

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

COMME EXIGENCE PARTIELLE
À L'OBTENTION DE LA
MAITRISE EN GÉNIE MÉCANIQUE

PAR
Mamiandrianina ANDRIAMISANDRATRA

ANALYSE NUMÉRIQUE DE LA MICROPLASTICITÉ AUX JOINTS DE GRAINS
DANS LES POLYCRISTAUX MÉTALLIQUES CFC

MONTREAL, LE 15 FÉVRIER 2013

©Tous droits réservés, Mamiandrianina Andriamisandratra, 2013

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Philippe Bocher, directeur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Florent Bridier, codirecteur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Remi Dingreville, codirecteur de mémoire
Sandia National Laboratories, Albuquerque, Nouveau-Mexique, États-Unis

M. Mohammad Jahazi, président du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Tan Pham, membre du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 30 JANVIER 2013

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord mon directeur de recherche, M. Philippe Bocher, professeur à l'ÉTS pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser ce projet de maîtrise au sein de son groupe de recherche, pour sa facile compréhension, et pour m'avoir soutenu tout au long de ces trois enrichissantes années.

J'adresse un remerciement aux membres du jury pour avoir accepté d'évaluer ce mémoire : M. Mohammad Jahazi que j'ai également eu en cours de Mise en forme et Usinage, et Tan Pham pour son intérêt pour le domaine de la micromécanique.

Je suis ensuite extrêmement reconnaissant envers mon premier co-directeur, M. Florent Bridier, chercheur à l'ÉTS. D'une part pour sa grande implication dans ce projet et d'autre part pour le partage d'une réelle passion du métier, Florent a grandement contribué à la réussite du projet de par ses multiples conseils. Je remercie également mon second co-directeur, M. Remi Dingreville pour son encadrement lors de mon séjour au « Department of Mechanical and Aerospace » au NYU-Poly, pour sa disponibilité ainsi que son suivi, malgré la distance.

Un grand merci également à tous les (ex)membres et amis du LOPFA, Meysam pour le soutien mutuel, Christophe pour son humour, sans oublier Jean-Charles qui a été d'une aide précieuse en cristallographie et en belotte. Également merci à Nicolas, Benjamin, Johan, Vincent, Mélissa, Nora, Johann, Majid, Nelly, Mohsen pour les agréables moments passés au travail mais également pour les petites retrouvailles hors du campus.

J'en profite également pour remercier mes amis de Montréal et de Poitiers pour leur présence tout au long de mes études et auxquels je souhaite également beaucoup de réussites.

VI

Enfin, je tiens à remercier profondément et énormément ma famille : ma sœur pour son soutien sans faille, et mes parents pour les encouragements et leur réconfort à tout moment. Enfin, une pensée pour ma grand-mère qui doit toujours attendre mon mariage !

ANALYSE NUMÉRIQUE DE LA MICROPLASTICITÉ AUX JOINTS DE GRAINS DANS LES POLYCRISTAUX MÉTALLIQUES CFC

Mamiandrianina ANDRIAMISANDRATRA

RÉSUMÉ

La rupture par fatigue concerne aujourd'hui encore beaucoup de pièces métalliques soumises en service à un chargement répétitif. À l'échelle de la microstructure, les joints de grains sont connus pour jouer un rôle important dans la tenue en fatigue du matériau grâce au durcissement qu'ils confèrent. Cependant les joints de grains eux-mêmes ou la zone à leur proximité ont souvent été identifiés comme lieux d'amorçage de fissures de fatigue, particulièrement dans le cas des métaux cubiques à faces centrées (CFC). Dans le but de caractériser le comportement micromécanique à proximité de différents types de joint de grain, le comportement à l'interface en traction monotone uniaxiale a été modélisé par la méthode des éléments finis et une loi de plasticité cristalline a été utilisée. De plus, quelques configurations cristallographiques bicristallines ont alors été simulées et leur comportement a été analysé sous un chargement de traction axiale monotone. Le cadre de validité de la modélisation a été restreint à celui des petites déformations ($< 5\%$).

Quatre critères importants dictant le comportement mécanique cristallin ont été identifiés. Il s'agit de la rigidité élastique, du facteur de Schmid des deux systèmes de glissement les plus favorables, et enfin du ratio entre ces deux plus forts facteurs de Schmid traduisant la propension au glissement simple ou multiple. Des simulations de traction sur des monocristaux ont ainsi permis de comprendre l'influence propre de chaque critère sur le comportement macroscopique (contraintes et déformations) et microscopique (glissements cristallins). Les calculs bicristallins ont ensuite mis en évidence l'activation particulière de certains systèmes de glissement a priori non favorables au niveau du joint de grain. Ce phénomène a été associé avec la nécessité d'assurer la compatibilité mécanique de déformation de part et d'autre de l'interface. Le profil de la déformation dans le sens longitudinal de l'éprouvette a montré une baisse systématique de déformation au niveau du joint et dont l'intensité augmente avec la désorientation angulaire entre les deux grains. L'hétérogénéité de la déformation en chaque section de l'éprouvette est quant à elle surtout liée au caractère fortement anisotrope de la plasticité et s'avère plus prononcée lorsque le mode de déformation est assuré par un glissement simple. Enfin, un cas bicristallin qui présentait une compatibilité microscopique des traces de glissement dans le plan du joint de grain a été étudié. Cependant, aucune corrélation avec le profil de glissement n'a été relevée, une cause macroscopique étant plus vraisemblablement à l'origine du profil observé.

Mots-clés : joints de grains, localisation, plasticité cristalline, éléments finis, bicristal.

NUMERICAL ANALYSIS OF MICROPLASTICITY OF GRAIN BOURDARIES IN FCC MATERIALS

Mamiandrianina ANDRIAMISANDRATRA

ABSTRACT

Fatigue failure is dominated by local mechanisms: strain localization, crack initiation and propagation. Grain boundaries are known for their role in strengthening polycrystalline materials but many fracture investigations revealed that fatigue crack initiation frequently occurred from or near grain boundaries, especially in the case of face centered cubic (FCC) materials. In order to characterize an interface behavior and its orientation dependency, a crystal plasticity model was implemented using the finite element method and the behavior of few FCC bicrystalline configurations have been investigated under monotonic loading.

Four criterions have been identified as governing crystal plasticity: the anisotropic elastic modulus, the primary and the secondary system Schmid factors and finally the ratio between the two latter. First, simple monotonic tension simulations of well-defined orientations have permitted to show the effect of each criterion on the single crystal mechanical behavior, in terms of stress-strain curves, progressive slip system activation (plastic hardening), and local crystal rotation. Then, bicrystalline simulations were run and their analysis highlighted a specific elasto-plastic behavior nearby grain boundaries. Particularly, the activation of non-favored slip systems was noted and is associated with the need of mechanical compatibility across the interface structure. Axial stress and strain profiles have also shown systematic stress maxima near (but not at) the interface and strain minima at the grain boundary. Moreover, the more the strain dropped at the interface, the higher the misorientation between the two crystals increased.

Finally, a particular case where slip trace in grain boundary plan were compatible was investigated in terms of local strain, local stress profiles and slip system activation history. No correlation could be found between the compatibility condition and the mechanical field magnitude. Instead the deformation profile showed the same systematic drop when approaching the grain boundary. Macro-mechanical features such as global rotation, anisotropy and misorientation seemed to be the cause of that drop profile.

Keywords: grain boundaries, localization, crystal plasticity, finite element, bicrystal.

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LA LITTÉRATURE	5
1.1 Présentation du matériau d'étude.....	5
1.1.1 Domaine d'applicabilité des polycristaux métalliques CFC.....	5
1.1.2 Choix du cuivre OFHC polycristallin – 99,99 %.....	5
1.2 Plasticité d'un monocristal.....	6
1.2.1 Mécanismes d'accommodation.....	6
1.2.2 Définition des systèmes cristallins.....	7
1.2.3 Effets de l'orientation cristallographique : critères d'anisotropie élasto-plastique	8
1.2.3.1 Le module élastique anisotrope	8
1.2.3.2 Le facteur de Schmid	9
1.2.3.3 Le glissement simple, double, multiple	10
1.2.4 Comportement monotone d'un monocristal	10
1.2.5 Comportement cyclique d'un monocristal.....	13
1.2.6 Différentiation entre matériaux de même structure CFC : énergie de faute d'empilement.....	15
1.3 Plasticité d'un polycristal.....	16
1.3.1 De la déformation du monocristal à celle du polycristal	16
1.3.1.1 Hétérogénéités de la déformation aux joints de grains	18
1.3.1.2 Impacts sur la modélisation numérique	19
1.3.2 Comportement des interfaces cristallines	19
1.3.2.1 Considération en mécanique continue	19
1.3.2.2 Conditions de compatibilité	20
1.3.3 Aspects physiques d'un joint de grain	21
1.3.3.1 Classification par famille des joints.....	21
1.3.3.2 Comportement d'un joint de grain face aux dislocations incidentes	22
1.3.4 Synthèse : vers une étude quantitative des effets locaux et longues- distances des interfaces cristallines dans les joints quelconques	24
CHAPITRE 2 MODÉLISATION NUMÉRIQUE DU COMPORTEMENT PAR LA PLASTICITÉ CRISTALLINE	27
2.1 Description du problème à modéliser et équations constitutives de l'écou- lement plastique à l'échelle du cristal	27
2.2 Plasticité cristalline	27
2.2.1 Cinématique de la plasticité cristalline	27
2.2.2 Loi d'écoulement et cinétique de durcissement.....	29
2.2.3 Premières limitations des équations constitutives.....	31
2.3 Valeurs numériques des paramètres pour le cuivre OFHC.....	32

2.3.1	Influence des paramètres sur le comportement simulé	34
2.3.2	Influence de la vitesse de déformation sur le comportement simulé	38
2.4	Implémentation numérique	39
2.4.1	Géométrie et maillage EF	39
2.4.2	Conditions aux limites et conditions de chargement	41
2.4.3	Résolution implicite/explicite	42
2.4.4	Contrôle de la stabilité numérique	43
CHAPITRE 3	ÉTUDE QUANTITATIVE DE L'ANISOTROPIE DU COMPOURTEMENT ÉLASTO-PLASTIQUE EN FONCTION DE L'ORIENTATION CRISTALLOGRAPHIQUE	47
3.1	Objectifs	47
3.2	Orientations cristallographiques et représentations en figure de pôles	47
3.2.1	Des angles d'Euler aux pôles de projection stéréographique	47
3.2.2	Représentation en figure de pôles des critères d'anisotropie élastique et plastique	50
3.2.3	Sélection d'orientations monocristallines et regroupement des orientations selon chaque critère	52
3.3	Comparaison du comportement de quelques monocristaux avec des données expérimentales issues de la littérature	54
3.3.1	Conditions de simulation et pôles comparés	54
3.3.2	Confrontation des courbes de comportement en traction et discussions	55
3.4	Analyse du comportement sur l'ensemble des monocristaux	57
3.4.1	Champs mécaniques d'intérêt	57
3.4.2	Comportement mécanique en traction uniaxiale	58
3.4.2.1	Effets du module élastique	58
3.4.2.2	Effets du module élastique combiné au facteur de Schmid	60
3.4.2.3	Effet du rapport des facteurs de Schmid primaire et secondaire $R_\mu = \mu_2/\mu_1$	61
3.4.3	Hétérogénéité de comportement le long du monocristal sollicité en traction	63
3.5	Rotations cristalline de la maille selon l'orientation cristallographique	66
3.5.1	Représentation des pôles issus de la simulation	66
3.5.2	Validité de l'approche en contrainte uniforme	69
CHAPITRE 4	INFLUENCES DES INTERFACES CRISTALLINES SUR LE COMPORTEMENT EN PROXIMITÉ ET LOIN DU JOINT DE GRAIN	71
4.1	Objectif	71
4.2	Effet de l'anisotropie élastique sur le comportement mécanique à l'interface	71
4.2.1	Choix des couples d'orientation cristalline	72
4.2.2	Représentativité des couples d'orientation choisis	74
4.2.3	Comportement en traction monotone en présence d'un joint de grain	74

4.2.3.1	Contraintes et déformation macroscopique	76
4.2.3.2	Contraintes et déformation locale	77
4.2.4	Comportement cinématique (γ - ϵ)	81
4.2.5	Représentation du profil des glissements aux différents stades de déformation	86
4.2.5.1	Profil des glissements le long du bicristal 21-28	87
4.2.5.2	Profil des glissements le long du bicristal 19-17	91
4.2.6	Déformations et contraintes induites	93
4.2.6.1	Déformations associées à l'état de glissement local	93
4.2.6.2	État des contraintes induites	99
4.2.6.3	Définition d'une zone du joint mécaniquement affectée	103
4.2.7	Rotations locales	104
4.3	Effets des compatibilités microscopiques sur le comportement d'une interface cristalline	106
4.3.1	Définition des compatibilités microscopiques	106
4.3.1.1	Comportement cinématique local des joints « twistés » : $\theta_{T1} = +45^\circ$ et $\theta_{T2} = +90^\circ$	108
4.3.1.2	Profil de la déformation dans les bicristaux « twistés »	112
4.3.1.3	Considération de l'effet poisson plastique	113
4.3.1.4	Profils des contraintes dans les bicristaux « twistés »	115
4.3.2	Effets d'une compatibilité des traces de glissement ($\theta = 0^\circ$)	117
4.3.2.1	Comportement cinématique et profil des glissements	117
4.3.2.2	Profil de la déformation et des contraintes	120
4.3.3	Rotations locales	122
4.3.4	Conclusion	123
CONCLUSION		125
ANNEXE I	CALCUL DU FACTEUR DE SCHMID DANS UN CFC	127
ANNEXE II	ANGLES D'EULER ET MATRICE DE ROTATION	129
ANNEXE III	LISTE DES ANGLES D'EULER ET COORDONNÉES CARTÉSIENNES DANS LE TRIANGLE STANDARD	133
BIBLIOGRAPHIE		135

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 1.1	Notations abrégées pour les systèmes de glissement du CFC (Bassani, Wu et Campbell, 1991)7
Tableau 1.2	EFE de quelques matériaux (Meyer et Chawla, 1999; Siegel, 2005)15
Tableau 2.1	Propriétés élastiques du cuivre pur monocristallin (Bassani, Wu et Campbell, 1991).....33
Tableau 2.2	Récapitulatif de la loi d'écoulement et valeurs numériques des paramètres (Zaafarani <i>et al.</i> , 2006)34
Tableau 2.3	Récapitulatif de la loi de durcissement et valeurs numériques des paramètres (Zaafarani <i>et al.</i> , 2006)34
Tableau 2.4	Gain de temps obtenu par mise à échelle de la masse (<i>mass scaling</i>)44
Tableau 2.5	Gain de temps obtenu par une augmentation de la vitesse de déformation44
Tableau 3.1	Domaine des angles d'Euler dans le triangle standard [001][011][111]50
Tableau 3.2	Récapitulatif des variables internes étudiées58
Tableau 4.1	Table récapitulative des propriétés des bicristaux 21-28 et 19-1774
Tableau 4.2	Table récapitulatif des types de système de glissement du bicristal 21-2882
Tableau 4.3	Étapes d'intérêt et correspondance en déformation pour le bicristal 21-2884
Tableau 4.4	Table récapitulatif des types de système de glissement du bicristal 19-1785
Tableau 4.5	Étapes d'intérêt et correspondance en déformation pour le bicristal 19-1786
Tableau 4.6	Taille des zones mécaniquement affectées dans les deux bicristaux103
Tableau 4.7	Table récapitulatif des trois bicristaux « twist » et de leurs propriétés cristallographiques108

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1	Maille cristalline CFC, avec 3 des 12 systèmes représentés : (111) [110] abrégé A2, (111) [101] abrégé A3, et (111) [011] abrégé A67
Figure 1.2	Représentation de l'amplitude du module élastique d'un CFC (ici, du nickel pur) dans toutes les directions de l'espace9
Figure 1.3	Courbes d'écrouissage de monocristaux de cuivre OFHC de différentes orientations cristallines, adaptée de (Bassani, Wu et Campbell, 1991).....11
Figure 1.4	Comportement monotone typique en trois statdes pour un monocristal CFC, adaptée de (Bassani, Wu et Campbell, 1991).....12
Figure 1.5	Courbes de comportement cyclique (CSSC, <i>cyclic stress strain curve</i>) d'un monocristal CFC ayant pour facteur de Schmid $\mu = 0,5$, adaptée de (Mughrabi, 1992)14
Figure 1.6	a) Comportement monotone du polycristal CFC de cuivre (P) et d'un monocristal $\langle 110 \rangle$ (SG); b) CSSC du cuivre polycristallin et monocristallin moyen, adaptée de (Franciosi et Zaoui, 1982) et de (Peralta, 1996) respectivement.....17
Figure 1.7	Développement des hétérogénéités de la déformations dans les joints de grains pour un CFC cuivre : sous chargement de 50 MPa (gauche), la même zone est ensuite montrée sous chargement de 150 MPa (droite), les flèches indiquent la présence de régions intragranulaires fortement déformées (Lopfa ÉTS, 2012).....18
Figure 1.8	Paramètres définissant un joint de grain général (Peralta, 1996).....20
Figure 1.9	Fraction linéique des désorientations dans un CFC polycristallin d'or avec 420 grains – une distribution parfaite en ligne discon- tinue (Owusu-Boahen et King, 2000)22
Figure 1.10	Empilement des dislocations près d'un joint de grain, adaptée de (Soer, 2006).....23
Figure 1.11	Schématisation des possibilités d'interaction interface/glisement : a) Transmission d'une dislocation par changement de plan; b) Transmission d'une dislocation avec naissance d'une dislo- cation résiduelle; c) Absorption complète d'une dislocation

