surface**, visible en AFM ou en microscopie confocale.
- **Déformations plastiques** entre la phase parente et la phase fille, mesurable en RX ou en EBSD
- Les dislocations créées **bloquent la propagation** de la transformation, ce qui explique pourquoi il faut continuer à baisser la température sous  $T_0$  pour que la transformation progresse, et l'hystérésis thermique associé.

### 3. Maclage de déformation

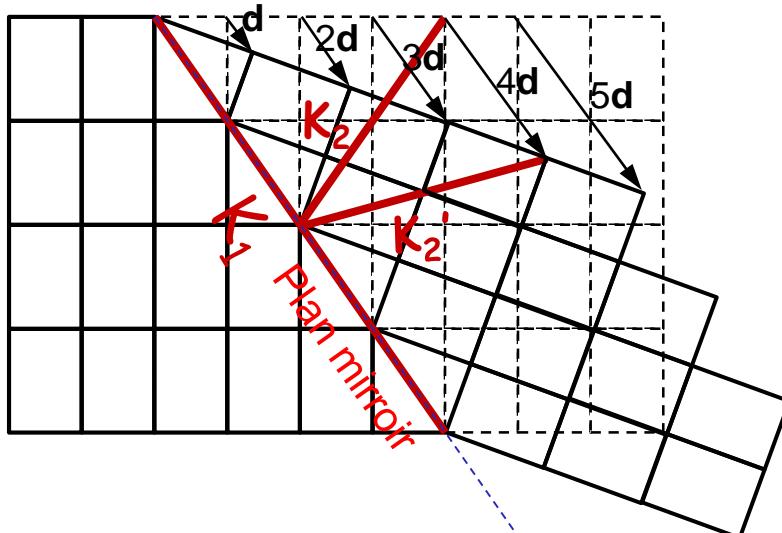
Le maclage mécanique (*deformation twinning*) est obtenu par cisaillement simple sur un plan cristallin  $\mathbf{p}$  le long d'une direction  $\mathbf{d}$  de telle manière que le réseau se retrouve « restauré » mais dans une nouvelle orientation. Le **maclage** n'est rien d'autre qu'une **transformation displacive** générée par contrainte dans laquelle la phase parente et la phase fille sont identiques. Le maclage peut aller à la **vitesse du son** (cri de l'étain).

Il y a deux plans spéciaux: le plan de maclage  $\mathbf{p}$  qui reste invariant noté  $K_1$  et un plan qui « bascule » noté  $K_2$  dans le maclage de type I. L'amplitude de maclage  $s$  est lié à  $2\theta$  l'angle de basculement



$$s = \frac{d}{h}$$

$$\tan \theta = \frac{s}{2}$$



Cas du maclage mécanique dans les fcc:

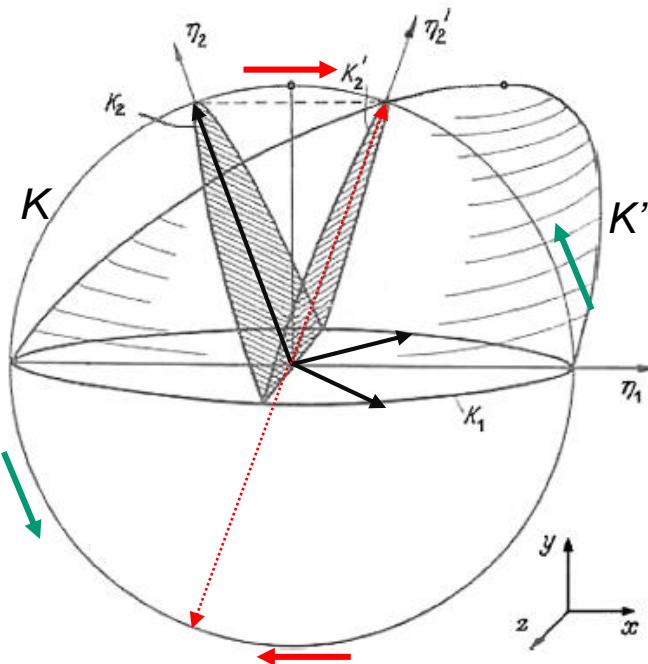
- Le plan de maclage est  $\mathbf{p} = K_1 = (111)$
- La direction de cisaillement est  $\mathbf{d} = \eta_1 = [11\bar{2}]$

