

Modélisation des comportements hystérétiques de piézocéramiques

Au sein des matériaux piézoélectriques, les piézocéramiques de type PZT sont aujourd'hui parmi les matériaux les plus utilisés. Plus facile à fabriquer que les monocristaux de type quartz ou niobate de lithium, ces matériaux ferroélectriques possèdent des caractéristiques plus intéressantes. Leur mode de fabrication étant bien maîtrisé, un raisonnement empirique basé sur les matériaux connus permet aux industriels de créer de plus en plus de nouveaux matériaux aux propriétés diverses.

Au cours de leurs fabrications, et lors de leurs usages, ils possèdent souvent des niveaux de contraintes résiduelles non nuls et sont communément soumis à de grandes contraintes mécaniques ou électriques, qui modifient significativement leurs caractéristiques par rapport à l'état non contraint. Chacun de ces matériaux est formé d'une multitude de domaines possédant chacun une polarisation et une déformation propre, eux même sensibles aux contraintes externes. Les altérations de structures vont générer des non-linéarités ferroélectriques se traduisant par quatre courbes d'hystérésis résultant de la somme des changements de propriétés de chaque domaine, via les évolutions de murs de domaines.

La compréhension de ces phénomènes est un point clef dans le travail d'amélioration des dispositifs piézoélectriques à comportement hystérétique. Basé sur ces considérations et sur des observations expérimentales, le modèle présenté dans ce chapitre décrit le comportement de piézocéramiques soumises à des contraintes mécaniques et électriques et en explique les fonctionnements.

I Les phénomènes hystérétiques dans les céramiques ferroélectriques

I.1 Domaine d'étude

Dans un matériau ferroélectrique, des phénomènes de couplage de la déformation, de la contrainte, du champ électrique et du déplacement électrique sont observés. Les relations hystérétiques entre les différents couples de variables (contrainte/champ électrique, déplacement électrique/champ électrique, déformation/contrainte et déformation/champ électrique) caractérisent le comportement non-linéaire de ces matériaux. Cette non-linéarité 'hystérétique' est à l'origine des changements de propriétés des matériaux ferroélectriques sous contraintes.

Notre étude traite d'une contrainte uniaxiale (mécanique ou électrique), appliquée dans une unique direction. La direction de contrainte est la direction 3, correspondant à la direction (Oz). Les directions (Ox) et (Oy) sont notées respectivement 1 et 2 et forment avec (Oz) un système de coordonnées orthonormé direct (figure IV.1). Par conséquent, les contraintes appliquées se réduisent à leurs composantes électrique et mécanique dans la direction 3, soit E_3 et σ_{33} respectivement. De même, le déplacement électrique considéré se réduit à sa composante D_3 . Par analogie, la déformation longitudinale associée est notée S_{33} et les deux déformations transversales identiquement notées S_{11} et S_{22} .

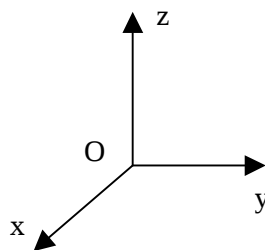


Figure IV.1 : Système de coordonnées de l'étude.

Les matériaux étudiés sont initialement polarisés dans la direction (Oz). Nous étudions l'évolution de la polarisation dans cette direction, en fonction des niveaux et du type de contraintes appliquées. L'étude de la polarisation se réduisant à sa composante P_3 , elle est notée P par soucis de simplicité. De la même manière, le champ électrique, la contrainte mécanique et le déplacement électrique ne possédant qu'une composante dans la direction (Oz), ils seront notés respectivement E , σ et D pour alléger les notations.

Le but de ce travail est de modéliser l'évolution des déformations et du déplacement électrique en fonction du champ électrique et de la contrainte mécanique appliqués. Lors du chargement électrique des piézocéramiques, la contrainte mécanique est nulle. Ce chargement induit une évolution hystérétique du déplacement électrique ainsi que des déformations. Lors du chargement mécanique des piézocéramiques, le champ électrique est nul. Il induit une évolution hystérétique du déplacement électrique ainsi que des déformations. On parlera de charge et de décharge pour notifier la mise sous contrainte et le relâchement de celle-ci.

Nous avons choisi de décrire les 4 phénomènes hystérétiques sur un même matériau, le PLZT, étudié par Lynch [Lynch1995a]. De cette manière, nous décrivons les quatre comportements hystérétiques sur un unique matériau, avec des valeurs de polarisations et des niveaux de contraintes comparables. Notons que ce matériau a fait l'objet de nombreux articles [Hwang1985-Sheritt1995-Chen1998-Michelitsch1998-Lu2006-Pandey2006-Su2011] et qu'il sera l'objet d'une confrontation avec notre modèle dans le chapitre suivant.

I.2 Chargement électrique d'un matériau ferroélectrique

I.2.1 Évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique

L'évolution du déplacement électrique en fonction de la charge puis de la décharge du champ électrique a déjà été traité (en partie) dans le premier chapitre. Ici, nous décrivons plus précisément ce cycle (figure IV.2) en insistant sur les points importants, ainsi que sur les différents processus mis en œuvre. Rappelons que la polarisation a été définie comme la densité de dipôle électrique, son évolution est donc liée à celle du déplacement électrique.

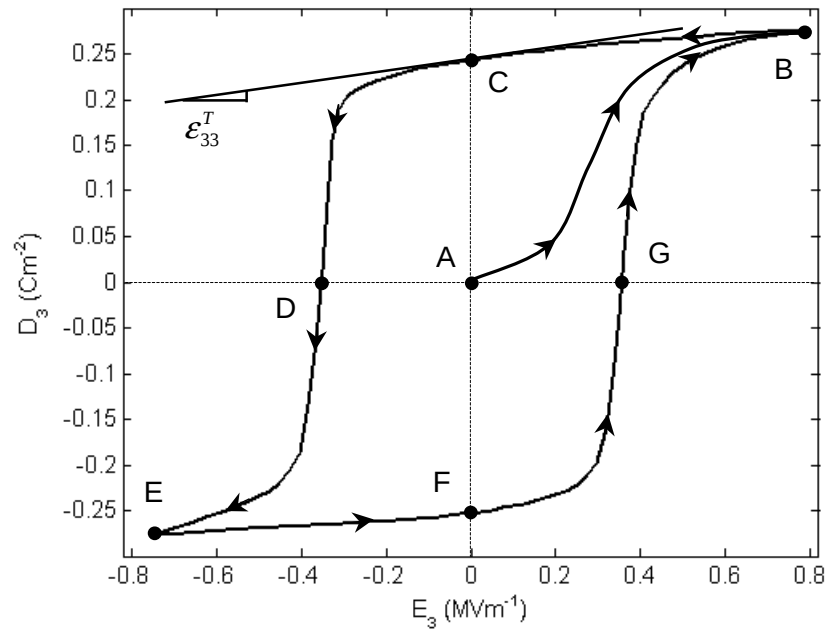


Figure IV.2 : Évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique à contrainte mécanique nulle dans un PLZT [Lynch1995a].

A l'état initial, la céramique n'est pas polarisée et possède un déplacement électrique nul à champ électrique nul (point A). On applique un champ électrique positif croissant qui va créer et faire croître la polarisation dans le matériau jusqu'à atteindre une variation de déplacement électrique linéaire (point B), correspondant au déplacement électrique de saturation D_{sat} . En ce point, le champ électrique est égal au champ de saturation E_{sat} . Lorsque le champ électrique est relâché, le déplacement électrique, ainsi que la polarisation diminuent lentement au fur et à mesure que le champ électrique se rapproche de zéro (point C). Une fois cette valeur atteinte, une polarisation rémanente, notée P_0 , est observée en l'absence de contrainte.

L'application d'un grand champ électrique négatif provoque la baisse non-linéaire du déplacement électrique. Dans un premier temps, la décroissance est lente puis s'accélère jusqu'au point D où le déplacement électrique et la polarisation sont nuls. En ce point, la variation de déplacement électrique (donc de polarisation) est maximum et le champ électrique correspondant est le champ électrique coercitif ($-E_c$). Au-delà de ce point, la valeur du déplacement électrique change de signe et s'oriente dans le sens du champ. La polarisation du matériau a elle aussi changé de signe. L'évolution du déplacement électrique croît (négativement) ensuite, mais de plus en plus lentement au fur et à mesure que l'on s'éloigne du champ coercitif ($D \rightarrow E$) jusqu'à une variation linéaire du déplacement électrique, alors égale à $-D_{sat}$ pour une valeur de champ égale à $-E_{sat}$. L'évolution de la vitesse de variation du déplacement électrique en fonction du champ électrique est considérée

symétrique par rapport à la valeur E_c [Lu2001-Boucher2002-Walter2003-Lu2006-Su2011]. Le segment $C \rightarrow D \rightarrow E$ est un processus de renversement de la polarisation.

Lorsque le champ électrique est relâché, le déplacement électrique diminue au fur et à mesure que le champ électrique se rapproche de zéro ($E \rightarrow F$). A champ électrique nul, la valeur de la polarisation est égale à $-P_0$. Ce phénomène de relâche est analogue (mais en sens inverse) au segment $B \rightarrow C$. Ces deux segments de courbe sont des processus de relâchement de la polarisation. Par la suite, on applique un champ électrique positif le long du segment $F \rightarrow G \rightarrow B$. L'évolution du déplacement électrique est inverse à celle du segment $C \rightarrow D \rightarrow E$, c'est un autre processus de renversement de polarisation. La valeur de champ électrique au point G est égale au champ électrique coercitif E_c .

Dans l'état polarisé, à contrainte mécanique nulle, pour de petites variations du champ électrique et dans l'approximation des faibles variations de polarisation, la relation avec le déplacement électrique autour du point C peut-être linéarisée :

$$D_3 = \varepsilon_{33}^T E_3. \quad (IV.1)$$

Par définition, la constante ε_{33}^T se calcule comme la pente de cette courbe à champ électrique nul, c'est-à-dire quand le matériau est dans son état de polarisation rémanente P_0 . Pour de grandes valeurs de champ électrique, l'effet non-linéaire sur le déplacement électrique doit être considéré.

I.2.2 Évolution des déformations en fonction du champ électrique

Comme décrit au chapitre I, l'action d'un champ électrique sur une piézocéramique engendre des déformations longitudinale et transversales. Ces deux déformations subissent des cycles d'hystérésis de même forme, seule l'évolution de la déformation longitudinale au cours de la charge puis de la décharge du champ électrique est décrite ici. La figure IV.3 montre le comportement de la déformation longitudinale lors d'une charge puis d'une décharge de type électrique en l'absence de contrainte mécanique dans un matériau de type PLZT.

L'évolution de la déformation en fonction du champ électrique à contrainte mécanique nulle décrit une nouvelle boucle d'hystérésis. La déformation est comptée positive en décompression. L'évolution de cette courbe est à mettre en parallèle avec la précédente, car les deux évolutions s'obtiennent en même temps et sont très liées, comme expliqué au chapitre I. Ainsi, nous mettons en évidence différents points de fonctionnements importants, identiques à ceux définis au cours de l'évolution de la polarisation.

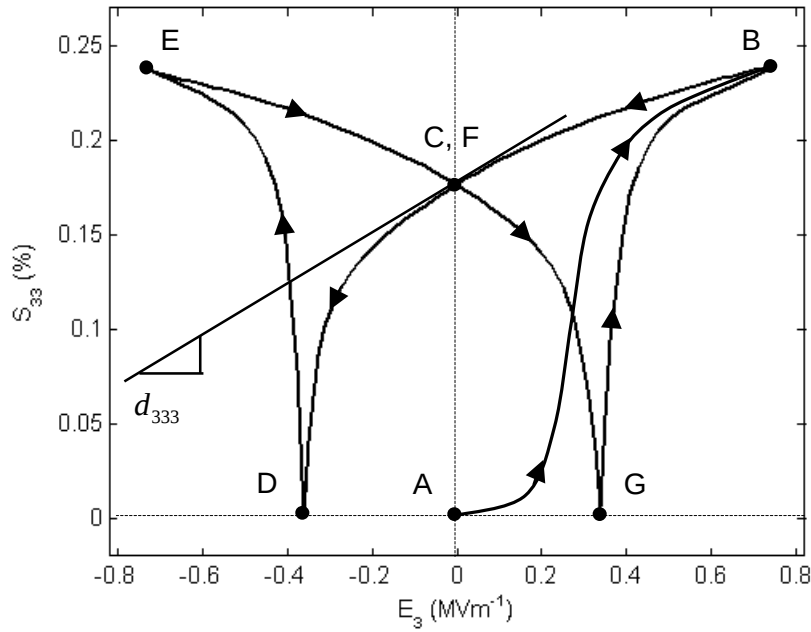


Figure IV.3 : Évolution de la déformation longitudinale en fonction du champ électrique à contrainte mécanique nulle dans un PLZT [Lynch1995a].

A l'état initial (point A), la céramique n'est pas polarisée. Nous considérons alors son état de déformée comme état de référence en le fixant à 0. On applique un champ électrique positif croissant qui crée et fait croître la polarisation dans le matériau, engendrant ainsi une déformation positive (expansion du matériau) jusqu'à atteindre une évolution de la déformation linéaire (point B), correspondant à la déformation de saturation S^{sat} . En ce point, le champ électrique est égal au champ de saturation E_{sat} . Lorsque le champ électrique est relâché, la déformation diminue (compression) lentement (en même temps que la polarisation) au fur et à mesure que le champ électrique se rapproche de zéro (point C). Une fois cette valeur atteinte, une déformation rémanente (S^{rem}) en l'absence de champ électrique est observée.