	(typique des joints incompatibles); d) Relaxation du joint de grain par création de dislocations, éventuellement suivie de l'émission d'une nouvelle dislocation, adaptée de (Soer, 2006)	23
Figure 2.1	Schéma reconstituant l'intégration de la plasticité cristalline dans un cadre de résolution numérique par la méthode EF, adaptée de (Dingreville, 2010).....	29
Figure 2.2	Vérification de concordance avec les données de Zaafarani sur un cristal d'orientation [111] (Zaafarani <i>et al.</i> , 2006)	33
Figure 2.3	Courbes des contraintes axiales (MPa) vs. déformations axiales normalisées ($\epsilon_{33}/\epsilon_{33 \text{ MAX}}$) pour différentes valeurs de paramètres numériques de la loi d'écoulement : a) Taux de cisaillement de référence γ_0 ; b) Coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation m	35
Figure 2.4	Courbes des contraintes axiales (MPa) vs. déformations axiales normalisées pour différentes valeurs de paramètres numériques de la loi d'écoulement : a) Scission critique résolue initiale κ_0 ; b) Taux initiale de durcissement h_0 ou θ_0 ; c) Contrainte de saturation du premier système de glissement τ_{S0} ; d) Durcissement initial τ_{Si} ; e) Vitesse de référence de glissement γ_{S0} ; f) Coefficient de sensibilité à la vitesse de glissement m'	37
Figure 2.5	Contrainte axiale σ_{33} (MPa) en fin de chargement en fonction de la vitesse de déformation. Bleu : $m = 0,05$ ex. titane (Marin, 2006); Rouge : $m = 0,010$ ex. cuivre; Courbes obtenues à partir d'un modèle cubique à 1 élément pour un chargement d'axe [001]	38
Figure 2.6	a) Maillage à 512 éléments utilisé pour les calculs monocristallins; b) maillage à 4320 éléments utilisé pour les calculs bicristallins – axe de chargement z	40
Figure 3.1	Axes principaux du cristal ($e1C, e2C, e3C$) et axes principaux de l'échantillon (X, Y, Z)	48
Figure 3.2	Repérage de l'axe macroscopique Z dans la base cristalline et pôle inverse de projection stéréographique associé.....	49
Figure 3.3	Figure de pôles inverse et représentation de l'axe Z dans le triangle standard [001][011][111]	49
Figure 3.4	Représentation (selon Z) des lignes à critère d'anisotropie constant dans l'espace du triangle standard [001][011][111]. De gauche à droite et de haut en bas : le module élastique (module d'Young),	

	le facteur de Schmid primaire μ_1 , le facteur de Schmid secondaire μ_2 , et le ratio des deux principaux facteurs de Schmid $R\mu = \mu_2 / \mu_1$	51
Figure 3.5	Représentation en figure de pôles inverse [001][011][111] selon Z de l'ensemble des orientations cristallines en fonction des différents critères d'anisotropie. De gauche à droite et de haut en bas : le module élastique (module d'Young), le facteur de Schmid primaire μ_1 , le facteur de Schmid secondaire μ_2 et enfin le ratio des deux principaux facteurs de Schmid $R\mu = \mu_2 / \mu_1$	53
Figure 3.6	Représentation en figure de pôles inverse [001][011][111] des orientations comparées avec l'article de Cuitinio et Ortiz	54
Figure 3.7	Courbes simulées et courbes expérimentales obtenues par Cuitinio et Ortiz	56
Figure 3.8	Courbes simulées et courbes expérimentales obtenues par Cuitinio et Ortiz (suite).....	57
Figure 3.9	Comportements monocristallins à la transition élastique-plastique et application du code couleur associé aux iso-E.....	59
Figure 3.10	Comportements monocristallins à la transition élastique-plastique et application du code couleur iso- μ_1	61
Figure 3.11	Application du code couleur associé aux iso- R_μ aux courbes des taux de glissement primaire	62
Figure 3.12	Profil de la déformation et de sa variance en glissement unique, exemple du cristal 17 ($\mu_1 = 0,454$).....	65
Figure 3.13	Profil de la déformation et de sa variance en glissement multiple, exemple du cristal 13 ($\mu_1 = 0,454$).....	65
Figure 3.14	Profil des désorientations représenté en code iso- R_μ	67
Figure 3.15	Évolution de l'orientation cristalline des 22 monocristaux, à cœur. Points vides : avant le test de traction; points pleins : après le test de traction.....	68
Figure 3.16	Convergence des orientations vers les pôles [101] en déformation par glissement simple, adaptée de (Stinville, 2006)	69
Figure 4.1	Représentation en figure de pôles inverse du bicristal 21-28 – FPI [001][011][111].....	73

Figure 4.2	Représentation en figure de pôles inverse du bicristal 19-17 – FPI [001][011][111].....	73
Figure 4.3	Groupes d'éléments représentant les 4 zones A, B, C et D pour l'étude du comportement mécanique et cinématique local des bicristaux.....	75
Figure 4.4	Courbes des contraintes axiales (S_{33} sur la légende)/déformation macroscopique dans les zones A, B, C et D du bicristal 21-28	76
Figure 4.5	Courbes des contraintes axiales (S_{33} sur la légende)/déformation macroscopique dans les zones A, B, C et D du bicristal 19-17	77
Figure 4.6	Comportement ($\sigma - \varepsilon$) des monocristaux 21 et 28, et comportement ($\sigma - \varepsilon$ local) dans le bicristal 21-28 à cœur de chaque cristal (zones A et D, respectivement)	79
Figure 4.7	Comportement ($\sigma - \varepsilon$) des monocristaux 21 et 28, et comportement ($\sigma - \varepsilon$ local) dans le bicristal 21-28 au joint de chaque cristal (zones B et C, respectivement).....	79
Figure 4.8	Comportement ($\sigma - \varepsilon$) des monocristaux 19 et 17, et comportement ($\sigma - \varepsilon$ local) dans le bicristal 19-17 au cœur de chaque cristal (zones A et D, respectivement)	80
Figure 4.9	Comportement ($\sigma - \varepsilon$) des monocristaux 19 et 17, et comportement ($\sigma - \varepsilon$ local) dans le bicristal 19-17 au joint de chaque cristal (zones B et C, respectivement).....	81
Figure 4.10	Amplitude du taux de glissement γ_{D4} (comportement cinématique) sur le système primaire D4 dans les 4 zones A, B, C et D du bicristal 21-28	83
Figure 4.11	Amplitude du taux de glissement γ_{D4} (comportement cinématique) sur le système primaire D4primaire dans les 4 zones A, B, C et D du bicristal 19-17	85
Figure 4.12	Systèmes de glissements impliqués au stade $\varepsilon_1 = 0,018 \%$ dans le bicristal 21-28	88
Figure 4.13	Systèmes de glissements impliqués au stade $\varepsilon_2 = 0,020 \%$ dans le bicristal 21-28	88
Figure 4.14	Systèmes de glissements impliqués au stade $\varepsilon_3 = 0,022 \%$ dans le bicristal 21-28	89

Figure 4.15	Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ (plasticité généralisée) dans le bicristal 21-28	89
Figure 4.16	Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_1 = 0,012 \%$ dans le bicristal 19-17	91
Figure 4.17	Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ dans le bicristal 19-17	92
Figure 4.18	Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_1 = 0,018 \%$ dans le bicristal 21-28	95
Figure 4.19	Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_2 = 0,020 \%$ dans le bicristal 21-28	95
Figure 4.20	Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_3 = 0,022 \%$ dans le bicristal 21-28	96
Figure 4.21	Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ dans le bicristal 21-28	96
Figure 4.22	Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_1 = 0,012 \%$ dans le bicristal 19-17	98
Figure 4.23	Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ dans le bicristal 19-17	98
Figure 4.24	Profil de la contrainte axiale et sa variance au stade ϵ_1 le long du bicristal 21-28 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire CRSS / μ_1	100
Figure 4.25	Profil de la contrainte axiale et sa variance au stade ϵ_4 le long du bicristal 21-28 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire CRSS / μ_1	100
Figure 4.26	a) Profil de la contrainte axiale et variance à différentes distances du joint de grain au stade ϵ_1 dans le bicristal 19-17 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire CRSS / μ_1 ; b) Représentation après refocalisation de l'axe des ordonnées.....	102

Figure 4.27	Profil de la contrainte axiale et variance à différentes distances du joint de grain au stade ϵ_4 dans le bicristal 19-17 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire CRSS / μ_1103
Figure 4.28	Profil du niveau de désorientation dans le bicristal 21-28105
Figure 4.29	Profil du niveau de désorientation dans le bicristal 19-17105
Figure 4.30	Repérage des angles et des vecteurs permettant de quantifier une compatibilité microscopique, adaptée de (Roters <i>et al.</i> , 2010)107
Figure 4.31	Comportement du glissement primaire aux zones A, B, C et D dans le 17-17A109
Figure 4.32	Comportement du glissement primaire aux zones A, B, C et D dans le 17-17B109
Figure 4.33	Profils et types de glissement dans le bicristal 17-17A ($\theta_{T1} = +45^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....111
Figure 4.34	Profils et types de glissements dans le bicristal 17-17B ($\theta_{T2} = +90^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....111
Figure 4.35	Profil de la déformation axiale dans le bicristal 17-17A ($\theta_{T1} = +45^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....112
Figure 4.36	Profil de la déformation axiale dans le bicristal 17-17B ($\theta_{T2} = +90^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....113
Figure 4.37	Déformations transversales (LE11 et LE22 sur la légende) pour la quantification de l'effet poisson dû à une rotation « twist » de $+45^\circ$ (bicristal 17-17A).....114
Figure 4.38	Déformations transversales (LE11 et LE22 sur la légende) pour la quantification de l'effet poisson dû à une rotation « twist » de $+90^\circ$ (bicristal 17-17B).....115
Figure 4.39	Profil de la contrainte axiale dans le bicristal 17-17A ($\theta_{T1} = +45^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....116
Figure 4.40	Profil de la contrainte axiale dans le bicristal 17-17B ($\theta_{T2} = +90^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....117
Figure 4.41	Comportement cinématique du glissement primaire D4 dans le bicristal 19C-17 avec compatibilité de la trace de glissement.....118

Figure 4.42	Profils et types de glissements dans le bicristal 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée, à noter que C5 et D1 sont superposés	118
Figure 4.43	Profils du taux de cisaillement sur le système primaire (γ_{D4}) dans les bicristaux 19-17 et 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée ($\epsilon_{33} = 0,05\%$)	120
Figure 4.44	Profil de la déformation axiale dans le bicristal 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée ($\epsilon_{33} = 0,05\%$)	121
Figure 4.45	Profil de la contrainte axiale dans le bicristal 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée.....	122
Figure 4.46	Profil de la désorientation locale dans le bicristal 19C-17	123

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

CFC	Cubique à faces centrées
PC	Plasticité cristalline
CRSS	Critical resolved shear stress, terminologie anglo-saxonne de la contrainte de cisaillement critique résolue
CSSC	Cyclic stress strain curve, terminologie anglo-saxonne de la courbe de comportement cyclique
EBSD	Electron backscatter diffraction, terminologie anglo-saxonne pour diffraction des électrons rétrodiffusés
EFE	Énergie de faute d'empilement
FIP	Figure de pôles inverses en référence aux projections stéréographiques
FP	Figure de pôles en référence aux projections stéréographiques
GND	Geometrically necessary dislocations, terminologie anglo-saxonne pour dislocations géométriquement nécessaires
MEB	Microscope électronique à balayage
MEF	Méthode des éléments finis
OFHC	Oxygen free high conductivity, désignant le cuivre pur 99,99 % à l'état de livraison
RSS	Resolved shear stress, terminologie anglo-saxonne de la contrainte de cisaillement résolue
ZAM	Zone (du joint de grain) affectée mécaniquement

INTRODUCTION

L'endommagement par fatigue est un mode de ruine des pièces métalliques structurelles aujourd'hui encore rencontré en dépit des avancées technologiques liées à leur conception. Cet endommagement se caractérise classiquement par la nucléation de microfissures, suivie de la propagation de ces dernières conduisant éventuellement à la rupture finale de la pièce. Le domaine de la fatigue des matériaux couvre cependant encore beaucoup d'applications et d'installations industrielles soumises à différents types de contraintes mécaniques cycliques. La possibilité de prédire ce type de dommage reste donc aujourd'hui d'un intérêt central pour l'industrie mécanique.

L'endommagement par fatigue est très largement piloté par des mécanismes intrinsèquement locaux : accumulation locale de la déformation plastique, amorçage et propagation, pouvant éventuellement entraîner la rupture finale de la pièce. Il est alors directement lié à la microstructure de la pièce (Miao, Pollock et Wayne Jones, 2009; Xiao, Chen et Chaturvedi, 2008). Ainsi la corrélation entre la microstructure et le comportement mécanique du matériau est essentielle pour pouvoir prédire l'endommagement par fatigue. D'un point de vue expérimental, cela a conduit au développement de techniques de caractérisation des évolutions microstructurales au cours de la déformation (Bridier, 2006; Dexet, 2006; Heripre, 2006). D'un point de vue numérique, cela a conduit à l'intégration de l'ensemble des échelles d'hétérogénéités microstructurales dans la modélisation (Dingreville *et al.*, 2010; Przybyla *et al.*, 2009). Les approches numériques utilisent notamment des lois d'écoulement de plasticité cristalline avec une description explicite de la morphologie et de l'orientation cristalline des grains, voire des phases constituant le polycristal. Elles se sont révélées souvent très utiles pour prédire le comportement mécanique cyclique de matériaux polycristallins complexes et ont offert une possibilité de décrire les champs mécaniques au sein d'un agrégat de grains (Barbe, 2002; Forest et Fivel, 2004c).

Autant dans le contexte expérimental que numérique, il apparaît aujourd'hui intéressant de pousser la description du comportement micromécanique jusqu'à l'échelle du sous-grain en

prêtant particulièrement attention aux effets des interfaces cristallines. En effet chaque grain ayant une réponse élasto-plastique différente du fait de l'orientation cristallographique, les joints de grains sont le théâtre d'interactions mutuelles ainsi que sièges d'importantes hétérogénéités de la déformation/contraintes (Delaire, Raphanel et Rey, 2000; Hirth, 1972; Peralta, 1996). Ces phénomènes d'interaction sont à l'origine de l'effet de taille ou effet Hall-Petch (Meyer et Chawla, 1999) mais ils sont également à l'origine de la localisation de la déformation plastique et contribuent ainsi au fort potentiel d'amorçage de fissure dans les régions interfaciales (Priester, 2011; Roters *et al.*, 2010). Il est alors intéressant de chercher à caractériser de manière systématique l'effet d'un joint de grain suivant les orientations cristallographiques des grains adjacents. Le raffinement de l'échelle d'étude à celle du sous-grain permettrait alors de caractériser l'influence particulière de ces interfaces sur le comportement locale. Cela permettrait notamment de prédire les configurations cristallographiques « propices » à l'amorçage de fissures.

Beaucoup de difficultés subsistent cependant dans une telle étude. D'un point de vue expérimental, il est difficile d'accéder aux champs de déformations et de contrainte dans une zone microscopique qu'est celle du joint de grain. Du point de vue numérique, la description de ces hétérogénéités implique souvent de faire appel à des modèles complexes que l'on ne peut pas, de manière réaliste, valider par des considérations physiques simples. Par exemple, l'introduction des GND (*Geometrically necessary dislocations*) a suscité un grand intérêt pour la modélisation de l'effet rochet en régime cyclique avec considération de l'effet Hall-Petch. Mais bien que pertinent, l'introduction des GND de manière systématique altère la possibilité de capturer les zones de localisation de déformation qui sont à l'origine de l'amorçage de fissures.

Ce travail adressera un volet entièrement numérique soit l'analyse par éléments finis du comportement local des joints de grains. La stratégie adoptée ici sera d'évaluer ce comportement local grâce à une version basique de la plasticité cristalline dans laquelle la seule variable d'état microscopique est le « glissement ». Pour cela, le premier chapitre consistera en une revue de littérature sur le mécanisme physique de la déformation cristalline,

les principaux critères qui dictent le comportement élasto-plastique y sont alors définis. Quelques aspects physiques du joint de grain sont également passés en revue. Par la suite, le cadre numérique est explicité dans le second chapitre et l'effet de chacun des paramètres de la loi de plasticité y est quantifié. Dans le troisième chapitre, une population représentative de monocristaux est sélectionnée sous les principaux critères pilotant supposément le comportement élasto-plastique. Des simulations de traction monotones sont alors réalisées. Les résultats permettront d'un côté de quantifier l'impact de chaque critère d'anisotropie élasto-plastique sur le comportement cristallin et d'un autre côté de cerner la fidélité/limitation de notre approche. Dans le dernier chapitre, les résultats obtenus avec des simulations de traction axiale sur quelques bicristaux seront présentés. En l'occurrence, l'effet de l'anisotropie élastique de chaque grain sur le comportement à l'interface est étudié. Les bicristaux seront formés de couple de monocristaux déjà étudiés au chapitre précédent, ce qui permettra d'isoler les effets (micro-/macroscopiques) dus à la présence du joint de grain. Là aussi, le lecteur sera fréquemment sensibilisé aux différentes limitations de l'approche numérique utilisée, et ce, afin de le guider dans l'évolution vers des systèmes polycristallins.