Cas du maclage mécanique dans les bcc:

- Le plan de maclage est  $\mathbf{p} = K_1 = (112)$ .
- La direction de cisaillement est  $\mathbf{d} = \eta_1 = [11\bar{1}]$
- Notez que ces deux systèmes de maclage sont les conjugués l'un de l'autre, c'après  $K_2$  fcc =  $K_1$  bcc et  $\eta_2$  fcc =  $\eta_1$  bcc

### 3. Maclage de déformation

La notation  $(K_1, \eta_1, K_2, \eta_2)$ , la distinction entre type I et II, ainsi que des formules de maclage ont été établies par Mügge en 1889.



- **$K_1$  plan cristallin**
  - $\eta_1$  direction
  - $K_2$  plan
  - $\eta_2$  direction cristalline
- } Type I
- } Type II

#### Type I:

*Input* : plan cristallin  $\mathbf{p} = K_1$

*Calcul* :  $\mathbf{T}$  = miroir sur  $K_1$

*Choix*: direction cristalline  $\eta_2$  qui va « basculer »

*Output*: direction de cisaillement  $\mathbf{d} = \eta_1$  et amplitude  $s$

#### Type II:

*Input* : direction cristalline  $\mathbf{d} = \eta_2$

*Calcul* :  $\mathbf{T}$  = rotation de  $180^\circ$  autour de  $\eta_2$

*Choix*: plan cristallin  $K_1$  qui va « basculer »

*Output*: plan de cisaillement  $\mathbf{p} = K_2$  et amplitude  $s$

Macles mixtes:  $(K_1, \eta_1, K_2, \eta_2)$  sont tous cristallins

Note 1: Les macles de type II pour le réseau direct sont des macles de types I pour le réseau réciproque, et vice-versa.

Note 2:  $K = \text{plane } (\eta_1, \eta_2)$ . Pas de rôle dans la théorie classique.

