Physique et soudures

Jean-Georges **Gasser**[1], Karim **Khalouk**[1], Nadra **Harchaoui**[2], Mohamed **Mouas**[1], Slimane **Hellal**[2], and Thomas **Dupuy**[3].

Laboratoire de Chimie et Physique – Approche Multi-Echelle des Milieux Complexes, Université de Lorraine, ICPM ; 1 Bd Arago 57078 Metz Cedex 3, France.

jean-georges.gasser@univ-lorraine.fr

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie.

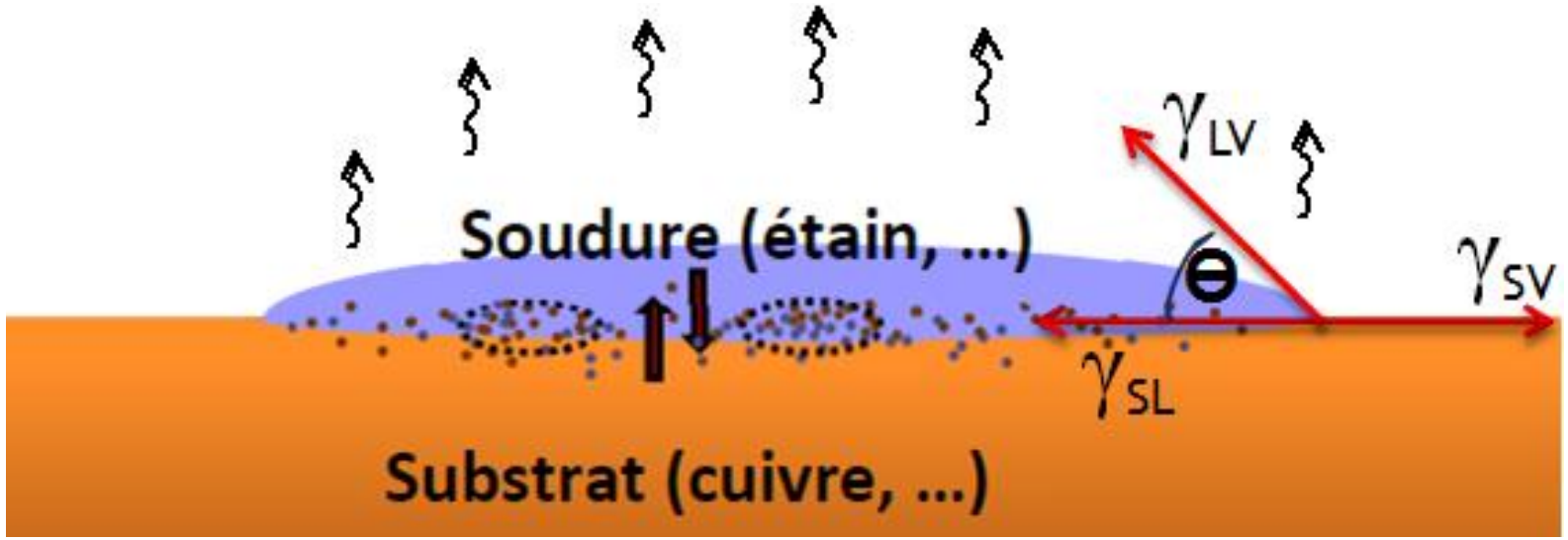
ArcelorMittal Global R&D Maizières, Voie Romaine, 57283 Maizières-les-Metz Cedex, France
thomas.dupuy@arcelormittal.com ;

MOUILLAGE ET ETALEMENT DE BRASURES SANS PLOMB

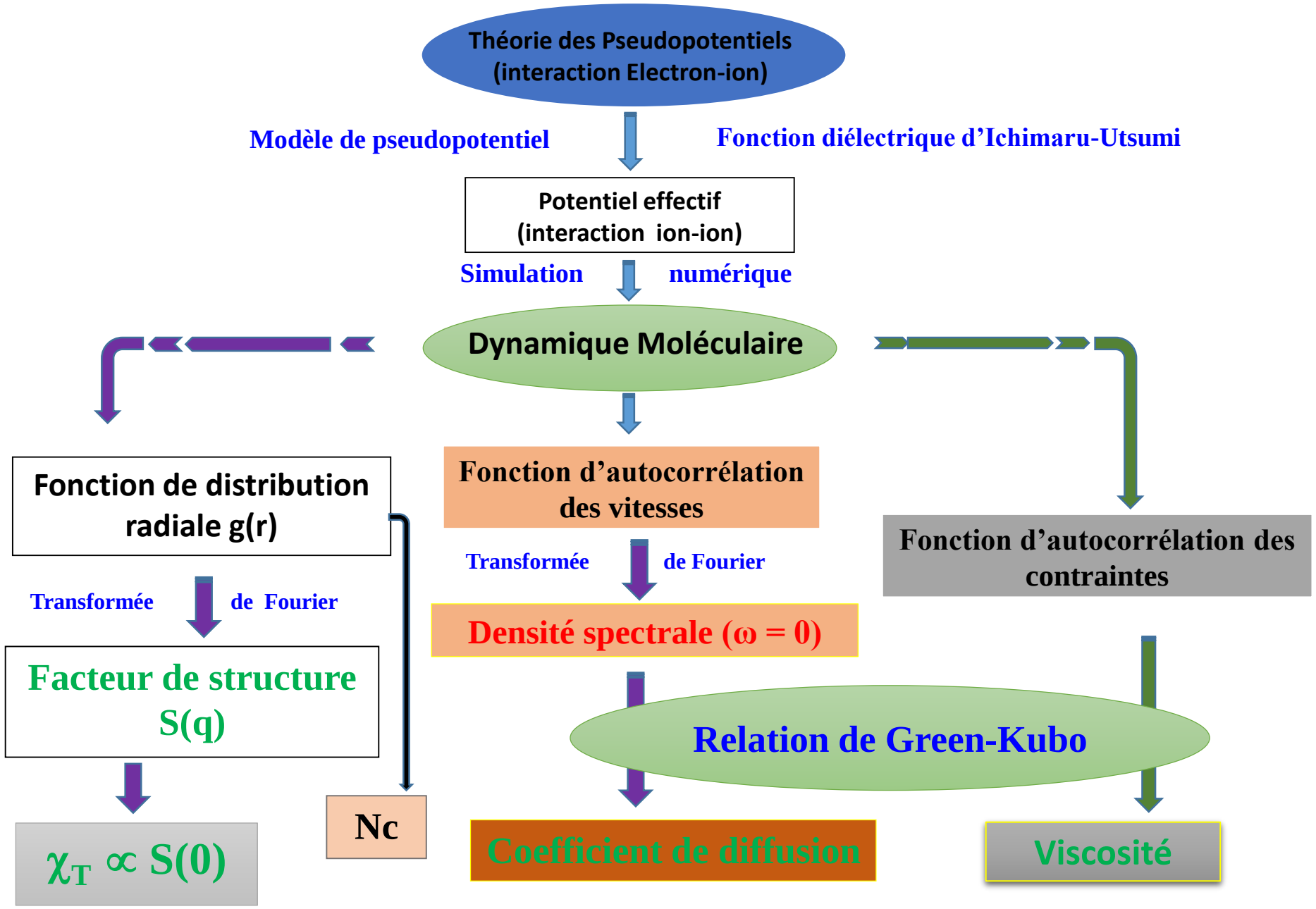
CONDUCTIVITE ELECTRIQUE ET THERMIQUE

- Tensions superficielle / interfaciales
- **Interdiffusion**
- **Viscosité**
- Densité

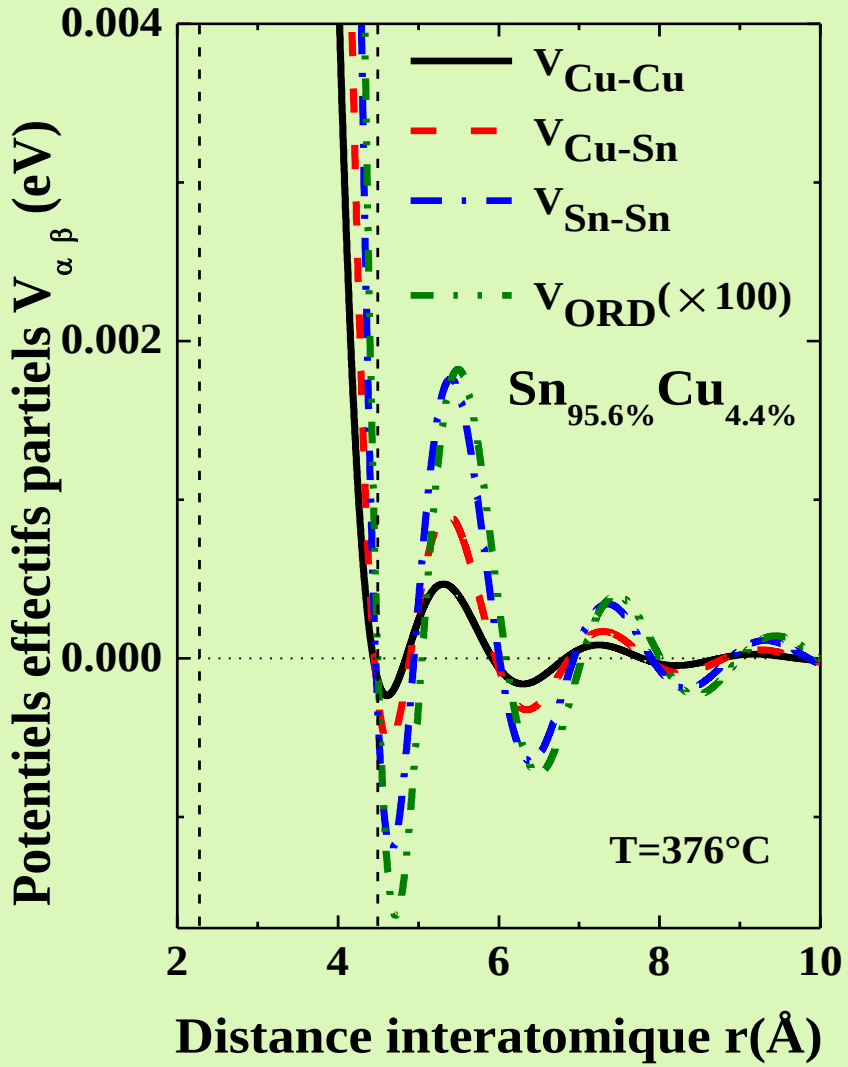
- **Conductivité électrique**
- **Conductivité thermique**
- Coefficient de Seebeck