CHAPITRE 1

REVUE DE LA LITTÉRATURE

1.1 Présentation du matériau d'étude

1.1.1 Domaine d'applicabilité des polycristaux métalliques CFC

Les polycristaux cubiques face centrée (CFC) sont une famille de matériaux métalliques largement utilisés dans l'industrie énergétique, automobile et aéronautique. Par exemple dans l'aéronautique, les alliages d'Aluminium (ex. série 2000) sont très utilisés pour leur faible poids et leur rigidité tandis que les superalliages à base de Nickel (ex. Inconel) sont très appréciés pour leurs excellentes propriétés mécaniques sous conditions d'utilisation sévères. Les pièces sont alors dimensionnées en fonction des conditions de tenue en service attendues (Hertzberg, 1996). Leurs microstructures sont également visées par rapport au type de chargement (Chan, 2010) et les caractéristiques cristallographiques des microstructures produites susceptibles de favoriser l'endommagement en service doivent être prédites. C'est dans le contexte de la prédiction de l'endommagement par fatigue que s'inscrit ce travail.

1.1.2 Choix du cuivre OFHC polycristallin – 99,99 %

Les matériaux métalliques industriels sont toujours constitués d'alliages de plusieurs éléments chimiques. Leur microstructure renferme alors des éléments chimiques d'insertion, de substitution ou des précipités, sources d'hétérogénéités. Cela a pour effet de modifier entièrement le comportement micro- et macromécanique du matériau (Salma et Cizeron, 1997). Avec la volonté de débiter les travaux de simulation sur un matériau modèle, exempt dans un premier temps d'hétérogénéités de phase, il est choisi dans ce travail de prendre comme matériau d'étude un polycristal pur sans aucun élément d'addition. Il s'agira du cuivre OFHC, pur à 99.99 % qui est de structure cristalline CFC. Le choix du cuivre est justifié – comparativement à du nickel pur par exemple – par le fait que ce matériau soit facilement disponible, peu onéreux, et beaucoup utilisé comme matériau d'étude dans

beaucoup de travaux expérimentaux. Par ailleurs, le comportement élasto-viscoplastique de ce matériau a été par le passé très étudié expérimentalement et pourra servir de source de données ainsi que base de comparaison pour les simulations numériques. Enfin, comme il en sera discuté ultérieurement, une propriété intéressante du cuivre est son énergie de faute d'empilement moyennement basse, se rapprochant de celle des alliages aéronautiques visés.

1.2 Plasticité d'un monocristal

1.2.1 Mécanismes d'accommodation

La déformation plastique induite au sein d'un métal est accommodée, à l'échelle cristalline, par le mouvement des dislocations. Cela se traduit par des glissements suivant des plans cristallins bien précis (cf. 1.2.2). Fondamentalement, il est nécessaire de distinguer deux différents « caractères » du mouvement de dislocations, coin ou vis. En effet la relation entre la direction du mouvement et l'état de contrainte qui les entraîne est assez distinct l'un de l'autre. La déformation générée diffèrerait alors entièrement dans un cas purement coin ou purement vis (Meyer et Chawla, 1999). Ce niveau de considération s'avère bien adapté pour l'étude des mécanismes fondamentaux tels les arrangements de dislocations, les phénomènes d'interaction et la localisation de la déformation (Forest et Fivel, 2004a). Des outils de modélisation dite discrètes (ex. « dynamique des dislocations discrètes ») peuvent capter de telles différences de comportement mais s'avère très couteux en temps de calcul et ne peuvent encore simuler le comportement de polycristaux. Les modèles utilisant l'approche de calcul par plasticité cristalline au contraire sont fonctions de l'accumulation de glissements (Cailletaud, 2009) et n'impliquent pas la nature individuelle des dislocations. Ainsi, leur principe repose sur le calcul de la quantité de glissement sur chaque plan de glissement et seul un effet moyen de la densité de dislocation sur ce plan est capté (Cailletaud, 2009; Forest et Fivel, 2004a; Forest et Fivel, 2004b). Le formalisme de la déformation cristalline, qui sera utilisée dans ce travail nécessite donc « simplement » une description géométrique de l'ensemble plans cristallins activables au complet. Cela est fait dans la section suivante.

1.2.2 Définition des systèmes cristallins

Les glissements cristallins se produisent selon des plans denses. On caractérise ainsi un glissement par son plan d'appartenance noté par les indices de Miller (hkl), et leur direction de glissement notée $[ijk]$, l'ensemble plan-direction formant un système de glissement. Dans les structures CFC comme le nickel, l'aluminium ou le cuivre, un exemple de système de glissement s'écrit $(111) [1\bar{1}0]$. On définit alors conventionnellement 12 systèmes de glissement les plus favorables dans un CFC comme étant les systèmes de glissement sur le plan (111) et la direction $[1\bar{1}0]$ (cf. Figure 1.1). Afin de raccourcir les appellations de chaque système, les notations abrégées de Bassani (Bassani, Wu et Campbell, 1991) seront utilisées dans le reste de ce manuscrit. Ces équivalences sont reportées dans le Tableau 1.1.

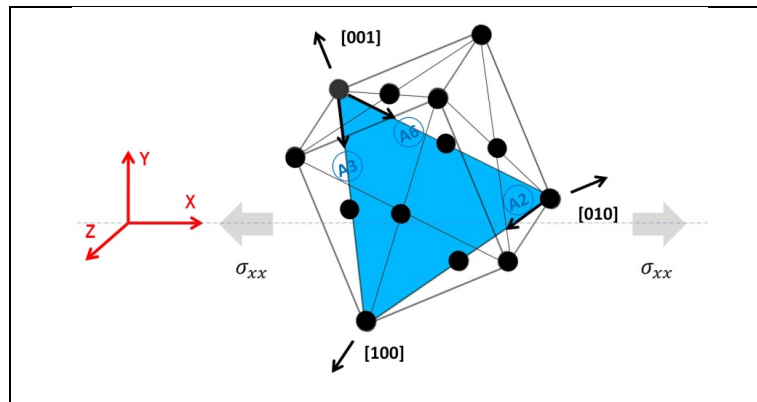


Figure 1.1 Maille cristalline CFC, avec 3 des 12 systèmes représentés : $(111) [1\bar{1}0]$ abrégé A2, $(111) [10\bar{1}]$ abrégé A3, et $(1\bar{1}1) [0\bar{1}1]$ abrégé A6

Tableau 1.1 Notations abrégées pour les systèmes de glissement du CFC (Bassani, Wu et Campbell, 1991)

Plan	(111)			$(11\bar{1})$			$(1\bar{1}1)$			$(1\bar{1}\bar{1})$		
Direction	$[10\bar{1}]$	$[0\bar{1}1]$	$[1\bar{1}0]$	$[101]$	$[011]$	$[1\bar{1}0]$	$[110]$	$[011]$	$[10\bar{1}]$	$[101]$	$[110]$	$[0\bar{1}1]$
Notation	A3	A6	A2	B4	B5	B2	C1	C5	C3	D4	D1	D6

1.2.3 Effets de l'orientation cristallographique : critères d'anisotropie élasto-plastique

1.2.3.1 Le module élastique anisotrope

Le comportement élastique d'un cristal CFC est fortement anisotrope du fait de la géométrie de la maille et de sa structure atomique. Elle est caractérisée par le module directionnel $E_{\vec{X}}$ défini en fonction de la direction $\vec{X}(x_1, x_2, x_3)$ dans l'espace par la relation (4.1) (Siebörger, Knake et Glatzel, 2001) :

$$\frac{1}{E_{\vec{X}}} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + C_{12})} + \left(\frac{1}{C_{44}} - 2 \frac{1}{C_{44} - C_{12}} \right) \frac{(x_1^2 x_2^2 + x_2^2 x_3^2 + x_3^2 x_1^2)}{\|\vec{X}\|^4} \quad (1.1)$$

où les C_{ij} sont les coefficients élastiques anisotropes. La Figure 1.2 donne une représentation de l'amplitude du module d'Young dans toutes les directions de l'espace. Cette anisotropie se traduit par différentes rigidités élastiques des courbes de contraintes – déformations élastiques dépendamment de la direction de traction. On évaluera quantitativement ses effets au Chapitre 3 grâce à une série de simulations numériques de structures monocristallines à différentes orientations cristallographiques.

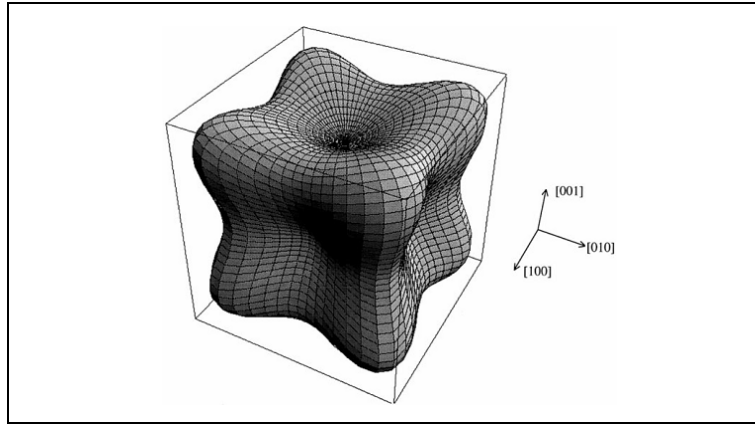


Figure 1.2 Représentation de l'amplitude du module élastique d'un CFC (ici, du nickel pur) dans toutes les directions de l'espace

1.2.3.2 Le facteur de Schmid

En plasticité, la déformation est assurée par l'activation des systèmes de glissement. Le facteur de Schmid μ (cf. Annexe 1) donne la contrainte de scission réduite (RSS, *resolve shear stress*) sur chaque système de glissement. Lorsqu'elle atteint une scission critique, le glissement s'active alors. La relation entre la RSS et la contrainte macroscopique est :

$$\tau_{\alpha=1,12} = \mu_{\alpha} \cdot \sigma \quad (1.2)$$

où $\tau_{\alpha=1,12}$ est le niveau du RSS sur le système α , $\mu_{\alpha} \in [0; 0.5]$ est le facteur de Schmid du système α et enfin σ est la contrainte appliquée. Le RSS est ainsi maximal pour $\mu_{\alpha} = 0.5$. Le mode de calcul donné dans l'annexe 1 permet de calculer le facteur de Schmid d'un système connaissant ses coordonnées et celles de la direction de chargement.

En calcul numérique (notamment en plasticité cristalline), on préférera davantage la formulation tensorielle appelée tenseur de Schmid généralisé. Elle prédéfinit la géométrie des 12 systèmes de glissement du CFC par l'intermédiaire de leur direction et plan. Cela permet plus facilement le calcul de l'ensemble des 12 facteurs de Schmid du cristal en connaissant juste son l'orientation cristallographique. L'on note alors :

$$P^\alpha = \frac{1}{2}(n^\alpha \otimes b^\alpha + b^\alpha \otimes n^\alpha) \quad (1.3)$$

avec P^α le facteur de Schmid du système α ($\alpha = 1, 12$), et n^α et b^α sont respectivement la normale au plan de glissement et la direction du glissement α .

1.2.3.3 Le glissement simple, double, multiple

Les glissements se produisent préférentiellement sur les systèmes à plus fort RSS, avec les plus forts facteurs de Schmid (Boas et Schmid, 1933). En fonction de l'orientation cristalline, on distingue alors les glissements uniques, doubles et multiples. Le glissement simple se produit dans les premiers stades de la déformation ou lorsque le facteur de Schmid de ce système est le plus élevé parmi les 12. Le facteur de Schmid décroît sur les autres systèmes de glissement et dicte l'ordre d'activation des glissements subséquents. Le glissement double ou duplexe se produit lorsque le facteur de Schmid est équivalent sur 2 systèmes de glissement. Le taux de durcissement (écrouissage) est assez caractéristique dans un cas de glissement unique que dans un cas de glissement double (ou multiple). La section suivante détaille alors le mécanisme physique de durcissement dépendamment de l'orientation cristalline et du niveau de la déformation.

1.2.4 Comportement monotone d'un monocristal

L'écrouissage caractérise le régime plastique de chaque métal et il est matérialisé par le phénomène d'écoulement/interaction des dislocations (Baïlon et Dorlot, 2001; Meyer et Chawla, 1999). L'augmentation de la densité des dislocations pendant la déformation entraîne une résistance supplémentaire quant à la mobilité ou à l'activation de nouvelles dislocations dans le cristal. Cette résistance s'ajoute ainsi à la résistance initiale et confère au métal le durcissement assez caractéristique.

Le mécanisme d'accommodation étant assuré par glissement cristallin sur des plans de glissement spécifiques dépendamment de l'orientation (cf. 1.2.1 à 1.2.3), il en résulte que le

mécanisme de durcissement n'est pas isotrope car certains systèmes accumuleront plus de glissements que d'autres. Cette anisotropie du durcissement se caractérise par une différence dans l'allure des courbes d'écrouissage. La Figure 1.3 montre une représentation typique en contrainte-déformation de cisaillement ($\tau - \gamma$) de quelques monocristaux. On y constate que pour certains cristaux, le durcissement structural est très faible (ex. cas C26) du moins jusqu'à 15 % de cisaillement. Contrairement pour d'autres, le durcissement a un taux très élevé dès le début du régime plastique (ex. cas C23).

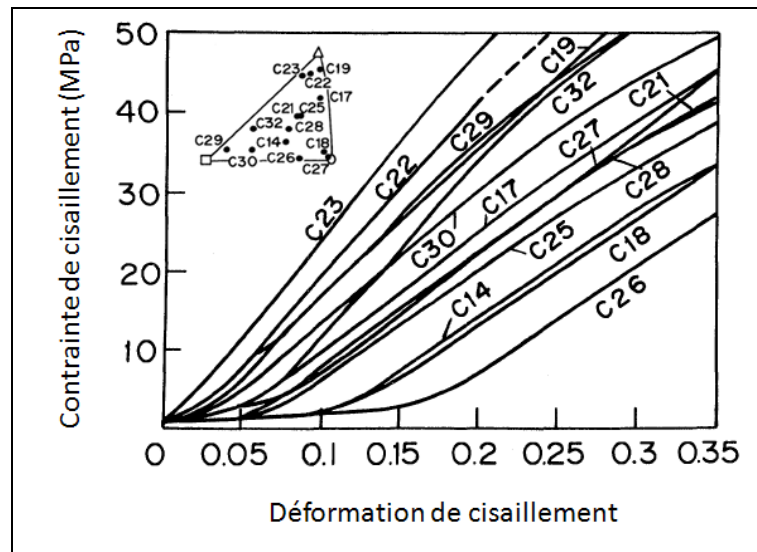


Figure 1.3 Courbes d'écrouissage de monocristaux de cuivre OFHC de différentes orientations cristallines, adaptée de (Bassani, Wu et Campbell, 1991)

Plus généralement, le comportement monocristallin du cuivre en traction monotone est divisé en trois stades (cf. Figure 1.4) :

- Stade I

Le premier stade correspond au durcissement induit par l'unique système de glissement actif : faible augmentation de la contrainte malgré l'augmentation de la déformation. La pente donne directement la valeur de la résistance initiale au glissement sur un système τ_0 . Ce stade n'est présent que dans les monocristaux pour lesquels un seul système de glissement

s'active. Pour les monocristaux orientés pour du glissement multiple, l'écrouissage ne présente pas de stade I et l'évolution est parabolique dès le départ.

- Stade II

Ce stade marque la transition glissement simple-multiple et son commencement se situe entre 1 et 15 % de déformation de cisaillement (cf. Figure 1.3). Il est caractérisé par une forte augmentation des contraintes correspondant au durcissement induit par les autres systèmes subséquentement activés. La vitesse de durcissement de ce stade est pilotée par deux phénomènes : le durcissement induit par l'ensemble des systèmes actifs plus leurs interactions lorsque les glissements traversent des systèmes croisés (forêts de dislocation). La limite « supérieure » de la notion de petite déformation peut alors être fixée à 15 % car au-delà, même un grain orienté pour du glissement unique activera plusieurs systèmes.

- Stade III

Le dernier stade correspond à la mise en place du glissement généralisé. Les systèmes saturent progressivement, se traduisant par la baisse de la pente d'écrouissage, aboutissant finalement par la rupture de l'échantillon.