L'application d'un grand champ électrique négatif provoque la baisse non-linéaire de la déformation (compression), provoquée en grande partie par la baisse de la polarisation jusqu'à une polarisation nulle (point D). En ce point, la variation de déformée est maximum et le champ électrique correspondant est le champ électrique coercitif ($-E_c$). Au-delà de ce point, la valeur de la polarisation change de signe, engendrant une déformée inverse (expansion). L'évolution de la déformation croît ensuite de plus en plus lentement au fur et à mesure que l'on s'éloigne du champ coercitif ($D \rightarrow E$) jusqu'à une variation linéaire, pour des valeurs de déformation et de champs égaux à $-S^{sat}$ et $-E_{sat}$ respectivement.

Lorsque le champ électrique est relâché, la déformée diminue (compression) au fur et à mesure que le champ électrique se rapproche de zéro ($E \rightarrow F$). Ce phénomène de relaxe est analogue (mais en sens inverse) au segment $B \rightarrow C$. Par la suite, on applique un champ électrique positif le long du segment $F \rightarrow G \rightarrow B$. L'évolution de la déformation est analogue au segment $C \rightarrow D \rightarrow E$. La valeur de champ électrique au point G est égale à E_c .

Dans l'état polarisé, à contrainte mécanique nulle, pour de petites variations de champ électrique et dans l'approximation des faibles variations de polarisation, la relation avec la déformation longitudinale autour du point C peut-être linéarisée :

$$S_{33} = d_{333} E_3. \quad (\text{IV.2})$$

Pour des valeurs de champ électrique proches de zéro, la relation est considérée comme linéaire. Par définition, la constante d_{333} correspond à la pente de cette courbe à champ électrique nul, c'est-à-dire quand le matériau est dans son état de polarisation rémanente P_0 . Pour des grandes valeurs de champ électrique, l'effet non-linéaire sur la déformation doit être considéré.

I.3 Chargement mécanique d'un matériau ferroélectrique

Dans cette partie, nous étudions le comportement des piézocéramiques sous contrainte mécanique, en mode compression et en l'absence de champ électrique. L'étirement du matériau n'est pas traité car beaucoup plus difficile à mettre en œuvre expérimentalement car il est impératif d'avoir un dispositif expérimental permettant de tenir l'échantillon sans le déformer et sans glissement. La géométrie de l'échantillon doit alors être adaptée et bien souvent, les matériaux de type PZT se déforment sous l'effet de pincement du dispositif. Par ailleurs, les comportements observés (expérimentalement) en compression ont une évolution proche des comportements en traction.

I.3.1 Évolution du déplacement électrique en fonction de la contrainte mécanique

L'action d'une contrainte mécanique sur une piézocéramique va engendrer une évolution du déplacement électrique. La figure IV.4 montre le comportement du déplacement électrique sous l'action d'une charge, puis d'une décharge mécanique en l'absence de champ électrique dans un matériau de type PLZT. On met en évidence différents points de fonctionnements importants.

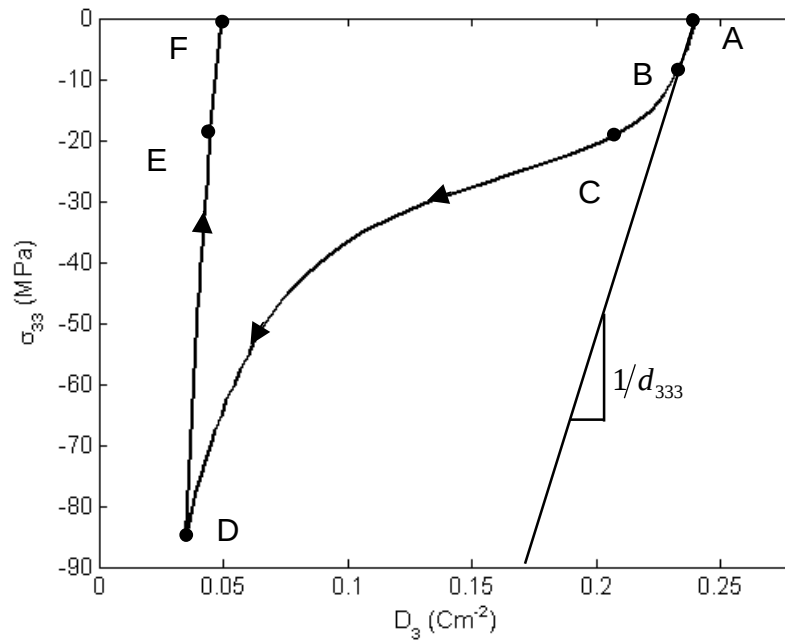


Figure IV.4 : Évolution de la contrainte en fonction du déplacement électrique à champ électrique nul dans un PLZT [Lynch1995a].

A contrainte mécanique nulle (point A), un déplacement électrique rémanent à l'état initial dû à un précédent chargement (électrique ou mécanique) du matériau est observé. Ce déplacement électrique à contraintes nulles est homogène à une polarisation rémanente analogue à celle observée dans le cas du chargement électrique, notée P_0 .

L'évolution du déplacement électrique suit d'abord une loi très linéaire jusqu'à un niveau de contrainte σ_l (point B), le déplacement électrique associé à ce point est noté D_l . On considère que les mouvements de champs de domaines sont négligeables dans cet intervalle de contrainte. Au-delà de ce point, la décroissance du déplacement électrique et de la polarisation deviennent plus rapides et ce, de plus en plus en se rapprochant de la contrainte coercitive σ_c (point C) pour laquelle on atteint un maximum de variation. Passé ce niveau de contrainte, la dépolarisation du matériau est de plus en plus lente au fur et à mesure que l'on se rapproche de la contrainte de saturation σ_{sat} (point D) au niveau de laquelle la variation devient linéaire. Dans ce cas, la plus grande partie des murs de domaines ayant basculé, la proportion de mouvement de domaines diminue. Le déplacement électrique a alors atteint sa valeur de saturation D_{sat} .

Lors de la décompression, le déplacement électrique et la polarisation diminuent linéairement. Aux abords de la contrainte nulle (point E), cette courbe fléchit très légèrement et bien que cela ne soit pas significatif pour ce matériau, nous verrons par la suite que ce phénomène est plus important dans des matériaux plus durs. Notons que dans de nombreux modèles, les auteurs négligent la

repolarisation du matériau [Lu2001-Lu2001a-Boucher2002] ou considèrent une relaxation purement linéaire [Hwang1995-Lu2006]. Cette courbe de relaxation diffère beaucoup selon le type de matériau utilisé, dur ou mou. Dans le cas des matériaux dits ‘durs’, la repolarisation est non négligeable et fortement non-linéaire [Cao1993-Stoll1997-Kamlah1999]. Cette légère repolarisation s’explique par le ‘vide’ créé dans l’axe de décompression qui aura tendance à attirer certaines charges dans cette direction. Une fois la contrainte relâchée point (F), le matériau garde une polarisation ‘résiduelle’ P^{res} .

Dans l’état polarisé, à champ électrique nul, pour de petites variations de contrainte mécanique et dans l’approximation des faibles variations de polarisation, la relation avec le déplacement électrique autour du point A peut-être linéarisée :

$$D_3 = d_{333} \sigma_{33}. \quad (IV.3)$$

Cette partie de courbe permet une nouvelle mesure du coefficient d_{333} , défini comme l’inverse de la pente de cette courbe à l’état initial, donc dans son état de polarisation rémanente P_0 . Pour des grandes valeurs de contrainte, le changement de polarisation rend le comportement du déplacement électrique non-linéaire.

I.3.2 Évolution des déformations en fonction de la contrainte mécanique

L’action d’une contrainte mécanique sur une piézocéramique engendre des déformations longitudinale et transversales. Ces deux déformations subissant des cycles d’hystérésis de même forme, seule l’évolution de la déformation longitudinale au cours de la charge puis de la décharge de la contrainte mécanique est étudiée. La figure IV.5 montre le comportement de la déformation longitudinale au cours de la charge puis de la décharge d’un matériau de type PLZT en l’absence de champ électrique. Comme expliqué au chapitre I, l’évolution de cette courbe est à mettre en parallèle avec la précédente, car les deux évolutions obtenues sont très liées. Ainsi, l’évolution de la polarisation en fonction de la contrainte mécanique influe directement sur les déformations. On met en évidence différents points de fonctionnement importants.

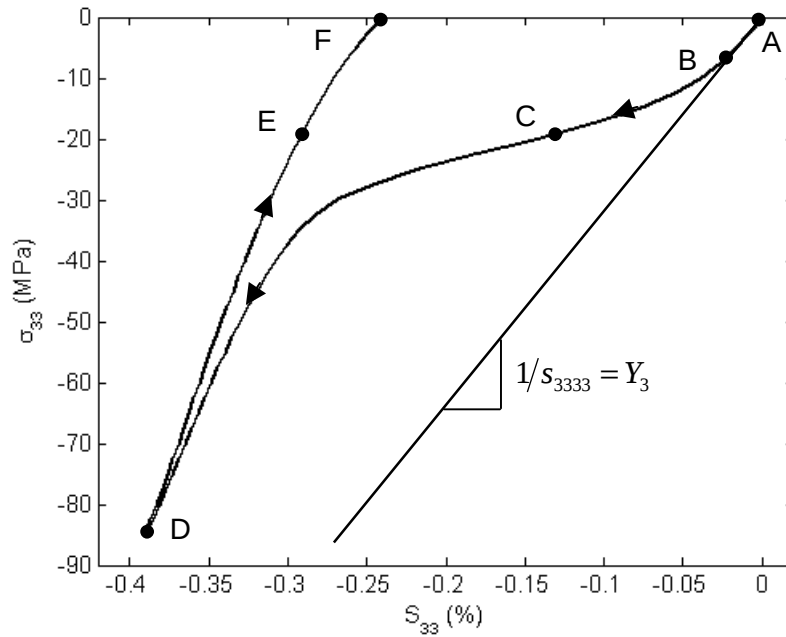


Figure IV.5 : Évolution de la relation contrainte en fonction de la déformation longitudinale à champ électrique nul dans un PLZT [Lynch1995a].

A l'état initial (point A), le matériau possède une déformation rémanente issue d'un précédent chargement, utilisée comme état de référence. Ainsi, on définit les déformations relativement à cette position, comptée négative en compression.

A faible contrainte (avant le point B), de la même manière que le déplacement électrique, l'évolution de la déformation est linéaire jusqu'à un niveau de contrainte mécanique σ_l avant lequel les champs de domaines bougent très peu et n'engendrent aucune non-linéarité. Au-delà de ce seuil, la déformation du matériau devient beaucoup plus rapide avec un maximum de variation au niveau de la contrainte coercitive σ_c (point C), identique à celle observée dans le cas du déplacement électrique. Ce comportement s'explique lui aussi par l'évolution de la polarisation qui est maximum en σ_c , provoquant un maximum de vitesse de déformation. Passé ce niveau de contrainte, la déformation liée au changement de polarisation du matériau est de plus en plus lente et linéaire au fur et à mesure que l'on se rapproche de la contrainte de saturation σ_{sat} (point D). C'est pourquoi la vitesse de déformation décroît aussi. Au niveau de la saturation, la déformation a atteint sa déformation de saturation S^{sat} . Ainsi, de forts changements des champs de domaines le long du segment $B \rightarrow C \rightarrow D$, dus en grande partie à l'évolution de la polarisation, sont observés. Cependant, il apparaît que la vitesse de déformation est plus rapide que la vitesse de dépolarisation. Cette différence s'explique par un deuxième effet purement mécanique des champs de domaines qui sera développé par la suite.

Lors de la décompression, la déformation évolue d'abord linéairement (segment $D \rightarrow E$), de la même manière que la polarisation. Au niveau de la contrainte coercitive (point E), la déformation devient plus rapide, et on observe que la courbe fléchit plus nettement que la courbe précédente. Ainsi, la relaxation mécanique de matériau semble suivre une loi analogue à l'évolution de domaines en compression, mais inverse et plus faible. Une fois la contrainte relâchée (point F), le matériau garde une déformation résiduelle notée S^{res} . Notons qu'ici aussi, de nombreux auteurs [Hwang1995-Chen1998-Lu2001-Lu2006] négligent la non-linéarité de cette relaxation. Pourtant, nous montrerons plus loin que la valeur de cette déformation diffère beaucoup selon le type de matériau utilisé (dur ou mou) et que la non linéarité peut-être très prononcée, donc largement non négligeable. Ce comportement ne s'explique pas totalement par l'évolution des déformations engendrées par les changements de la polarisation et confirme l'existence d'un mouvement des champs de domaines purement mécanique.

Dans l'état polarisé, à champ électrique nul, pour de petites variations de contrainte mécanique et dans l'approximation des faibles variations de polarisation, la relation avec la déformation longitudinale autour du point A peut-être linéarisée :

$$S_{33} = s_{3333} \sigma_{33}, \quad (IV.4)$$

où le coefficient élastique s_{3333} est l'inverse du module d'Young Y_3 . Cette partie de courbe permet une nouvelle mesure du coefficient s_{3333} défini comme l'inverse de la pente de cette courbe à l'état initial, donc dans son état de polarisation rémanente P_0 . Pour des grandes valeurs de contrainte, le changement de polarisation rend le comportement du déplacement électrique non-linéaire.