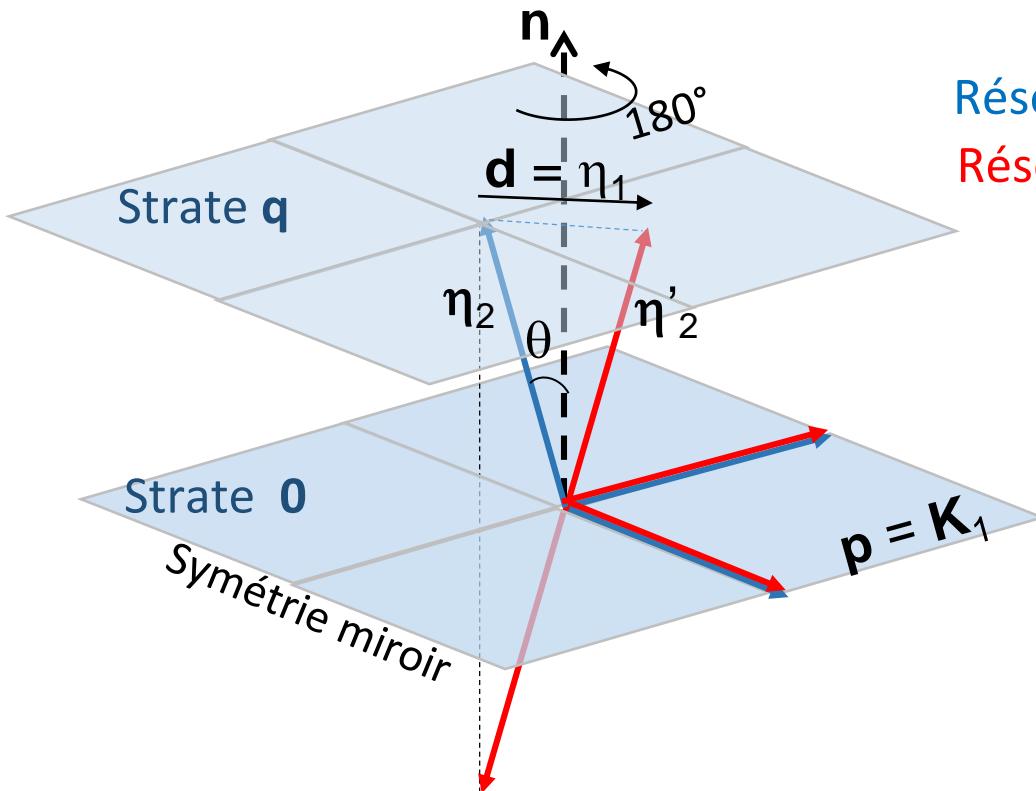
### 3. Maclage de déformation

#### Type I

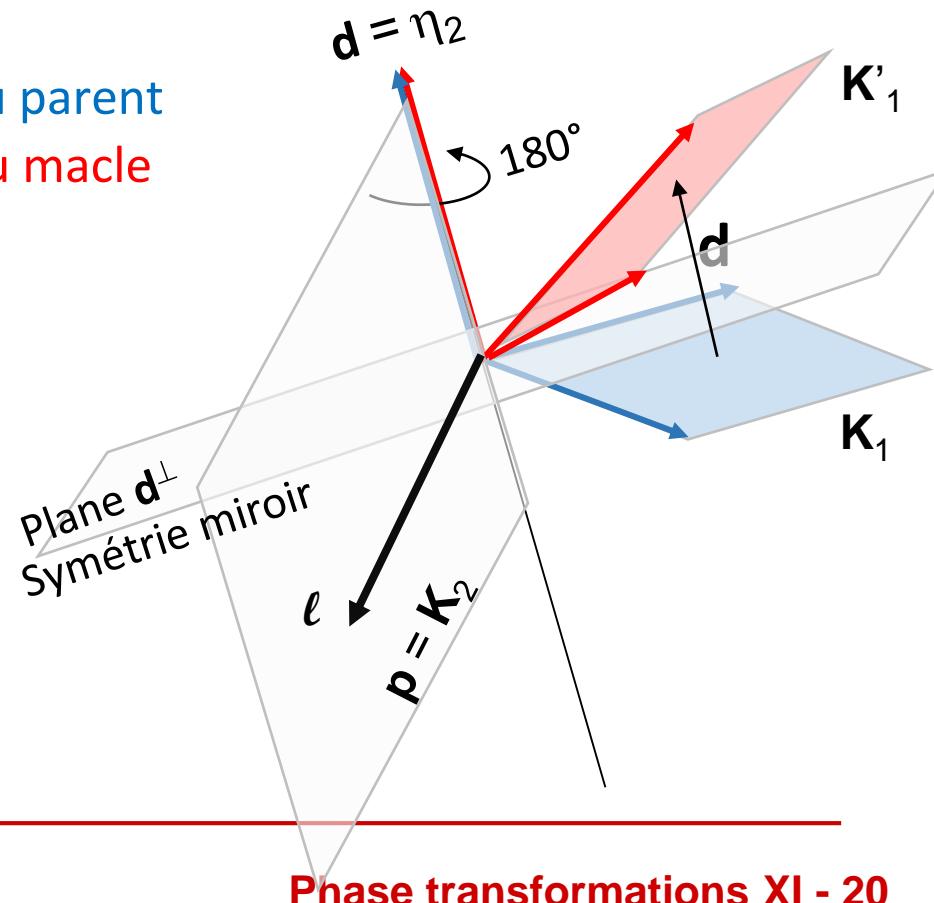
- $p = K_1$  rationnel
  - $\eta_2$  rationnelle (close to  $n = G^{-1}p$ )
- $\Rightarrow d = \eta_1 = \eta_2' - \eta_2$

#### Type II

- $d = \eta_2$  rationnelle
  - $K_1$  rationnel (close to  $d^\perp = G^\perp d$ )
- $\Rightarrow p = K_2 = (d, \ell)$  avec  $\ell = d^\perp \cap K_1$