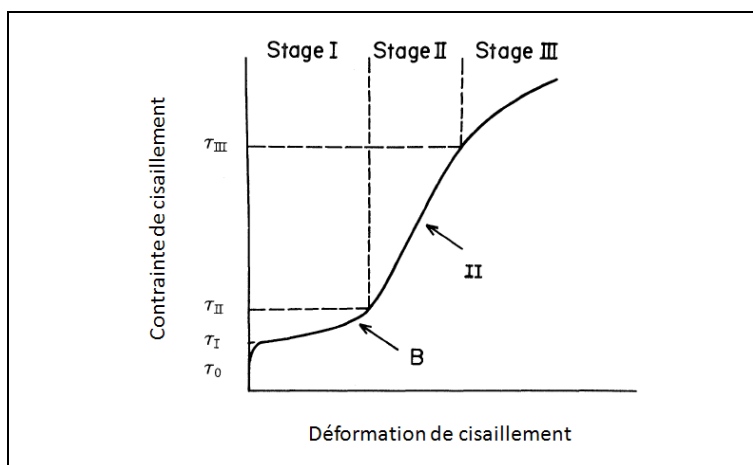


Figure 1.4 Comportement monotone typique en trois stades pour un monocristal CFC, adaptée de (Bassani, Wu et Campbell, 1991)

1.2.5 Comportement cyclique d'un monocristal

En sollicitation cyclique, la nature des glissements cristallins évoquée dans le cas du chargement monotone reste la même. Trois stades (Peralta, 1996) peuvent être distingués, avec un caractère plus ou moins marqué en fonction du nombre de glissement impliqué par l'orientation cristallographique. La Figure 1.5 illustre ces trois stades pour un monocristal de cuivre pur d'une orientation à facteur de Schmid $\mu = 0,5$. Cette courbe appelée courbe d'écrouissage cyclique (CSSC) s'obtient via un essai uniaxial cyclique à amplitude de déformation plastique donnée. D'une éprouvette à l'autre, cette amplitude est alors augmentée d'un petit incrément puis la pointe de l'hystérésis stabilisée (ou contrainte de saturation) est relevée.

- Stade I

Le premier stade correspond à du glissement unique et, structuralement parlant, on assiste à la mise en dipôle des dislocations appelées « nuages de dislocation » uniformément dispersés dans le monocristal.

- Stade II

Dans une fourchette d'amplitude de déformation un peu plus élevée, on constate le second stade. Il est marqué par le peuplement progressif en bandes de glissement persistantes (PSB, *persistent slip band*) induites par les systèmes critiques, et qui traversent des nuages de dislocations. La fin du second stade correspond à la saturation en PSB. Plusieurs systèmes sont activés avec la même intensité que le système primaire. Un cristal configuré pour du glissement multiple affiche quant à lui la formation précoce des PSB ainsi qu'un niveau de saturation plus élevé. La fatigue à haut cycle retrouvée en application industrielle se caractérise plutôt par des saturations localisées (Miao, Pollock et Wayne Jones, 2009; Zhang et Jiang, 2007).

- Stade III

Le dernier stade commence à partir de 10^{-03} à 10^{-02} de déformation où de fortes désorientations locales se produisent et entraînent la formation de nouvelles orientations cristallines.

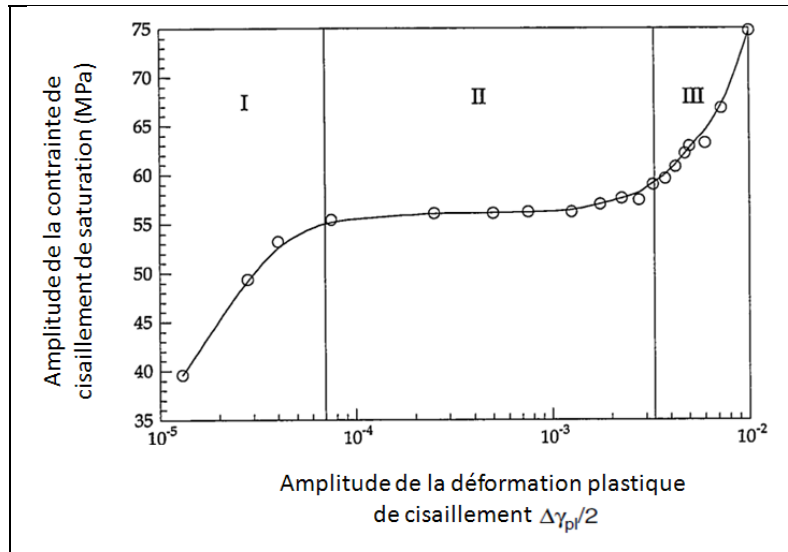


Figure 1.5 Courbes de comportement cyclique (CSSC, *cyclic stress strain curve*) d'un monocristal CFC ayant pour facteur de Schmid $\mu = 0,5$, adaptée de (Mughrabi, 1992)

Le comportement élasto-plastique est donc gouverné par un certain nombre de paramètres. En élasticité, il est fonction du module élastique (cf. 1.2.3.1), tandis que la contrainte de limite élastique (activation du premier glissement) et le module plastique instantané (taux de durcissement) sont gouvernés par le facteur de Schmid et par le nombre de glissement impliqué (cf. 1.2.3.2 et 1.2.3.3).

En modélisation, un point critique est la détermination du module instantané de chacun des systèmes de glissement actifs, car ils dictent à leur tour la cinématique entière de la déformation plastique. La difficulté vient du fait que la valeur de ces modules résulte simultanément de plusieurs mécanismes physiques : la résistance initiale au glissement, la résistance due à l'interaction avec d'autres systèmes et la saturation. Ce sont des grandeurs

non-directement mesurables expérimentalement mais plutôt par des tests de traction de durcissement latent (Bassani et Wu, 1991; Bassani, Wu et Campbell, 1991). En plasticité cristalline, ces effets sont traduits par une matrice d'écrouissage. Le rôle de ce dernier est de pondérer le durcissement apporté par chaque système actif pendant la déformation plastique. Les équations constitutives de la plasticité cristalline restent alors avant tout phénoménologiques.

1.2.6 Différentiation entre matériaux de même structure CFC : énergie de faute d'empilement

La variation du mécanisme de durcissement d'un CFC à l'autre repose sur la cinétique du mouvement des dislocations i.e. la manière dont elles se déplacent. Cette cinétique est gouvernée principalement par l'énergie de faute d'empilement du matériau (EFE). L'EFE désigne simplement l'énergie interne que possède la structure cristalline pour confiner le glissement sur son plan initiale, ou au contraire pour la faire dévier de ce plan lorsque cette énergie est forte (Hertzberg, 1996; Meyer et Chawla, 1999). Ainsi, dans les matériaux à faible EFE, ex. le cuivre, la déformation sera assurée par des glissements principalement planaires (confiné dans leur système initial). En revanche, dans les matériaux à forte EFE la déformation se caractérisera par des glissements fréquemment déviés de leur plan initial (*wavy glides*). Quelques valeurs de l'EFE de certains CFC sont reportées dans le Tableau 1.2. Les impacts sur la modélisation sont discutés dans la section suivante.

Tableau 1.2 EFE de quelques matériaux (Meyer et Chawla, 1999; Siegel, 2005)

Métal	EFE (mJ/m ²)	Glissement
Aluminium	~ 250	Dévié
Nickel	~ 200	Dévié
Cuivre	~ 90	Dévié/planaire
Alliage Ni-Nb	~ 59	Planaire
Or	~ 45	Planaire
Acier inoxydable	~ 22	Planaire

L'EFE exerce donc une influence sur la cinétique des dislocations durant la déformation plastique. Les structures des réseaux de dislocations dépendamment de la EFE sont bien observées (Baïlon et Dorlot, 2001; Meyer et Chawla, 1999) et il serait pertinent de tenir compte de ces phénomènes lorsqu'on mène une étude de modélisation sur la localisation de la déformation en cours de chargement.

Dans le cadre d'une description en milieu continu, notamment en plasticité cristalline, la variable principale est le glissement. Ainsi le chemin des dislocations n'est pas décrit en tant que tel. En effet on ne décrit explicitement que la vitesse d'accumulation des glissements sur chaque plan, tandis que la résistance à l'activation est contrôlée via la définition d'une matrice d'écrouissage (Cailletaud, 2009). Bien qu'il soit possible de moduler la vitesse initiale des glissements ou les termes de la matrice d'écrouissage pour la calibration du comportement, un tel modèle ne permettra donc pas de réaliser une étude de localisation explicitement paramétrée par l'EFE.

Un grand avantage des modèles continus réside cependant en leur richesse à évoluer, offerte par les différentes possibilités de couplage avec l'expérimental, cela est par exemple intéressant pour la validation des champs mécaniques microstructuraux. Les possibilités de calculs sont aussi intéressantes car les formulations sont faites à des échelles spatiales et temporelles raisonnables soit $\sim 10^{E-04} - 10^{E-06}$ s pour la plasticité cristalline vs. $\sim 10^{E-11}$ s pour la dislocation discrète (Forest et Fivel, 2004a).

1.3 Plasticité d'un polycristal

1.3.1 De la déformation du monocristal à celle du polycristal

Le polycristal est un agrégat de grains de différentes orientations cristallines où chaque grain se comporte comme un monocristal. Cependant du fait de la différence en réponse mécanique entre chaque grain, leurs interfaces doivent mutuellement s'accommoder de la déformation environnante afin d'assurer la continuité du milieu. Cette accommodation implique le développement spécifique d'un réseau de dislocation dans le voisinage du joint de grain. La

présence significative de joints de grains dans le polycristal induit alors un durcissement complémentaire à celui induit par le mouvement même des dislocations dans chaque grain individuel. La Figure 1.6.a montre la différence de comportement entre mono- et polycristal. On constate notamment l'absence de stade I dans le comportement polycristallin, cela vient de l'effet « isotrope moyen » induit par la multiplicité des joints de grains pouvant accommoder la déformation. La Figure 1.6.b montre qu'en régime cyclique également, la contrainte de saturation est plus élevée et que le stade III est avancé dans le polycristal.

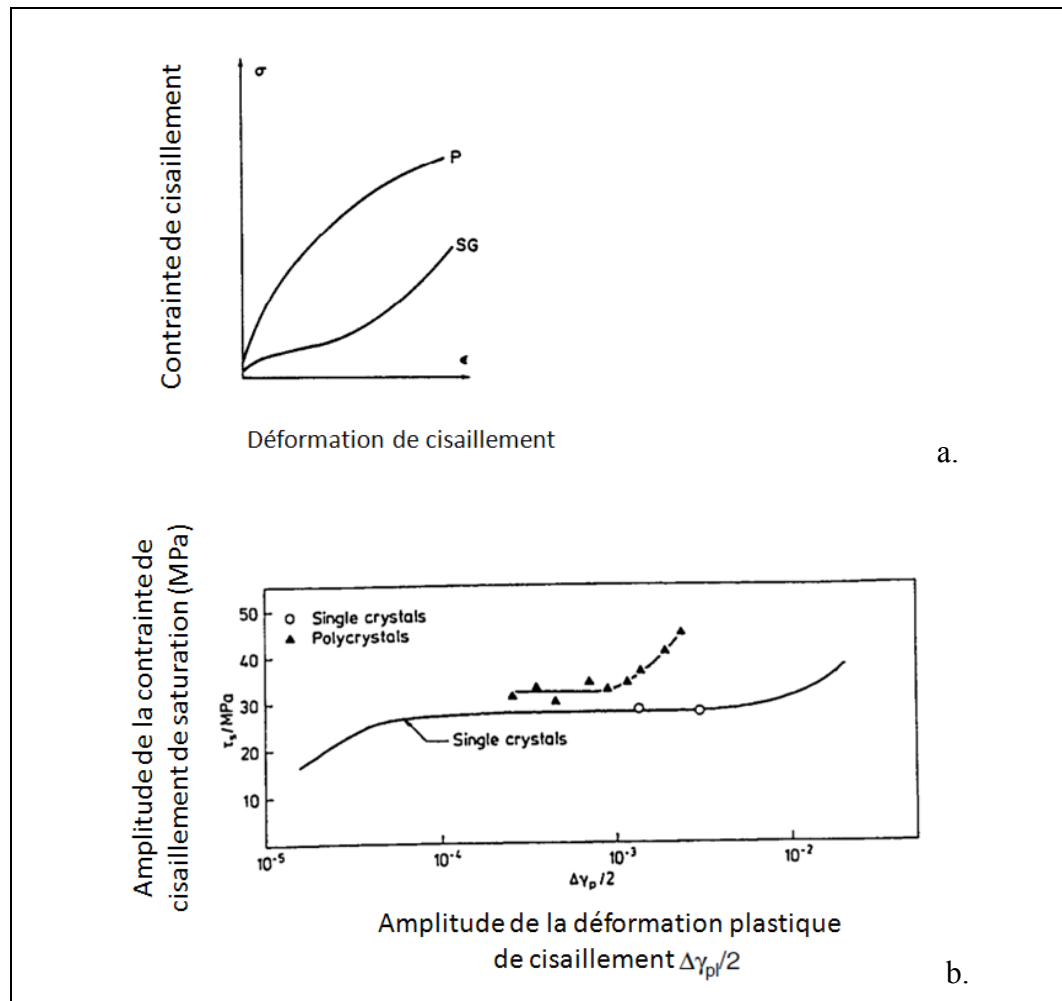


Figure 1.6 a) Comportement monotone du polycristal CFC de cuivre (P) et d'un monocristal $\langle 110 \rangle$ (SG); b) CSSC du cuivre polycristallin et monocristallin moyen, adaptée de (Franciosi et Zaoui, 1982) et de (Peralta, 1996) respectivement

1.3.1.1 Hétérogénéités de la déformation aux joints de grains

Les joints de grains constituent alors des zones de déformation hétérogènes (cf. Figure 1.7) qu'il est important de quantifier afin de pouvoir évaluer la criticité de la configuration cristallographique locale. Une des principales difficultés dans cette quantification des hétérogénéités repose en la description des micromécanismes locaux (glissements et compatibilités), qui gouvernent étroitement les caractéristiques du champ mécanique (contrainte – déformation et rotation). La compréhension de ces mécanismes est nécessaire pour documenter les lois de comportement afin que ces dernières prennent en compte les effets d'interaction. Hirth avait établi la nécessité d'activer des glissements (cf. 1.3.2.2) pour assurer la continuité de la déformation (Hirth, 1972). Les observations des joints de grains dans le cuivre (Peralta, 1996; Zhang et Wang, 1998; Zhang, Wang et Hu, 1999a; Zhang, Wang et Hu, 1999b) ont aussi permis de mettre en évidence la présence de glissements secondaires très localement et d'une certaine épaisseur (ZAM). Il s'agit des systèmes de glissement autres que ceux activés par atteinte de la scission critique (i.e. selon la loi de Schmid). Mais ces analyses sont souvent qualitatives du fait de la singularité des cas étudiés, en effet l'élaboration d'échantillons avec des orientations cristallines prédéfinies et donc contrôlées reste actuellement très difficile.

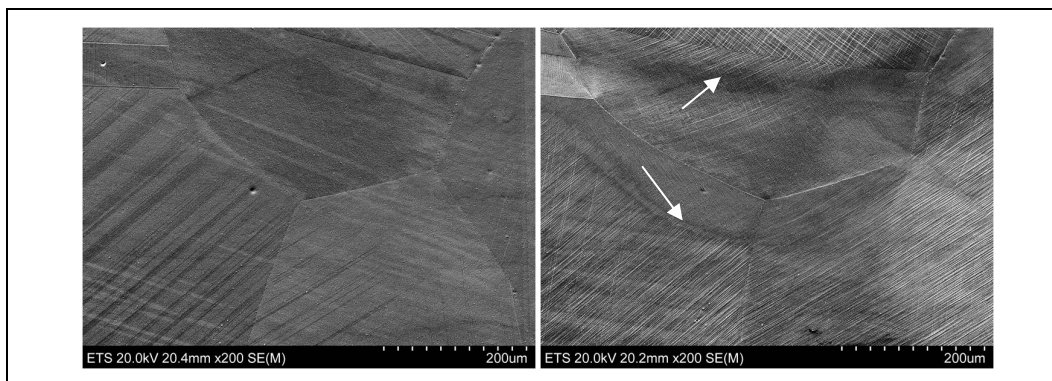


Figure 1.7 Développement des hétérogénéités de la déformations dans les joints de grains pour un CFC cuivre : sous chargement de 50 MPa (gauche), la même zone est ensuite montrée sous chargement de 150 MPa (droite), les flèches indiquent la présence de régions intragranulaires fortement déformées (Lopfa ÉTS, 2012)

1.3.1.2 Impacts sur la modélisation numérique

Le besoin de caractériser les hétérogénéités microstructurales a ainsi conduit à plusieurs tentatives de modélisations numériques. La modélisation d'agrégats polycristallins a par exemple suscité beaucoup d'intérêt durant les dix dernières années, mais elle reste confrontée à certaines difficultés. Ces dernières sont principalement liées au couplage avec l'expérimental – par exemple sur la considération de la microstructure sous la surface (Dexet, 2006; Heripre, 2006). Les conditions de simulation aussi sont eux-mêmes problématiques – par exemple sur l'influence du maillage des joints de grains ou sur l'application des conditions aux limites (Barbe, 2002; Dingreville *et al.*, 2010). De plus, une approche polycristalline ne permet pas de quantifier les effets des joints, noyés dans une multitude de paramètres physiques.