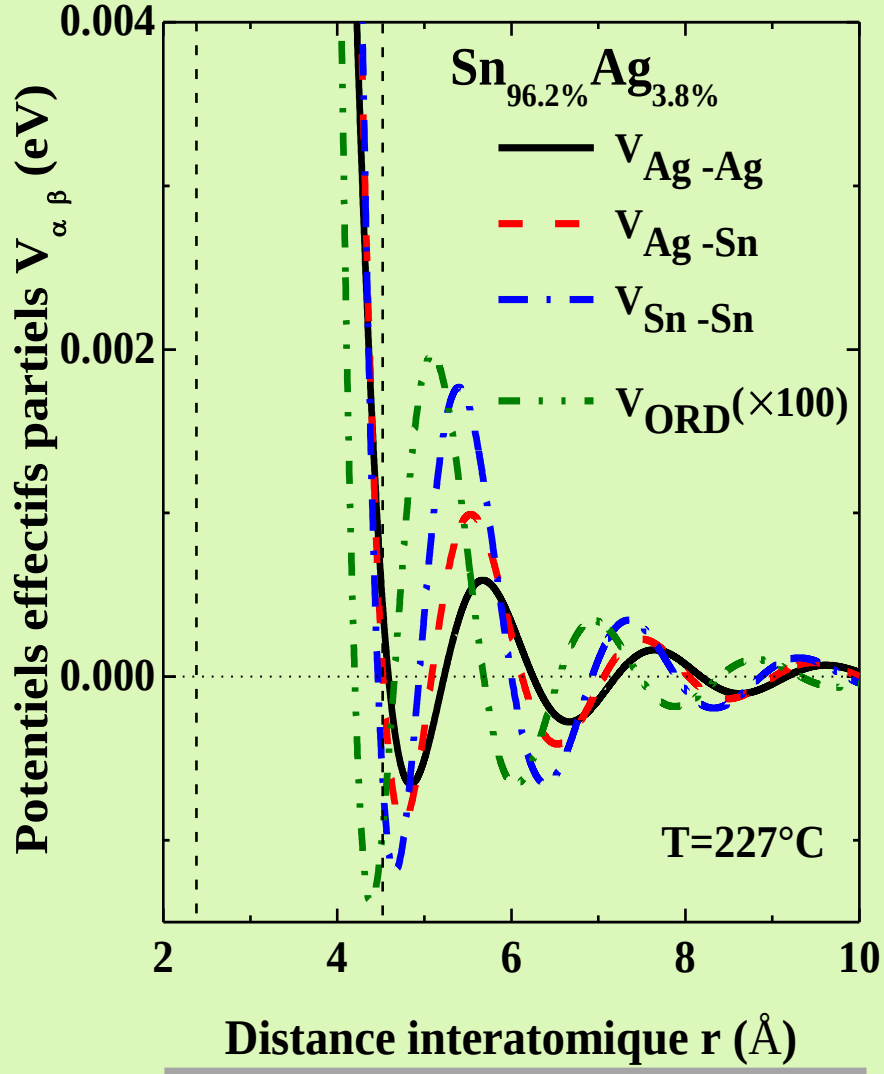


Application: propriétés statiques et dynamiques



Alliages



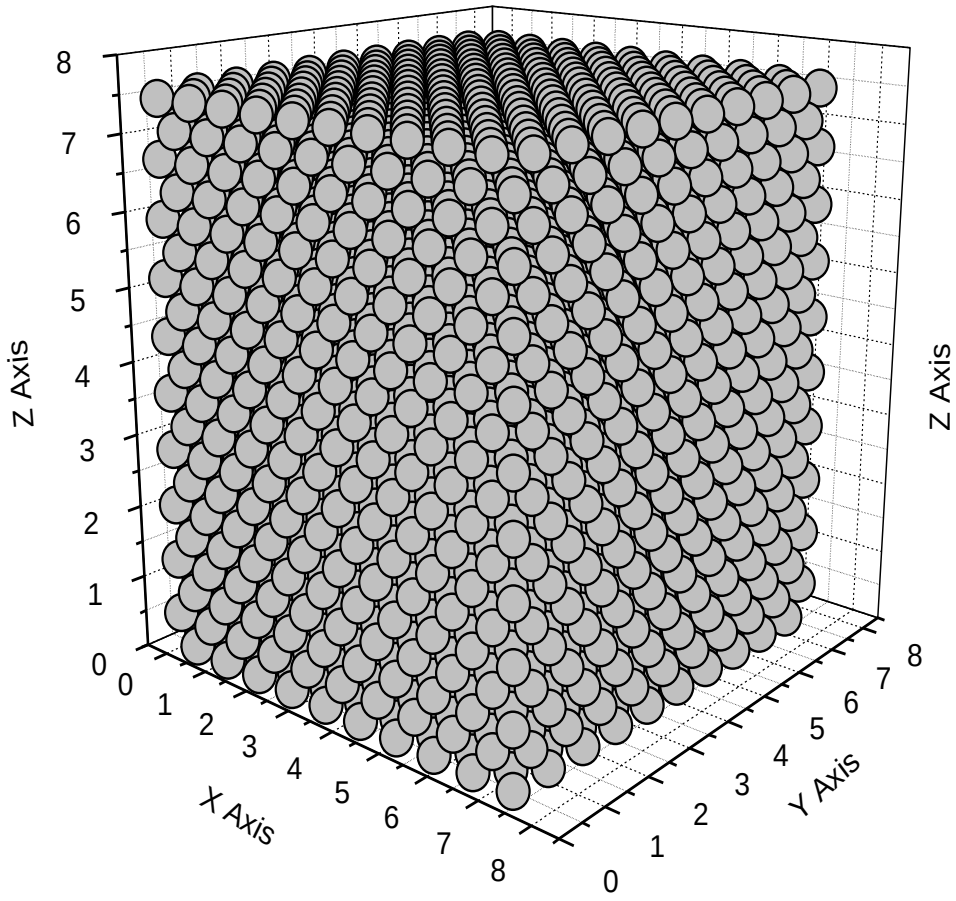


$$V_{ord}(r) = (V_{11}(r) + V_{22}(r) - 2 \cdot V_{12}(r)) \cdot c_1 c_2$$

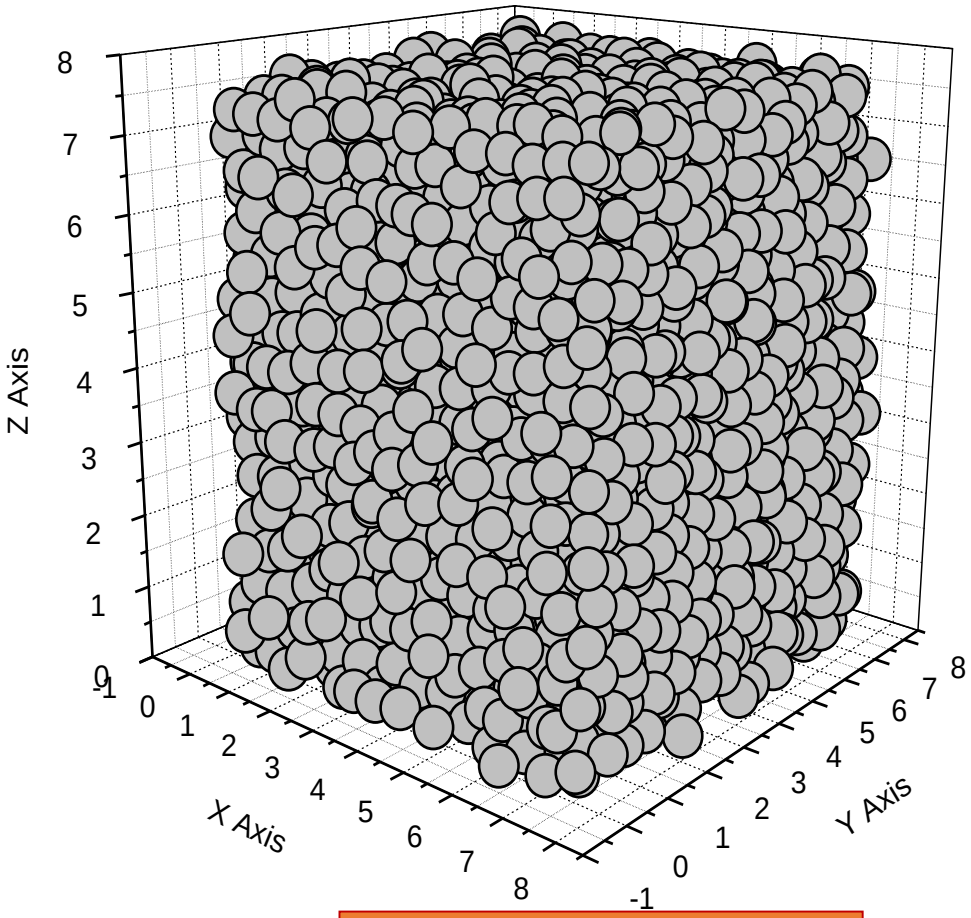
(au niveau des premiers voisin)

> 0	hétérocoordonné
= 0	Idéal
< 0	homocoordonné

Boite de simulation étain liquide : 4000 atomes

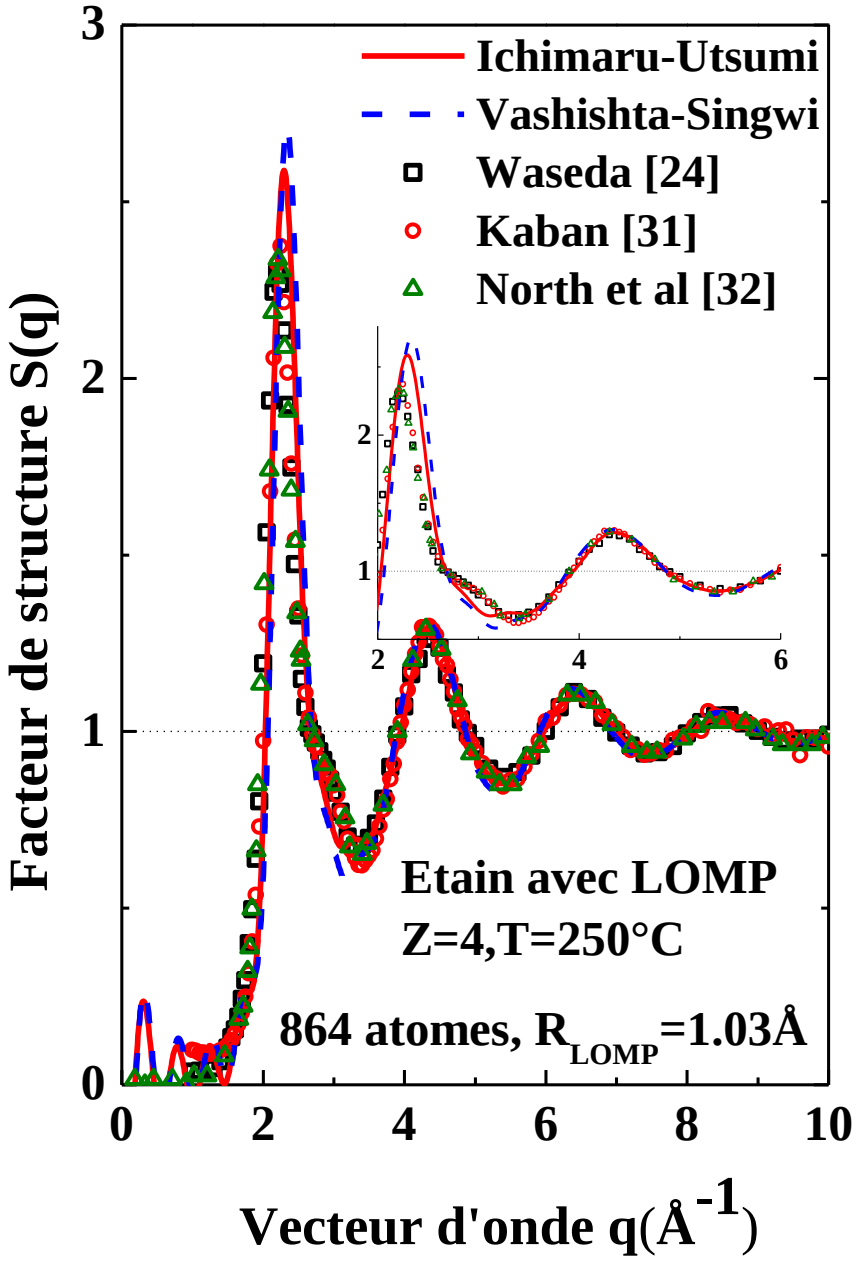


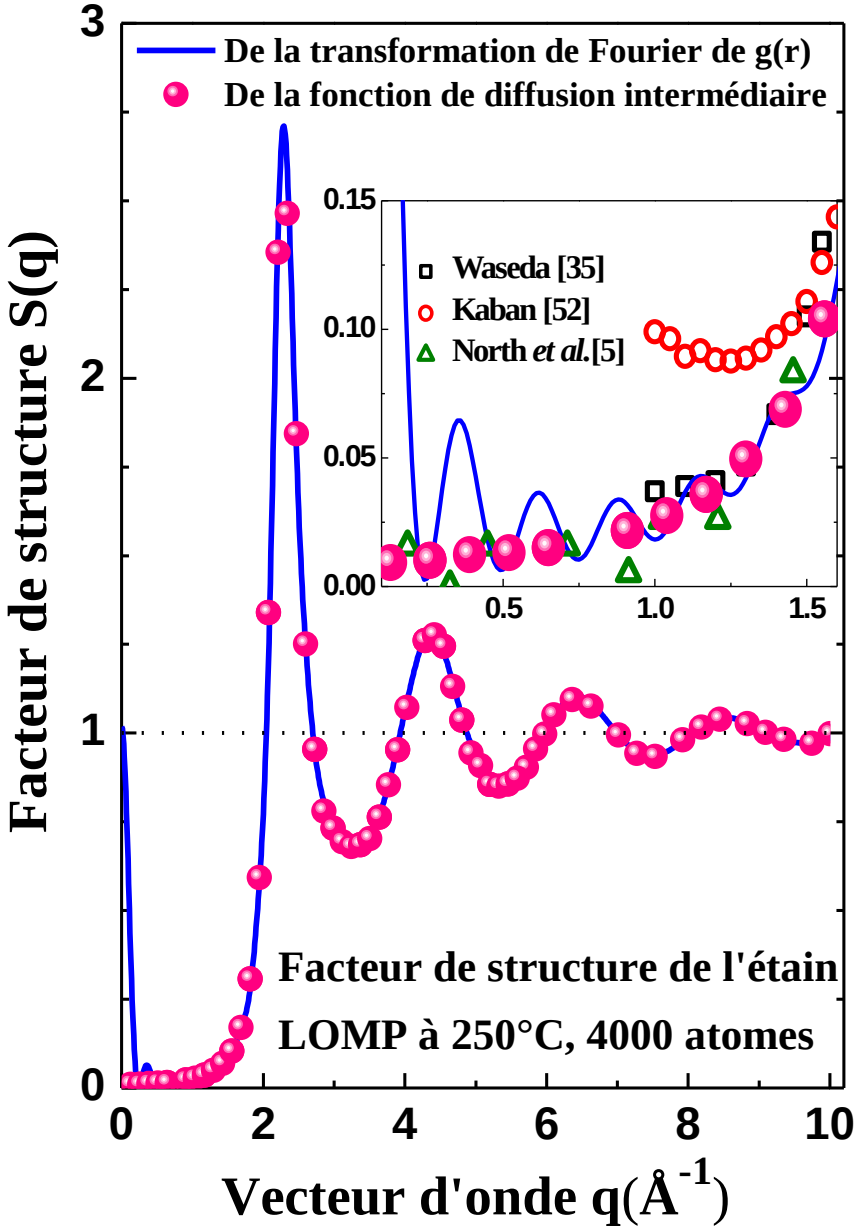
Positions initiales



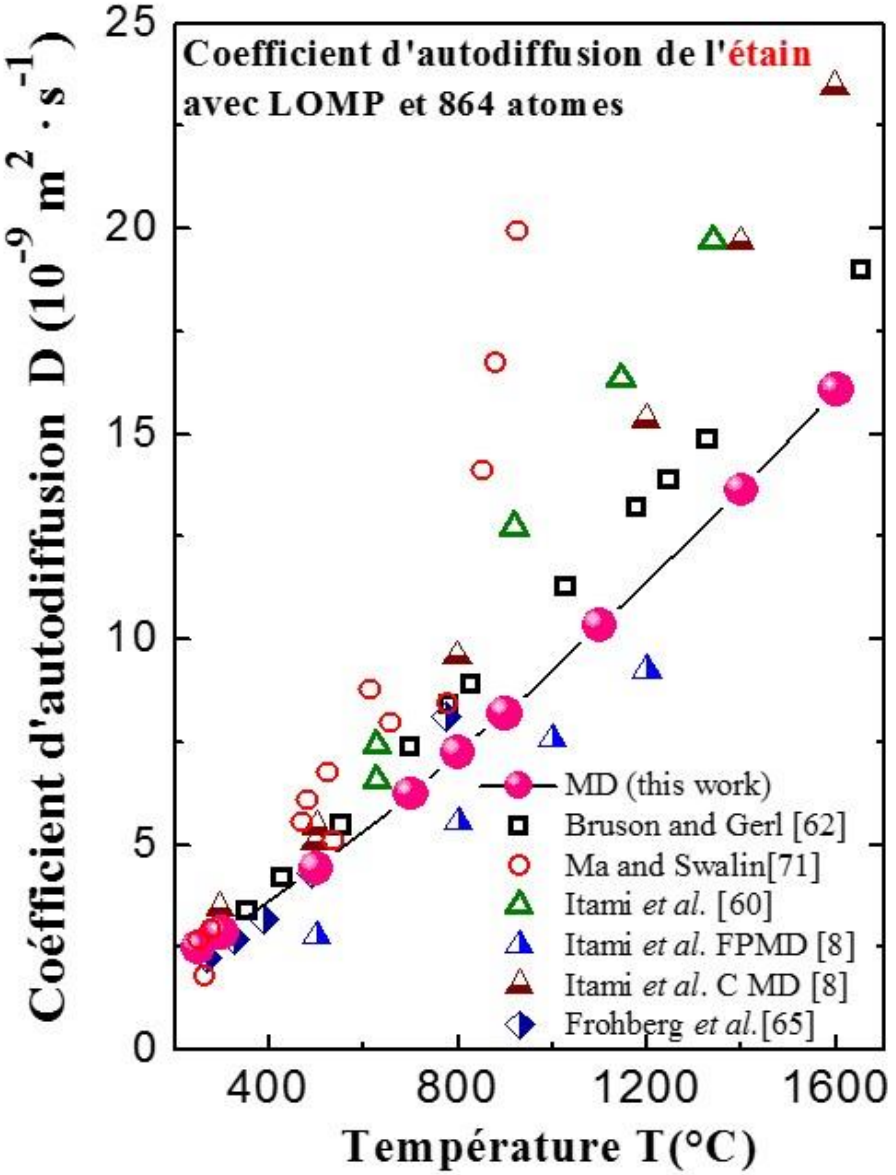
Positions finales
(après 40 picosecondes)

Etain


Ichimaru-Utsumi
Vashishta-Singwi
Waseda [24]
Kaban [31]
North et al [32]
Etain avec LOMP
Z=4,T=250°C
864 atomes, R_LOMP=1.03Å
Facteur de structure S(q)
Vecteur d'onde q(Å^-1)


De la transformation de Fourier de g(r)
De la fonction de diffusion intermédiaire
Waseda [35]
Kaban [52]
North et al.[5]
Facteur de structure de l'étain
LOMP à 250°C, 4000 atomes
Facteur de structure S(q)
Vecteur d'onde q(Å^-1)

Autodiffusion dans l'étain liquide



Relation d'Einstein :

$$D = \lim_{t \to \infty} \text{de} : \left\langle \left| \vec{r}(t) - \vec{r}(0) \right|^2 \right\rangle \Big/ 6t$$

Fonction d'autocorrélation des vitesses (VAF) :

$$Z(t) = \frac{1}{3} \left\langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \right\rangle$$

Fonction spectrale : (mesurable)

$$\psi(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} Z(t) \exp(-i\omega t)\, dt$$

Coefficient de diffusion :

$$D = \int_0^{\infty} Z(t)\, dt$$

(Green-Kubo)

Autodiffusion et interdiffusion dans l'alliage

Fonctions VAFs partielles :

$$Z_{\alpha\beta}(t)=\frac{1}{3}C_\alpha C_\beta N\left\langle\left[\vec{u}_\alpha(t)-\vec{u}_\beta(t)\right]\cdot\left[\vec{u}_\alpha(0)-\vec{u}_\beta(0)\right]\right\rangle$$

Fonctions spectrales partielles :

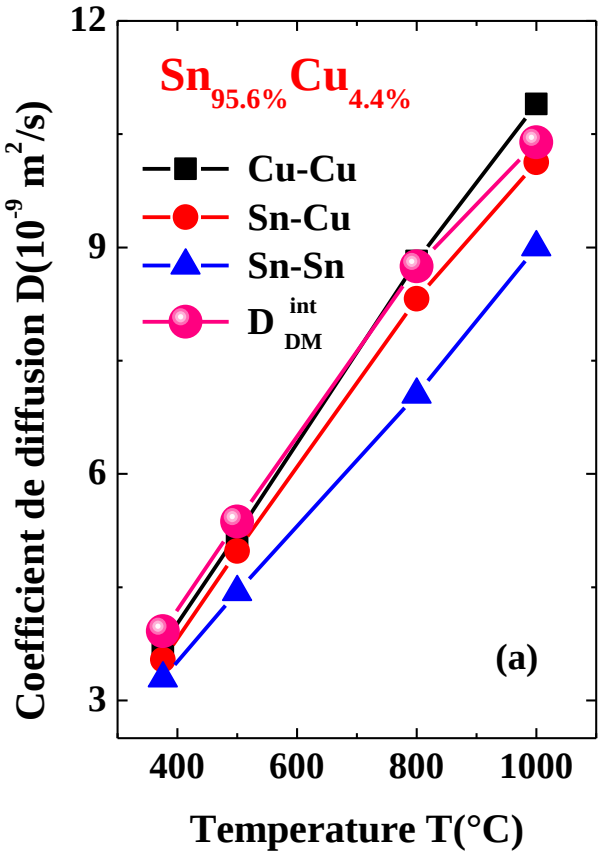
$$\psi_{\alpha\beta}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}Z_{\alpha\beta}(t)\exp(-i\omega t)\,dt$$