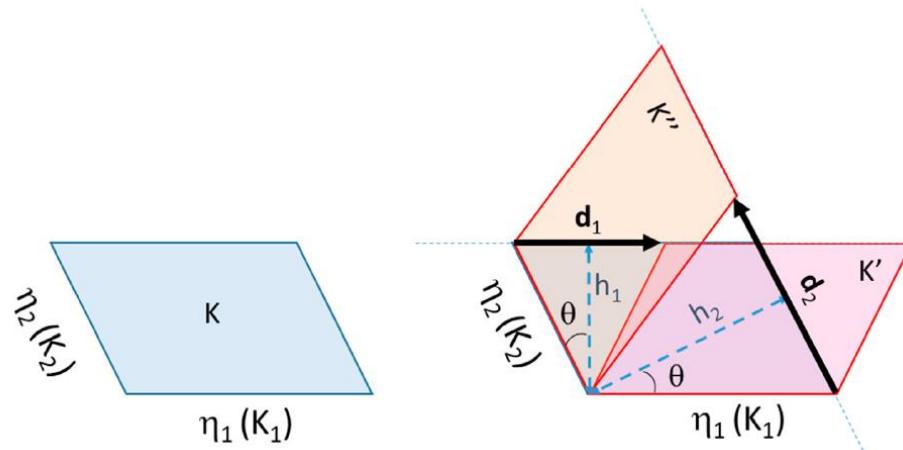
Réseau parent  
Réseau macle



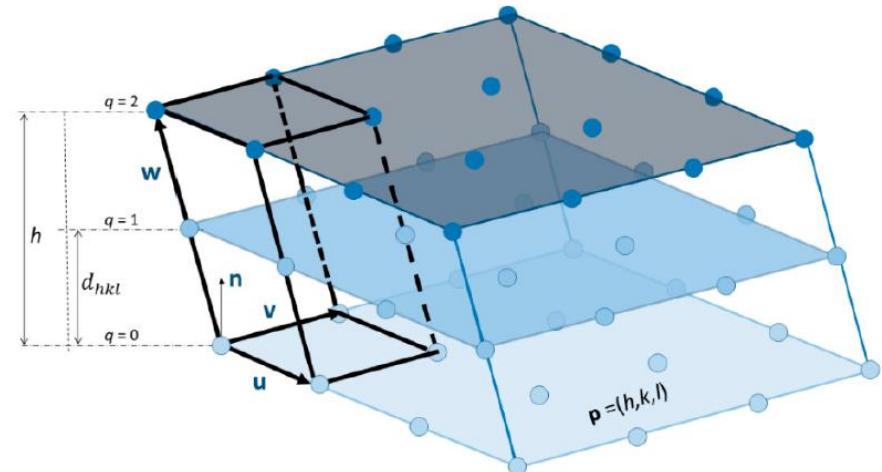
### 3. Maclage de déformation

#### Quelques remarques

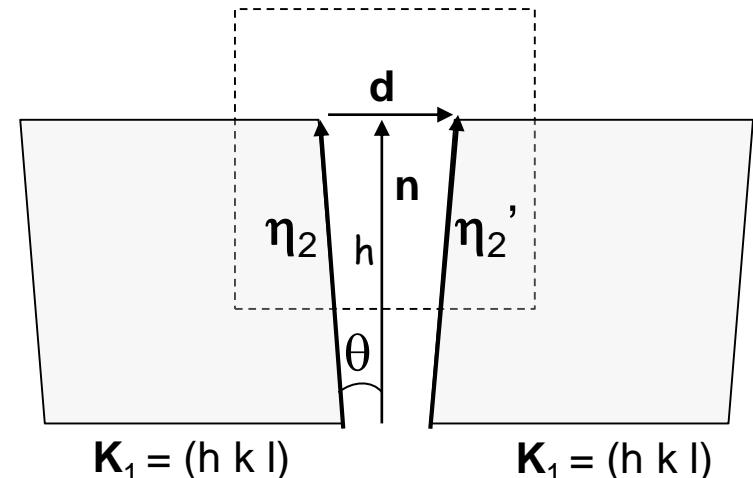
- Les macles de type I et II pour un même couple  $(\mathbf{K}_1, \eta_2)$  sont dites conjuguées
- Elles ont toutes deux la même amplitude cisaillement  $s = \frac{d}{h}$
- Les calculs des éléments de maclage  $(\mathbf{K}_1, \eta_1, \mathbf{K}_2, \eta_2)$  peuvent être réalisés avec des supercellules (*supercells*). Cette idée a été introduite par Friedel en 1904. Le volume de la supercellule divisé par le volume de la cellule unitaire est appelé  $\Sigma$