Il est important de noter qu'à la saturation, les champs de domaines sont bloqués et n'engendrent plus de déformation significative. Ainsi, le comportement du matériau redevient classique. Pourtant, la pente de la courbe (le module d'Young Y_3) près de la saturation est plus élevée qu'à l'état initial. Cette différence est très souvent négligée [Kamlah1999a-Lu2001-Lu2001a] ou expliqué par le comportement non-linéaire du module d'Young qui aurait (en chargement) un comportement initialement élastique, puis plastique et enfin élastique près de la contrainte de saturation, et se déchargerait élastiquement [Lu2006]. Dans notre étude, nous montrons que cet état mou s'explique par les mouvements de domaines.

I.3.3 Évolution de la déformation en fonction de la contrainte mécanique dans un matériau ferroélectrique non polarisé

Nous avons vu dans le chapitre I que les matériaux antiferroélectriques étaient des matériaux très proches des matériaux ferroélectriques eux aussi composés de différents domaines, hystérétiques sous fortes contraintes mais à polarisation (résiduelle ou rémanente) nulle en l'absence de contrainte. Ainsi, à faible contrainte, ces matériaux sont l'équivalent de matériaux ferroélectriques non polarisés. Dans ce cas de figure, l'effet de la polarisation ne rentre pas en jeu.

La figure IV.6 montre l'évolution de la déformation dans un matériau antiferroélectrique non chargé [Cao1993], donc avec une polarisation nulle à champ électrique nul. Cette étude a mis à jour que les matériaux ferroélectriques non polarisés possédaient eux-aussi une déformation hystérétique sous contrainte mécanique.

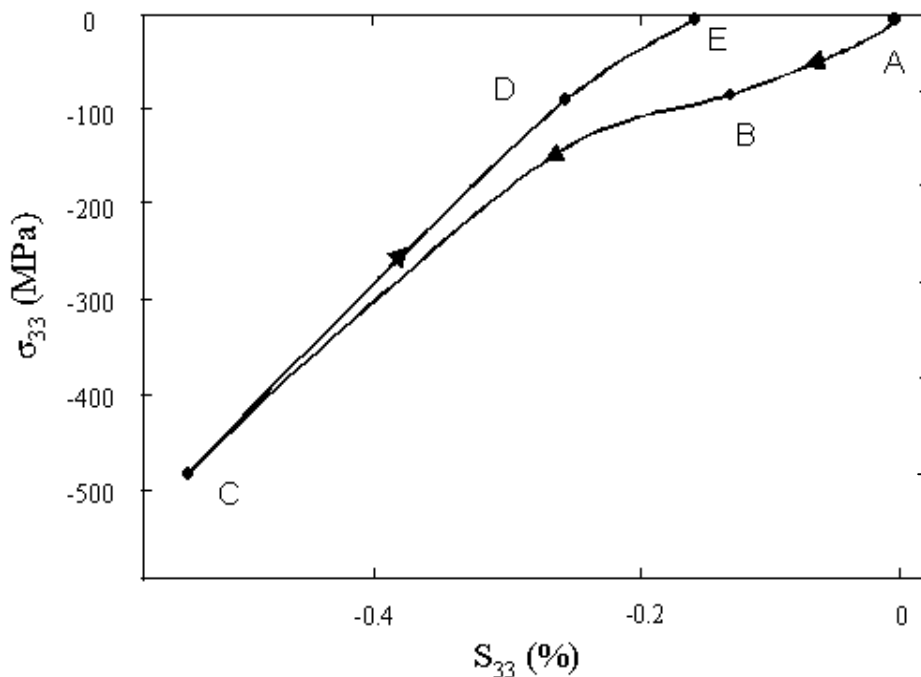


Figure IV.6 : Évolution de la contrainte mécanique en fonction de la déformation longitudinale à champ électrique nul dans un matériau antiferroélectrique non polarisé [Cao1993].

L'évolution de la déformation en fonction de la contrainte mécanique suit une loi non-linéaire de type hystérétique comparable à la précédente. Définissant les déformations par rapport à un état de référence (point A), on observe que la déformation est rapide dès le début de la contrainte. De ce fait, nous ne considérons pas de seuil de contrainte à partir duquel les murs de domaines commencent à bouger. Lors de la compression du matériau, on observe une déformation non-linéaire admettant une vitesse de déformation maximum (point B) pour une valeur de contrainte coercitive σ_c . Au-delà de cette contrainte, la vitesse de déformation diminue et devient constante

en se rapprochant de la contrainte de saturation σ_{sat} (point C). La contrainte mécanique est ensuite relâchée, le comportement de la déformation jusqu'à la contrainte coercitive σ_c (point D) est linéaire. Au-delà, la vitesse de déformation augmente en se rapprochant du mode non contraint (point E) et la déformation résiduelle est non nulle.

La polarisation du matériau restant nulle dans ce domaine d'application, ce cycle d'hystérésis est uniquement dû à des mouvements mécaniques des champs de domaines, et non à un changement de polarisation microscopique engendrant une déformation. Pourtant, la description de cette courbe est analogue à celle faite dans le cas des déformations liées à la variation de polarisation sous contrainte mécanique dans le matériau ferroélectrique. Ainsi, nous faisons l'hypothèse que cette déformation est elle aussi due aux changements de domaines, mais indépendante du changement de polarisation et posons que les matériaux ferroélectriques possèdent une déformation ferroélastique 'pure' en plus de la déformation due au changement de polarisation et de la déformation classique. Cette déformation ferroélastique purement mécanique explique pourquoi la vitesse de déformation est plus importante que celle engendrée par le changement de polarisation et est à l'origine d'une partie de l'augmentation de la vitesse de déformation en fin de décompression. Ainsi, la déformation rémanente d'un matériau ferroélectrique est due aux changements de domaines liés à la polarisation microscopique, mais aussi aux mouvements de domaines purement mécaniques.

Notons que d'autres mesures ont été faites par Schäufele en 1996 [Schaeufele1996] sur des PZT durs et mous non polarisés qui ont montré des évolutions de déformations sous contrainte mécanique non-linéaire hystérétique du même type que celles des matériaux ferroélectriques polarisés. Ceci confirme que le comportement ferroélastique des piézocéramiques suit une loi analogue à celle de la déformation due aux changements de domaines. Par ailleurs cette même hypothèse est formulée par Kamlah dans de récents articles [Kamlah1999-Kamlah1999a].

La prise en compte de ce comportement est une des originalités majeures de notre modèle qui donne du sens à un comportement non-linéaire pas ou mal décrit par d'autres auteurs. Ainsi, cette considération résout le problème rencontré par Lu qui l'oblige à considérer un matériau biphasé en relaxation et non en compression. Son hypothèse n'étant pas physique, notre modèle propose une explication réaliste et basée sur des considérations expérimentales.

II Mise en place du modèle de piézocéramiques sous contraintes

L'analyse de l'évolution de la déformation et du déplacement électrique sous contraintes électrique et mécanique a montré que la non-linéarité hystérétique est en majeure partie due aux

mouvements de domaines dans les matériaux. Prenant en compte la polarisation spontanée dans les équations piézoélectriques décrites au chapitre II, le déplacement électrique s'exprime :

$$D_m = P_m^{sp} + \varepsilon_{mn} E_n + d_{mij} \sigma_{ij}. \quad (IV.5)$$

Notons que dans le cas d'un matériau monodomaine, on exprime rarement la polarisation spontanée dans l'expression du déplacement électrique car elle évolue très peu, le déplacement électrique est alors calculé à une constante près. Dans le cas des matériaux polydomaines, nous avons montré au chapitre I que cette polarisation varie beaucoup, car les murs de domaines évoluent sous contraintes. Dans le modèle qui suit, nous évaluons l'évolution de la polarisation rémanente en fonction de la contrainte appliquée au travers des mouvements de domaines. De la même manière, nous évaluons l'évolution de la déformation rémanente, engendrée par les mouvements de domaines, qui se superpose à l'équation classique de la déformation d'un matériau piézoélectrique.

II.1 Formulation du modèle en contrainte uniaxiale de type mécanique ou électrique

Nous nous plaçons dans le domaine d'étude décrit précédemment, en considérant des chargements isothermes avec des valeurs de contraintes au maximum égales aux contraintes de saturation. Au-delà de ces niveaux, le comportement du déplacement électrique et de la déformation redeviennent linéaires. Dans cette configuration, nous décomposons les déplacements électriques et tenseurs des déformations, en définissant les polarisations et déformations rémanentes macroscopiques comme des variables internes indépendantes :

$$D_m = D_m^{rev} + P_m^{rem}, \quad (IV.6)$$

$$S_{ij} = S_{ij}^{rev} + S_{ij}^{rem}, \quad (IV.7)$$

où les composantes du déplacement électrique D_m^{rev} et de la déformation S_{ij}^{rev} sont appelées réversibles dans le sens où elles s'annulent en l'absence de contraintes externes. Les autres composantes sont nommées rémanentes du fait qu'elles existent en l'absence de chargement. Comme expliqué précédemment, la polarisation rémanente est simplement notée P_m . Cette décomposition est de plus en plus répandue et soutenue par différents auteurs [Hwang1995-Kamlah1999-Walter2003-Chen2006].

D'un point de vue microscopique, nous avons vu dans le chapitre I que les polarisations et déformations spontanées sont liées entre elles par effet piézoélectrique. Par définition, la déformation spontanée représente la déformation engendrée par l'alignement des domaines dans la

direction de polarisation. Ainsi, nous ne considérons pas d'effet électrostrictif, car la relation entre polarisation et déformation est déjà prise en compte dans l'évolution des variables microscopiques. Par conséquent, et comme démontré par Kamlah [Kamlah1999], nous considérons les polarisations et déformations rémanentes macroscopiques comme des variables indépendantes.

La déformation engendrée par les mouvements de domaines liés au changement de polarisation est appelée 'déformation piézoélectrique' et est notée S_{ij}^p . Comme décrit au paragraphe I.3.3 et comme soutenue par d'autres auteurs [Kamlah1999-Walter2003], le comportement non-linéaire des déformations rémanentes S_{ij}^{rem} ne s'explique pas uniquement par les déformations rémanentes issues du changement de polarisation S_{ij}^p . Nous avons montré qu'une déformation purement mécanique intervient sous contrainte mécanique. Ainsi, nous définissons une déformation purement ferroélastique notée S_{ij}^f , induite par les mouvements de domaines lors d'un chargement mécanique :

$$S_{ij}^f = S_{ij}^{rem} - S_{ij}^p. \quad (IV.8)$$

Ainsi, dès lors que le matériau est sous contrainte mécanique ou électrique, nous évaluerons et calculerons l'évolution des composantes rémanentes, soit la polarisation, la déformation piézoélectrique et la déformation ferroélastique pure (dans le cas de la contrainte mécanique).

II.2 Effet réversible

II.2.1 Comportement linéaire des matériaux

En première approximation, les propriétés élastiques et diélectriques du matériau peuvent être considérées isotropes et les propriétés piézoélectriques considérées transverses isotropes [Lynch1994-Hwang1995-Chen1998-Kamlah1999a-Walter2003]. Les propriétés de la céramique étant égales à celle du grain, nous utilisons les équations constitutives linéaires de la piézoélectricité pour chaque grain. Les expressions linéaires du déplacement électrique D_m^L et de la déformation S_{ij}^L , avec la contrainte et le champ électrique comme variables sont données par :

$$\begin{cases} D_m^L = d_{mkl} \sigma_{kl} + \varepsilon_{mn}^T E_n \\ S_{ij}^L = s_{ijkl} \sigma_{kl} + d_{mij} E_m \end{cases}. \quad (IV.9)$$

avec :

$$s_{ijkl} = \frac{1+\nu}{Y} \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\nu}{Y} \delta_{ij} \delta_{kl}, \quad (\text{IV.10})$$

où Y est le module d'Young, ν est le coefficient de Poisson et δ est le symbole de Kronecker.

II.2.2 Évolution des constantes d'une piézocéramique

Il est important de noter que le module d'Young, ainsi que les coefficients piézoélectriques et diélectriques sont sensibles à la microstructure en domaines de ces matériaux. Kamlah [Kamlah1999a] a montré cet effet sur le module d'Young et le coefficient diélectrique de piézocéramique en mesurant ces constantes sur deux échantillons issus d'un même matériau, l'un polarisé dans la direction de la contrainte et l'autre polarisé dans une direction perpendiculaire à la contrainte. La différence entre les valeurs respectives est de l'ordre de 10%. Ainsi, le module d'Young, mais aussi le coefficient diélectrique [Zhang1999-Boucher2002-Zhou2005] sont sensibles à la polarisation du matériau, donc à leur champ de domaines. De nombreux auteurs [Lynch1994-Hwang1995-Chen1998-Kamlah1999a-Walter2003] choisissent de négliger cette variation du module d'Young et du coefficient diélectrique. Cette hypothèse s'appuie sur le fait que dans de nombreux matériaux, les mouvements de domaines sont très faibles à l'état initial. Ainsi, pour de faibles niveaux de contraintes, les variations de champs de domaines sont considérées comme faibles et n'altérant que très peu la mesure des coefficients. Les variations des polarisations et déformations rémanentes à faibles contraintes sont donc négligées. Pourtant, nous verrons par la suite que les matériaux ne répondent pas tous de la même manière et peuvent avoir une évolution des champs de domaines très précoce, qui altère la mesure des coefficients.

A contrario, le comportement du coefficient piézoélectrique des piézocéramiques est mieux connu. Il a été montré que ces coefficients varient en fonction du niveau de polarisation [Chen1998] et de la température [Zhang1983-Kounga2008]. La figure IV.7 décrit l'évolution du coefficient piézoélectrique d_{31} en fonction du champ de polarisation et de la température sur un matériau piézoélectrique de type PVDF [Murayama1975].