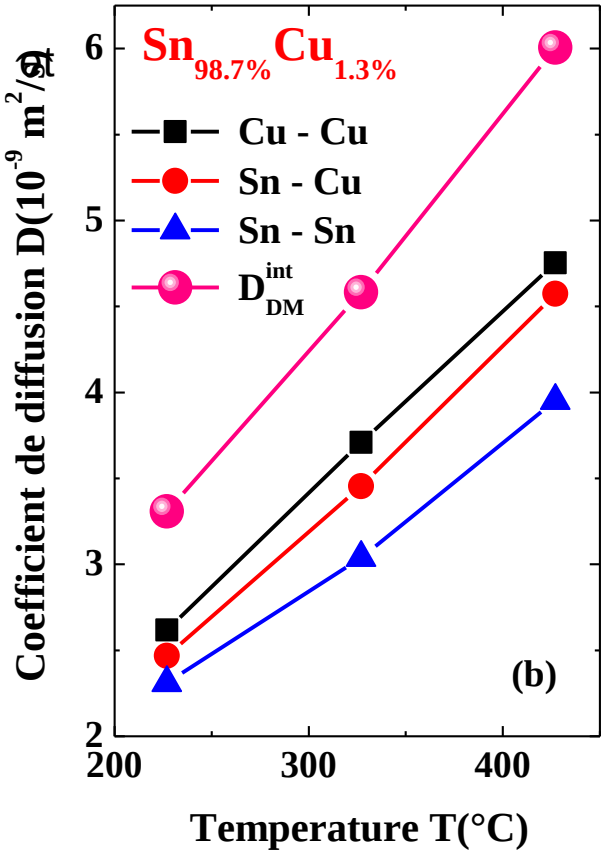
Coefficients de diffusion :

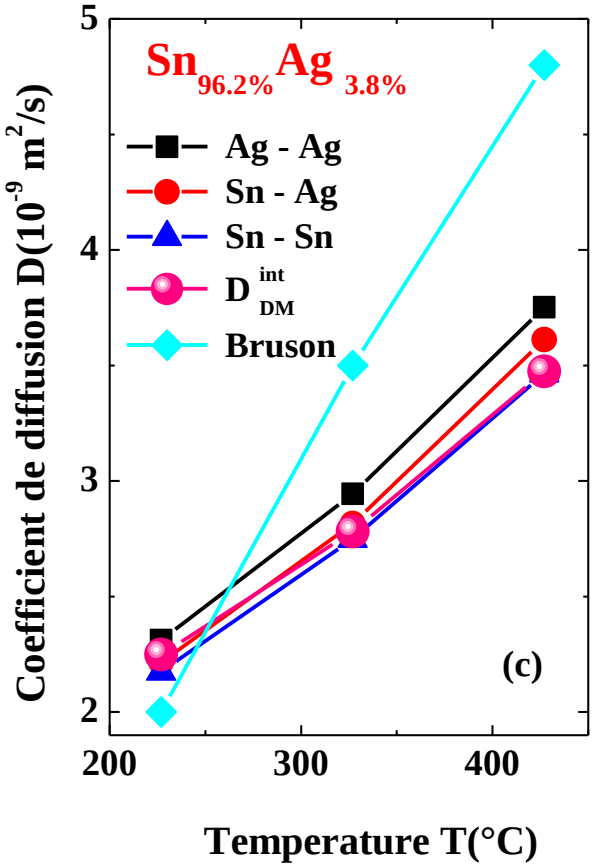
$$D_{\alpha\beta}=\int_0^{\infty}Z_{\alpha\beta}(t)\,dt \qquad D_{\alpha\beta}=\frac{\Psi_{\alpha\beta}(0)}{\pi}$$

Coefficient d'interdiffusion :

$$D_{int}=\frac{c_1c_2}{S_{cc}(0)}D_{12}$$







Viscosité de cisaillement de l'étain liquide

Tenseur de contraintes :

$$\Pi^{\mu\nu} = -\frac{1}{\Omega}\sum_{i=1}^{N}\left[p_i^{\mu} p_i^{\nu}/m_i + \sum_{j>i}^{N} R_{ij}^{\mu} f_{ij}^{\nu} \right]$$

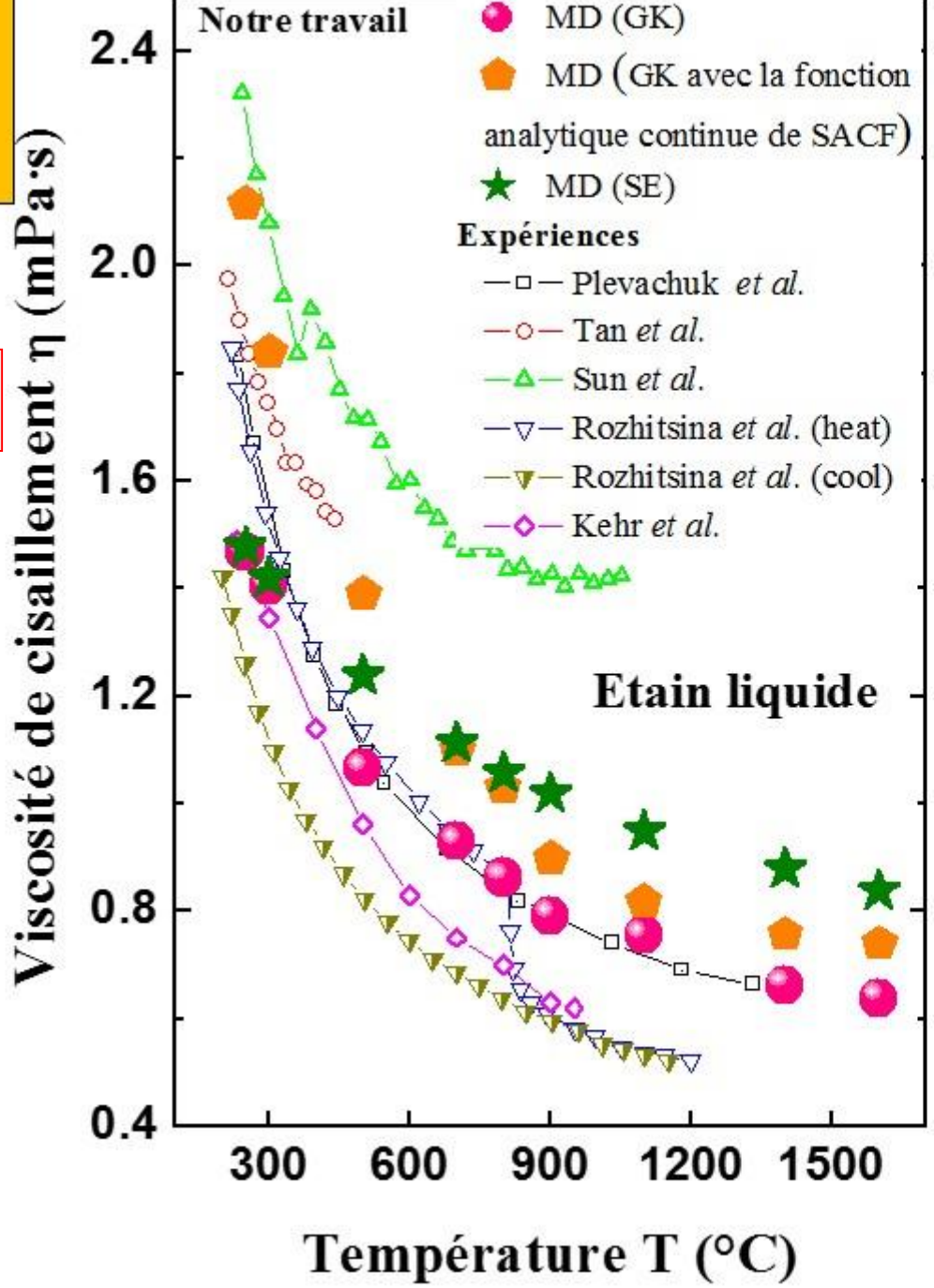
Viscosité cisaillement (expression de Green-Kubo):

$$\eta = \frac{\Omega}{k_B T}\int_0^{\infty} dt \left\langle \Pi^{\mu\nu}(t)\cdot\Pi^{\mu\nu}(0)\right\rangle$$