Exemple de supercellule  $(u, v, w)$ ,  $q = 2$



Friedel (1904) était intéressé par les **macles de croissance** dans les minéraux. Il existe de nombreuses phases en minéralogie, et certaines ont une métrique proche d'une phase de plus haute symétrie, par exemple une phase monoclinique avec  $\beta \approx 90^\circ$  sera proche de la phase orthorhombique ( $\beta = 90^\circ$ ).



Les macles de type I déterminées par Friedel sont celles dont la normale au plan cristallin  $\mathbf{K}_1 = (h k l)$  est proche d'une direction rationnelle. Plus précisément lorsque  $\mathbf{n} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{p}$  est un vecteur du réseau direct proche d'un vecteur à coordonnées entières, c'est-à-dire d'une direction cristalline  $\eta_2$ . L'angle  $\theta$  entre les directions  $\mathbf{n}$  and  $\eta_2$  est appelé **obliquité**.

- Dans les minéraux ou les ferroélectriques les macles qui se forment ont toutes une faible obliquité ( $\theta < 5^\circ$ ), et donc une faible amplitude de cisaillement ( $s < 0.2$ ).
- Les macles en métallurgie peuvent avoir des  $s > 0.2$ . Par exemple, les macles  $(111)\langle 112 \rangle$  des fcc ou  $(112) \langle 111 \rangle$  ont un  $s = \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0.71$ .

### 3. Maclage de déformation

**Bevis & Crocker** (1968) ont établi des formules de calculs sur la base de l'équation  $\mathbf{C} = \mathbf{T} \mathbf{F}$  sachant que  $\mathbf{T}$  doit être d'ordre deux, soit une rotation de 180° ou un plan miroir. Pour les macles de type I, ils ont montré que:

L'amplitude de maclage  $s$  est donné par la matrice de correspondance  $\mathbf{C}$  par:

Amplitude  $s$

$$s^2 = \text{Tr}(\mathbf{C}^t \mathbf{G} \mathbf{C} \mathbf{G}^{-1}) - \dim$$

avec  $\dim = 2$  en 2D, ou  $3$  en 3D

Si on connaît la direction de cisaillement  $\mathbf{d}$  dans l'espace direct, le plan de cisaillement  $\mathbf{p}$  dans l'espace réciproque, et l'amplitude  $s$ , alors la matrice de cisaillement  $\mathbf{F}$  est donnée par :

Matrice de cisaillement  $\mathbf{F}$

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + s \tilde{\mathbf{d}} \tilde{\mathbf{p}}^t = \mathbf{I} + s \tilde{\mathbf{d}} \otimes \tilde{\mathbf{p}}$$

$$\text{avec } \tilde{\mathbf{d}} = \frac{\mathbf{d}}{\sqrt{\mathbf{d}^t \mathbf{G} \mathbf{d}}} \text{ et } \tilde{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{\mathbf{p}^t \mathbf{G}^* \mathbf{p}}}$$

$$\left. \begin{array}{l} \|\tilde{\mathbf{d}}\|^2 = \tilde{\mathbf{d}}^t \mathbf{G} \tilde{\mathbf{d}} = 1 \\ \|\tilde{\mathbf{p}}\|^2 = \tilde{\mathbf{p}}^t \mathbf{G}^* \tilde{\mathbf{p}} = 1 \\ \mathbf{G} = \text{tenseur métrique} \\ \mathbf{G}^* = \mathbf{G}^{-1} \end{array} \right\}$$

### 3. Maclage de déformation

Vérifiez la formule  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + s \tilde{\mathbf{d}} \tilde{\mathbf{p}}^t$

$\mathbf{F} \tilde{\mathbf{d}} = \tilde{\mathbf{d}}$  car  $\tilde{\mathbf{p}}^t \tilde{\mathbf{d}} = 0$ , et en fait vrai pour tout vecteur appartenant au plan  $\mathbf{p}$