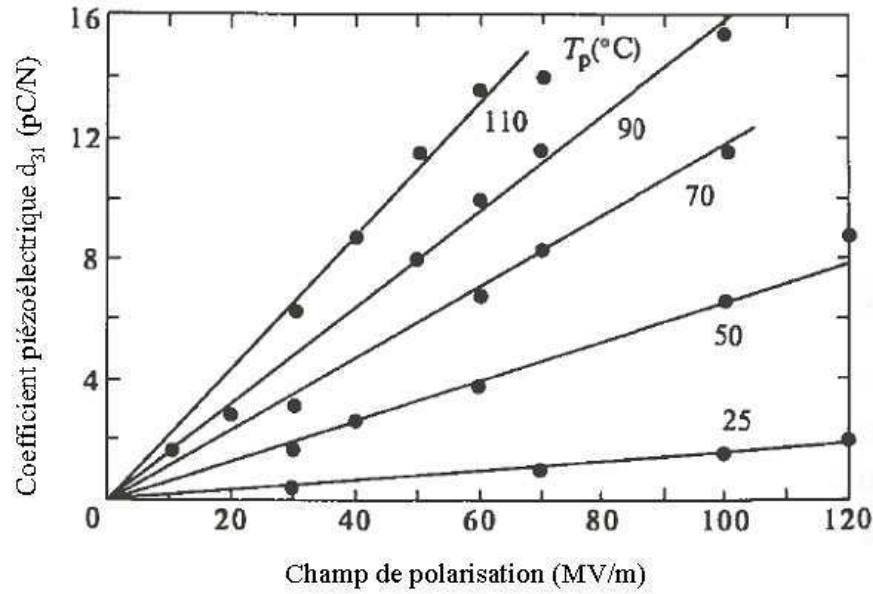


Figure IV.7 : Évolution du coefficient piézoélectrique en fonction du champ de polarisation et de la température pour un film mince de PVDF [Murayama1975].

Considérant une relation directe entre le champ de polarisation et la polarisation elle-même, il apparaît clairement que le coefficient piézoélectrique dépend linéairement du niveau de polarisation. Généralisant à l'ensemble du tenseur piézoélectrique, plus la polarisation du matériau est importante, plus les valeurs des coefficients piézoélectriques sont importantes. Inversement, en l'absence de polarisation, l'effet piézoélectrique disparaît. La dépendance des coefficients piézoélectriques à la polarisation est donc considérée comme linéaire elle aussi [Hwang1995-Chen1998-Kamlah1999-Walter2003]. Respectant le fait que les constantes classiques des matériaux sont définies à contrainte nulle, cette dépendance est normalisée par rapport à la polarisation rémanente à contrainte nulle P_0 . Les coefficients piézoélectriques modifiés sont définis comme :

$$\tilde{d}_{mkl} = d_{mkl} \frac{P}{P_0}. \quad (\text{IV.11})$$

De cette manière, la validité de l'équation classique est vérifiée à l'état initial. Au niveau de la polarisation de saturation, la valeur du coefficient piézoélectrique modifiée peut aussi être considérée comme constante. Cette expression est donc homogène avec les lois classiques de la piézoélectricité, et contrairement aux autres auteurs, elle utilise le coefficient piézoélectrique classique et ne nécessite pas le calcul d'un coefficient piézoélectrique à contrainte de saturation.

II.2.3 Équations constitutives réversibles

Dans l'approximation des faibles mouvements de domaines à faibles contraintes, nous prenons les valeurs de module d'Young et des constantes diélectriques et piézoélectriques issues de la littérature. En insérant le coefficient piézoélectrique modifié $\tilde{d}_{mkl}$ dans les équations constitutives linéaires, nous définissons les variables réversibles comme suit :

$$\begin{cases} D_m^{rev} = \tilde{d}_{mkl} \sigma_{kl} + \epsilon_{mn}^T E_n \\ S_{ij}^{rev} = s_{ijkl} \sigma_{kl} + \tilde{d}_{mij} E_m \end{cases} \quad (IV.12)$$

Ces équations sont réversibles, car n'existent qu'en présence de contrainte électrique ou mécanique. Cependant, le coefficient piézoélectrique est fonction de la polarisation, donc d'une valeur qui n'évolue pas linéairement. Il est important de noter qu'en l'absence de champ externe et pour des champs supérieurs aux champs de saturation, ces équations sont linéaires et homogènes aux équations classiques.

II.3 Distribution d'orientation de domaines

II.3.1 Distribution de von Mises

La distribution de champs de domaines que nous avons choisi d'utiliser pour caractériser l'évolution de champ de domaines dans les matériaux piézocéramiques sous contraintes est une distribution de von Mises. Déjà utilisée pour caractériser ce genre de phénomène dans des matériaux 2D [Lu2006], nous utilisons les bases du modèle existant pour l'adapter à notre configuration. Cette distribution circulaire ressemble à une distribution Gaussienne et donne une distribution du maximum d'entropie [Dowe1995]. En faisant l'approximation de volume et température constants, elle est directement liée au minimum d'énergie libre [Lu2006].

Associant la coordonnée polaire θ à chaque point matériel de coordonnées cartésiennes $\vec{x}$, (figure IV.8), la distribution des orientations de domaines de von Mises est donnée par :

$$f(\theta, \vec{x}) = \frac{e^{\kappa \cos(\theta - \bar{\theta})}}{2\pi I_0(\kappa)}, \quad (IV.13)$$

où $\kappa = \kappa(\vec{x}) \in [0, \infty)$, $\bar{\theta} = \bar{\theta}(\vec{x}) \in [-\pi, \pi]$ et $I_0(\kappa)$ est la fonction de Bessel modifiée de première espèce et d'ordre 0 définie comme :

$$I_0(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\kappa \cos \theta} d\theta. \quad (\text{IV.14})$$

Ainsi, la fonction de distribution est dépendante de deux paramètres :

- le paramètre de concentration de domaines κ ,
- la direction principale de domaines $\bar{\theta}$.

Le paramètre de concentration κ donne une information sur la proportion de domaines orientés dans la direction principale de domaines $\bar{\theta}$. Le terme $f(\theta, \bar{\theta}) d\theta$ est la probabilité d'un domaine de se trouver dans une direction comprise entre θ et $\theta + d\theta$. Les directions perpendiculaires aux directions θ et $\bar{\theta}$ sont notées respectivement α et $\bar{\alpha}$. Chacune de ces directions est portée par les vecteurs unitaires $\vec{e}_\theta$, $\vec{e}_{\bar{\theta}}$, $\vec{e}_\alpha$ et $\vec{e}_{\bar{\alpha}}$. Nous disposons de deux systèmes de coordonnées. L'un global de type cartésien repère la position du point dans la céramique et le deuxième est local de type cylindrique qui donne une information sur l'angle associé à ce point.

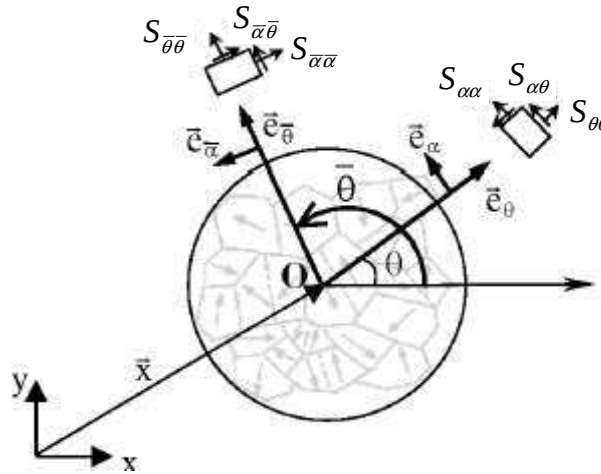


Figure IV.8 : Système de coordonnées cartésien global et système de coordonnées cylindrique local.

De cette manière, nous passons d'un repère cartésien au repère de von Mises, plus adapté à la description de nos matériaux 'orientés'. Dans notre étude, nous évaluons la valeur du paramètre de concentration de domaines correspondant à la direction 3.

II.3.2 Propriétés de la distribution de von Mises

La distribution de von Mises est une fonction cyclique en θ , symétrique par rapport à la direction principale $\bar{\theta}$ (figure IV.9) et possédant les propriétés suivantes :

$$\int_0^{2\pi} f(\theta, \bar{x}) d\theta = 1, \quad (IV.15)$$

$$\int_0^{2\pi} \theta f(\theta, \bar{x}) d\theta = \bar{\theta}. \quad (IV.16)$$

Ces deux équations indiquent qu'en chaque point matériel de position $\bar{x}$, la somme des probabilités de domaines est de 1 et que la somme des directions de domaines indique la direction principale de domaines $\bar{\theta}$. Dans la suite de la discussion, nous omettrons le vecteur $\bar{x}$ pour simplifier la notation.

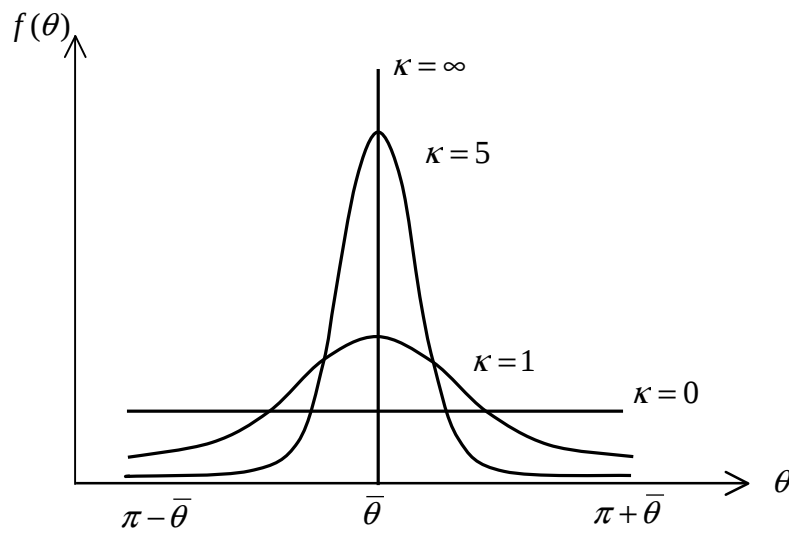


Figure IV.9 : Variation de la distribution de von Mises en fonction du paramètre de concentration κ .

Cette figure représente l'évolution de la distribution de von Mises pour différentes valeurs du paramètre de concentration κ . Ainsi, lorsque le paramètre de concentration κ augmente, la fonction de distribution se resserre de plus en plus autour de la direction principale $\bar{\theta}$. Les cas où $\kappa = 0$ et $\kappa = \infty$ correspondent respectivement à une distribution uniforme et à une distribution de Dirac.

Reprenant la figure I.11 déjà décrite en terme de polarisation au chapitre I, nous pouvons décrire les différents états de polarisation du matériau par ce couple de valeurs :

- figure IV.10.a : aucune polarisation particulière, $\kappa = 0$ et $\bar{\theta}$ est arbitraire,
- figure IV.10.b : le matériau possède une polarisation macroscopique dans la direction $\bar{\theta}$, κ est non nul et $\bar{\theta}$ indique la direction de polarisation.
- figure IV.10.c : le matériau est polarisé 'quasi' totalement dans une direction, $\kappa \approx \infty$ et $\bar{\theta}$ indique la direction de polarisation.

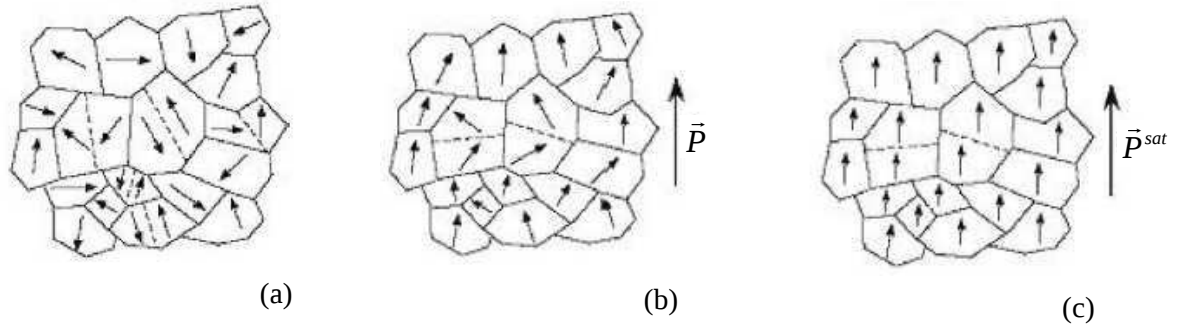


Figure IV.10 : Modèles de piézocéramiques non polarisée (a), polarisée (b) et à polarisation de saturation (c).

Ainsi, la concentration d'orientation de domaines dans une direction $\bar{\theta}$ est reliée au paramètre κ . L'évolution de ce paramètre est directement liée à l'évolution de la concentration de domaines dans une direction. Il nous informe sur la proportion de domaines polarisés et déformés dans cette direction. Dans notre étude, cette direction est également la direction d'application des champs de contraintes ($0z$).

II.3.3 Définitions des différents paramètres de concentrations de la piézocéramique

Précédemment, nous avons décrit l'évolution de la polarisation dans une piézocéramique en expliquant que ces changements de polarisation entraînent des déformations. Ainsi, et comme proposé par Lu [Lu2006], nous définissons un paramètre de concentration 'piézoélectrique', noté κ^p . Ce paramètre régit l'évolution de la polarisation et par conséquent de la déformation piézoélectrique.