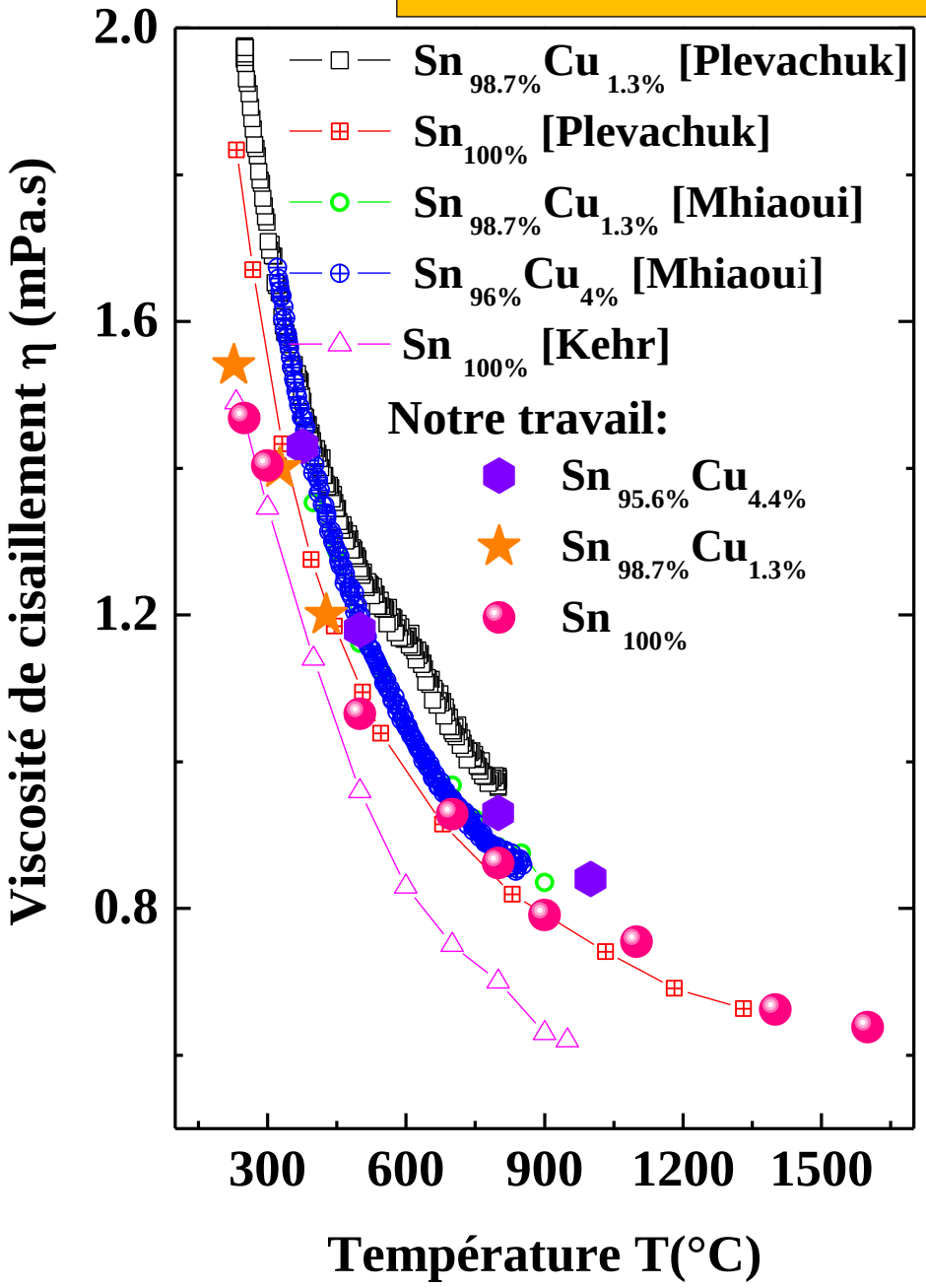
éléments non diagonaux : α ≠ β

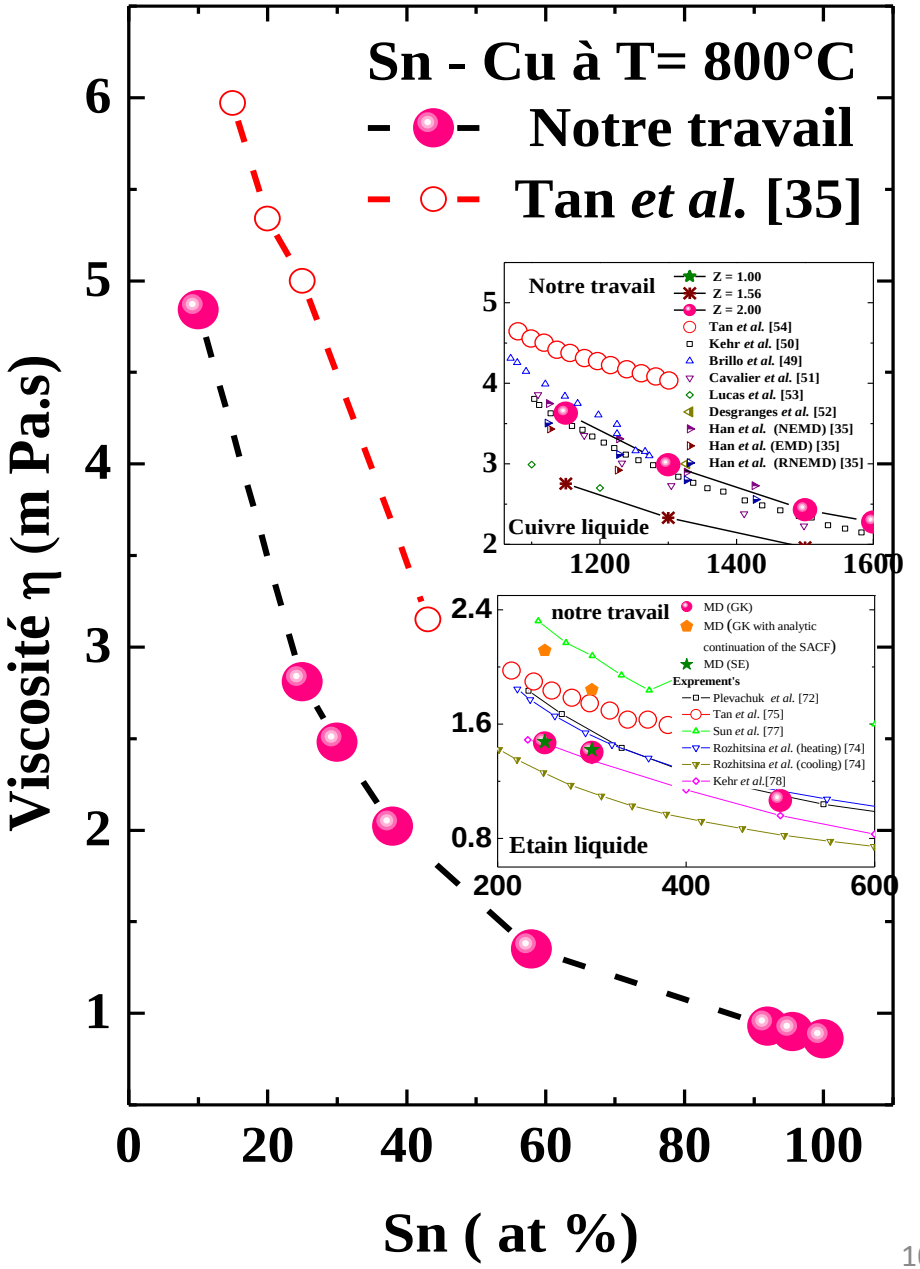
- **Sutherland-Einstein**

$$D = \frac{k_B T}{f} = \frac{k_B T}{2\pi\eta d}$$

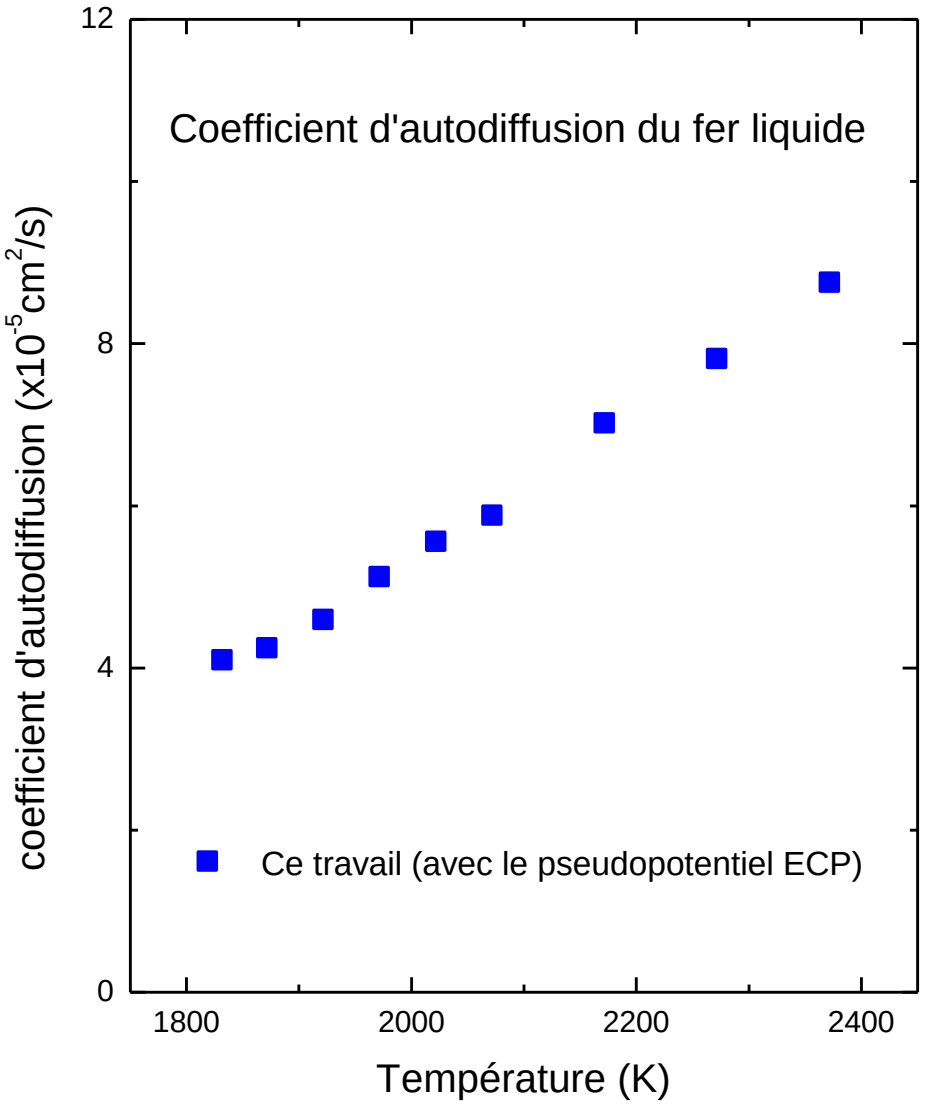


Viscosité dans les alliages liquides



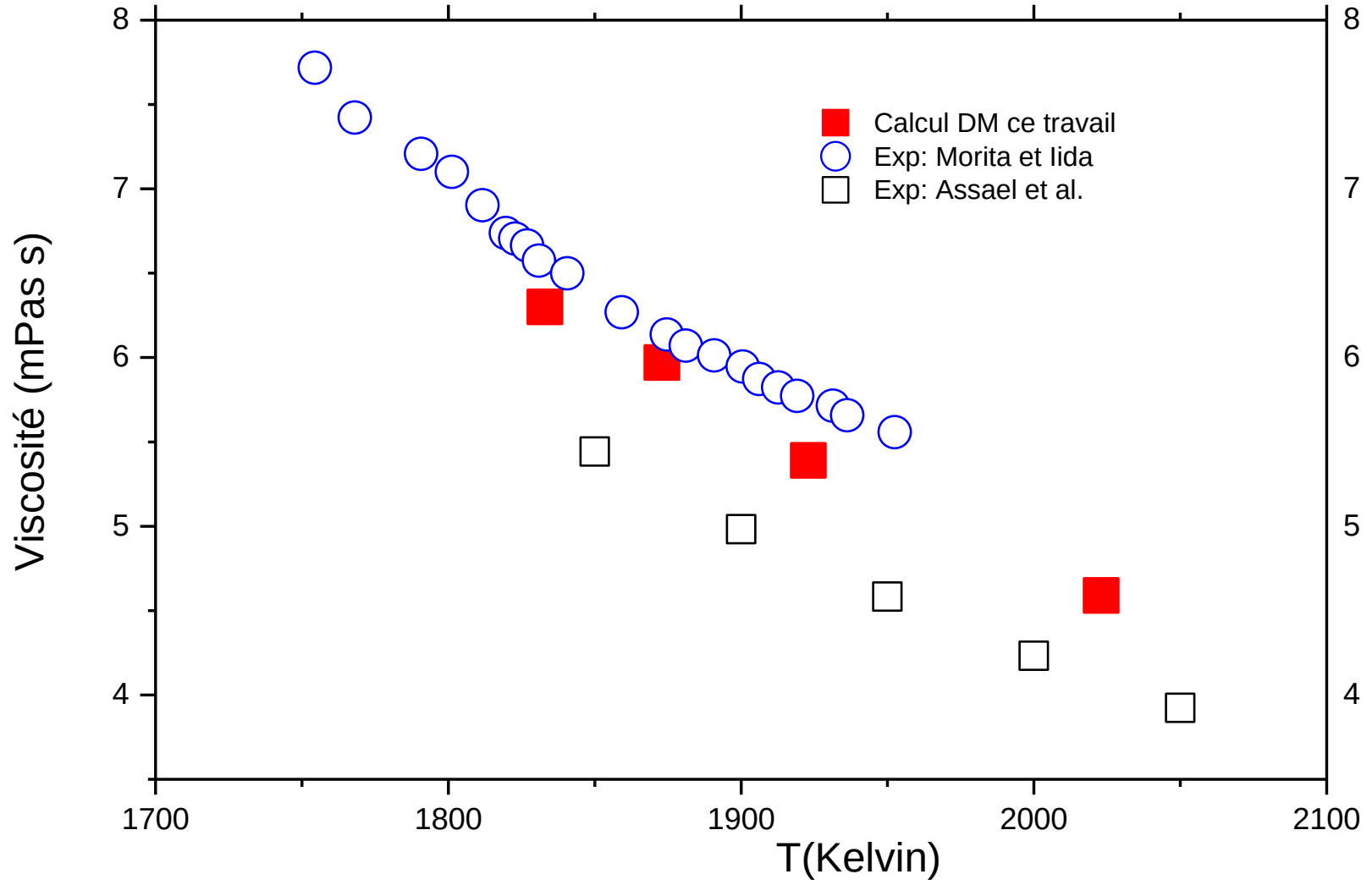


COEFFICIENT DE DIFFUSION DU FER LIQUIDE OBTENUE PAR DYNAMIQUE MOLECULAIRE « GREEN-KUBO »



Calcul Nadra Harchaoui mars 2016

VISCOSITE DU FER LIQUIDE OBTENUE PAR DYNAMIQUE MOLECULAIRE « GREEN-KUBO »



Seuls autres calculs: Fer entre 4300 à 7000K et de 135 à 343 Gpa (centre de la terre) et 120 000K (planètes géantes)

Calcul Nadra Harchaoui mars 2016

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

Mesure de la résistivité électrique de brasures sans plomb À l'état liquide et solide (de la température ambiante à 1000°C)

$$\vec{J}_e = e^2 K_{11}\vec{E} - (e/T_K)K_{12}(-\vec{\nabla}T_K)$$

A gradient de température nul :

$$\vec{J}_e = \sigma\vec{E} = -\sigma\vec{\nabla}V$$

$$\sigma = e^2 K_{11}$$

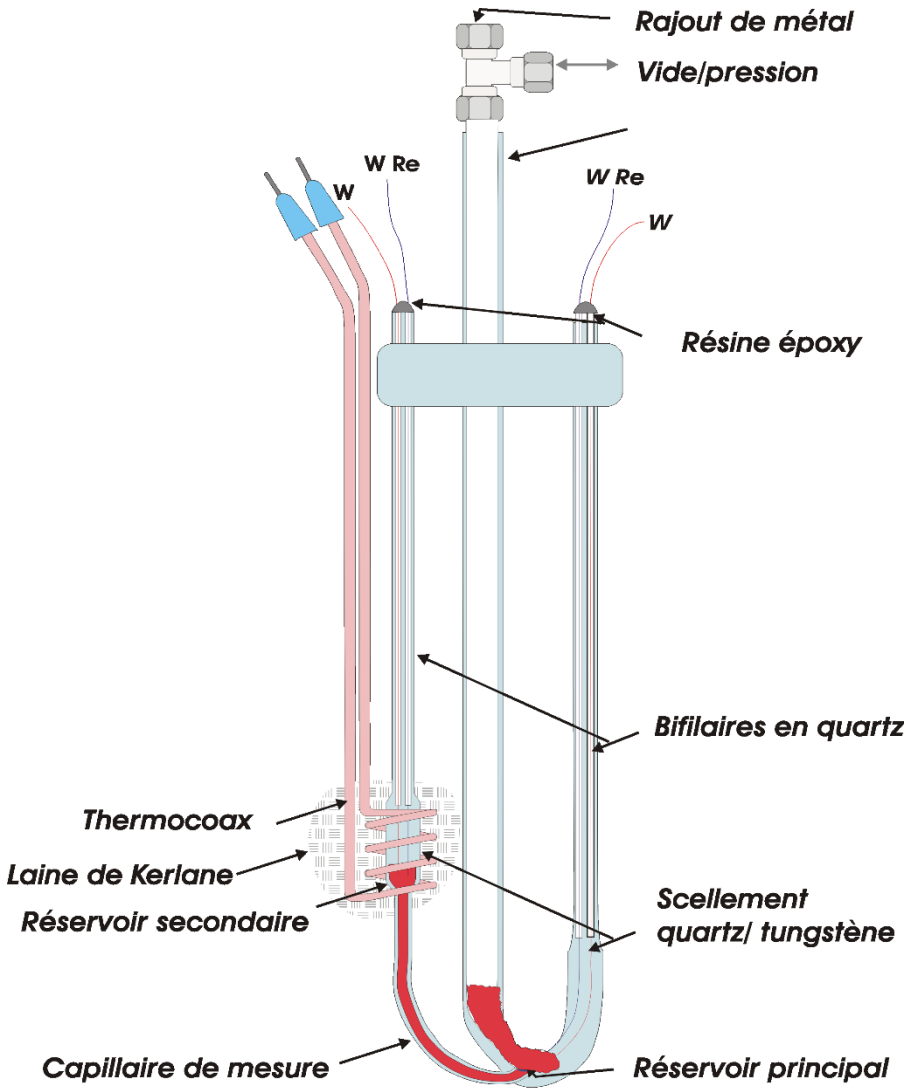
C'est la loi d'Ohm microscopique, σ est la conductivité électrique

- **à densité de courant nul (circuit ouvert)**

$$\lambda = \frac{\left(L_0 - S^2\right)T_K}{\rho} = \left(L_0 - S^2\right)T_K\sigma$$

La loi de Wiedemann Franz relie la conductivité thermique "électronique" à la conductivité électrique (pour S≈0)

Measurement cell



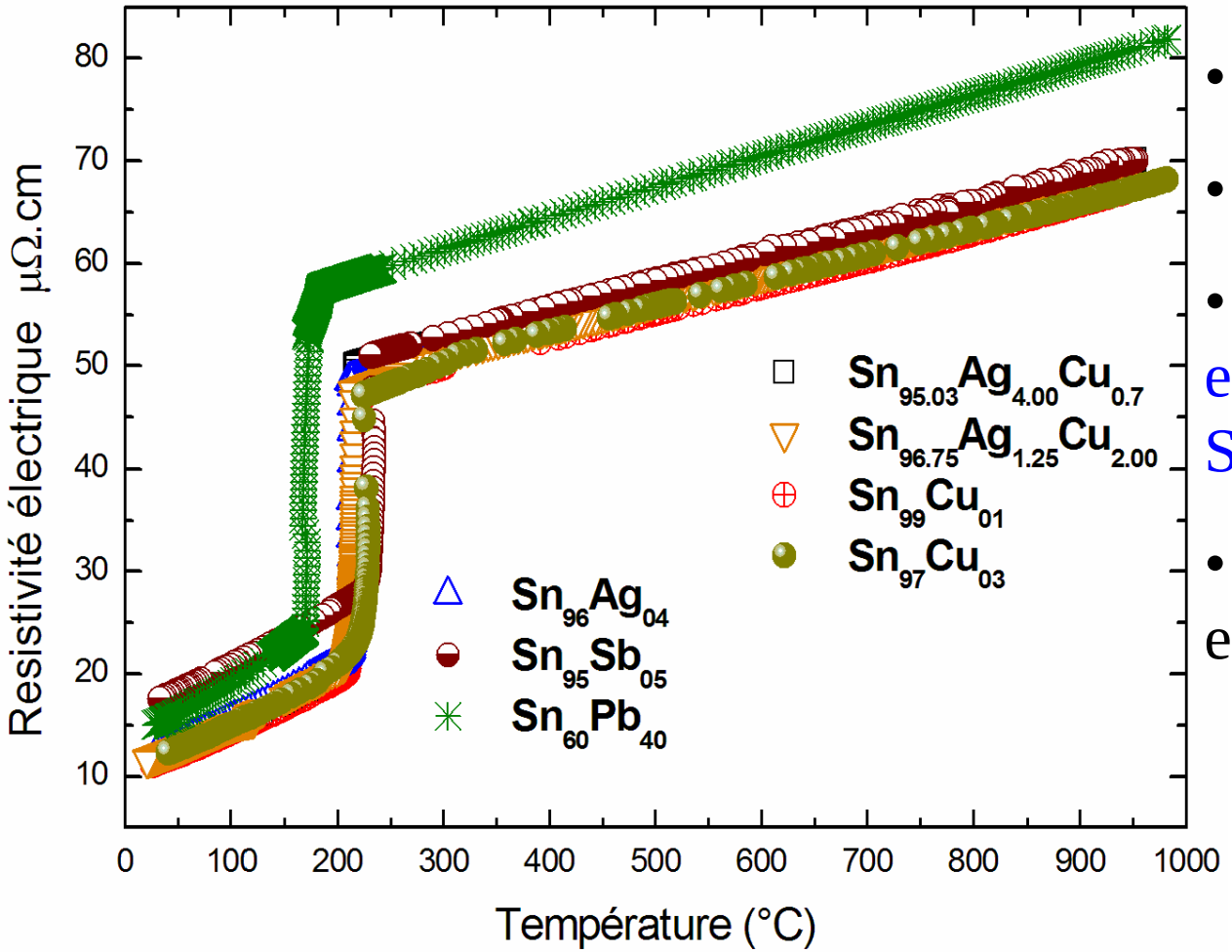
The measurement of the resistivity needs:

- A long capillary
- 4 electrodes

The measurement of the TEP needs :

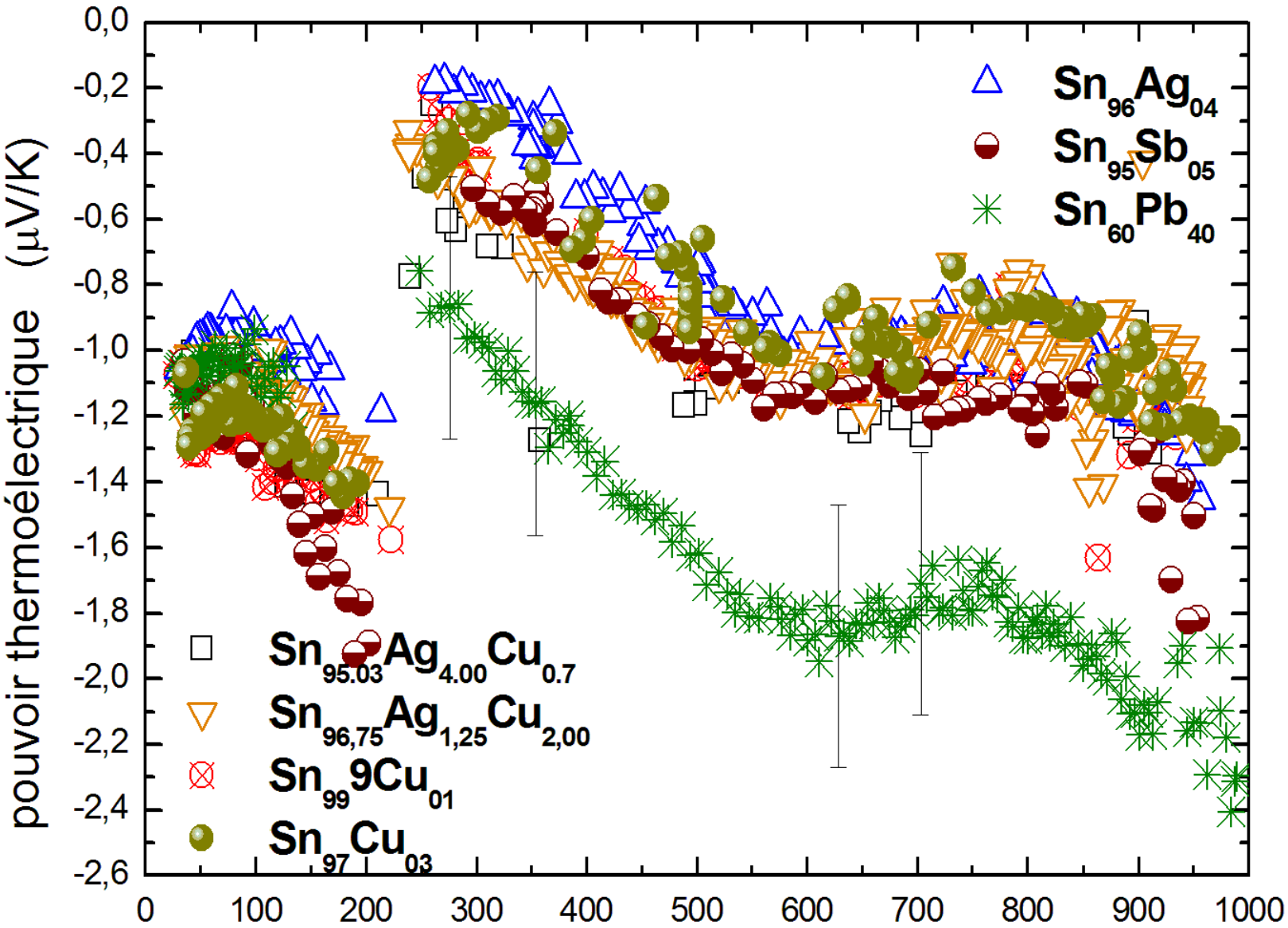
- A gradient of temperature
- Two (thermo) couples of wires immerged in the liquid bath.