#### Propriétés

- $\text{Det}(\mathbf{F}) = 1$  (pas de changement de volume dans le maclage)
- $\text{Tr}(\mathbf{F}) = \dim = 3$  (cas réels)
- Valeurs propres de  $\mathbf{F} = 1$  (doublées)
- Vecteurs propres de  $\mathbf{F}$  forment un espace de dim  $2 = \mathbf{p}$

#### Note:

Le vecteur  $\tilde{\mathbf{p}}$  est le vecteur unitaire de  $\mathbf{p}$  ; ses coordonnées sont données dans l'espace réciproque. On peut noter pour être plus clair  $\tilde{\mathbf{p}} = \tilde{\mathbf{n}}^*$  avec  $\tilde{\mathbf{n}}$  le même vecteur unitaire mais écrit dans l'espace direct.

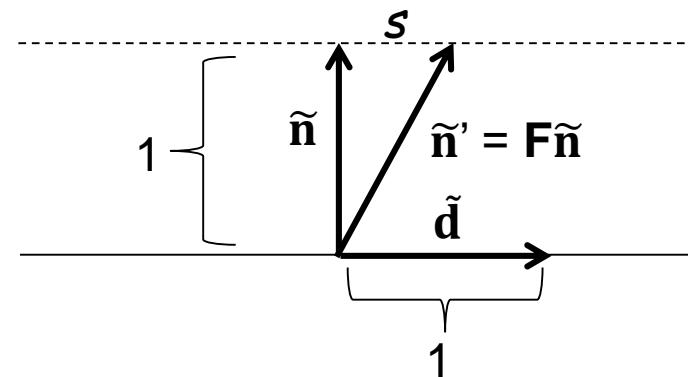
$$\|\tilde{\mathbf{n}}\|^2 = \tilde{\mathbf{n}}^t \mathbf{G} \tilde{\mathbf{n}} = 1 \rightarrow \tilde{\mathbf{n}} = [\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}^*] \tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{G}^* \tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{G}^{-1} \tilde{\mathbf{p}}$$

De plus:

$$\rightarrow \mathbf{F} \tilde{\mathbf{n}} = \tilde{\mathbf{n}} + s \tilde{\mathbf{d}}$$

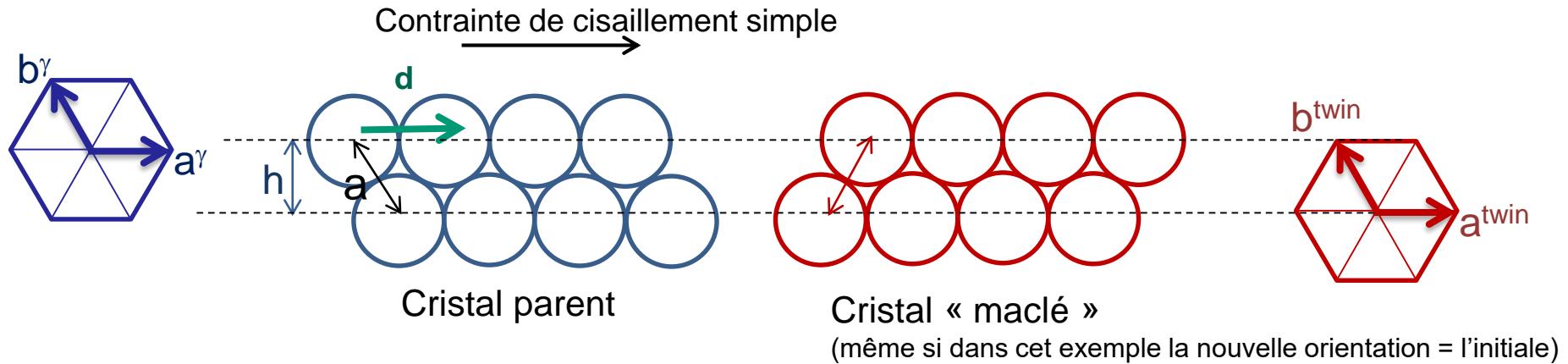
$\rightarrow \mathbf{F}$  peut s'écrire dans le repère 2D  $(\tilde{\mathbf{d}}, \tilde{\mathbf{n}})$  par la matrice

$$\mathbf{F}_{/(\tilde{\mathbf{d}}, \tilde{\mathbf{n}})} = \begin{pmatrix} 1 & s \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$