De plus, l'étude des mesures de Cao et Evans [Cao1993] a montré qu'une déformation ferroélastique pure venait se superposer à la précédente dans le cas de la contrainte mécanique. Kamlah ayant montré que ce comportement était analogue au comportement précédent, nous choisissons d'utiliser la même distribution de domaines pour quantifier l'évolution de concentration de domaines changeant ferroélastiquement. Nous appelons ce paramètre de concentration 'ferroélastique' κ^f . Il est directement lié à la déformation ferroélastique engendrée par le mouvement des domaines dans le cas d'une compression mécanique. Cette considération est une des originalités majeure de ce modèle.

Ainsi, l'évolution du paramètre de concentration κ^p décrit l'évolution de la direction principale de polarisation ainsi que de la déformation piézoélectrique. L'évolution du paramètre de concentration ferroélastique κ^f décrit l'évolution de la direction principale de déformation ferroélastique.

II.4 Évolution des distributions de domaines

II.4.1 Évolution de la polarisation en fonction des distributions de domaines

Comme nous l'avons vu au chapitre I, une piézocéramique est composée de domaines, chacun possédant une polarisation spontanée spécifique P^{sp} , mais aussi des déformations spontanées, notées dans le repère local $S_{\theta\theta}^{sp}$, $S_{\alpha\alpha}^{sp}$ et $S_{\alpha\theta}^{sp}$. Ces différentes quantités dépendent de la température et bien-sûr du champ de polarisation initialement appliqué. Dans la suite, nous traitons le cas d'une céramique de taille finie, dans laquelle le nombre de domaines est en nombre limité, à température constante.

La polarisation totale d'un champ de domaines compris entre les angles θ et $\theta + d\theta$ est égale à $P^{sp} f(\theta) d\theta \vec{e}_\theta$. Projetant ce vecteur dans la direction principale $\bar{\theta}$ et selon sa direction normale $\bar{\alpha}$, deux relations scalaires sont obtenues :

$$P^{sp} f(\theta) d\theta (\vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_{\bar{\theta}}) = P^{sp} f(\theta) \cos(\theta - \bar{\theta}) d\theta , \quad (IV.17)$$

$$P^{sp} f(\theta) d\theta (\vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_{\bar{\alpha}}) = P^{sp} f(\theta) \sin(\theta - \bar{\theta}) d\theta . \quad (IV.18)$$

En intégrant ces équations pour des valeurs de θ entre 0 et 2π , les composantes du vecteur polarisation dans les directions $\vec{e}_{\bar{\theta}}$ et $\vec{e}_{\bar{\alpha}}$ sont trouvées, respectivement :

$$\int_0^{2\pi} P^{sp} f(\theta) \cos(\theta - \bar{\theta}) d\theta = P^{sp} \frac{I_1(\kappa)}{I_0(\kappa)} , \quad (IV.19)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} P^{sp} f(\theta) \sin(\theta - \bar{\theta}) d\theta = 0 , \quad (IV.20)$$

où $I_1(\kappa)$ est la fonction de Bessel modifiée de première espèce et du premier ordre définie par :

$$I_1(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\kappa \cos \theta} \cos \theta d\theta . \quad (IV.21)$$

Par définition, le paramètre de concentration décrivant le changement de polarisation de domaines est le paramètre de concentration piézoélectrique κ^p . De ces deux équations, la polarisation macroscopique est déduite :

$$\vec{P} = P^{sp} \frac{I_1(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)} \vec{e}_{\bar{\theta}} . \quad (IV.22)$$

Au travers du paramètre de concentration κ^p , cette relation fait le lien entre le niveau de polarisation microscopique représenté ici par la polarisation spontanée P^{sp} et la polarisation totale macroscopique. Dans la configuration de notre étude, la direction principale $\bar{\theta}$ correspond à la direction 3, nous avons donc :

$$\vec{P} = P^{sp} \frac{I_1(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)} \vec{e}_3. \quad (\text{IV.23})$$

Ainsi, cette expression relie le paramètre de concentration piézoélectrique κ^p à la polarisation, parallèle à l'axe de contrainte du matériau.

II.4.2 Évolution de la déformation piézoélectrique en fonction des distributions de domaines

Les domaines de piézocéramiques possèdent une polarisation (microscopique) spontanée, mais aussi une déformation (microscopique) spontanée. Dans le système de coordonnées locales (θ, α) , ces déformations sont définies comme suit :

$$S_{\theta\theta}^{sp} = S^{sp}, \quad (\text{IV.24})$$

$$S_{\alpha\alpha}^{sp} = -\nu^p S^{sp}, \quad (\text{IV.25})$$

$$S_{\alpha\theta}^{sp} = 0, \quad (\text{IV.26})$$

où ν^p est le coefficient de Poisson piézoélectrique. La déformation piézoélectrique étant isochore [Cao1993-Hwang1995-Kamlah1998-Lu2006], on pose $\nu^p = 1$. Notons que cette considération est une approximation, et que selon le type de matériau elle est plus ou moins valable, mais acceptable en première approximation [Lynch1995a].

Dans notre étude, nous considérons que la contrainte est appliquée uniquement dans l'axe (Oz) et qu'elle n'entraîne aucun phénomène de cisaillement. De plus, la déformation transversale $S_{\alpha\alpha}^p$ représente la déformation transversale 'totale' (donc dans les deux directions perpendiculaires en 3 dimensions). Notons que cette remarque corrige une erreur au sein d'un modèle antérieur [Lu2006] qui considérait cette déformation égale à la déformation transverse dans les deux directions, ce qui rompait son hypothèse de déformation isochore.

Pour un cristal polarisé dans la direction $\vec{e}_\theta$, le changement de polarisation microscopique (changement de paramètre de concentration piézoélectrique) induit des 'déformations piézoélectriques' au travers de la même fonction de distribution. Ainsi, les domaines de direction de

polarisation entre θ et $\theta + d\theta$ possèdent des déformations piézoélectriques macroscopiques définies dans le système de coordonnées (θ, α) par :

$$S_{\theta\theta}^p = f(\theta) S^{sp} d\theta, \quad (\text{IV.27})$$

$$S_{\alpha\alpha}^p = -f(\theta) S^{sp} d\theta, \quad (\text{IV.28})$$

$$S_{\alpha\theta}^p = 0. \quad (\text{IV.29})$$

Dans le système de coordonnées $(\bar{\theta}, \bar{\alpha})$, ces déformations s'expriment :

$$\begin{pmatrix} S_{\bar{\theta}\bar{\theta}}^p \\ S_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}}^p \\ S_{\bar{\alpha}\bar{\theta}}^p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2 \Delta\theta & \sin^2 \Delta\theta & \sin 2\Delta\theta \\ \sin^2 \Delta\theta & \cos^2 \Delta\theta & -\sin 2\Delta\theta \\ \frac{\sin 2\Delta\theta}{2} & -\frac{\sin 2\Delta\theta}{2} & \frac{\cos 2\Delta\theta}{2} \end{pmatrix} f(\theta) d\theta \begin{pmatrix} S^{sp} \\ -S^{sp} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.30})$$

où $\Delta\theta = \theta - \bar{\theta}$.

En intégrant ces expressions pour des valeurs de θ allant de 0 à 2π , les déformations piézoélectriques macroscopiques sont obtenues en fonctions du paramètre de concentration de piézoélectrique κ^p :

$$S_{\bar{\theta}\bar{\theta}}^p = \int_0^{2\pi} f(\theta) S^{sp} [\cos^2(\theta - \bar{\theta}) - \sin^2(\theta - \bar{\theta})] d\theta = S^{sp} \frac{I_2(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)}, \quad (\text{IV.31})$$

$$S_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}}^p = \int_0^{2\pi} f(\theta) S^{sp} [\sin^2(\theta - \bar{\theta}) - \cos^2(\theta - \bar{\theta})] d\theta = -S^{sp} \frac{I_2(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)}, \quad (\text{IV.32})$$

$$S_{\bar{\alpha}\bar{\theta}}^p = 0, \quad (\text{IV.33})$$

où $I_2(\kappa)$ est la fonction de Bessel modifiée de première espèce et du second ordre définie par :

$$I_2(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\kappa \cos \theta} \cos 2\theta d\theta. \quad (\text{IV.34})$$

Dans notre configuration d'étude, il vient :

$$S_{33}^p = S^{sp} \frac{I_2(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)}, \quad (\text{IV.35})$$

$$S_{11}^p = S_{22}^p = -\frac{S^{sp}}{2} \frac{I_2(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)}. \quad (\text{IV.36})$$

Ainsi, les trois déformations piézoélectriques engendrées par le changement de polarisation sont connues. Sous contrainte électrique, les déformations rémanentes sont rigoureusement égales aux déformations piézoélectriques, elles sont complètement connues. Dans le cas de la compression

mécanique, il reste à calculer la déformation ferroélastique pure pour connaître la déformation rémanente totale.

II.4.3 Évolution de la déformation ferroélastique pure en fonction des distributions de domaines

L'évolution de la déformation longitudinale rémanente en fonction de la contrainte mécanique étant connue, l'équation (IV.8) nous permet de calculer la déformation longitudinale ferroélastique pure associée. Comme expliqué au paragraphe I.3.3, nous décrivons l'évolution de la déformation ferroélastique avec les même lois que dans le cas piézoélectrique, mais avec un paramètre de concentration ferroélastique κ^f , soit :

$$S_{\theta\theta}^f = S^{sp} \frac{I_2(\kappa^f)}{I_0(\kappa^f)}, \quad (\text{IV.37})$$

$$S_{\alpha\alpha}^f = -S^{sp} \frac{I_2(\kappa^f)}{I_0(\kappa^f)}, \quad (\text{IV.38})$$

$$S_{\alpha\theta}^f = 0. \quad (\text{IV.39})$$

Ici aussi, aucun phénomène de cisaillement n'est considéré. Dans notre configuration d'étude, il vient :

$$S_{33}^f = S^{sp} \frac{I_2(\kappa^f)}{I_0(\kappa^f)}, \quad (\text{IV.40})$$

$$S_{11}^f = S_{22}^f = -\frac{S^{sp}}{2} \frac{I_2(\kappa^f)}{I_0(\kappa^f)}. \quad (\text{IV.41})$$

Ainsi, les trois déformations ferroélastiques engendrées par le changement de domaines purement mécanique sont évaluables. Les déformations rémanentes sous contrainte mécanique sont donc complètement connues.

II.4.4 Évolution des fonctions de polarisation et de déformations en fonction des paramètres de concentration de domaines

Par définition, les fonctions de distributions évoluent en fonction du paramètre de concentration ainsi que de la direction principale (correspondant à la direction 3 dans notre configuration). Les rapports de fonction de Bessel intervenant dans le calcul de la polarisation

$(I_1(\kappa)/I_0(\kappa))$ et des déformations piézoélectriques, comme ferroélastiques $(I_2(\kappa)/I_0(\kappa))$, sont représentés sur la figure IV.11 en fonction de κ .

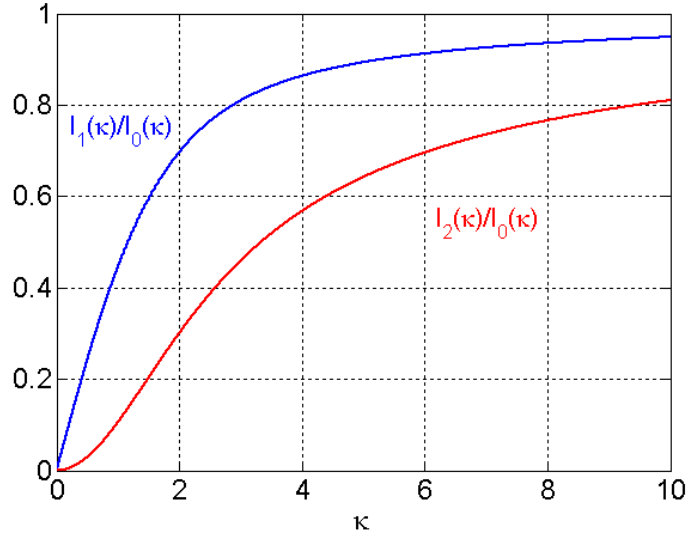


Figure IV.11 : Représentation des rapports de fonction de Bessel en fonction du paramètre de concentration κ .

Comme le montre l'équation (IV.23), l'évolution du rapport $I_1(\kappa)/I_0(\kappa)$ est directement proportionnelle à l'évolution de la polarisation macroscopique. Ainsi, pour une distribution uniforme ($\kappa = 0$), on vérifie que la polarisation macroscopique est nulle. Pour une valeur infinie du paramètre de concentration, cette courbe est maximum en 1, ce qui traduit le cas idéal de la polarisation macroscopique égale à la polarisation spontanée. Comme expliqué au chapitre I, cette valeur ne pouvant être atteinte physiquement, nous considérons une polarisation dite de saturation P^{sat} , à partir de laquelle l'évolution de la polarisation est négligeable pour des concentrations croissantes. Une concentration de saturation κ_{sat}^p est associée à cette polarisation de saturation.

Connaissant les valeurs de polarisation rémanente à contraintes nulles P_0 et à champ de saturation P^{sat} , l'équation (IV.23) permet de calculer les valeurs du paramètre de concentration κ^p correspondantes, soit κ_0^p et κ_{sat}^p respectivement. Sous contrainte électrique, la valeur du déplacement électrique notée D_l au niveau de contrainte σ_l est utilisée pour calculer le paramètre de concentration piézoélectrique associé noté κ_l^p à l'aide de l'équation (IV.6).

Chaque valeur de déformation piézoélectrique étant associée à une valeur du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p , les équations (IV.35-36) nous permettent de calculer les déformations piézoélectriques associées. Comme le montrent ces équations, l'évolution du rapport $I_2(\kappa^p)/I_0(\kappa^p)$ est directement proportionnelle aux évolutions des déformations macroscopiques.