Résistivité des phases liquides et solides de brasures sans plomb



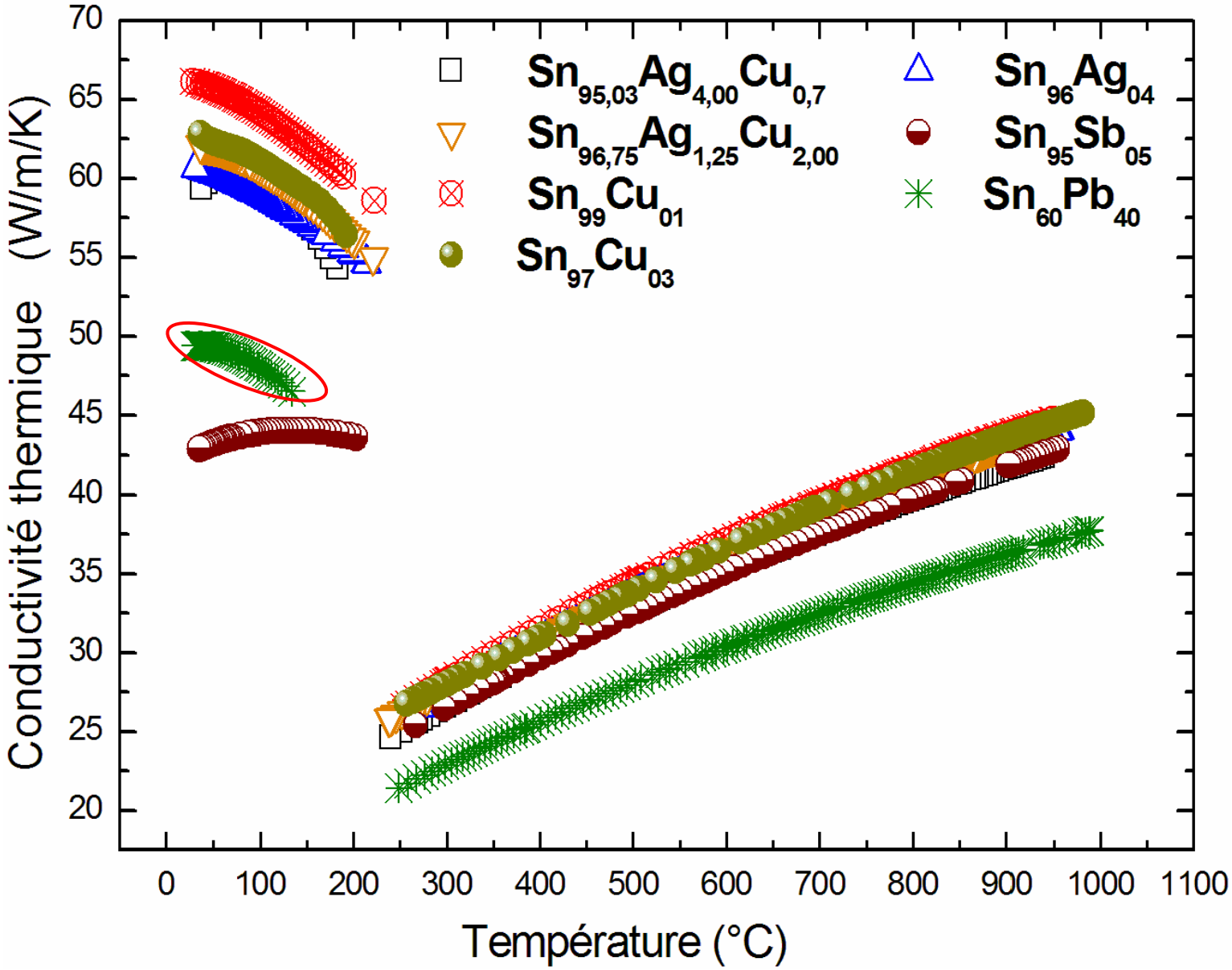
- ρ(SnPb)> ρ(LFS)
- σ=1/ρ
- The LFS are better electric conductor that SnPb
- $Sn_{99}Cu_1$ is the best electric conductor.

PTA



Thèse Mhiaoui

Conductivité thermique



Mesure de la résistivité électrique d'aciers solides de la température ambiante à 1250°C

Pour le compte d' Arcelor-Mittal Maizières les Metz

K. Khalouk et J.G. Gasser

Institut de ***C***himie, ***P***hysique et ***M***atériaux

Laboratoire de Chimie Physique Approches Multiéchelles des Milieux Complexes (LCP-A2MC)

1, Bd Arago, Technopôle 2000 - 57078 Metz Cedex 3 France

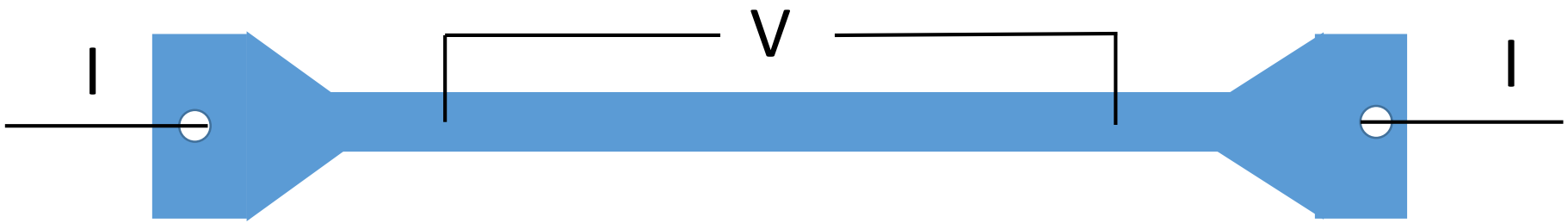
Tél Labo. : 03 87 31 58 82/89

Tél Bureau. : 03 87 31 58 59/ 03 87 31 71 73

CHOIX DE LA METHODOLOGIE DE MESURE

La mesure se fait en deux étapes:

1)- **Etalonnage:** Mesure précise de la résistivité électrique autour de la température ambiante (2 à 50°C environ) sur des éprouvettes de grandes dimensions.



2)- **Mesure de la résistivité à haute température** en calibrant (à la température ambiante) le dispositif sur la valeur mesurée dans l'étape N° 1.

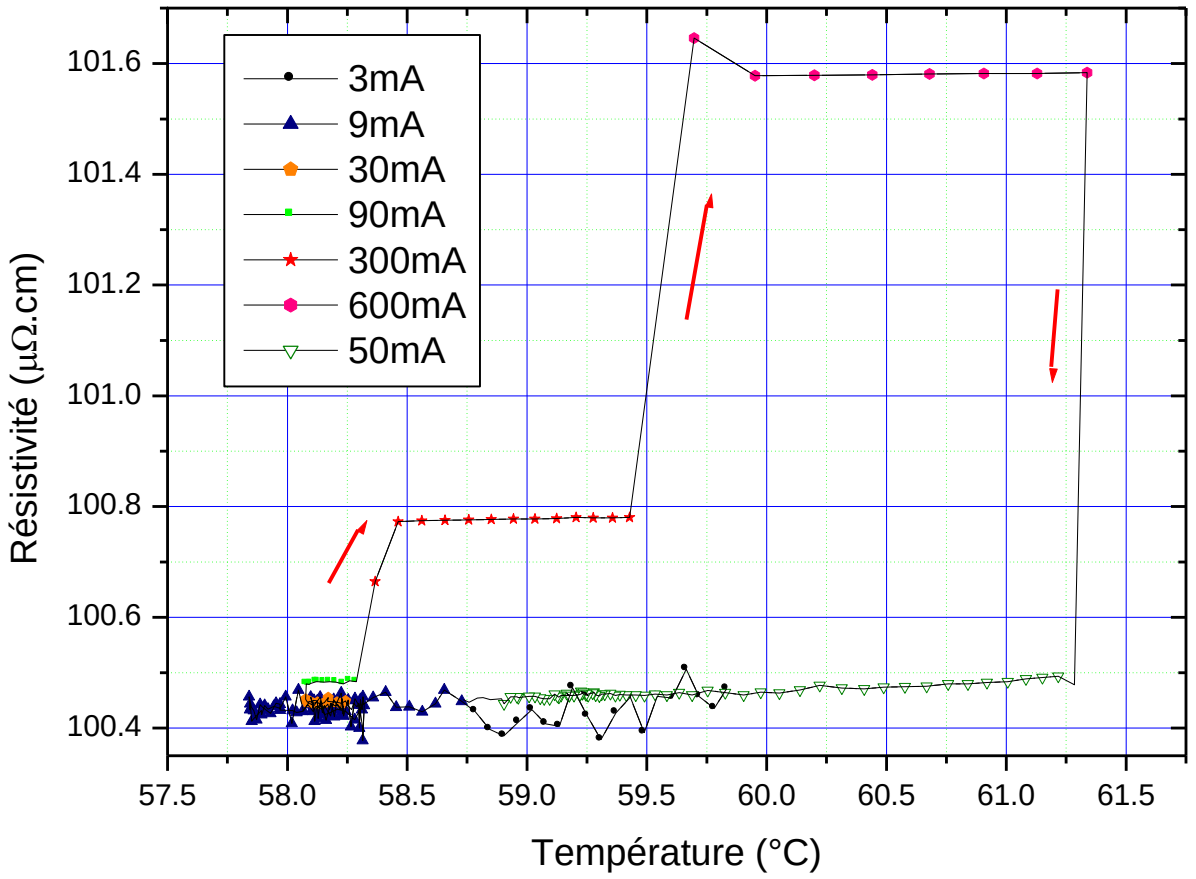
Dispositif pour mesurer la Résistivité et le PTA à moyenne température

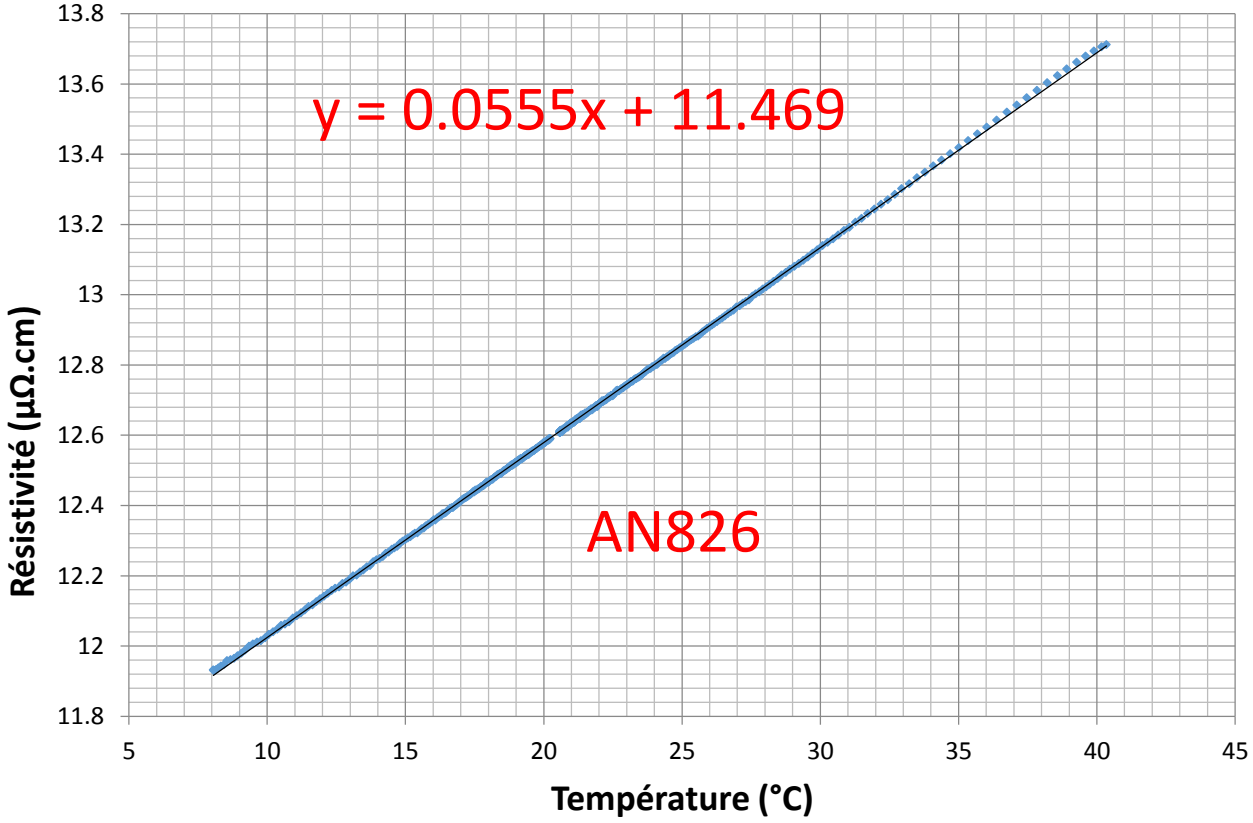
Travaux de K. Khalouk

Adaptation à haute température.
La taille de l'échantillon est petite par rapport à la taille optimale.

Choix de la valeur du courant de mesure

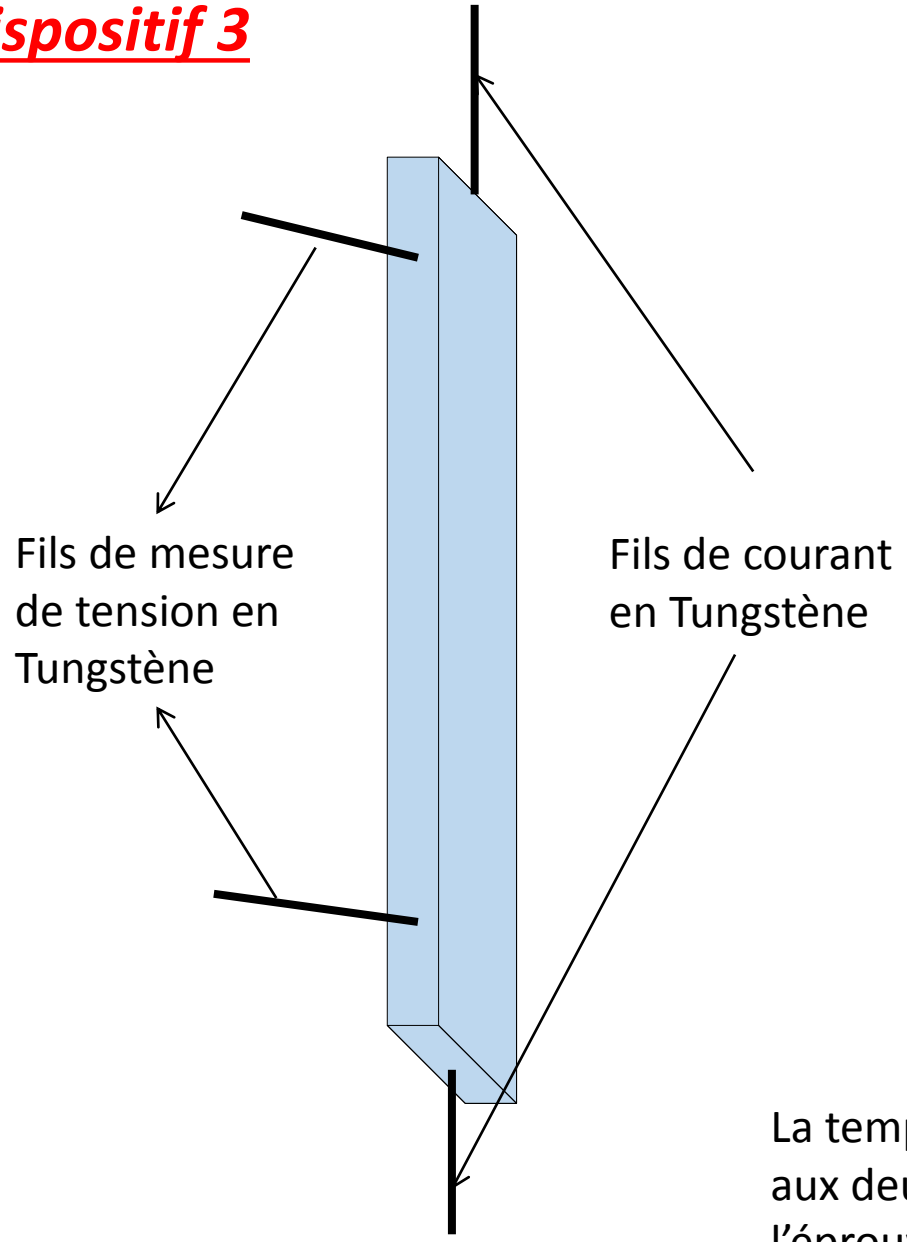
Le courant de mesure ne doit pas modifier la température de l'échantillon par effet Joule comme illustré ci-dessous.