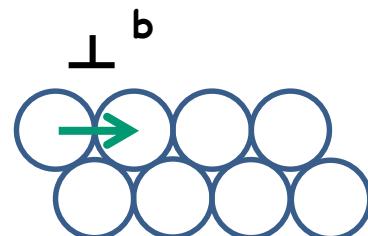
### 3. Maclage de déformation

Exemple  $P6m \rightarrow P6m$

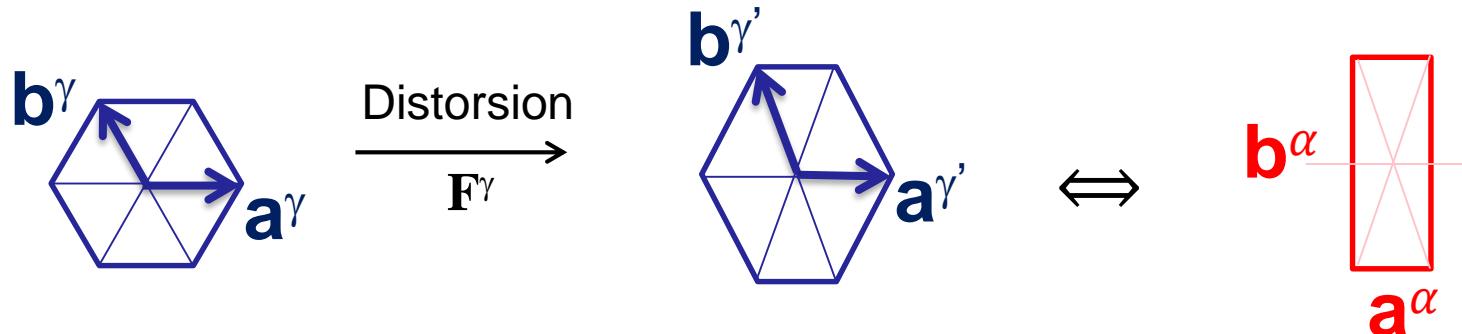


- L'amplitude de cisaillement est  $s = d/h = a/h = 2/\sqrt{3}$
- Le tenseur métrique est  $\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & -1/2 \\ -1/2 & 1 \end{bmatrix}$  dans le cas  $a = 1$
- On vérifie qu'en effet  $s^2 = \text{Tr}(\mathbf{C}^t \mathbf{G} \mathbf{C} \mathbf{G}^{-1}) - 2 = 4/3$

Note: Cette macle "iso-orientation" n'est qu'un cas purement théorique. Elle restaure le réseau cristallin dans son orientation initiale car le vecteur de déplacement est aussi un vecteur de Burgers  $\mathbf{d} = \mathbf{b} = \mathbf{a}$ .



# Résumé



Pour toute transformation **displacive**, nous avons

- Matrice de distorsion:  $\mathbf{F}^{\gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}'_{/\gamma} & \mathbf{b}'_{/\gamma} & \mathbf{c}'_{/\gamma} \end{bmatrix}$  (active)
- Matrice d'orientation:  $\mathbf{T}^{\gamma \rightarrow \alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{\alpha}_{/\gamma} & \mathbf{b}^{\alpha}_{/\gamma} & \mathbf{c}^{\alpha}_{/\gamma} \end{bmatrix}$  (passive)
- Matrice de correspondance:  $\mathbf{C}^{\alpha \rightarrow \gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}'_{/\alpha} & \mathbf{b}'_{/\alpha} & \mathbf{c}'_{/\alpha} \end{bmatrix} = \mathbf{T}^{\alpha \rightarrow \gamma} \mathbf{F}^{\gamma}$  (rationnelle)

**Le maclage mécanique** peut être traité comme une transformation martensitique. La théorie de Bevis & Crocker donne la valeur de l'amplitude de cisaillement  $s$  en fonction de la matrices de correspondance et du tenseur métrique. La matrice de distorsion peut être ensuite calculée directement avec la valeur de  $s$ , du plan et de la direction de cisaillement.