Ainsi, en l'absence de polarisation ($\kappa^p = 0$), aucune déformation piézoélectrique n'est considérée. La figure IV.11 montre que l'évolution de la déformation piézoélectrique en fonction du paramètre de concentration κ^p est plus lente que l'évolution de la polarisation, mais possède aussi un maximum en 1 pour une valeur de κ^p infinie. La déformation spontanée est elle aussi atteinte dans une configuration où l'ensemble des champs de domaines serait idéalement orienté dans la même direction.

Les déformations ferroélastiques étant connues à l'état initial et à saturation, l'équation (IV.40) nous permet de calculer les valeurs du paramètre de concentration ferroélastique associé, soit κ_0^f et κ_{sat}^f respectivement.

II.4.5 Évolution des paramètres de concentration

Les champs électriques et de contrainte mécanique gouvernant l'évolution des orientations de champs de domaines, ils régissent les variations des paramètres de concentrations. Nous supposons que seules ces composantes influent sur ces paramètres de concentration et que leurs effets sont additifs. Le paramètre de concentration piézoélectrique κ^p évoluant pour une contrainte mécanique ou électrique, il se décompose en la somme de deux fonctions distinctes. Le paramètre de concentration ferroélastique n'étant influencé que par la contrainte mécanique, il ne comporte qu'un terme. Ainsi, les évolutions des paramètres de concentration sont de la forme :

$$\dot{\kappa}^p = A_{\kappa^p}(E) \frac{\dot{E}}{E_c} + B_{\kappa^p}(\sigma) \frac{\dot{\sigma}}{\sigma_c}, \quad (\text{IV.42})$$

$$\dot{\kappa}^f = C_{\kappa^f}(\sigma) \frac{\dot{\sigma}}{\sigma_c}, \quad (\text{IV.43})$$

où les coefficients A_{κ^p} , B_{κ^p} et C_{κ^f} sont des paramètres sans dimensions régissant l'évolution des paramètres de concentration et sont dépendants des conditions de chargement. Parce que l'évolution des paramètres de concentration leurs est intimement liée, les valeurs de champs coercitifs E_c et σ_c normalisent les composantes de champs.

II.4.6 Calculs des polarisations et déformations spontanées

Comme expliqué dans le chapitre I, par définition, les valeurs de la polarisation et de la déformation spontanées se mesurent à champ électrique infini. Certaines de ces valeurs se trouvent

dans la littérature, mais peu d'auteurs expliquent comment ils les déterminent. Dans notre étude, la détermination de la polarisation spontanée se fait par optimisation à partir d'une valeur numérique évaluée par la méthode de Baerwald [Baerwald1957]. Ce dernier a montré qu'en première approximation, la valeur de la polarisation rémanente de saturation P^{sat} est égale à 83% de la valeur de la polarisation spontanée d'un grain, soit :

$$P^{sat} = 0.83 P^{sp}. \quad (IV.44)$$

L'étude de l'évolution de la polarisation sous contraintes montre que la valeur de la polarisation rémanente à contraintes nulles P_0 est proche de la valeur à saturation P^{sat} . De plus, nous avons montré précédemment que la valeur de la polarisation rémanente P_0 est nécessairement la même sous contrainte électrique et mécanique. Sans avoir de données expérimentales du déplacement électrique sous contrainte, nous utiliserons l'équation (IV.44) en remplaçant la valeur de saturation P^{sat} par la valeur à la rémanence en gardant à l'esprit que la valeur 'réelle' est légèrement supérieure. Cette valeur sera le point de départ de notre calcul d'optimisation pour déterminer la valeur de la polarisation spontanée.

Inversement, peu de valeurs de déformation spontanée sont disponibles dans la littérature. Dans cette étude, nous déterminons cette valeur avec une loi empirique proposée par Hwang [Hwang1995]. Définissant la valeur de la déformation de saturation S^{sat} entre l'état non polarisé et l'état à champ de saturation E_{sat} , la relation qui relie cette déformation à la déformation spontanée S^{sp} est alors :

$$S^{sat} = 0.37 S^{sp}. \quad (IV.45)$$

Cette relation empirique sera le point de départ de notre calcul d'optimisation pour déterminer la valeur de déformation spontanée. Dans le cas où nous n'aurions pas connaissance de la courbe d'évolution de la déformation longitudinale en fonction du champ électrique, nous déterminerons la valeur de déformation spontanée en correspondance avec les données d'un matériau connu possédant une polarisation spontanée proche de celle de notre matériau. En effet, la comparaison de valeurs de polarisation et déformation spontanée a montré que les matériaux qui possèdent une grande valeur de polarisation spontanée ont aussi une valeur de déformation spontanée élevée (et inversement).

III Modélisation des comportements hystérétiques de piézocéramiques sous chargement électrique

Nous nous plaçons dans le cas d'une piézocéramique possédant une polarisation rémanente P_0 orientée dans la direction 3 et soumise à une contrainte électrique parallèle, à contrainte mécanique nulle. La résolution du modèle sous contrainte électrique nécessite de connaître certains paramètres du matériau :

- ses coefficients piézoélectriques d_{333} et d_{311} ,
- sa constante diélectrique ϵ_{33}^T ,
- son coefficient de Poisson ν .

Connaissant l'évolution du déplacement électrique et de la déformation longitudinale en fonction du champ électrique, on vérifie la cohérence de ces données avec le matériau en question et on évalue les valeurs de la polarisation spontanée P^{sp} et de la déformation spontanée S^{sp} à l'aide des équations (IV.44) et (IV.45). Une fois le reste du modèle en place, le calcul de ces valeurs sera optimisé par ajustement des paramètres du modèle aux données expérimentales.

III.1 Lois de comportement

Sous contrainte électrique, à contrainte mécanique nulle, les déformations rémanentes se réduisent aux déformations rémanentes piézoélectriques. Ainsi, les équations du déplacement électrique (IV.6) et de la déformation (IV.7) se réduisent en :

$$\begin{cases} D_m = P_m + \epsilon_{mn}^T E_n \\ S_{ij} = S_{ij}^p + \tilde{d}_{mij} E_m \end{cases} \quad (\text{IV.46})$$

En l'absence de chargement mécanique, Seul le paramètre de concentration piézoélectrique κ^p est à considérer, le modèle décrit dans le couple d'équation (IV.42-43) se simplifie-en :

$$\dot{\kappa}^p = A_{\kappa^p}(E) \frac{\dot{E}}{E_c} \quad (\text{IV.47})$$

Dans ce cas, l'évolution du paramètre de concentration dépend uniquement de l'évolution du champ électrique.

III.2 Évolution de la polarisation et du paramètre de concentration piézoélectrique sous chargement électrique

III.2.1 Évolution de la polarisation sous chargement électrique

Au travers de la courbe d'évolution du déplacement électrique en fonction du champ électrique (la figure IV.12), les valeurs de la polarisation correspondantes aux différentes valeurs clefs du champ électrique sont évaluées : nulle, critique E_c et de saturation E_{sat} .

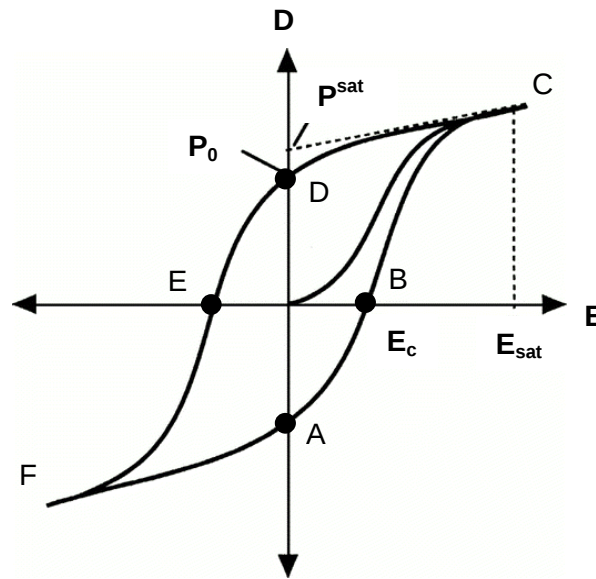


Figure IV.12 : Évolution de la polarisation et du déplacement électrique sous contrainte électrique.

Une fois le matériau polarisé et le champ électrique de saturation E_{sat} atteint (point C), l'évolution du déplacement électrique devient proportionnelle au champ électrique. Par définition, l'ordonnée à l'origine de la tangente à cette courbe au point C indique la valeur de la polarisation de saturation P^{sat} . Rappelons que si le champ électrique atteignait une valeur infinie, l'ordonnée à l'origine de la tangente à cette courbe tendrait vers la valeur de la polarisation spontanée. Une fois le champ électrique relâché jusqu'à une valeur de champ électrique nul, la valeur de la polarisation rémanente P_0 est déterminée. Le champ électrique coercitif E_c correspondant au changement de polarisation, la valeur de la polarisation en ce point est nulle.

Connaissant la valeur de la polarisation spontanée, l'équation (IV.46.a) est développée avec l'équation (IV.23) pour obtenir l'expression du déplacement électrique en fonction du paramètre de concentration piézoélectrique et du champ électrique :

$$D_m = P^{sp} \frac{I_1(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)} + \varepsilon_{mn}^T E_n. \quad (\text{IV.48})$$

Connaissant la valeur de la polarisation rémanente P_0 , ainsi que la valeur du déplacement électrique de saturation associé à la valeur de champ électrique de saturation E_{sat} , la résolution de cette équation nous permet de calculer les valeurs associées des paramètres de concentration piézoélectrique κ_0^p et κ_{sat}^p respectivement.

III.2.2 Évolution du paramètre de concentration piézoélectrique sous chargement électrique

Comme nous l'avons discuté précédemment, et comme le représente la figure IV.12, l'hystérésis diélectrique peut être divisée en deux processus :

Les segments $A \rightarrow B \rightarrow C$ et $D \rightarrow E \rightarrow F$ correspondent à des processus de changement de polarisation. L'application d'un champ électrique de sens opposé à la polarisation provoque la dépolarisation du matériau. Cette dépolarisation est de plus en plus rapide au fur et à mesure que l'on se rapproche du champ coercitif où la vitesse de dépolarisation est maximum. Au-delà du champ coercitif, la repolarisation est très rapide et ralentit en s'en éloignant. Ainsi, le taux de changement du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p est maximum près du champ coercitif et décroît de plus en plus lentement dès que l'on s'éloigne de cette valeur. L'évolution du paramètre de concentration est donc étroitement liée au champ électrique coercitif E_c pour lequel la polarisation est ramenée à zéro. La vitesse de changement de κ^p étant directement liée à la vitesse de changement de polarisation, on approche l'évolution du coefficient A_{κ^p} régissant le processus de renversement de polarisation par une loi Gaussienne de covariance $\zeta_{C_1}^2$, admettant un maximum en E_c . Plus le coefficient $\zeta_{C_1}^2$ est petit, plus les changements de κ^p sont rapides près de E_c .

Les segments $C \rightarrow D$ et $F \rightarrow A$ sont des processus de relaxation de la polarisation. La polarisation décroît d'abord lentement de sa valeur de saturation puis de plus en plus rapidement en se rapprochant du champ électrique nul. Le taux de variation du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p étant directement lié à cette vitesse de dépolarisation, on suppose alors que le coefficient A_{κ^p} évolue exponentiellement.

Dans les deux cas, on normalise par rapport à la valeur du champ coercitif. Ainsi, le coefficient A_{κ^p} est choisi de la forme :

$$A_{\kappa^p} = \begin{cases} \frac{C_1}{\zeta_{C_1} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(|E/E_c| - 1)^2}{2\zeta_{C_1}^2}\right) & \text{pendant le processus de renversement} \\ C_2 \exp(-\gamma \frac{E}{E_c}) & \text{pendant le processus de relaxation} \end{cases}, \quad (\text{IV.49})$$

avec C_1 , C_2 , ζ_{C_1} et γ définies comme des constantes sans dimension du matériau.

III.3 Détermination des constantes d'intégration

De manière à déterminer ces constantes, l'équation (IV.47) du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p est intégrée le long de différents segments de la courbe de la figure IV.12 en prenant ses points de fonctionnements pour bornes d'intégration.

En intégrant l'équation le long du segment $F \rightarrow A$ (processus de relaxation de la polarisation) :

$$\kappa_0^p - \kappa_{sat}^p = -\frac{C_2}{\gamma} \left(1 - \exp\left(-\gamma \frac{E_{sat}}{E_c}\right) \right). \quad (\text{IV.50})$$

En faisant de même le long du segment $A \rightarrow B$ (première moitié du processus de renversement de la polarisation) :

$$\kappa_0^p - 0 = \frac{C_1}{\zeta_{C_1} \sqrt{2\pi}} (\Phi_E(1) - \Phi_E(0)), \quad (\text{IV.51})$$

$$\text{avec } \Phi_E(\omega) = \int_0^\omega \exp\left(-\frac{(x-1)^2}{2\zeta_{C_1}^2}\right) dx \quad (\text{IV.52})$$

$$\text{et } \omega = \frac{E}{E_c}.$$

En intégrant sur le segment $B \rightarrow C$ (deuxième moitié du processus de renversement de la polarisation) :

$$\kappa_{sat}^p - 0 = \frac{C_1}{\zeta_{C_1} \sqrt{2\pi}} \left(\Phi_E\left(\frac{E_{sat}}{E_c}\right) - \Phi_E(1) \right). \quad (\text{IV.53})$$

La dernière équation nécessaire pour résoudre un système de quatre équations s'obtient en imposant une continuité de la pente au niveau de la transition $F \rightarrow A \rightarrow B$ (processus de renversement de la polarisation complet), soit :

$$\frac{C_1}{\zeta_{C_1} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\zeta_{C_1}^2}\right) = C_2. \quad (\text{IV.54})$$

La résolution de ces quatre équations (IV.50-51-53-54), permet de déterminer les quatre constantes du matériau C_1 , C_2 , ζ_{C_1} et γ . Cependant, ce système d'équation ne se résout pas complètement analytiquement et oblige à utiliser une résolution par optimisation. La résolution du système formé par les équations (IV.51) et (IV.53) permet de déterminer les valeurs de C_1 et ζ_{C_1} . La valeur de la constante C_2 se déduit alors analytiquement de l'équation (IV.54). Pour finir, l'équation (IV.50) est résolue par optimisation pour déterminer la valeur de la constante C_2 .