Ainsi, la modélisation ciblée sur les joints de grains se révèle beaucoup plus pertinentes pour la caractérisation des effets locaux. Chen et Wan (Chen, Li et Wang, 1998; Wan et Yue, 2003) ont par exemple mis en évidence un profil de contrainte hétérogène autour d'un joint de grain en utilisant une approche purement élastique, et respectivement un critère de plasticité de Von Mises. Cailletaud et Delaire (Delaire, Raphanel et Rey, 2000; Méric, Cailletaud et Gaspérini, 1994) ont montré les possibilités de l'outil « plasticité cristalline » à reproduire certaines zones de concentration de la déformation et du cisaillement comme observées expérimentalement.

1.3.2 Comportement des interfaces cristallines

1.3.2.1 Considération en mécanique continue

En mécanique continue, on peut décrire le joint de grain dans un polycristal comme une interface entre deux milieux anisotropes. Un joint général d'un CFC est défini par cinq degrés de liberté (Priester, 2011) où trois décrivent la relation de rotation entre les orientations par une direction commune r et l'angle de rotation relative θ , et deux l'inclinaison du plan du joint noté n par rapport aux directions macroscopiques (Figure 1.8).

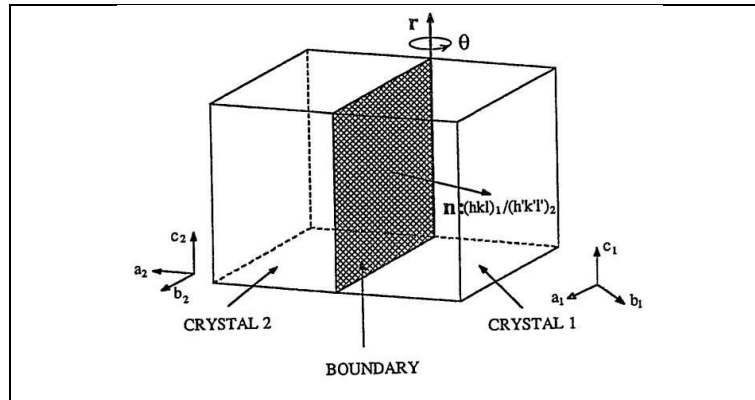


Figure 1.8 Paramètres définissant un joint de grain général (Peralta, 1996)

Du point de vue purement élastique, le comportement d'une interface découle de quelques conditions de compatibilité élastique (Hirth, 1972). En effet la continuité de la déformation implique que dans le voisinage du joint, des composantes de contrainte de cisaillement y soient forcément introduites. Mais une multitude de possibilité d'état de contrainte peut exister – tant en amplitude de chaque composante qu'en la distance affectée partant de l'interface – et ce dépendamment de l'orientation respective des deux milieux, rendant la majorité des études plutôt qualitatives. En plasticité, les possibles scénarios sont plus complexes (Hirth, 1972; Priester, 2011) : lorsque la déformation plastique et/ou la rotation est autorisée, les composantes de contrainte de cisaillement ne sont pas forcément introduites ou alors sont relaxées par des micromécanismes locaux. Ainsi une étude des interfaces au cas par cas peut s'avérer nécessaire pour connaître l'effet de la cristallographie.

1.3.2.2 Conditions de compatibilité

Afin de préserver la cohérence des cristaux aux interfaces cristallines, il est nécessaire d'autoriser un certain nombre de degrés de liberté – liés aux possibilités de déformation et de rotation. Le critère de Von Mises nécessite par exemple la définition de cinq degrés de liberté afin de fixer les conditions de compatibilité (Hirth et Hook, 1968). Cela se traduit par la nécessité d'avoir cinq systèmes de glissement actifs. La prédiction des systèmes actifs dans le voisinage du joint reste cependant problématique à cause de la particularité du champ local.

L'observation des états de glissement aux interfaces dans les bicristaux ont permis de noter la présence de glissements secondaires qui ne correspondaient pas forcément aux systèmes prédit par la loi de Schmid sur les systèmes à forte scission. Les sources expliquées sont possiblement géométriques (Hu et Wang, 1998; Zhang et Wang, 1998) soit dues à l'influence d'une bonne corrélation géométrique entre les plans de glissement des deux côtés du joint (transfert du glissement), ou d'origine mécanique, où l'activation est provoquée par de fortes contraintes de cohérence (Peralta, 1996). La première source est aussi à l'origine des empilements de glissements aux voisinages du joint de grain (Roters *et al.*, 2010).

Une partie de cette étude consistera en l'étude des effets de compatibilité géométrique dans le joint de grain. Cela sera fait par un choix de couple d'orientation ayant des glissements géométriquement compatibles. Cela permettra aussi de bien apprécier la sensibilité de notre cadre de travail à ces considérations purement géométriques. La compatibilité mécanique doit quant à elle être assurée par le principe des éléments finis.

1.3.3 Aspects physiques d'un joint de grain

1.3.3.1 Classification par famille des joints

On distingue deux grandes familles de joints de grains. Les joints symétriques et les joints asymétriques ou quelconques (Priester, 2011). Les joints symétriques sont des joints où l'on a une relation d'interface $(hkl)_A = (hkl)_B$. Autrement dit l'expression du plan au sein de la maille du cristal A est la même que si on l'exprimait au sein de la maille du cristal B et, qui plus est, il s'agit de leur plan d'accolement. Cela est le cas de tous les joints coïncidents ($\Sigma 3$, $\Sigma 5$, $\Sigma 9$ etc.) dans les matériaux CFC. Autrement, les joints sont dit asymétriques ou quelconques, notre étude se portera sur cette dernière famille de joint. Au sein du polycristal non texturé, une distribution des orientations comprend une grande quantité de joint $\Sigma 1$ et $\Sigma 3$ (joint de macle). La Figure 1.9 présente une distribution des désorientations intergranulaires au sein d'un polycristal CFC de 420 grains.

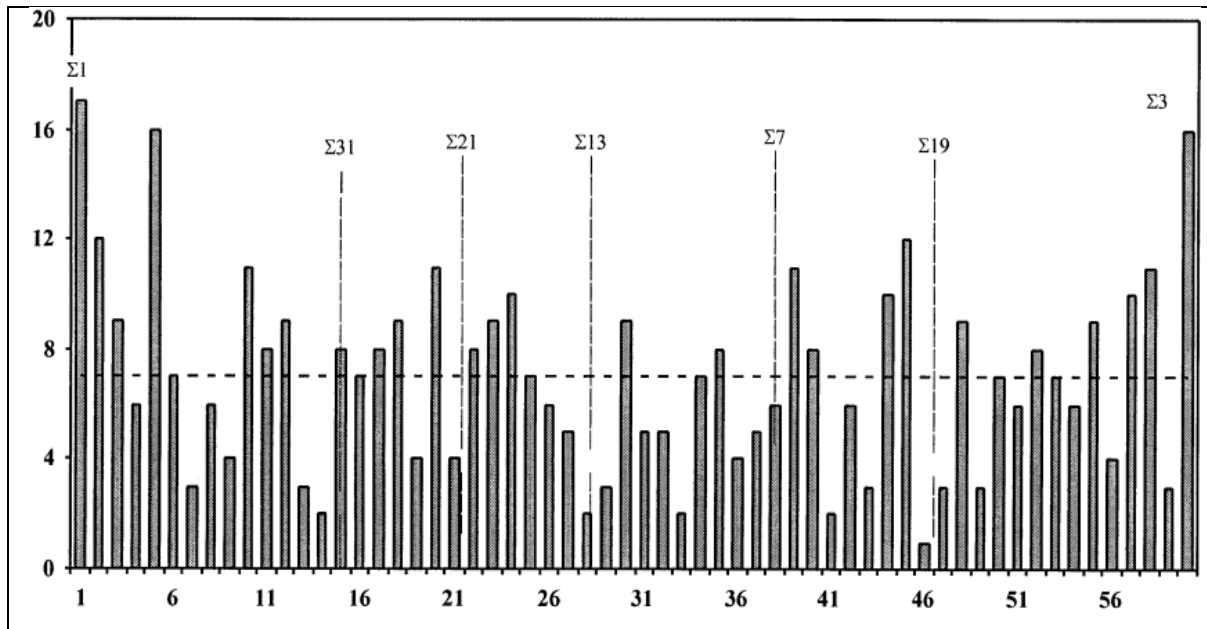


Figure 1.9 Fraction linéique des désorientations dans un CFC polycristallin d'or avec 420 grains – une distribution parfaite en ligne discontinue (Owusu-Boahen et King, 2000)

1.3.3.2 Comportement d'un joint de grain face aux dislocations incidentes

Une dislocation proche d'un joint de grain est soumise à deux types de forces, courte et longue distance. Cependant ces considérations relèvent de l'unité structurale et formellement il est difficile de prévoir le comportement d'une dislocation à l'encontre de l'interface à moins d'accéder aux informations unitaires de chaque dislocation incidente. Néanmoins les cas de transfert de glissement sont classiquement montrés être favorisés par une faible désorientation et/ou une configuration particulière de compatibilité macro-/ microscopique (Roters *et al.*, 2010), tandis que l'empilement des dislocations à l'interface domine dans une grande majorité des cas (Hirth, 1972). Une force élastique de longue distance appelée « image » dicte la nature répulsive ou attractive du joint, elle-même dépendant d'un certain rapport d'anisotropie E_I/E_{II} entre les deux grains (Priester, 2011) – et également en quelques sortes du niveau de désorientation entre les deux. En cas de répulsion, les dislocations entrantes s'y empilent à une certaine distance de l'interface (Figure 1.10) tandis que des études plus poussées décomposent le comportement en plusieurs scénarios possibles, cf. Figure 1.11.

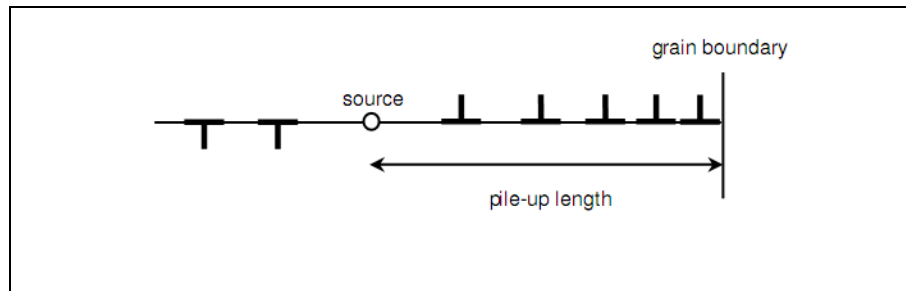


Figure 1.10 Empilement des dislocations près d'un joint de grain, adaptée de (Soer, 2006)

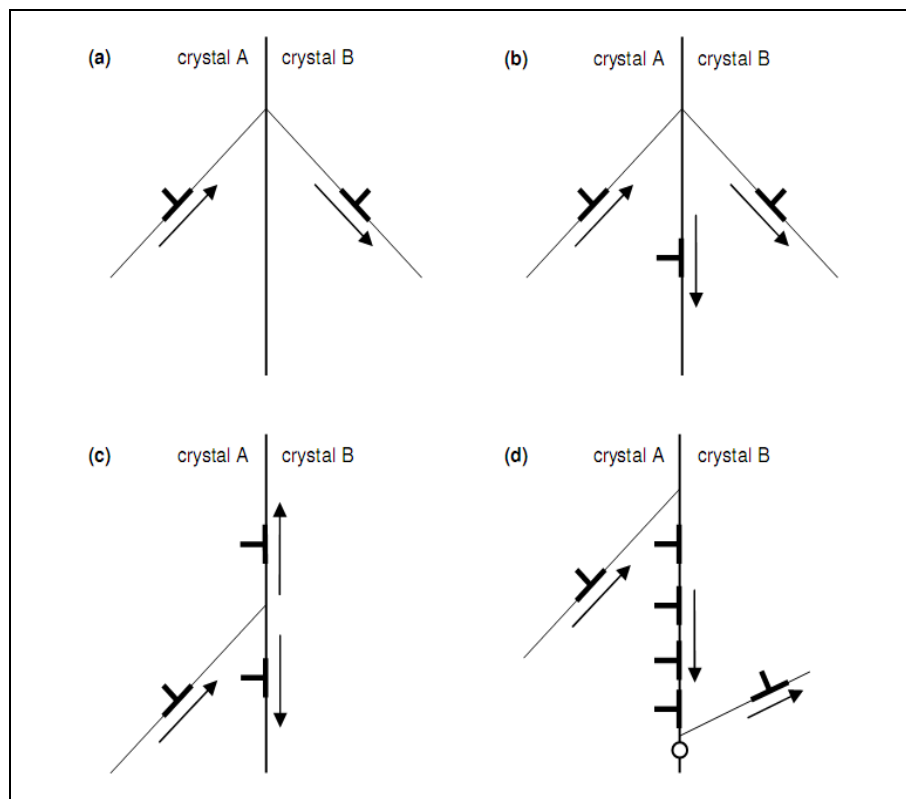


Figure 1.11 Schématisation des possibilités d'interaction interface/glisement : a) Transmission d'une dislocation par changement de plan; b) Transmission d'une dislocation avec naissance d'une dislocation résiduelle; c) Absorption complète d'une dislocation (typique des joints incompatibles); d) Relaxation du joint de grain par création de dislocations, éventuellement suivie de l'émission d'une nouvelle dislocation, adaptée de (Soer, 2006)

1.3.4 Synthèse : vers une étude quantitative des effets locaux et longues-distances des interfaces cristallines dans les joints quelconques

Afin de clore ce chapitre, les principales difficultés associées au comportement des joints de grains et l'objectif de l'étude sont récapitulées :

- Le comportement d'une interface est dicté simultanément par beaucoup de paramètres géométriques et physiques : à l'échelle macroscopique il s'agit de la désorientation relative des grains adjacents, de l'inclinaison du plan d'interface par rapport aux directions macroscopiques, et enfin de l'orientation de chaque grain elle-même qui gouverne l'activité des glissements. Cependant peu d'études portant sur les effets des interfaces cristallines abordent systématiquement les dépendances à l'orientation.
- À l'échelle microscopique, certains arrangements géométriques « favorables » des systèmes de glissements – comme la coïncidence des traces de glissement dans le plan du joint de grain, la colinéarité des vecteurs de direction ou la coplanarité des systèmes de part et d'autre de l'interface – influencent l'activité plastique autour de celle-ci. Aussi en hypothèse de milieu continu, cette plasticité locale peut aussi avoir des sources d'ordre macro-mécanique, il s'agit de la contrainte de cohérence/compatibilité entre les deux milieux anisotropes.
- À l'échelle nanoscopique, la structure atomique du joint influence également le mécanisme d'interaction des dislocations avec l'interface mais le problème de ces échelles discrètes est qu'il devient largement problématique de remonter aux champs mécaniques des échelles physiques plus raisonnables.
- Les joints symétriques cohérents sont beaucoup étudiés, il s'agit des joints ayant une structure atomique parfaitement quantifiable tels les joints de macles, mais la structure atomique d'une interface « quelconque » est infiniment variable et une étude à l'échelle continue serait d'abord intéressante. Ce qui justifie l'approche par la plasticité cristalline qui on le rappelle est un modèle phénoménologique dans notre cas.

Beaucoup de paramètres ainsi que différentes échelles sont impliquées dans le comportement des joints de grains. Comme il s'agit d'un premier abord, l'intérêt portera simplement sur une évaluation globale du comportement d'interface en fonction de l'orientation cristalline. En effet la connaissance des champs mécaniques associés aux configurations étudiées permettra déjà de faire une classification des configurations faibles. Aussi, les analyses réalisées dans ce manuscrit sont de nature comparative et donc révélera une tendance plutôt qu'un comportement absolu de chaque interface.

CHAPITRE 2

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DU COMPORTEMENT PAR LA PLASTICITÉ CRISTALLINE

2.1 Description du problème à modéliser et équations constitutives de l'écoulement plastique à l'échelle du cristal

La microplasticité des joints de grain est un problème de mécanique qui peut être modélisé par la plasticité cristalline (PC). Cette dernière appartient à la famille des comportements viscoplastiques avec une dépendance à l'historique de la déformation. La PC décrit directement la déformation plastique du cristal par la cinétique des glissements cristallins. L'ensemble peut alors être implémenté dans un contexte numérique par éléments finis ou autre codes d'intégration numérique. Cette section présente l'ensemble des composantes de la plasticité cristalline soit la cinématique, la cinétique qui est donnée par les équations constitutives. Une étude paramétrique visant à une meilleure compréhension de la loi de comportement utilisé est alors faite. Enfin le cadre numérique d'implémentation sera présenté.