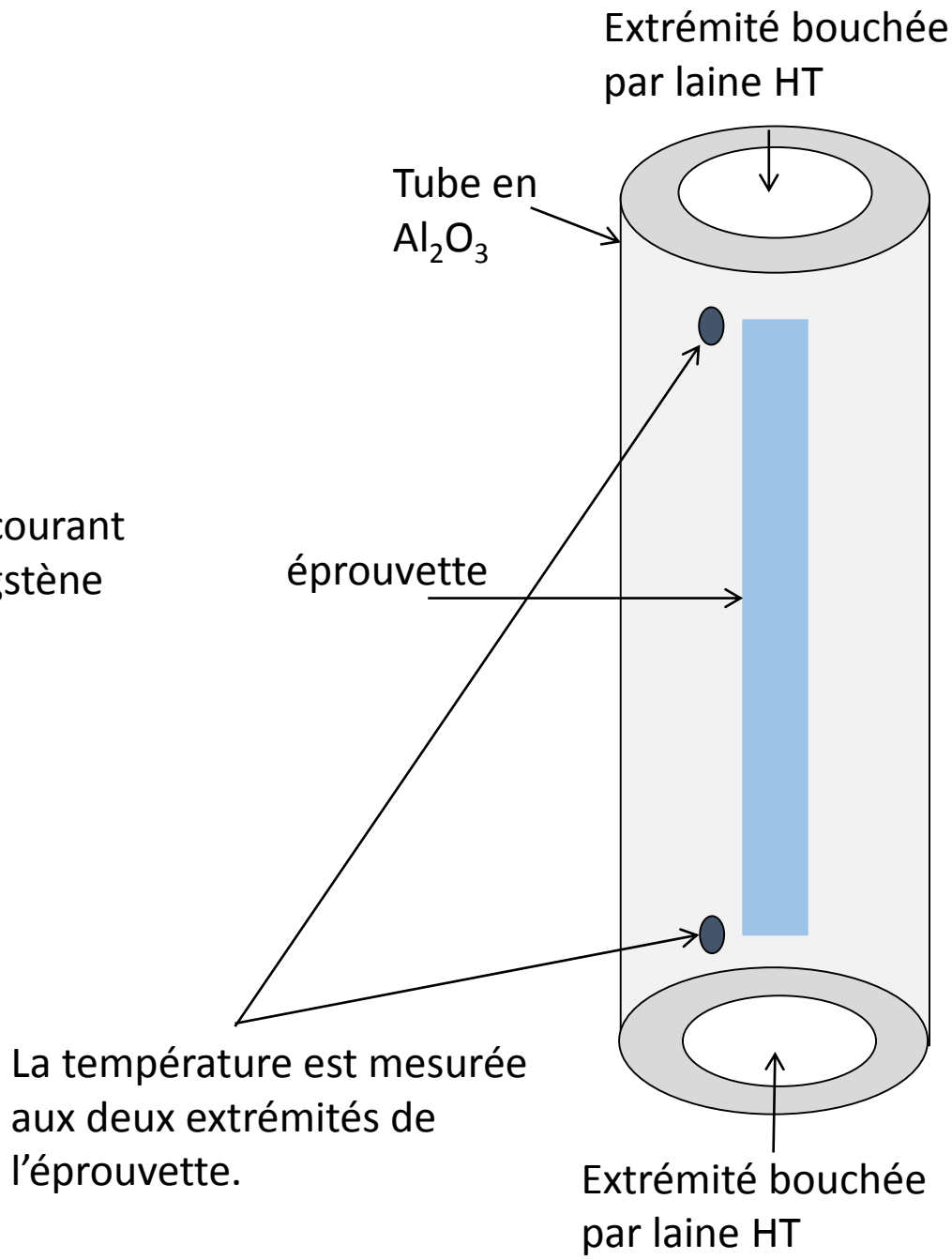




Travaux de K. Khalouk

Dispositif 3

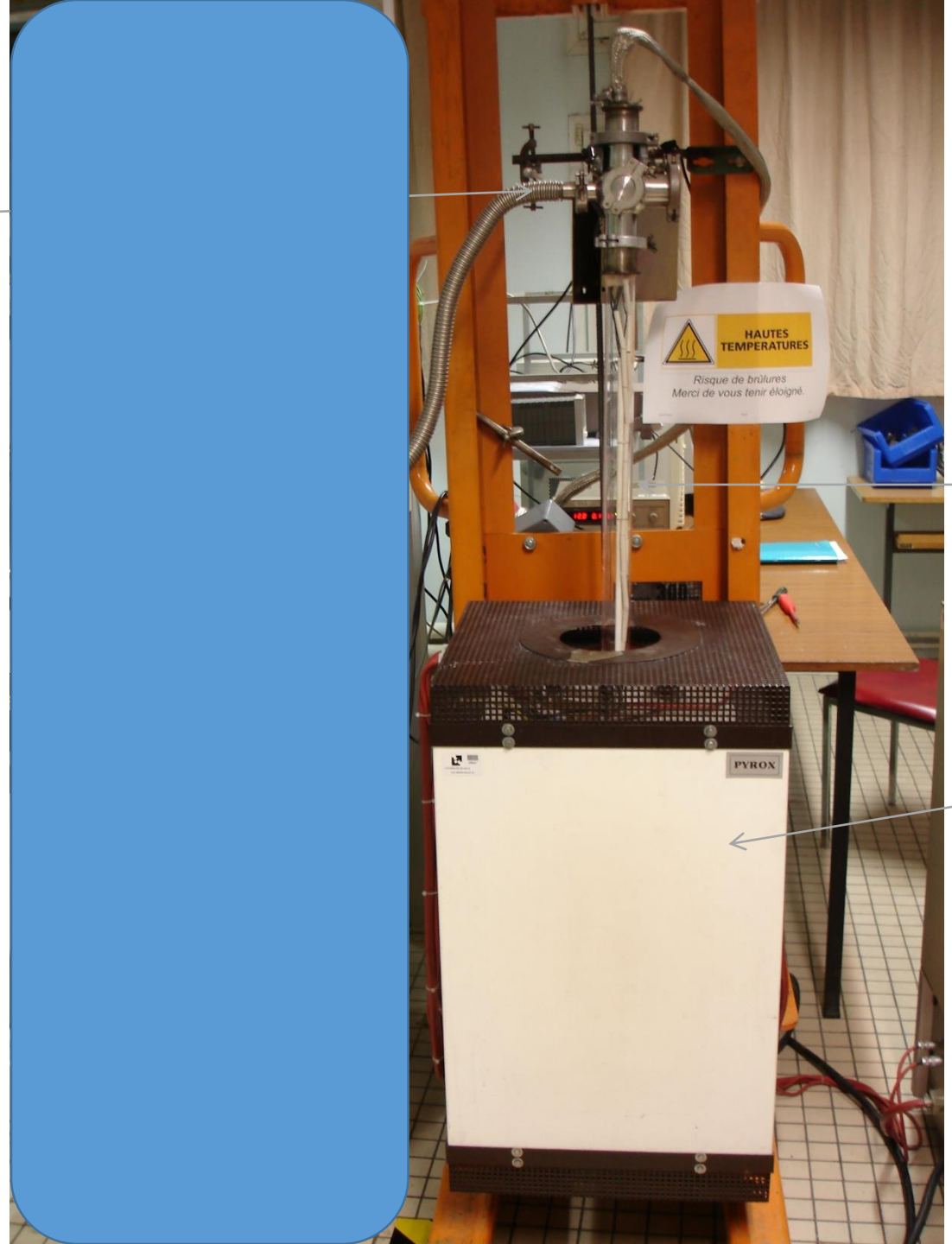




Mesures en fonction de la température

Travaux de K. Khalouk

Vide +pression d’argon pur

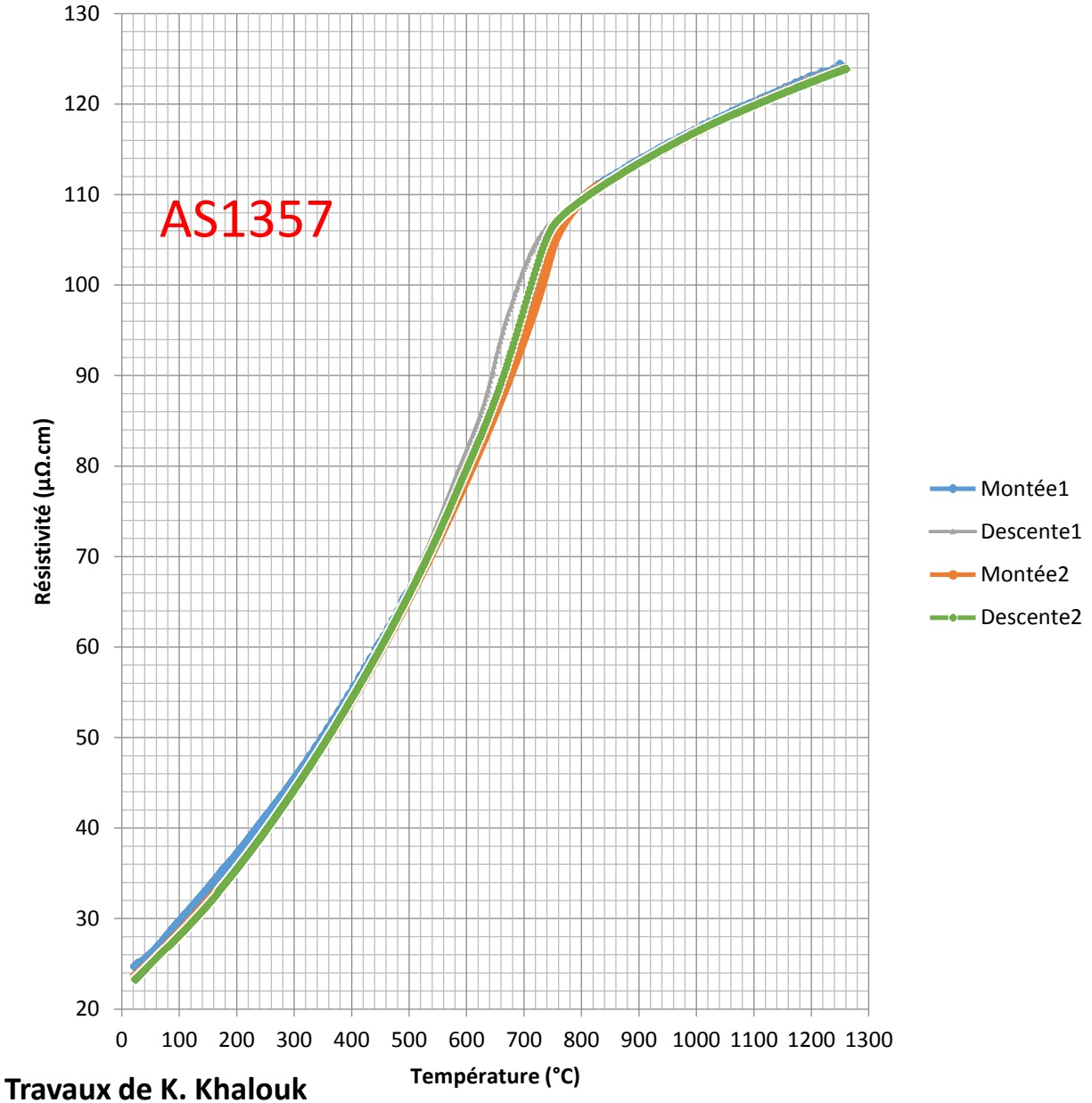


Tube en quartz

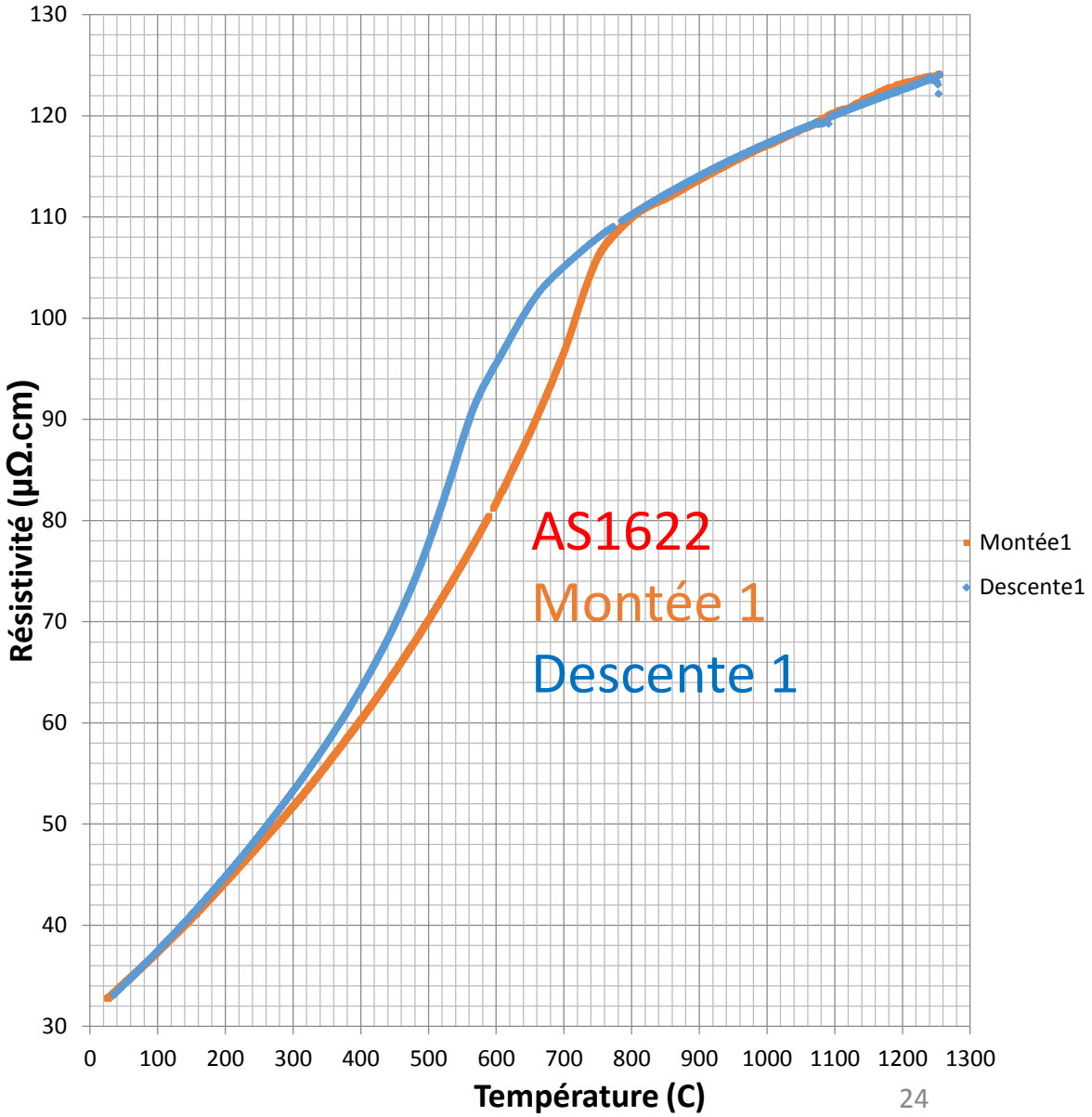
Four

Travaux de K. Khalouk

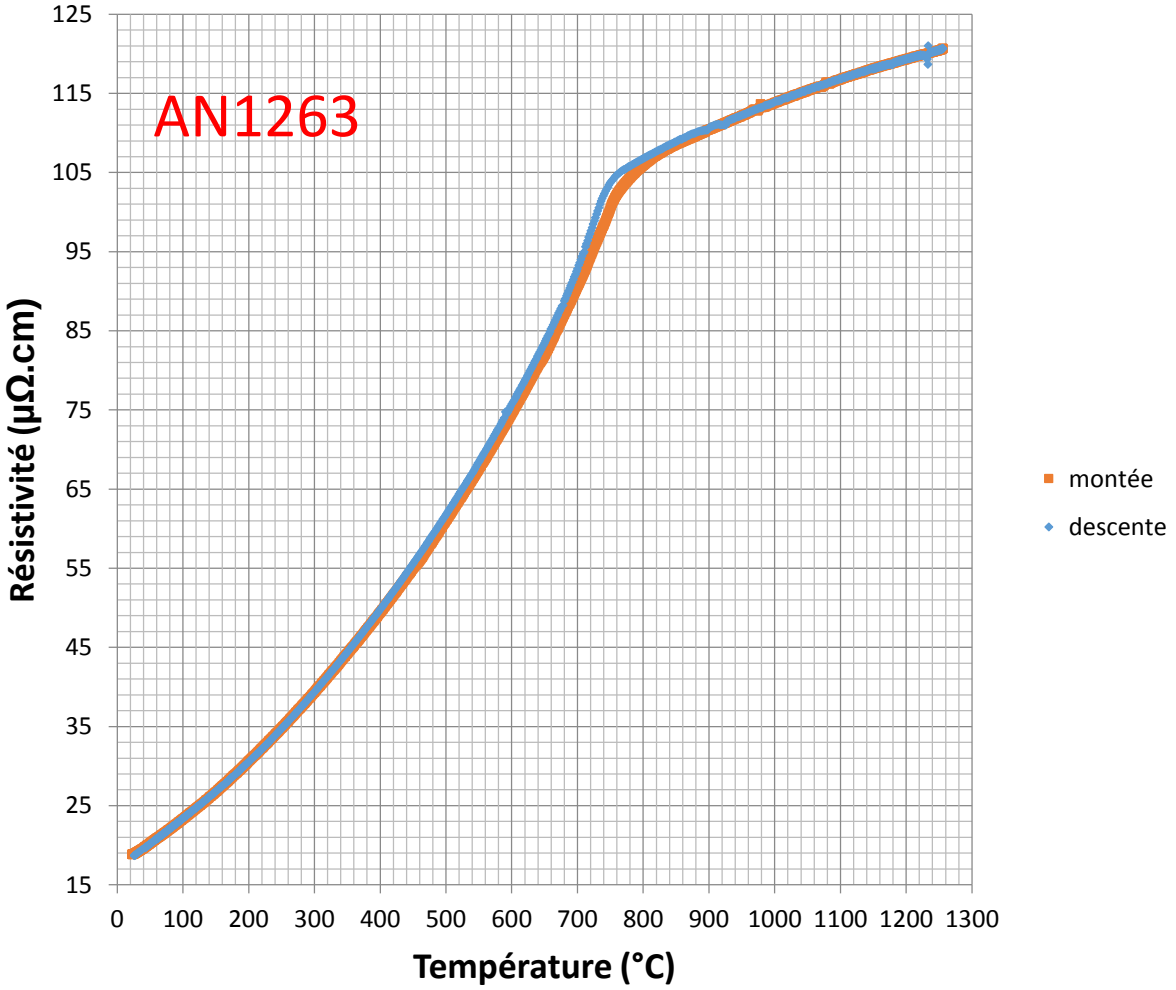
QUELQUES RESULTATS POUR ARCELOR-MITTAL LORRAINE

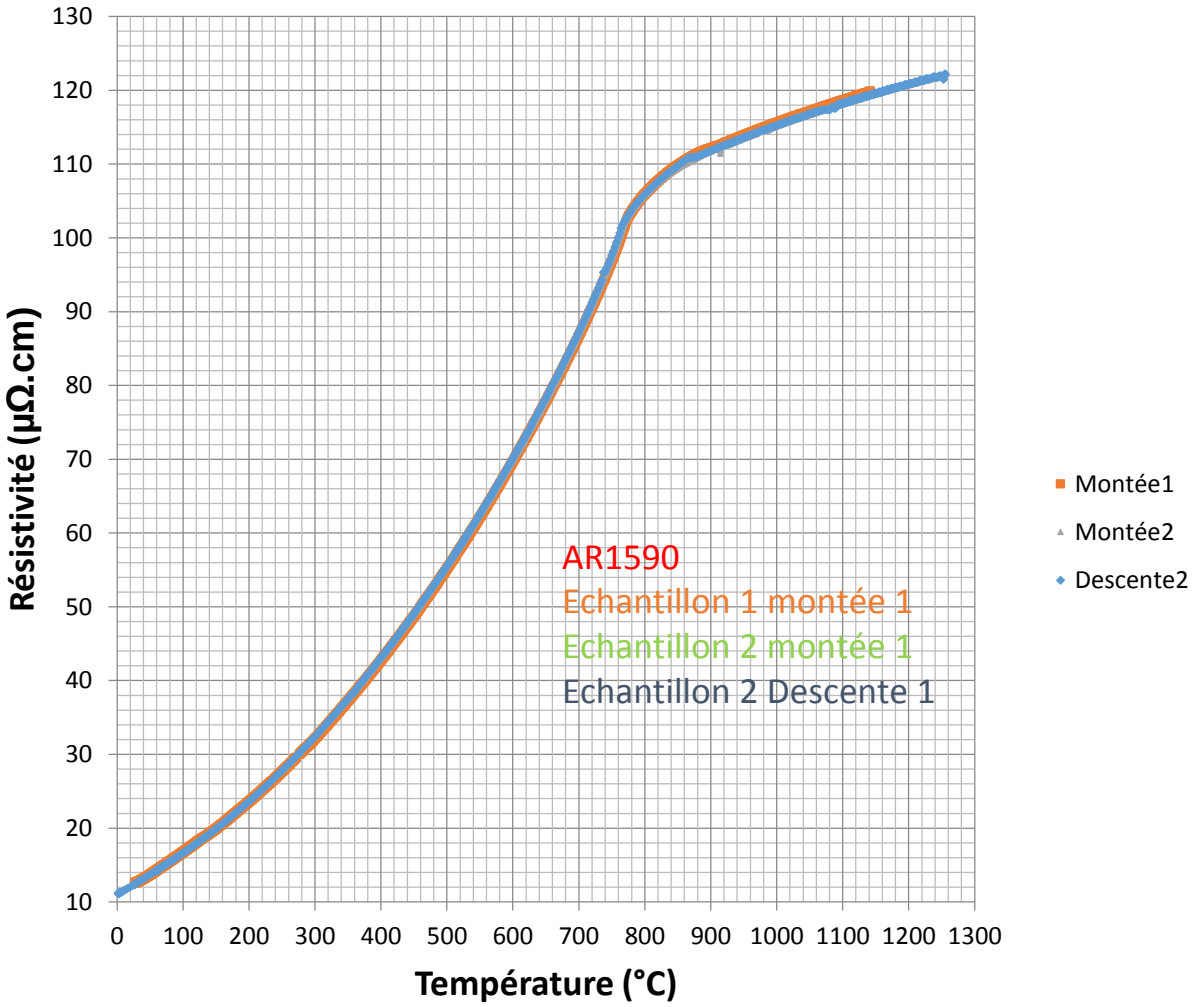


Travaux de K. Khalouk



La résistivité à température ambiante varie de 10 à 40 µΩ cm (400%!)

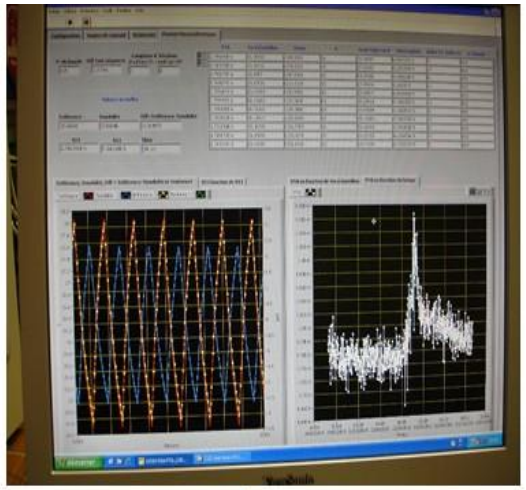




Travaux de K. Khalouk

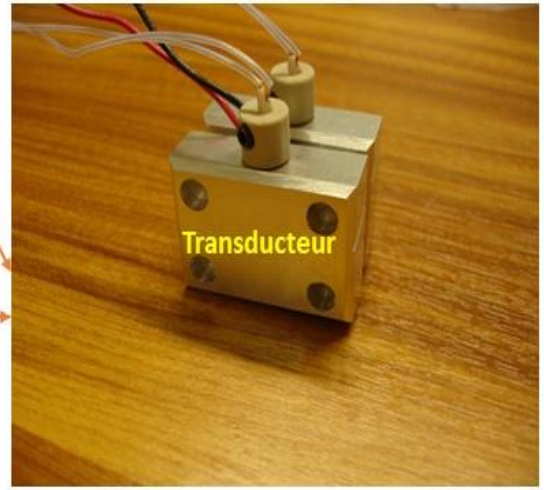
La résistivité à 1250°C varie de 122 à 126 µΩ cm (3%!)

Prototype pour la mesure du coefficient de Seebeck absolu (PTA)



Un logiciel de pilotage et mesure

Un dispositif de mesures



Un capteur

Nous avons mesuré le **Pouvoir Thermoélectrique Absolu** des grandes éprouvettes.
Nous avons obtenu les résultats suivants à une température moyenne de 34°C

Nuance	Eprouvette 1	Eprouvette 2	Eprouvette 3	Moyenne
AN826	13.2	13.3	13.0	13.16