La construction de cette partie nous permet de décrire complètement l'évolution du paramètre de concentration κ^p , donc de la polarisation et du déplacement électrique en fonction du champ électrique. Dans un deuxième temps, une valeur plus précise de la polarisation spontanée est déterminée par optimisation de la courbe expérimentale du déplacement électrique en fonction du champ électrique.

III.4 Évolution des déformations sous chargement électrique

Sous contrainte électrique, les déformations rémanentes sont uniquement piézoélectriques, donc complètement déterminées par la valeur du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p . Connaissant l'évolution de ce paramètre en fonction du champ électrique appliqué, l'évolution de la déformation rémanente sous contrainte électrique est déduite. Ainsi, l'équation (IV.46.b) est développée en y intégrant les équations (IV.40) et (IV.41), pour obtenir les expressions des déformations longitudinale et transversales :

$$S_{33} = S^{sp} \frac{I_2(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)} + d_{333} \frac{P}{|P_0|} E_3, \quad (\text{IV.55})$$

$$S_{11} = S_{22} = -\frac{S^{sp}}{2} \frac{I_2(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)} + d_{311} \frac{P}{|P_0|} E_3. \quad (\text{IV.56})$$

Utilisant la valeur de la déformation spontanée, les déformations longitudinales et transversales sont évaluées. Dans un deuxième temps, une valeur plus précise de la déformation spontanée est déterminée par optimisation de la courbe expérimentale de déformation longitudinale en fonction du champ électrique.

IV Modélisation des comportements hystérétiques de piézocéramiques sous chargement mécanique

Nous nous plaçons dans le cas d'une piézocéramique possédant une polarisation rémanente P_0 orientée dans la direction 3 et soumise à une contrainte mécanique parallèle, à contrainte électrique nulle. Le modèle théorique étant établi, sa résolution nécessite de connaître un certain nombre de paramètres du matériau :

- son module d'Young Y_3 ,
- ses coefficients piézoélectriques d_{333} et d_{311} ,
- son coefficient de Poisson ν .

Connaissant l'évolution du déplacement électrique et de la déformation longitudinale en fonction de la contrainte mécanique, il est possible de vérifier la cohérence de ces données avec le matériau en question. Dans le cas où l'étude du matériau aura été faite sous contrainte électrique, nous utilisons les valeurs de polarisation et déformation spontanées calculées et optimisées précédemment. Sinon, nous déterminons des valeurs approchées de ces constantes comme expliqué au paragraphe II.4.6 et les optimiserons par la suite.

IV.1 Lois de comportement

Sous contrainte mécanique, à champ électrique nul, les déformations rémanentes se décomposent en déformations rémanentes piézoélectriques et ferroélastiques. Ainsi, les équations du déplacement électrique (IV.6) et des déformations (IV.7) se développent ici en :

$$\begin{cases} D_m = P_m + \tilde{d}_{mij} \sigma_{ij} \\ S_{ij} = S_{ij}^p + S_{ij}^f + s_{ijkl} \sigma_{kl} \end{cases} \quad (IV.57)$$

Dans ce cas, nous considérons le paramètre de concentration piézoélectrique κ^p , ainsi que le paramètre de concentration ferroélastique κ^f . En l'absence de chargement électrique, le modèle décrit dans le couple d'équation (IV.42-43) se simplifie-en :

$$\begin{cases} \dot{\kappa}^p = B_{\kappa^p}(\sigma) \frac{\dot{\sigma}}{\sigma_c} \\ \dot{\kappa}^f = C_{\kappa^f}(\sigma) \frac{\dot{\sigma}}{\sigma_c} \end{cases} \quad (IV.58)$$

Dans ce cas, les évolutions des paramètres de concentration piézoélectrique et ferroélastique dépendent uniquement de l'évolution de la contrainte mécanique.

IV.2 Calcul de la polarisation et de la déformation piézoélectrique rémanente sous chargement mécanique

IV.2.1 Évolution de la polarisation sous chargement mécanique

Au travers de la description de l'évolution du déplacement électrique en fonction de la contrainte mécanique (figure IV.13), on évalue le niveau de contrainte avant lequel la dépolarisation est linéaire σ_l , la contrainte coercitive σ_c au niveau de laquelle la variation du déplacement électrique est maximum et la contrainte de saturation σ_{sat} . De plus, on détermine les valeurs de la polarisation, ou du déplacement électrique, correspondantes aux différentes valeurs clefs de la contrainte mécanique : nulle, égale au seuil de contrainte σ_l et à la contrainte de saturation σ_{sat} .

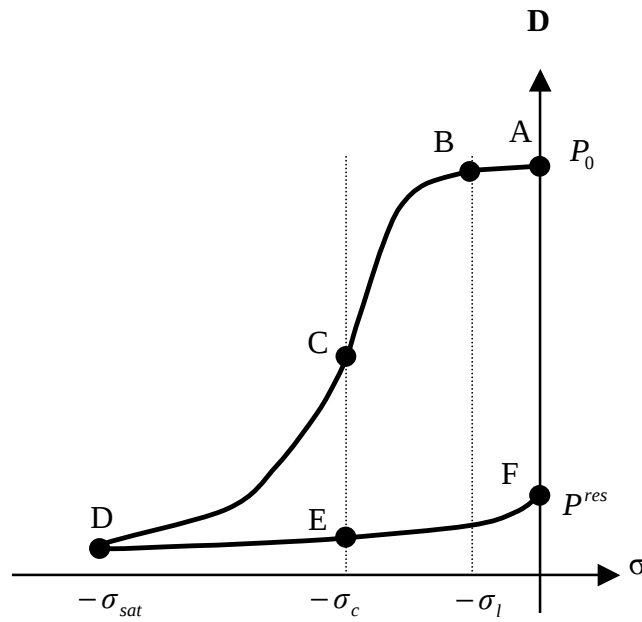


Figure IV.13 : Évolution du déplacement électrique en fonction de la contrainte mécanique, à champ électrique nul.

Le matériau considéré possède une polarisation initiale P_0 (point A). Le niveau de contrainte σ_l (point B) est déterminé juste avant que la décroissance du déplacement électrique s'accélère et tant que cette évolution reste linéaire. En ce point, nous évaluons la valeur de déplacement électrique notée D_l . Lors de la dépolarisation, le seuil de contrainte coercitive σ_c au point d'inflexion (point

C) de la courbe de déplacement électrique est déterminé. Le niveau de saturation de la contrainte mécanique σ_{sat} est atteint quand l'évolution du déplacement électrique devient stable. Le déplacement électrique est non nul et égale à D_{sat} , la polarisation correspondante est notée P^{sat} . Ensuite, la contrainte mécanique est relâchée et on mesure la valeur de polarisation résiduelle P^{res} en fin de cycle (point F).

Notons que certains auteurs [Lu2006] font l'approximation d'une polarisation de saturation P^{sat} égale à 0. Or, il est improbable que la distribution de domaines soit complètement aléatoire. C'est pourquoi nous considérons une polarisation de saturation P^{sat} non nulle. La repolarisation partielle est aussi souvent négligée, les auteurs [Hwang1995-Chen1998-Kamlah1999a-Lu2006] considèrent alors que l'évolution de la polarisation pendant le processus de relâchement de la contrainte est nulle. Mais comme montré par les nombreuses mesures de Stoll et Davis [Stoll1997-Fan1999-Davis2006], et comme nous le verrons dans le prochain chapitre, cette approximation est beaucoup trop forte.

Connaissant la valeur de la polarisation spontanée, l'équation (IV.57.a) est développée avec l'équation (IV.23) pour obtenir l'équation du déplacement électrique en fonction du paramètre de concentration piézoélectrique et de la contrainte mécanique :

$$D_m = P^{sp} \frac{I_1(\kappa^p)}{I_0(\kappa^p)} \left(1 + \frac{d_{mij} \sigma_{ij}}{|P_0|} \right). \quad (IV.59)$$

Connaissant la valeur de la polarisation rémanente initiale P_0 , le déplacement électrique D_l associé à la valeur de contrainte σ_l , la valeur du déplacement électrique de saturation D_{sat} associée à la valeur de contrainte σ_{sat} , la valeur de polarisation résiduelle P^{res} , nous utilisons cette équation pour déterminer les valeurs du paramètre de concentration piézoélectrique associées, soit : κ_0^p , κ_l^p , κ_{sat}^p et κ_{res}^p .

IV.2.2 Évolution du paramètre de concentration piézoélectrique sous chargement mécanique

Comme nous l'avons discuté précédemment, et comme le représente la figure IV.13, l'évolution du déplacement électrique en fonction de la contrainte mécanique peut être divisée en trois processus :

Le long du segment $A \rightarrow B$, la dépolarisation est très faible et communément considérée comme nulle. Pourtant, l'étude de nombreux cycle d'hystérésis montre que la dépolarisation n'est pas nulle mais extrêmement faible et constante. Ainsi, nous considérons qu'avant un niveau de contrainte σ_l (point B), le paramètre de concentration piézoélectrique κ^p décroît linéairement.

Le long du segment $B \rightarrow C \rightarrow D$, une dépolarisation rapide est observée. Celle-ci accélère en se rapprochant de la contrainte coercitive σ_c (segment $B \rightarrow C$) où elle atteint son maximum. Une fois ce seuil passé, la vitesse de dépolarisation ralentit et se stabilise en se rapprochant de la contrainte de saturation (segment $C \rightarrow D$). Ainsi, la vitesse d'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p croît significativement à partir du niveau de contrainte σ_l jusqu'à son maximum en σ_c et décroît vers une valeur stable en σ_{sat} . Considérant que ce comportement est symétrique par rapport à la contrainte coercitive, nous supposons que l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p obéit à une fonction Gaussienne, avec un maximum en σ_c et une covariance $\zeta_{C_3}^2$. Plus le coefficient $\zeta_{C_3}^2$ est petit, plus les changements de κ^p sont rapides près de σ_c .

Le long du segment $D \rightarrow E \rightarrow F$, on observe un phénomène de repolarisation. Alors que l'évolution de la vitesse de repolarisation semble stable le long du segment $D \rightarrow E$, on observe qu'elle est significativement plus rapide une fois la contrainte coercitive franchie (point E). En accord avec des comportements plus prononcés observés sur d'autres matériaux, nous supposons que la vitesse de polarisation décroît en se rapprochant de la contrainte coercitive pour ensuite recroître le long du segment $E \rightarrow F$. Cette hypothèse suppose un comportement analogue, mais inversé, à celui du comportement sous compression. Ainsi, nous considérons que l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p obéit à une fonction Gaussienne inverse, avec un minimum en σ_c et une covariance $\zeta_{C_4}^2$ qui sera significativement plus élevée que dans le cas de la dépolarisation.

On considère donc le coefficient B_{κ^p} de la forme :

$$B_{\kappa^p} = \begin{cases} \sigma_c & \text{processus de dépolarisation, avant } \sigma_l \\ \frac{C_3}{\zeta_{C_3} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\|\sigma/\sigma_c\|-1)^2}{2\zeta_{C_3}^2}\right) & \text{processus de dépolarisation, après } \sigma_l \\ \frac{C_4}{\zeta_{C_4} \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{(\|\sigma/\sigma_c\|-1)^2}{2\zeta_{C_4}^2}\right) & \text{processus de repolarisation} \end{cases}, \quad (\text{IV.60})$$

où C_3 , C_4 , ζ_{C_3} et ζ_{C_4} sont des constantes sans dimension du matériau.

IV.2.3 Détermination des constantes d'intégration

De manière à déterminer les constantes d'intégration, on intègre l'équation (IV.58.a) du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p le long des différents segments en prenant pour bornes d'intégration les points de fonctionnements de la courbe de la figure IV.13.

En intégrant l'équation (IV.58.a) le long du segment $B \rightarrow D$ (processus de dépolarisation) :

$$\kappa_l^p - \kappa_{sat}^p = \frac{C_3}{\zeta_{C_3} \sqrt{2\pi}} \left(\Phi_{\sigma}^{dp} \left(\frac{\sigma_{sat}}{\sigma_c} \right) - \Phi_{\sigma}^{dp} \left(\frac{\sigma_l}{\sigma_c} \right) \right), \quad (IV.61)$$

avec la fonction de dépolarisation $\Phi_{\sigma}^{dp}(\omega)$ définie par :

$$\Phi_{\sigma}^{dp}(\omega) = \int_0^{\omega} \exp\left(-\frac{(x-1)^2}{2\zeta_{C_3}^2}\right) dx \quad (IV.62)$$

et $\omega = \frac{\sigma}{\sigma_c}$.

La résolution de cette équation permet de calculer la valeur de la constante ζ_{C_3} en fonction de la valeur de C_3 . On détermine ensuite le meilleur couple de constante par optimisation aux données expérimentales.