2.2 Plasticité cristalline

2.2.1 Cinématique de la plasticité cristalline

La mise en place d'une loi de comportement dans un cadre numérique tel les éléments finis nécessite usuellement de définir la transformation F appliquée (ou gradient de déformation). En plasticité cristalline, cette transformation F peut être décrite par l'association de composante purement plastique et d'une composante purement élastique :

$$F = F_E \cdot F_P \quad (2.1)$$

La partie plastique F_P y décrit essentiellement la déformation plastique due à l'activation des systèmes de glissement, et F_E est un étirement plus une rotation. Dans le cas des codes de

calcul commerciaux, notamment Abaqus (AbaqusV6.8, 2008), F est initialement estimée à l'aide d'un champs de vitesse « virtuel », la partie plastique F_P ainsi que la partie élastique F_E qui la composent étant inconnues. Le taux de déformation est communément utilisé pour exprimer la cinétique à partir de cette décomposition. Dès lors le gradient de vitesse de déformation entre deux point matériel de l'espace dans la configuration déformée peut être exprimé par :

$$L = L_E + F_E \cdot L_P \cdot F_E^{-1} \quad (2.2)$$

et

$$L_E = \dot{F}_E \cdot F_E^{-1} \quad (2.3)$$

avec L_E la composante élastique, et L_P la composante plastique liée aux glissements sur les différents systèmes actifs telle que :

$$L_P = \sum_{\alpha=1,12} \dot{\gamma}^\alpha \cdot P^\alpha \quad (2.4)$$

où $P^\alpha = \frac{1}{2}(n^\alpha \otimes b^\alpha + b^\alpha \otimes n^\alpha)$ est le tenseur de Schmid généralisé (cf. 1.2.3.2) et $\dot{\gamma}^\alpha$ le taux de cisaillement sur un des 12 systèmes de glissement α de normale au plan de glissement n^α et de direction de glissement b^α .

Enfin il est nécessaire d'avoir une composante cinétique qui relie la cinématique à l'état de contrainte dans le monocristal. Ceci se fait par une loi linéaire anisotrope :

$$\bar{\bar{S}} = \bar{\bar{C}} : \bar{\bar{E}} \quad (2.5)$$

où $\bar{\bar{C}}$ est la matrice de rigidité (tenseur du quatrième d'ordre). Le tenseur des contraintes $\bar{\bar{S}}$ (ou σ^{PK2}) obtenu ci-dessus est le tenseur conjugué de $\bar{\bar{E}}$ (Green-Lagrange à droite) $\bar{\bar{E}} = \frac{1}{2}(F^E \cdot (F^E)^T - I)$ où I est le tenseur identité du second ordre. La Figure 2.1 ci-dessous donne

l'ensemble des ingrédients ainsi que leur intégration dans le contexte numérique par éléments finis.

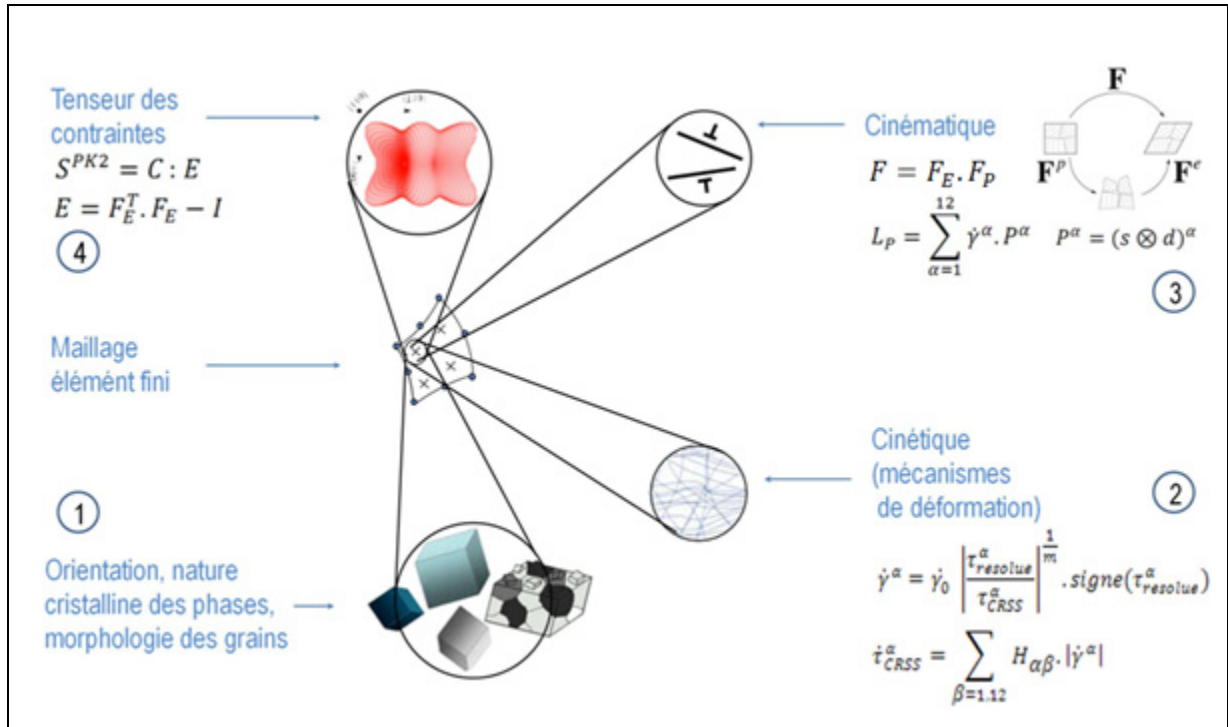


Figure 2.1 Schéma reconstituant l'intégration de la plasticité cristalline dans un cadre de résolution numérique par la méthode EF, adaptée de (Dingreville, 2010)

2.2.2 Loi d'écoulement et cinétique de durcissement

L'écoulement plastique résulte de l'activation de certains systèmes de glissement sur lesquels la contrainte de cisaillement a atteint une scission critique notée τ_{CRSS} . Une relation donnant la vitesse de la déformation de cisaillement sur un système de glissement α peut alors être écrite. Elle a initialement été proposée par Hutchinson et s'écrit (Hutchinson, 1976) :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_{resolue}^{\alpha}}{\tau_{CRSS}^{\alpha}} \right|^{\frac{1}{m}} \cdot \text{signe}(\tau_{resolue}^{\alpha}) \quad (2.6)$$

où $\tau_{resolue}$ est la scission résolue sur le système de glissement α , $\dot{\gamma}_0$ est la vitesse référence d'activation (vitesse initiale), et m un coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation.

Plus le matériau écrouit, plus la contrainte d'écoulement τ_{CRSS}^α augmente si le matériau durcit ou diminue si celui-ci s'adoucit. L'évolution de cette dernière peut être décrite par une seconde relation proposée initialement par Hill et Mandel en 1976, et qui pilote également l'influence des autres systèmes de glissement β sur le système de glissement α :

$$\dot{\tau}_{CRSS}^\alpha = \sum_{\beta=1,12} H_{\alpha\beta} \cdot |\dot{\gamma}^\alpha| \quad (2.7)$$

où $\sum_{\alpha=1,12} |\dot{\gamma}^\alpha|$ est la somme des déformations de glissement sur tous les systèmes, et $H_{\alpha\beta}$ est une matrice d'interaction qui traduit phénoménologiquement le durcissement du à l'accumulation/interaction des différents glissements impliqués. Par exemple si l'on considère uniquement deux systèmes, respectivement 1 et 2, alors H_{11} représente l'auto-durcissement du système actif 1, tandis que $H_{12} = H_{21}$ représentent le durcissement induit par 2 sur le système actif 1.

Cette matrice est proposée sous plusieurs variantes dans la littérature, en fonction de la nature du problème à modéliser mais le sens physique de H_{ij} reste de représenter l'interaction entre les différents systèmes de glissements. Une grande majorité de la littérature l'écrit en fonction de la contrainte d'écrouissage et de la contrainte de saturation, soient τ_{CRSS}^α et $\tau_{saturation}$ respectivement. Dans cette étude, la variante s'écrit :

$$H_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_0 \left(1 - \frac{\tau_{CRSS}^\alpha}{\tau_{saturation}^\alpha} \right) \right] \quad (2.8)$$

$q_{\alpha\beta}$ est ici une mesure du durcissement latent, il vaut 1,0 si α et β sont coplanaires et 1,4 si α et β sont des systèmes croisés. Le terme h_0 est le module plastique instantané en tout début

de plasticité. Ainsi, cette grandeur $H_{\alpha\beta}$ décroît progressivement jusqu'à stagner à l'approche de la saturation ($\tau_{saturation}^\alpha$ est l'asymptote). À noter que la décroissance de $H_{\alpha\beta}$ peut être décrite plus drastiquement par une fonction sécante hyperbolique. Cela a été proposé par Asaro (Asaro, 1983) et a par exemple été repris par Bassani (Bassani et Wu, 1991) afin de mieux décrire l'effet du durcissement latent :

$$H_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_0 \operatorname{sech}^2 \left(h_0 \frac{\sum_\alpha |\gamma^\alpha|}{\tau_{saturation}^\alpha} \right) \right] \quad (2.9)$$

Dans ce travail, la relation (2.8) sera gardée. Les interactions dislocations/dislocations seront négligées, $q_{\alpha\beta}$ est constante et égale à 1,0 (pas de distinction entre systèmes croisés et coplanaires). Cela introduit l'hypothèse que nos systèmes durcissent tous équitablement (écrouissage isotrope). Les impacts de cette hypothèse sont présentés ci-après.

2.2.3 Premières limitations des équations constitutives

Les principales limites des équations constitutives utilisées dans cette étude, par rapport au comportement réel du cuivre sont signalées dans cette section.

Premièrement la description du monocristal est simplifiée en assumant que le régime plastique est isotrope : on assume que chaque système est soumis au même niveau de résistance au glissement. L'on a alors isotropie du τ_{CRSS}^α qui devient indépendant de α et se réduit à un scalaire τ_{CRSS} . En réalité cependant, cette résistance peut évoluer différemment d'un système à l'autre, suivant le partitionnement de la déformation plastique. Par exemple elle est plus importante sur un système traversé par une forêt de dislocation, ou sur le système actif lorsque celui-ci se rapproche de la saturation. Une conséquence de cette simplification est que la description du comportement généralise le durcissement par interactions entre dislocation : le phénomène de durcissement latent qui découle de la distinction entre glissements coplanaires et glissements croisés est ignoré. Cependant, le cadre reste capable de reproduire les principales zones de cisaillement et la simplification

offre l'avantage que la matrice d'interaction $H_{\alpha\beta}$ est réduite à un scalaire, ce qui affranchit de l'identification de ses composantes qui sont de loin les moins aisées à identifier des paramètres d'une loi de plasticité cristalline (Bassani, Wu et Campbell, 1991).

Pour les bicristaux, les interfaces sont soumises aux effets de voisinage, qui entraîne des états de contraintes, de déformations et de rotations particuliers des deux côtés du joint de grain. Notre loi d'écoulement plastique étant basée sur la loi de Schmid, l'activité plastique causée par l'interaction du voisinage, les effets de transmission, ou autres effets locaux ne seront pas capturés. En revanche le cadre élément fini modélise par nature même les contraintes de cohérence qui contraignent les interfaces entre deux milieux anisotropes. Cela est dû à la nécessité d'assurer la continuité du milieu. Ce sont ces états de contraintes ou de déformation qui seront alors intéressants à quantifier.

Enfin, nous ne savons pas si les équations constitutives seront sensibles aux effets des compatibilités microscopiques i.e. des corrélations géométriques qui peuvent exister au sein des joints de grains – compatibilité des plans ou des directions de glissement. Le dernier chapitre se focalisera sur les effets de ces compatibilités.

2.3 Valeurs numériques des paramètres pour le cuivre OFHC

Les valeurs numériques des paramètres des équations constitutives ont été prises de la littérature – notamment des travaux de Zaafarani (Zaafarani *et al.*, 2006). Identifiés dans une hypothèse de milieu continu (core-fitting) ces paramètres restent phénoménologiques. Des essais de traction sur des éprouvettes monocristallines suffisent à fournir les courbes $\tau - \gamma$ desquelles ces différents paramètres de plasticité sont déterminés. La Figure 2.2 montre les courbes $\tau - \gamma$ expérimentale et numérique obtenues par Zaafarani pour leur procédure d'identification. Une simulation sur un cristal d'orientation $\langle 001 \rangle$ avec les mêmes conditions soit une compression axiale à un taux de déformation de $0,05 \text{ \%}.s^{-1}$ (courbe rouge) a fourni un résultat cohérent. Le maillage et la géométrie cylindrique de l'article n'ont cependant pas été reproduits. L'ensemble des valeurs pour le cuivre sont reportées dans (Tableau 2.1 –

Tableau 2.3) et l'on évalue leur influence sur le comportement simulé dans la section suivante (2.3.1).

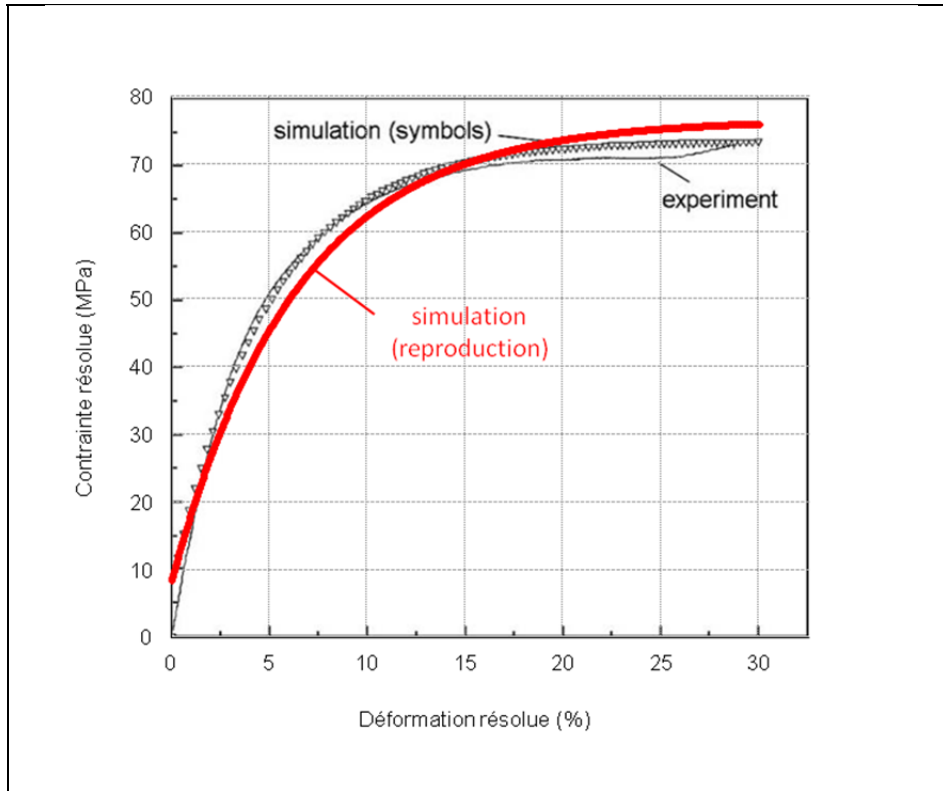


Figure 2.2 Vérification de concordance avec les données de Zaafarani sur un cristal d'orientation [111] (Zaafarani *et al.*, 2006)

Tableau 2.1 Propriétés élastiques du cuivre pur monocristallin (Bassani, Wu et Campbell, 1991)

C_{11}	C_{12}	C_{44}
170 GPa	124 GPa	64 GPa

Tableau 2.2 Récapitulatif de la loi d'écoulement et valeurs numériques des paramètres (Zaafarani *et al.*, 2006)

$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left[\frac{\tau_{resolue}^\alpha}{\tau_{CRSS}} \right]^{\frac{1}{m}} \cdot \text{signe}(\tau_{resolue}^\alpha)$	
$\dot{\gamma}_0$	$1/m$
$1,0^{E-03} \text{ s}^{-1}$	100

Tableau 2.3 Récapitulatif de la loi de durcissement et valeurs numériques des paramètres (Zaafarani *et al.*, 2006)

$\dot{\tau}_{CRSS} = H \sum_{\alpha=1,12} \dot{\gamma}^\alpha $				
$H = h_0 \left[1 - \frac{\tau_{CRSS}}{\tau_{Saturation}} \right]$				
h_0	$\tau_{Saturation} = \tau_{S0} \left[\frac{\sum_{\alpha=1,12} \dot{\gamma}^\alpha }{\dot{\gamma}_{S0}} \right]^{m'}$		τ_{S0}	$\tau_{CRSS} \text{ à } t = 0$ (κ_0)
	$\dot{\gamma}_{S0}$	m'		
200 MPa	$5,0^{E10} \text{ s}^{-1}$	$5,0^{E-04}$	75,0 MPa	8,0 MPa

2.3.1 Influence des paramètres sur le comportement simulé

L'impact des paramètres sur le comportement mécanique simulé doit être connu et évalué. Chaque paramètre des équations constitutives est alors varié autour de sa valeur principale et des simulations d'essai de traction axisymétrique sont réalisées dans les mêmes conditions ($0,5 \text{ \%} \cdot \text{s}^{-1}$ jusqu'à un allongement de 5 %) et avec les mêmes géométries. Les courbes contraintes – déformations sont ensuite relevées. Les résultats sont présentés dans les Figure 2.3 et Figure 2.4, où les courbes en trait discontinu sont celles représentant le comportement de référence (i.e. avec toutes les valeurs des paramètres d'origine).

- Taux de cisaillement de référence $\dot{\gamma}_0$ (s^{-1} ou en $\text{\%} \cdot \text{s}^{-1}$)

Ce paramètre a été varié d'un ordre 10. Du point de vue du comportement mécanique macroscopique (cf. Figure 2.3, a.), il n'influe pas sur l'allure des courbes. En revanche d'un

point de vue des glissements, ce taux de référence – qui n’est autre que le taux « seuil » à partir duquel un système est considéré comme actif – fera que l’ordre de grandeur du taux de glissement du système activé lui sera directement proportionnel.