AR1590	12.9	13.2	13.0	13.03
AR1503	12.85	12.95	12.85	12.88
AN1263	12.9	12.6	12.8	12.76
AT1128	12.1	12.3	12.2	12.2
AS1357	10.7	10.4	10.3	10.46
AS235	8.9	8.88	8.9	8.89
AR2935	7.79	7.70	7.59	7.69
AR1630	7.4	7.4	7.8	7.53
AS1622	5.47	5.56	5.38	5.47
AT0031	4.71	5.15	4.90	4.92
AR1126	-1.18	-1.19	-1.18	-1.18

INTERPRETATION THEORIQUE

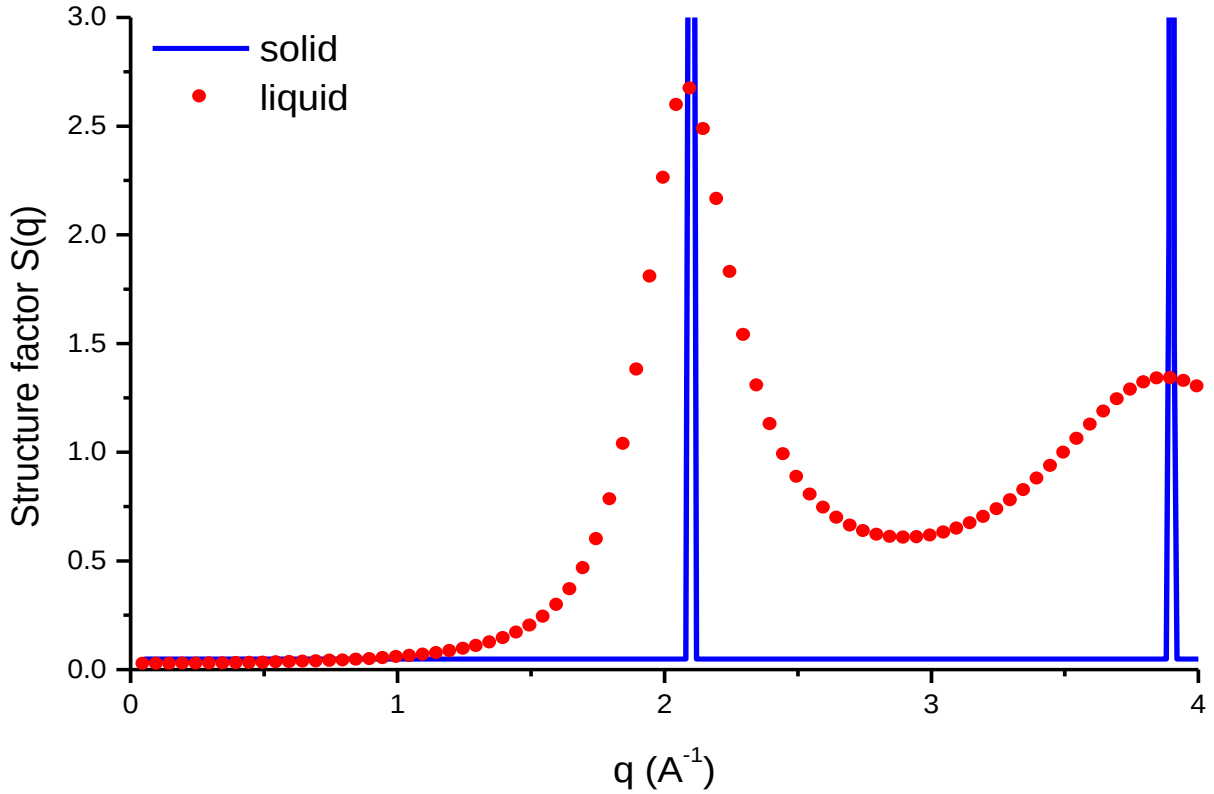
Sur quoi se base la théorie des métaux désordonnés?

$$\rho(E) = \frac{3\pi m^2}{4e^2\hbar^3}\frac{\Omega}{k^6}\int_0^{2k} a(q)t^2(q,E)q^3dq$$

facteur de structure: caractérise la position relative des atomes.

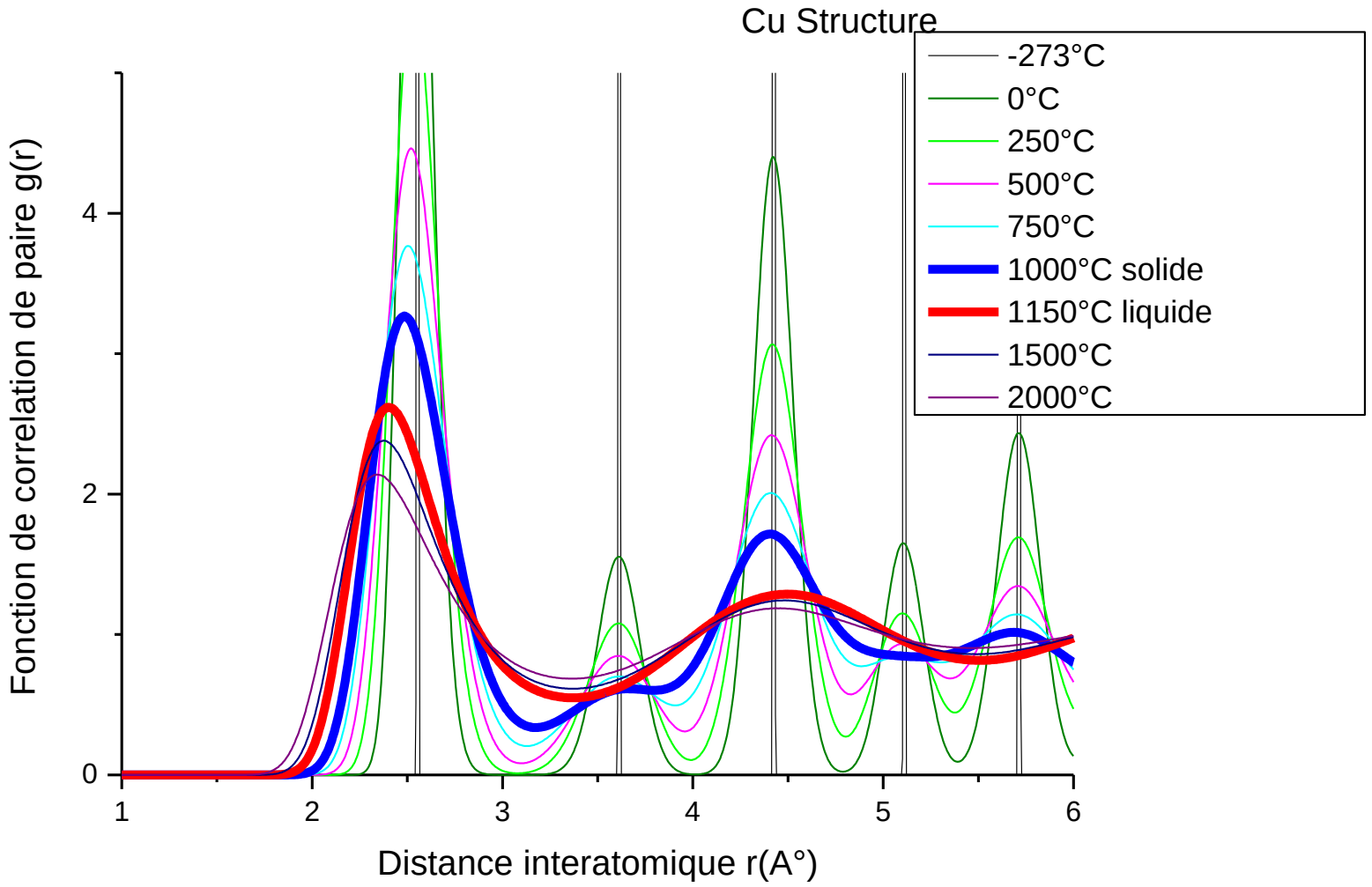
carré de la matrice diffusion: caractérise la diffusion d'un électron par un atome

Peut on conclure quelque chose pour les solides métalliques « réels »? (monocristaux, poly-cristaux, quasi-cristaux avec des défauts, à température élevée). Les théoriciens pensent que le formalisme de Ziman ne s'applique pas aux solides car le facteur de structure présente des pics de Bragg très intenses et étroits. L'énergie de Fermi a peu de chance de se trouver dans un pic de Bragg.