En intégrant l'équation (IV.58.a) le long du segment $D \rightarrow E$ (processus de repolarisation) :

$$\kappa_{sat}^p - \kappa_{res}^p = \frac{C_4}{\zeta_{C_4} \sqrt{2\pi}} \left(\Phi_{\sigma}^{rp} \left(\frac{\sigma_{sat}}{\sigma_c} \right) - \Phi_{\sigma}^{rp}(0) \right) \quad (IV.63)$$

avec la fonction de repolarisation $\Phi_{\sigma}^{rp}(\omega)$ définie par

$$\Phi_{\sigma}^{rp}(\omega) = \int_0^{\omega} \exp\left(-\frac{(x-1)^2}{2\zeta_{C_4}^2}\right) dx \quad (IV.64)$$

et $\omega = \frac{\sigma}{\sigma_c}$.

La résolution de cette équation permet de calculer la valeur de ζ_{C_4} en fonction de la valeur de C_4 . On détermine ensuite le meilleur couple de constante par optimisation aux valeurs expérimentales.

La construction de cette partie relie l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p , donc de la polarisation et du déplacement électrique, en fonction de la contrainte mécanique. Si nous ne disposons que d'une valeur approchée de la polarisation spontanée, nous déterminons une valeur plus précise par optimisation de la courbe expérimentale du déplacement électrique en fonction du champ électrique.

IV.2.4 Évolution des déformations rémanentes piézoélectriques

Sous contrainte mécanique, les déformations rémanentes d'origine piézoélectrique sont complètement déterminées par l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique κ^p . Connaissant la valeur de la déformation spontanée (ou approchée) ainsi que l'évolution de ce paramètre en fonction de la contrainte mécanique appliquée, les équations (IV.35) et (IV.36) nous permettent de calculer l'évolution des déformations piézoélectriques longitudinale (S_{33}^p) et transversales (S_{11}^p et S_{22}^p) en fonction de la contrainte mécanique.

IV.3 Calcul de la déformation ferroélastique rémanente

IV.3.1 Évolution de la déformation ferroélastique

Au travers de la description de l'évolution de la déformation longitudinale en fonction de la contrainte mécanique, représentée sur la figure IV.14, on évalue les valeurs de déformation longitudinale à l'état initial, à la contrainte de saturation σ_{sat} et une fois la contrainte complètement relâchée, soit respectivement : S^0 , S^{sat} et S^{res} . Notons que les niveaux de contrainte coercitive et de saturation sont les mêmes que ceux observés lors de l'évolution du déplacement électrique en fonction de la contrainte mécanique.

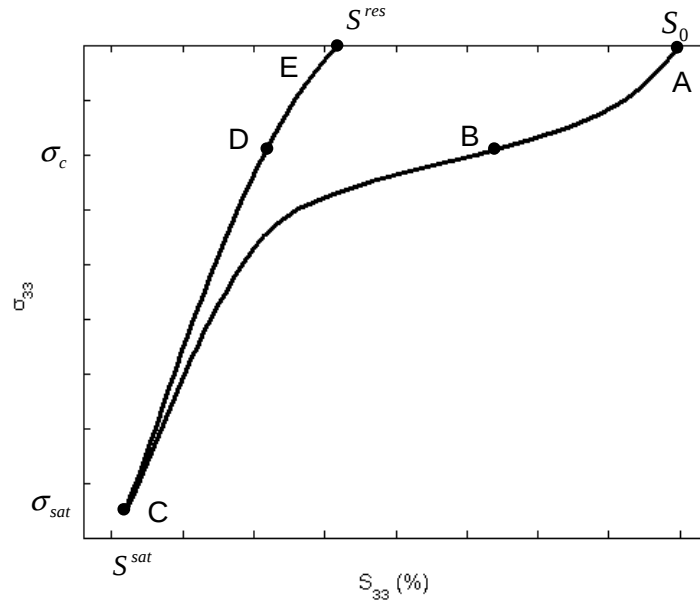


Figure IV.14 : Évolution de la déformation longitudinale en fonction de la contrainte mécanique, à champ électrique nul.

Considérant une déformation initiale S_0 (point A), nous repérons la déformation à saturation S^{sat} (point C) ainsi que la déformation résiduelle S^{res} . Généralement, les auteurs considèrent un niveau de déformation S_0 nul et définissent l'évolution de la déformation par rapport à ce point. Nous adopterons cette même simplification.

La déformation longitudinale piézoélectrique (rémanente) ayant été calculée précédemment, et la déformation spontanée étant connue, nous développons l'équation (IV.57.b) en y intégrant l'équation (IV.40) pour obtenir l'expression de la déformation longitudinale :

$$S = S^p + S^{sp} \frac{I_2(\kappa^f)}{I_0(\kappa^f)} + s_{ijkl} \sigma_{kl}. \quad (\text{IV.65})$$

Connaissant la valeur de ces paramètres à l'état initial et après relâchement, nous calculons les paramètres de concentrations ferroélastiques κ^f associés aux valeurs de déformations ferroélastiques S_0^f et S_{res}^f , soit respectivement κ_0^f et κ_{res}^f . Par construction du modèle, les valeurs de déformation rémanente à saturation sont proches de zéro. La valeur du paramètre de concentration ferroélastique à la saturation κ_{sat}^f est considérée comme nulle.

IV.3.2 Évolution du paramètre de concentration ferroélastique

Comme nous l'avons vu précédemment, l'évolution de la déformation ferroélastique en fonction de la contrainte mécanique suit une loi non-linéaire de type hystérétique analogue à l'évolution de la déformation piézoélectrique sous les mêmes conditions. Observant une déformée rapide dès le début de la contrainte, nous ne considérons pas de seuil de contrainte σ_l à partir duquel les murs de domaines commencent à bouger. Lors de la compression du matériau, une déformation non-linéaire admettant une vitesse de déformation maximum (point B) est observée au niveau de la contrainte coercitive σ_c . Au-delà de cette contrainte, la vitesse de déformation diminue et devient constante en se rapprochant de la contrainte de saturation σ_{sat} (point C). Ainsi, et comme suggéré par Kamlah [Kamlah1999], nous considérons une évolution de paramètre de concentration ferroélastique, analogue à celle du paramètre de concentration piézoélectrique (Gaussienne) mais avec des paramètres différents. Relâchant la contrainte mécanique, nous observons un comportement linéaire de la déformation jusqu'à la contrainte coercitive σ_c (point D) à partir de laquelle la vitesse de déformation augmente en se rapprochant du mode non contraint (point E). Cependant, de la même manière que dans le cas de l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique, on suppose que la vitesse de déformation ferroélastique décroît en se rapprochant de la contrainte coercitive pour ensuite croître de plus en plus rapidement en s'éloignant de celle-ci. Ainsi, l'évolution du paramètre de concentration ferroélastique κ^f est considérée comme obéissant à une fonction Gaussienne inverse, avec un minimum en σ_c , mais avec des paramètres différents.

Ainsi, le coefficient C_{κ^f} est choisi de la forme :

$$C_{\kappa^f} = \begin{cases} \frac{C_5}{\zeta_{C_5} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\lvert\sigma/\sigma_c\rvert - 1)^2}{2\zeta_{C_5}^2}\right) & \text{processus de compression} \\ \frac{C_6}{\zeta_{C_6} \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{(\lvert\sigma/\sigma_c\rvert - 1)^2}{2\zeta_{C_6}^2}\right) & \text{processus de relaxation} \end{cases}, \quad (IV.66)$$

où C_5 , C_6 , ζ_{C_5} et ζ_{C_6} sont des constantes sans dimension du matériau.

IV.3.3 Détermination des constantes d'intégration

De manière à déterminer les constantes d'intégrations, l'équation (IV.58.b) du paramètre de concentration ferroélastique κ^f est intégrée le long du processus de compression puis de

décompression en prenant pour bornes d'intégration les points de fonctionnement de la courbe de la figure IV.13.

En intégrant l'équation (IV.58.b) le long du segment $A \rightarrow C$ (processus de compression) :

$$\kappa_0^f - 0 = \frac{C_5}{\zeta_{C_5} \sqrt{2\pi}} \left(\Phi_{\sigma}^{cp} \left(\frac{\sigma_{sat}}{\sigma_c} \right) - \Phi_{\sigma}^{cp}(0) \right), \quad (IV.67)$$

avec la fonction de compression $\Phi_{\sigma}^{cp}(\omega)$ définie par :

$$\Phi_{\sigma}^{cp}(\omega) = \int_0^{\omega} \exp\left(-\frac{(x-1)^2}{2\zeta_{C_5}^2}\right) dx \quad (IV.68)$$

et $\omega = \frac{\sigma}{\sigma_c}$.

La résolution de cette équation permet de calculer la valeur de ζ_{C_5} en fonction de la valeur de C_5 .

On détermine ensuite le meilleur couple de constante par optimisation aux valeurs expérimentales.

De la même manière que précédemment, les constantes C_6 et ζ_{C_6} se déterminent en intégrant l'équation (IV.58.b) le long du segment $C \rightarrow E$ (processus de décompression) :

$$0 - \kappa_{res}^f = \frac{C_6}{\zeta_{C_6} \sqrt{2\pi}} \left(\Phi_{\sigma}^{dcp} \left(\frac{\sigma_{sat}}{\sigma_c} \right) - \Phi_{\sigma}^{dcp}(0) \right), \quad (IV.69)$$

avec la fonction de décompression $\Phi_{\sigma}^{dcp}(\omega)$ définie par :

$$\Phi_{\sigma}^{dcp}(\omega) = \int_0^{\omega} \exp\left(-\frac{(x-1)^2}{2\zeta_{C_6}^2}\right) dx \quad (IV.70)$$

et $\omega = \frac{\sigma}{\sigma_c}$.

La résolution de cette équation permet de calculer la valeur de ζ_{C_6} en fonction de la valeur de C_6 .

Le meilleur couple de constante est ensuite déterminé par optimisation aux valeurs expérimentales.

IV.3.4 Calcul des déformations rémanentes ferroélastiques

La construction de cette partie nous permet de décrire complètement l'évolution du paramètre de concentration ferroélastique κ^f . Connaissant l'évolution de ce paramètre en fonction de la

contrainte mécanique, nous utilisons les équations (IV.40) et (I.41) pour calculer les déformations rémanentes ferroélastiques longitudinale et transversales.

Dans un deuxième temps, une valeur plus précise de la déformation spontanée est déterminée par optimisation de la courbe expérimentale de déformation longitudinale en fonction de la contrainte mécanique.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons modélisé les comportements hystérétiques de piézocéramiques polarisées dans une direction et soumises à une contrainte uniaxiale de type mécanique ou électrique parallèle à cette direction.

Nous avons commencé par étudier l'évolution du déplacement électrique et de la déformation longitudinale en fonction du champ électrique en expliquant ces phénomènes par les changements de polarisation de domaines dans la structure Pérovskite. Lors de l'étude de l'évolution de la contrainte mécanique en fonction du déplacement électrique et de la déformation longitudinale, nous avons montré que l'évolution microscopique de la polarisation explique la non-linéarité de la courbe de déplacement électrique. Ce mouvement de domaines a été qualifié de 'piézoélectrique'. Inversement, des études récentes ont montré que la non-linéarité de la déformation longitudinale sous contrainte mécanique a une origine liée à l'évolution de la polarisation, mais aussi à un mouvement de domaines purement mécanique que nous avons appelé 'ferroélastique' pur.

Nous avons montré que le comportement des piézocéramiques peut se diviser en deux phénomènes, l'un réversible dans lequel les composantes du déplacement électrique et de la déformation s'annulent en l'absence de contrainte et l'autre rémanent, existant en l'absence de contrainte. Nous avons considéré que le module d'Young et la constante diélectrique varient très peu sous contraintes, tout prenant en compte l'évolution du coefficient piézoélectrique en fonction du champ de polarisation. La description de l'évolution des domaines s'est faite au travers d'une distribution de von Mises qui nous renseigne sur la concentration de domaines piézoélectriques et ferroélastiques orientés dans la direction de polarisation initiale. Les propriétés de cette distribution nous ont permis d'évaluer les fonctions de polarisation et de déformation piézoélectrique et ferroélastique en fonction de leurs paramètres de concentration respectifs.

De manière à modéliser les comportements hystérétiques de piézocéramiques sous contrainte électrique, nous avons déterminé quelles constantes du matériau sont nécessaires et défini les points fonctionnels du déplacement et du champ électrique. Dans un deuxième temps, nous avons

modélisé des lois d'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique et montré comment calculer les constantes d'intégrations inhérentes. Une fois l'évolution de la concentration piézoélectrique connue, nous avons déduit la déformation rémanente qui dans ce cas est uniquement liée aux mouvements de domaines piézoélectriques.

De manière à modéliser les comportements hystérétiques de piézocéramiques sous contrainte mécanique, nous avons montré quelles constantes du matériau sont requises et déterminé les valeurs du déplacement électrique, de la contrainte mécanique et de la déformation longitudinale nécessaires au calcul de l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique. Dans un deuxième temps, nous avons modélisé les lois d'évolution de ce paramètre et déterminé comment calculer les constantes d'intégration associées. Connaissant l'évolution du paramètre de concentration piézoélectrique, nous avons déduit l'évolution du déplacement électrique et des déformations rémanentes piézoélectriques en fonction de la contrainte mécanique. Pour finir, nous avons évalué différentes valeurs de déformation ferroélastique en supposant que l'évolution de la déformation ferroélastique suit une loi analogue à celle du paramètre de concentration piézoélectrique, mais avec des paramètres différents. La détermination des nouvelles constantes d'intégration est analogue à la précédente.

Dans le chapitre suivant, nous testons ce modèle sur différents matériaux.