- Coefficient de sensibilité au taux de déformation m (sans unité)

Ce paramètre a été varié d’un ordre 10. Il détermine la sensibilité de la loi à la vitesse de déformation. Une examination détaillée des courbes de comportement obtenues avec la même vitesse de chargement mais avec différentes valeurs de ce paramètre m montre logiquement que l’augmentation de sa valeur entraîne une augmentation, certes minime, mais sensible de la contrainte plastique. Plus précisément, à tout moment, l’amplitude de la contrainte plastique vérifie une loi puissance avec celle du taux de déformation ($\sigma = \dot{\epsilon}^{1/m}$), la puissance en question n’étant autre que $1/m$. La section 0 montre clairement l’influence de ce paramètre lorsque la vitesse de chargement est variée.

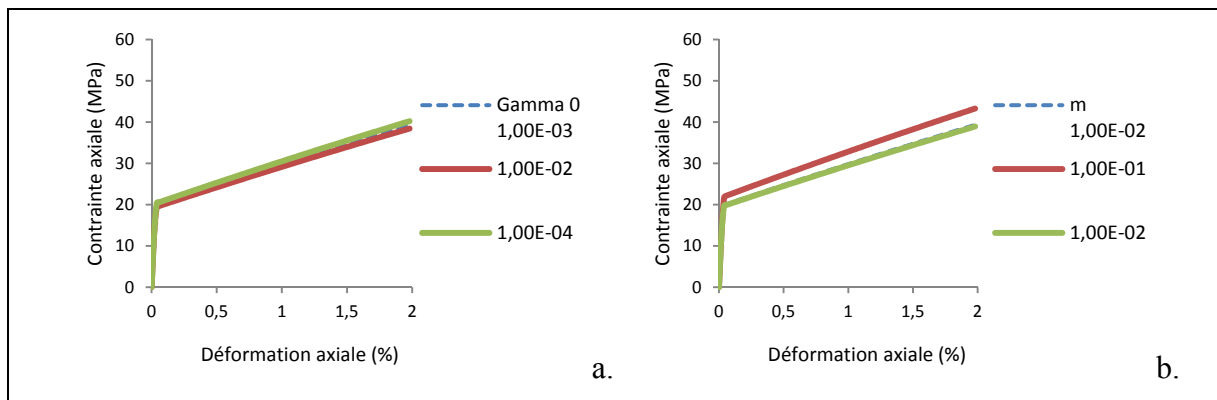


Figure 2.3 Courbes des contraintes axiales (MPa) vs. déformations axiales normalisées ($\epsilon_{33}/\epsilon_{33 \text{ MAX}}$) pour différentes valeurs de paramètres numériques de la loi d’écoulement : a) Taux de cisaillement de référence $\dot{\gamma}_0$; b) Coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation m

- Scission résolue critique initiale dans le cristal vierge κ_0 ou $\tau_{CRSS}(t = 0)$ (MPa)

C’est la valeur initiale de la surface de charge associée à chaque système de glissement. En réalité, il s’agit de la contrainte de cisaillement nécessaire pour activer celui-ci. Ainsi, lorsqu’il est augmenté/diminué (Figure 2.4.a) le seuil de plasticité se translate alors vers le haut/bas. Dans le cas d’un cristal accommodant par glissement unique, κ_0 sera directement la

limite élastique, biaisée, manifestement, par son facteur de Schmid. Lorsque plusieurs systèmes sont impliqués dès le départ – comme tel est le cas dans de l'orientation [001] prise dans cette étude paramétrique – la limite élastique va être déterminé par la contribution de tous les systèmes concernés.

- Module plastique du premier système de glissement h_0 ou θ_0 (MPa)

Dans notre formulation il s'agit simplement d'un taux initial de durcissement. Sa variation entraîne différentes pentes de plasticité dans la courbe de comportement (Figure 2.4) dû au fait que l'évolution du τ_{CRSS} (i.e. la vitesse d'écrouissage) lui est directement proportionnelle.

- Contrainte de saturation du premier système de glissement τ_{s0} (MPa)

Niveau initial de la saturation, il représente physiquement le niveau de contrainte à laquelle un système de glissement sature. En réalité, cette saturation du premier système s'obtient par des test de durcissement latent, mais elle est difficilement mesurable expérimentalement car la valeur de la contrainte relevée à la soit dite « saturation » compose forcément avec les effets des autres systèmes (Bassani, Wu et Campbell, 1991).

- Vitesse de référence de glissement $\dot{\gamma}_{s0}$ (s^{-1} en $\%.s^{-1}$)

Assimilable à une vitesse d'accumulation, il s'agit d'une autre vitesse de référence mise en œuvre dans la loi de durcissement afin de fixer la vitesse à laquelle un système de glissement tend vers saturation (d'où le rapport $\frac{\sum \alpha |\dot{\gamma}^\alpha|}{\dot{\gamma}_{s0}}$). Il influe très peu sur le comportement simulé, cf. Figure 2.4.e.

- Coefficient de sensibilité à la vitesse de glissement m' (sans unité)

De même que le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation, ce dernier paramètre induit une certaine sensibilité d'un système actif à atteindre plus ou moins vite son durcissement à saturation. D'après la courbe de comportement de la Figure 2.4.f, l'on voit que pour m' minimum, la courbe est en hausse. Pour rattraper le niveau des deux autres courbes, l'on pourrait alors agir en abaissant τ_{s0} .

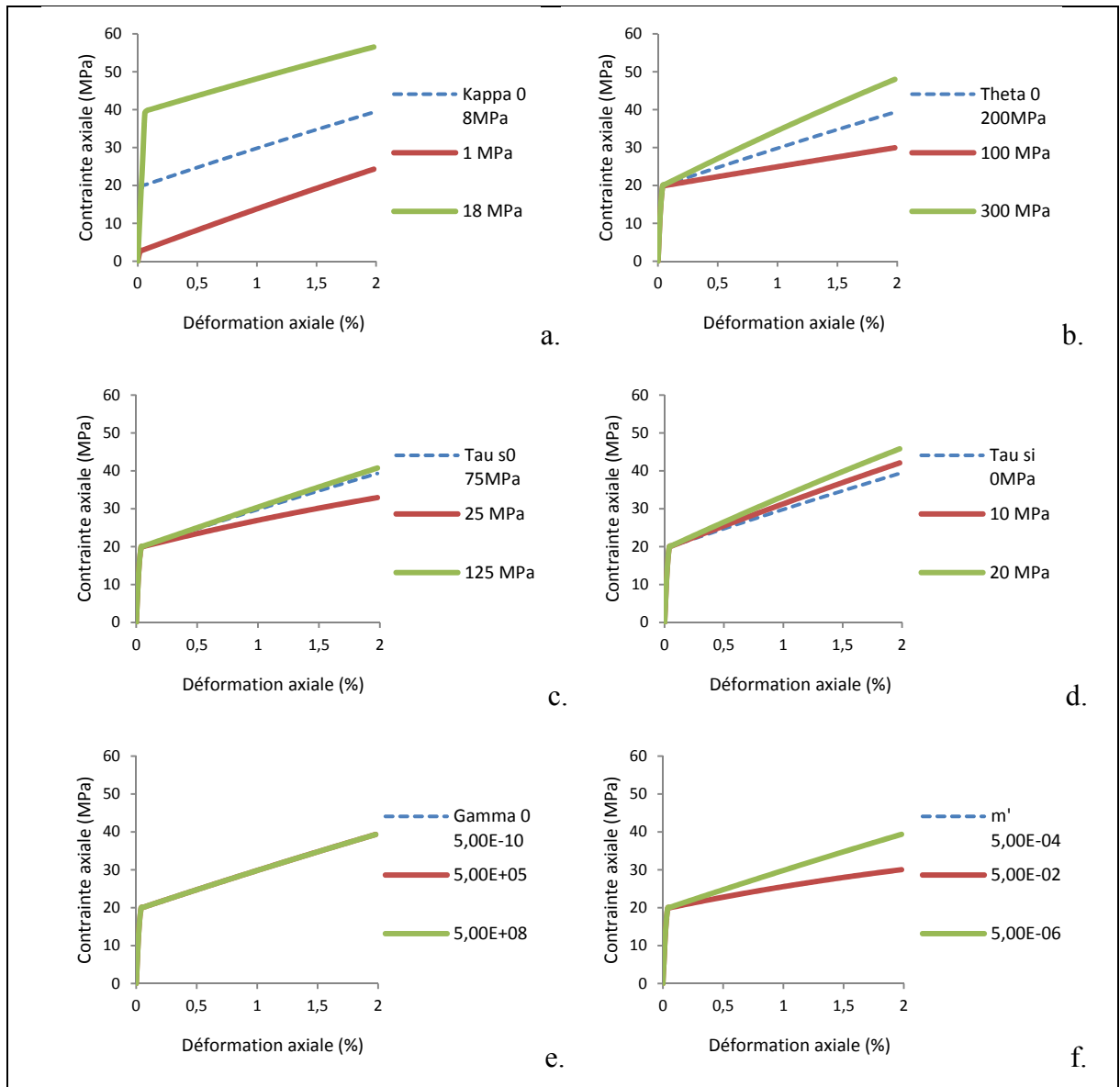


Figure 2.4 Courbes des contraintes axiales (MPa) vs. déformations axiales normalisées pour différentes valeurs de paramètres numériques de la loi d'écoulement : a) Scission critique résolue initiale κ_0 ; b) Taux initial de durcissement h_0 ou θ_0 ; c) Contrainte de saturation du premier système de glissement τ_{s0} ; d) Durcissement initial τ_{si} ; e) Vitesse de référence de glissement γ'_{s0} ; f) Coefficient de sensibilité à la vitesse de glissement m'

2.3.2 Influence de la vitesse de déformation sur le comportement simulé

La sensibilité du comportement à cette vitesse est gérée par l'exposant m de la loi puissance, cf. équation (2.6). Pour le cuivre la valeur de ce coefficient est de 0,01 (Zaafarani *et al.*, 2006). Le niveau de contrainte à un même instant a été reporté pour plusieurs vitesses de chargement allant de $10\text{ \%}\cdot\text{s}^{-1}$ à $0,01\text{ \%}\cdot\text{s}^{-1}$ (Figure 2.5). L'on remarque que les amplitudes de la contrainte axiale (σ_{33}) sont fonction « puissance » de la vitesse de déformation, l'exposant de la courbe formée n'étant alors rien d'autre que m . En réalisant la même opération pour un coefficient m élevé (0,05 pour le titane), l'on note une courbe beaucoup plus élargie, signe que la moindre variation de la vitesse entraine une plus large variation de la contrainte.

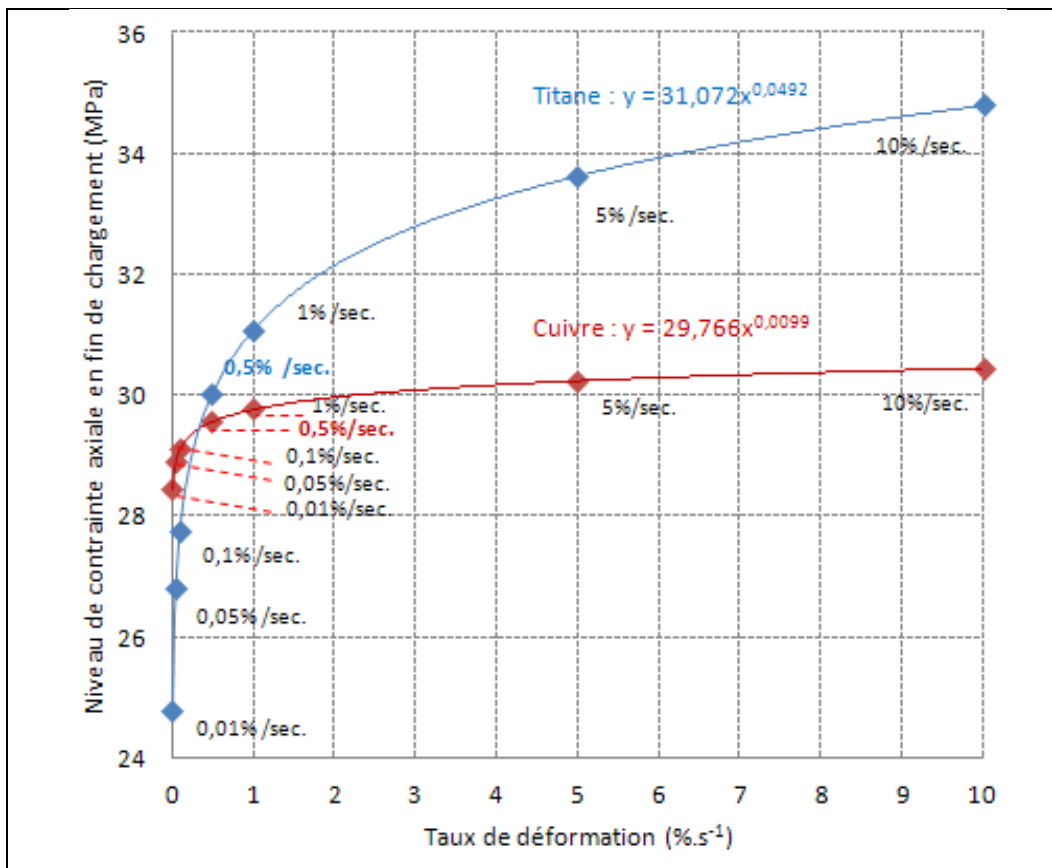


Figure 2.5 Contrainte axiale σ_{33} (MPa) en fin de chargement en fonction de la vitesse de déformation. Bleu : $m = 0,05$ ex. titane (Marin, 2006); Rouge : $m = 0,010$ ex. cuivre; Courbes obtenues à partir d'un modèle cubique à 1 élément pour un chargement d'axe [001]

2.4 Implémentation numérique

Les simulations numériques ont été réalisées avec le logiciel FEA ABAQUS ®. La présente section fournit des précisions sur la géométrie des éprouvettes simulées, le maillage utilisé et les conditions aux limites du calcul. Finalement, les principales caractéristiques du solveur « explicite », notamment en termes d'avantages et d'inconvénients seront discutées.

2.4.1 Géométrie et maillage EF

Les modèles utilisés pour les simulations mono- et bicristallines sont des éprouvettes de géométrie parallélépipédique de longueur $L = 1$ mm et de section carré $l = e = 0,25$ mm (cf. Figure 2.6).

Une taille de maille de $1/32 L$ correspondant à un maillage de 512 éléments a été utilisée pour les simulations monocristallines (Figure 2.6.a). Un test de convergence a préalablement été effectué par l'intermédiaire de modèles à $1/16 L$ (256 éléments), $1/8 L$ (64 éléments) et $1/1 L$ (élément unique). La comparaison des courbes de comportement a permis de constater que le comportement monocristallin n'évoluait que très peu dès le maillage à 64 éléments. De plus un raffinement selon X ou Y ne donnait aucun avantage en termes de convergence du comportement. Ce qui provient de la géométrie régulière et de l'uniaxialité du chargement.

Un maillage plus fin a été utilisé pour les calculs bicristallins (cf. Figure 2.6.b). Il s'agit d'un maillage à $1/48 L$ à la base avec un raffinement à $1/176 L$ dans la région du centre (région de l'interface). Le maillage obtenu est de 4320 éléments car un raffinement selon X et Y a été nécessaire pour éviter l'aplatissement excessif des éléments du joint de grain. Le choix de la géométrie à section carré a été fait pour éviter la différenciation de la largeur et l'épaisseur de l'éprouvette qui conduirait à une ambiguïté dans la lecture entre les composantes transversales des contraintes et de la déformation (σ_{11} et σ_{22} puis entre ε_{11} et ε_{22}). Le type d'élément est un hexaèdre 3D avec un seul point d'intégration au centre, et 8 nœuds d'interpolation linéaire. Il s'agit des éléments C3D8R dans le code Abaqus.