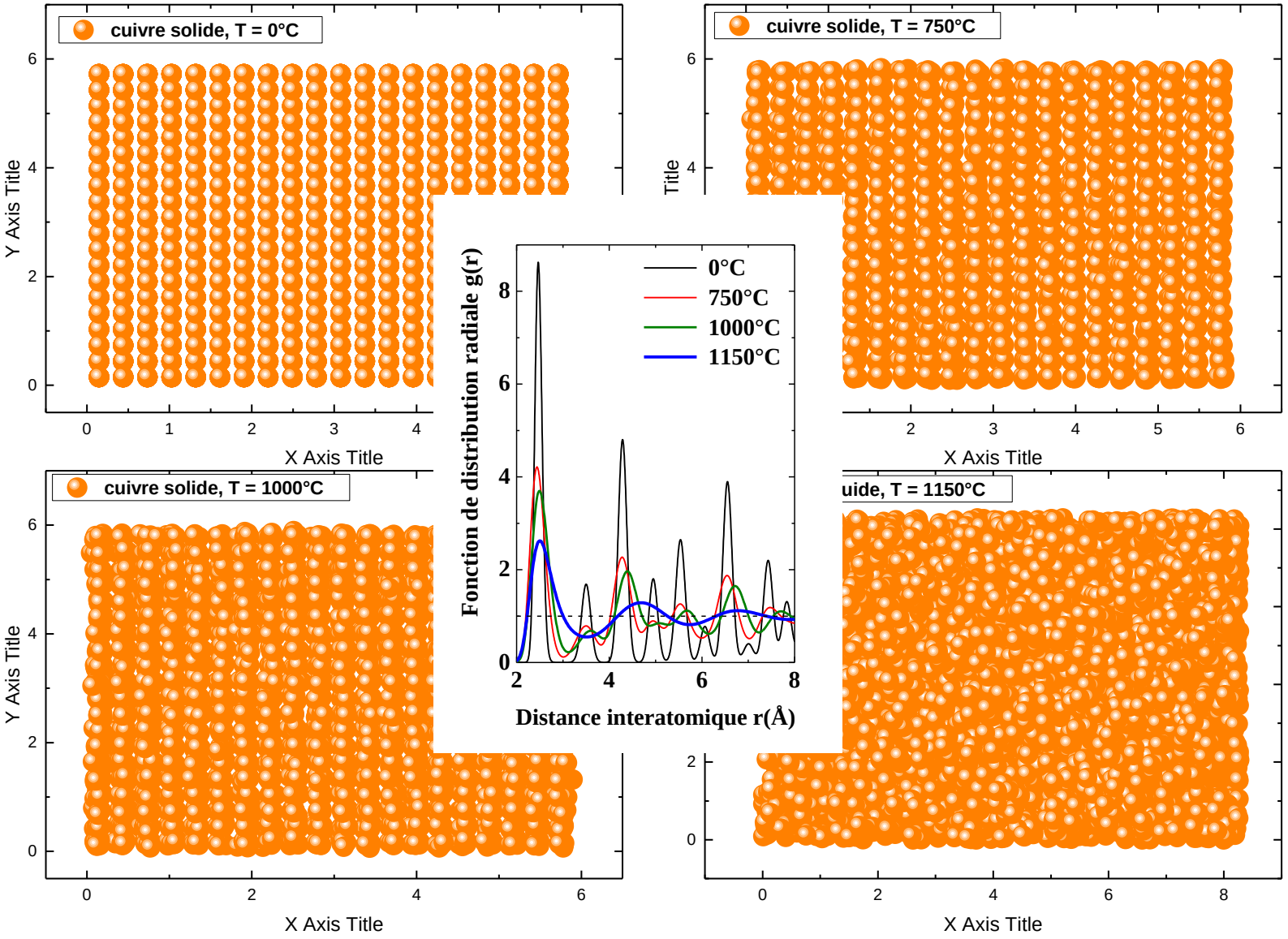


La description ci dessus du facteur de structure du solide est elle bien correcte?

NON A HAUTE TEMPERATURE SI ON EN CROIT NOS CALCULS MAIS OUI A TRES BASSE TEMPERATURE

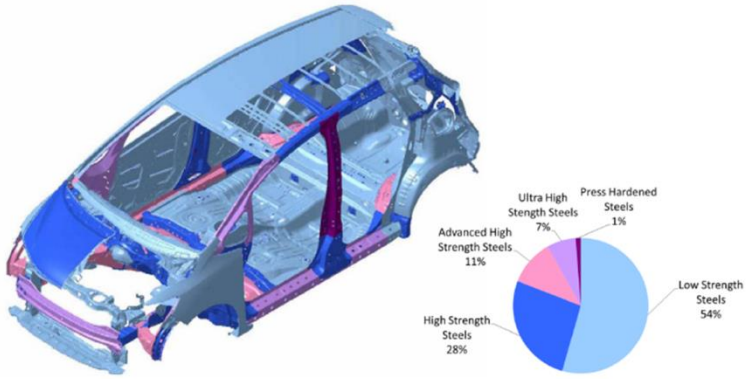


A BASSE TEMPERATURE LA RESISTIVITE DES METAUX EST BEAUCOUP PLUS FAIBLE QU'A HAUTE TEMPERATURE

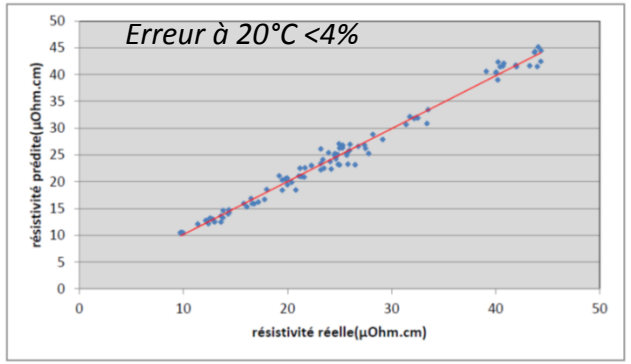

cuivre solide, T = 0°C
cuivre solide, T = 750°C
cuivre solide, T = 1000°C
uide, T = 1150°C
Y Axis Title
X Axis Title
Title
Fonction de distribution radiale g(r)
Distance interatomique r(Å)
0°C
750°C
1000°C
1150°C

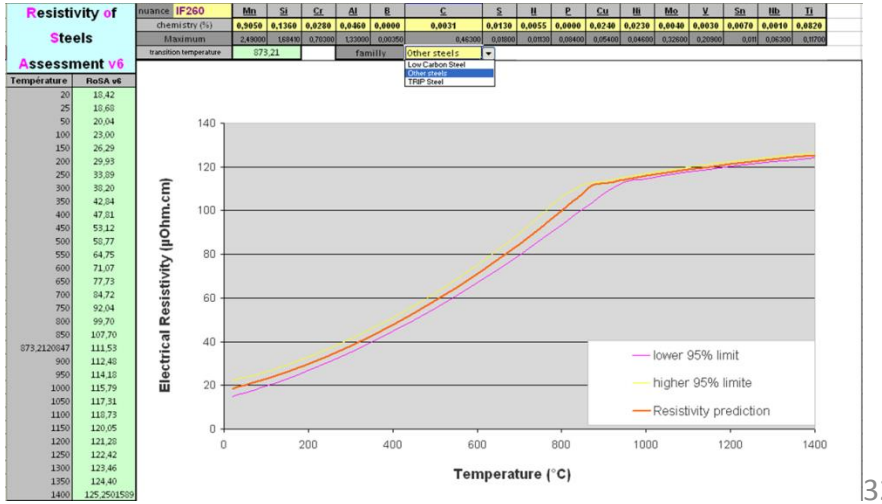
Utilité des mesures de résistivité pour la SNS

- Contexte de l'industrie automobile
  - Grande variété de nuances
  - Difficile de tout mesurer !



- En attendant les modèles théoriques…
  - Modèle empirique RoSA = Resistivity of Steels Assessment
    - Régression linéaire sur la chimie
    - + effet température

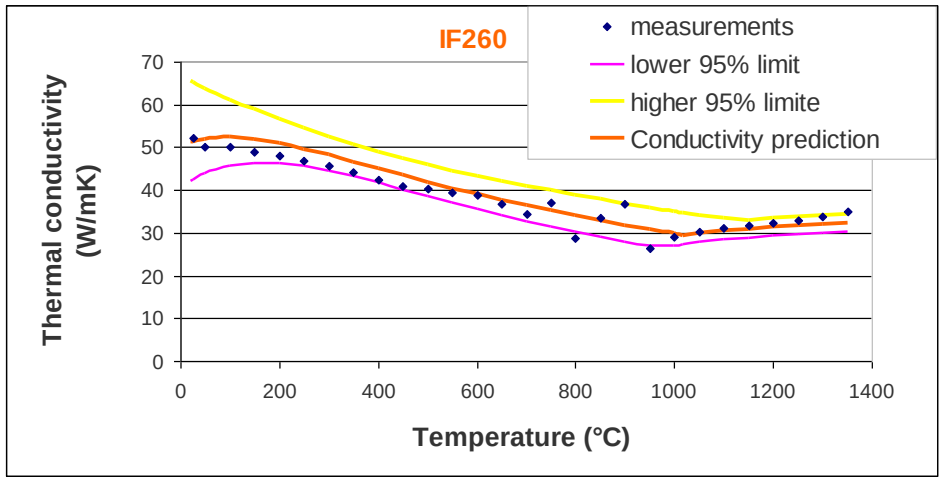


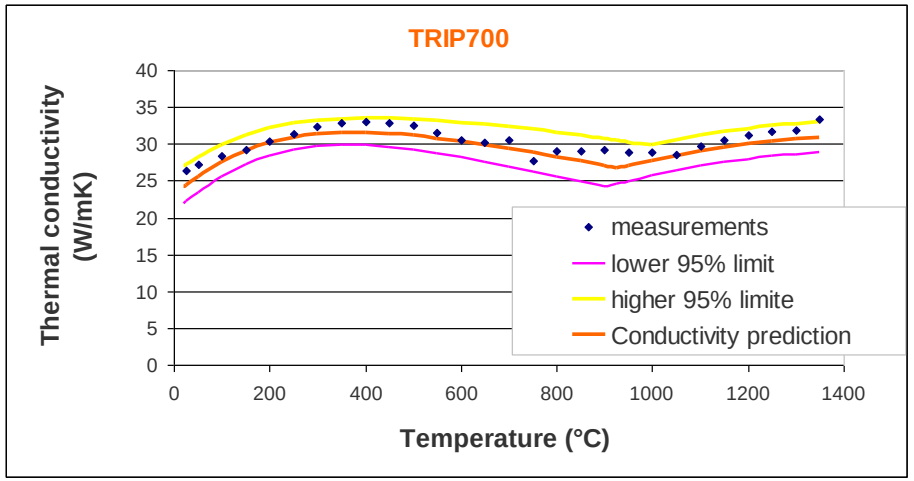


Pour la conductivité thermique

- Modèle CoSA = Conductivity of Steels Assessment
  - Déduction de RoSA par la loi de Wiedemann Franz adaptée (coefficient théorique 2.44 10^{-8} WΩ/K²)

$$thermal_conductivity = 3.243 \frac{Temperature(K)}{electrical_resistivity}$$

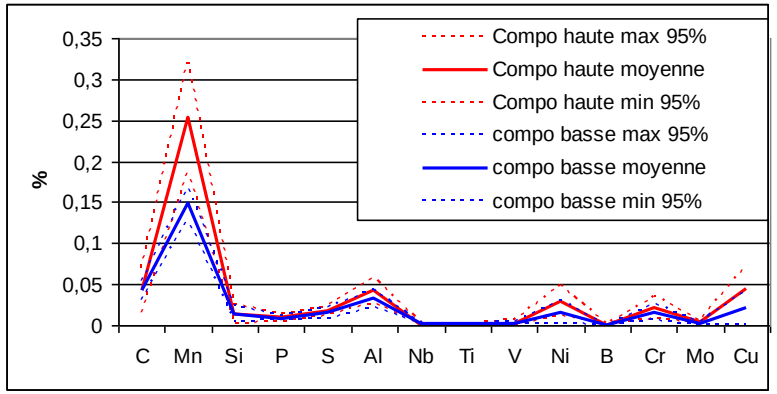




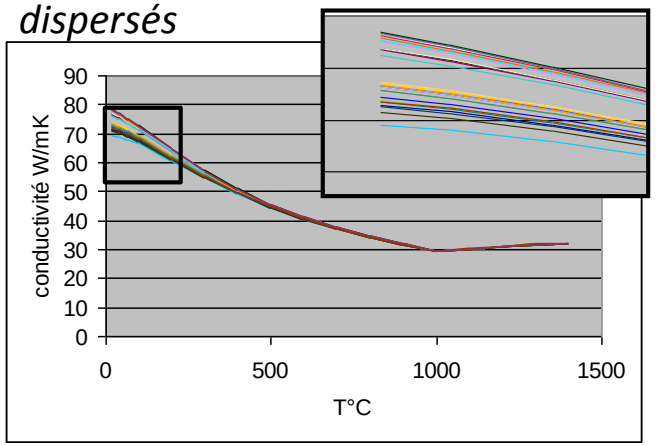
Exemple d'application

- Dispersion de chimie acier => conséquences ?

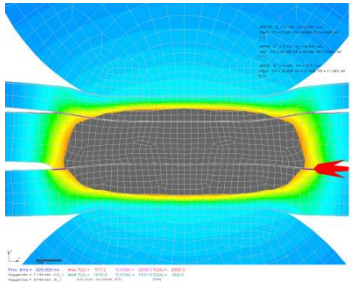
Statistiques sur 2 usines



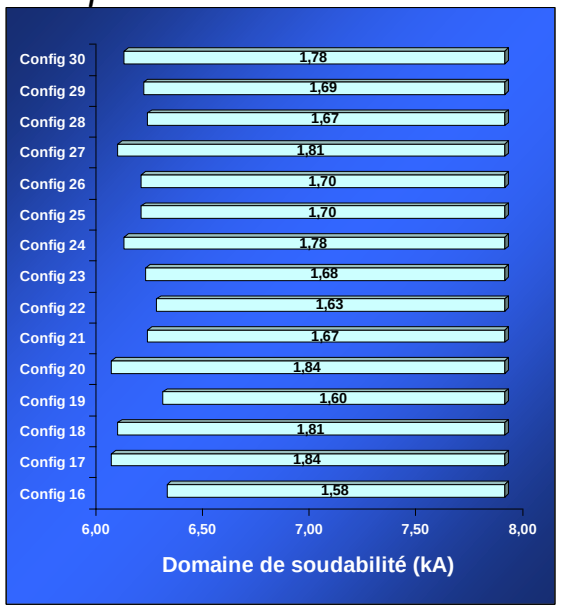
Génération d'échantillons virtuels dispersés



Calculs SNS



Dispersion de soudabilité



Merci de votre attention

Post scriptum: M. Mouas est en recherche d'un post doc./emploi.