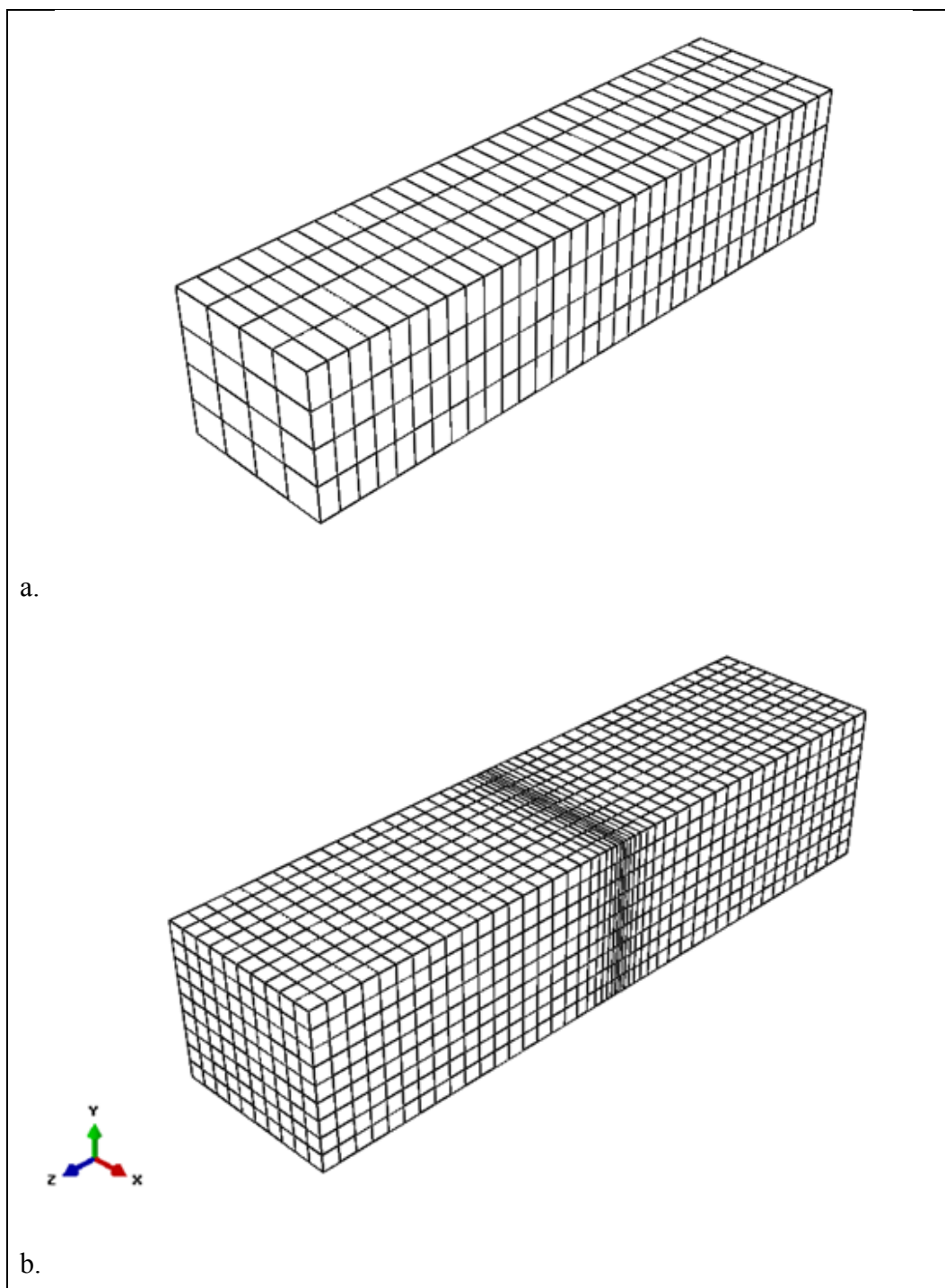


Figure 2.6 a) Maillage à 512 éléments utilisé pour les calculs monocristallins; b) maillage à 4320 éléments utilisé pour les calculs bicristallins – axe de chargement $\vec{z}$

2.4.2 Conditions aux limites et conditions de chargement

Tous les monocristaux et les bicristaux de cette étude ont été sollicités en traction monotone uniaxiale d'axe $\vec{z}$. Plus précisément, une vitesse de déplacement est appliquée à chaque bord ($\pm z$) de l'éprouvette de manière parfaitement antagoniste. Elle est choisie avec une certaine considération des conditions expérimentales réelles pratiquées dans la littérature (Glenn et Bradley, 1973; Llanes *et al.*, 1993). Les taux de déformation expérimentaux en essais quasi-statiques sur du cuivre sont de l'ordre de $0,1 \text{ \%} \cdot \text{s}^{-1}$ voire $0,01 \text{ \%} \cdot \text{s}^{-1}$. Différentes sources d'instabilité affectent en effet le comportement à haute vitesse. Cependant les capacités numériques combinées à la quantité de cas à simuler nous ont conduits à une vitesse de $5 \text{ \%} \cdot \text{s}^{-1}$ pour maintenir un temps d'accomplissement raisonnable, notamment pour les calculs sur le modèle à 4320 éléments. Cela correspond à un déplacement aux bords de $0,025 \text{ mm s}^{-1}$ (éprouvette de $L = 1 \text{ mm}$). Les calculs sont alors arrêtés à 2,5 % d'allongement axial.

L'évitement des modes rigides de déformation ou de rotation a été assuré en bloquant certains degrés de liberté des coins de l'éprouvette. L'ensemble des blocages fait en sorte qu'il ne soit pas nécessaire d'encasturer un point du modèle comme cela est souvent pratiqué pour fixer les conditions aux limites. Cependant la restriction du mouvement de ces coins concentre anormalement des contraintes, notamment les composantes transversales. Il est alors généralement préférable d'exclure ces éléments communs aux coins, ou bien de réaliser les simulations directement sur des géométries réelles de microéprouvettes.

Enfin il peut être utile de mentionner que l'écriture sous forme incrémentale des équations constitutives est due à la dépendance au temps du comportement décrit (ex. viscoplasticité). Cela implique de donner l'amplitude de déformation souhaitée avec la durée voulue ($t_2 - t_1$) pour atteindre la déformation. Il est donc plus commode de fournir directement la vitesse de déplacement comme conditions aux bords.

2.4.3 Résolution implicite/explicite

Il est nécessaire de distinguer la part de la vumat et celle du solveur EF dans la résolution. Ce dernier a en effet besoin de la description de la transformation F et de la loi de comportement liant $\sigma(u)$ au déplacement u afin de renvoyer la contrainte induite par la transformation. Cette loi est fournie par la vumat. Ainsi, le rôle principal de la vumat est de fournir l'incrément de contrainte qui permette d'atteindre le gradient de déformation F tout en vérifiant la condition d'équilibre au sens énergétique.

La résolution explicite se réfère ici à la procédure de recherche de solution appliquée par le code EF et non par la vumat elle-même pour le calcul de ses propres variables internes. En termes, elle s'applique aux entités génériques F et σ et non aux quatre principales variables internes (τ^α , R , τ_{CRSS} , $\dot{\gamma}^\alpha$) définies dans la vumat. Le code EF met ainsi à jour $F_{t+\Delta t}$ et $\sigma_{t+\Delta t}$ en connaissant entièrement leurs valeurs F_t et σ_t à l'instant t . Le schéma explicite est donc peu coûteux sur un incrément de temps Δt et est stable à condition d'avoir ce dernier suffisamment petit. La seule boucle, qui se fait par dichotomie, consiste à trouver l'incrément de temps qui vérifie la condition d'équilibre et qui assure la stabilité de l'analyse. La principale contrainte d'une procédure explicite réside en la nécessité d'opérer avec de très petits incréments de temps Δt . Cela implique très souvent un grand nombre d'incrémentes et un temps de calcul conséquent. Les artéfacts numériques palliatifs sont nombreux mais peuvent introduire des phénomènes d'instabilités qu'il faut contrôler (Harewood et McHugh, 2006). Cela est discuté dans la section sur le contrôle de la stabilité numérique (cf. 2.4.4).

En procédure implicite, la grandeur calculée à l'instant $t + \Delta t$ dépend de sa valeur à $t + \Delta t$ elle-même. Ainsi elle nécessite obligatoirement une itération à chaque incrément de temps pour rechercher la grandeur consistante (ex. $\sigma_{t+\Delta t}$) vérifiant la condition d'équilibre. Cette étape étant assurée par un schéma de Newton-Raphson, il faut inverser la matrice tangente ou jacobien à chaque incrément de temps. Cela est le cas des variables internes $\dot{\gamma}^\alpha$, τ^α et τ_{CRSS} , ce qui explique la nécessité du calcul des jacobiens $d \dot{\gamma}^\alpha / d \tau_{CRSS}$ et respectivement $d \dot{\gamma}^\alpha / d \tau^\alpha$ au sein de la vumat qui sont les étapes les plus consommatrices de ressource.

Cependant, la méthode autorise des incréments de temps 10 à 100 fois plus large que les pas de temps en explicite ce qui représente un gain significatif de nombre d'incrément et donc de temps de calcul. De plus elle est inconditionnellement stable. Le présent cadre numérique implique donc les deux schémas d'intégration pour deux différents groupes de variables, F et σ d'un côté, et $\dot{\gamma}^\alpha$, τ^α et τ_{CRSS} de l'autre. L'article de Roters (Roters *et al.*, 2010) montre que les deux méthodes d'intégration mènent à des résultats similaires mais que pour des problèmes à large nombre d'élément ou points, une procédure explicite est plus appropriée. Aucune étude quantitative sur l'efficacité relative d'une méthode entièrement explicite par rapport à une méthode entièrement implicite n'a été menée, cependant le présent travail se situe dans la continuité des travaux de Sandia National Laboratories, ce qui nous a amenés à travailler dans ce cadre « semi-explicite ».

2.4.4 Contrôle de la stabilité numérique

Afin de réduire le temps de calcul, il est commun de recourir à des artéfacts numériques qui affectent sa stabilité (Harewood et McHugh, 2006; Kutt *et al.*, 1998), il s'agit d'un problème majeur en analyses explicites. La réduction du temps de calcul implique alors principalement de jongler sur trois entités qui sont la densité physique du matériau, la vitesse de chargement, et enfin la qualité du maillage. L'impact des deux premiers paramètres a premièrement été évalué via des simulations avec le modèle à 512 éléments et respectivement à élément unique. Le temps de calcul a été relevé tandis que l'apparition des signes d'instabilité dynamique est repérée – elle se manifeste par des oscillations dans le comportement mécanique. L'ensemble des valeurs retenues pour nos simulations sont alors reportées dans les Tableau 2.4 et Tableau 2.5.

Tableau 2.4 Gain de temps obtenu par mise à échelle de la masse (*mass scaling*)

Densité (g/cm^3)	Temps de calcul (s)	Stabilité
$\rho = 8,92$	4h 40'	Oui
$\rho * 10$	1h 40'	Oui
$\rho * 100$	30'	Non

Tableau 2.5 Gain de temps obtenu par une augmentation de la vitesse de déformation

Taux de déformation	Temps de calcul (s)	Stabilité
$v = 0,05 \% \cdot s^{-1}$	2' 18''	Oui
$v * 10$	16''	Oui
$v * 100$	3''	(dépend du maillage)

À ces conditions retenues (fond gris dans les tableaux), la stabilité reste encore susceptible d'être perturbée par la taille des éléments du maillage utilisé – voir notamment dernier cas $v * 100$. En effet plus la taille des éléments diminue (maillage de haute qualité), plus on augmente naturellement la qualité des résultats, mais plus le modèle devient sensible à la propagation d'ondes de pression. Afin d'éviter cette dernière, il faut alors s'approcher le plus possible des conditions réelles de chargement. En d'autres termes, la densité matériau et la vitesse de chargement doivent être ramenées à leur valeur réelle pour éviter ces propagations d'onde. Une autre option est de desserrer le maillage (i.e. le rendre plus grossier). Or un raffinement du maillage a bien été nécessaire dans notre cas, notamment pour la section bicristalline où une taille d'élément de $1/176 L$ – soit avoisinant $5,6 \mu m$ est requise (Priester, 2011) pour pouvoir capturer un comportement « local » de l'interface cristalline. L'utilisation des artéfacts ci-dessus (augmentation de la densité et de la vitesse de chargement) est alors inévitable pour réduire le temps de calcul. Mais elle a pour impact de nous faire tendre vers les limites de la stabilité numérique. La démarche de vérification de la stabilité qui a été réalisée est alors explicitée ci-après.

Une relation (AbaqusV6.8, 2008) relie la densité matériau et la taille des éléments de maillage à la taille de l'incrément de temps nécessaire pour écarter les risques d'instabilité numérique. L'estimation de l'incrément de temps conservatif doit vérifier la relation :

$$\Delta t = \frac{L}{C} < \frac{L}{\omega_{MAX}} \quad (2.10)$$

avec L [mm] la longueur caractéristique du plus petit élément dans le modèle, ω_{MAX} la fréquence propre du système mécanique et C [mm/s] la vitesse de propagation des ondes de pression au sein du matériau. Son expression est :

$$C = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \quad (2.11)$$

avec ρ [tonne/mm³] la densité du matériau, λ et μ étant les constantes de Lamé du matériau.

Une taille d'élément de 5,6 μ m donne alors des incréments de temps stables de 10^{E-06} s lorsque l'incrément de temps critique approximé par Abaqus par l'intermédiaire de ω_{MAX} est de 10^{E-02} s, ce qui vérifie bien l'inégalité (2.10). Cependant il est important de noter est la vitesse de chargement impacte beaucoup sur la fréquence propre ω_{MAX} du système (qui peut augmenter de manière drastique et ainsi diminuer Δt). Comme il n'existe pas de relation directe entre la vitesse de chargement et cette fréquence propre, la stabilité doit être vérifiée d'un autre moyen. Ici, elle sera simplement supposée assurée lorsqu'aucune oscillation n'est repérée dans les courbes de comportement. En outre, la littérature (Harewood et McHugh, 2006; Kutt *et al.*, 1998) et le manuel Abaqus recommande de s'assurer que l'énergie cinétique du système n'excède pas 5 % de l'énergie total du système (informations renvoyées par le solveur dynamique dans le fichier *.sta). Cette condition a été vérifiée pour l'ensemble de nos simulations et aucun signe d'instabilité n'a été détecté.

CHAPITRE 3

ÉTUDE QUANTITATIVE DE L'ANISOTROPIE DU COMPORTEMENT ÉLASTO-PLASTIQUE EN FONCTION DE L'ORIENTATION CRISTALLOGRAPHIQUE

3.1 Objectifs

La section précédente présentait essentiellement les caractéristiques du cadre numérique et les hypothèses de la modélisation. La présente section consistera à réaliser une série de simulations en traction monotone uniaxiale sur des monocristaux. L'objectif est d'évaluer la tendance du comportement macroscopique (contraintes et déformations) et microscopique (glissements cristallins) par rapport à quatre critères qui dictent supposément le comportement cristallin. Ces critères sont le module élastique anisotrope, les deux facteurs de Schmid principaux et enfin le ratio entre ces deux principaux facteurs de Schmid. L'impact de chaque critère sur le comportement monocristallin sera évalué. Les résultats serviront aussi à documenter les phénomènes qui seront observés dans les joints de bicristaux au Chapitre 4. Enfin, il s'agira aussi de cerner les limitations de ce cadre numérique.

3.2 Orientations cristallographiques et représentations en figure de pôles

3.2.1 Des angles d'Euler aux pôles de projection stéréographique

L'orientation cristallographique désigne l'orientation d'un grain au sein de la microstructure par rapport à un repère macroscopique fixée par exemple celui de l'échantillon. L'orientation est alors définie par la relation entre les axes principaux du cristal, ici (e_1^C, e_2^C, e_3^C) et les axes principaux macroscopiques, ici (X, Y, Z) (Figure 3.1). La relation entre les deux bases est entièrement décrite par un triplé d'angles d'Euler où chacun désigne une rotation spécifique. Dans cette étude la convention qui régit ces trois rotations successives est la convention de Bunge dont les caractéristiques ainsi que la matrice de rotation résultante en sont détaillées dans l'annexe II. Dans cette convention, le triplet d'angles d'Euler est alors noté (ϕ_1, Φ, ϕ_2) .

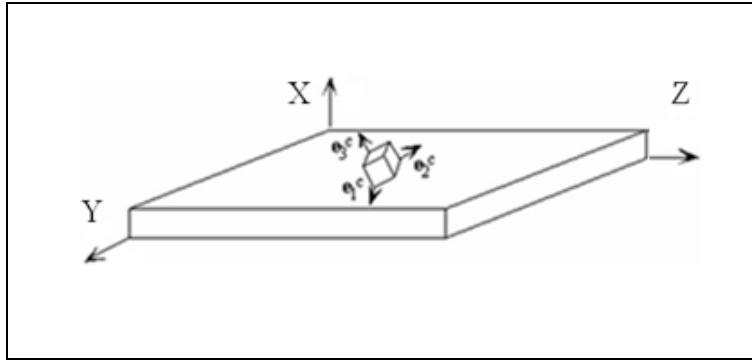


Figure 3.1 Axes principaux du cristal (e_1^C, e_2^C, e_3^C) et axes principaux de l'échantillon (X, Y, Z)

Une représentation graphique simplifiée de l'orientation cristalline largement utilisée en cristallographie est la représentation par projection stéréographique de ces axes principaux étant donnés ϕ_1 , Φ et ϕ_2 . Il s'agit de la représentation en figure de pôles, un pôle étant formé par la projection stéréographique d'une des axes principaux du cristal – ex. e_1^C, e_2^C ou e_3^C au sein de la base macroscopique (X, Y, Z). Les analyses pratiques s'intéressent cependant plus aux propriétés mécaniques du cristal par rapport à une direction macroscopique spécifique – notamment la direction de chargement, ici Z . L'on préférera alors la représentation en figure de pôles « inverse ». Elle consiste à se placer d'emblée dans la base cristalline et ainsi à repérer l'axe de chargement au niveau du cristal comme le montre la Figure 3.2. Le pôle de projection stéréographique associé à cet axe est alors représentatif de l'orientation cristallographique mais il n'est toutefois pas la plus rigoureuse car les autres axes X et Y sont libres de tourner autour de Z (le triplet ϕ_1 , Φ et ϕ_2 est défini à une rotation de 360° autour de Z près). La pertinence des analyses du comportement mécanique est néanmoins conservée car l'on se place dans un contexte de contrainte uniaxiale selon l'axe Z .

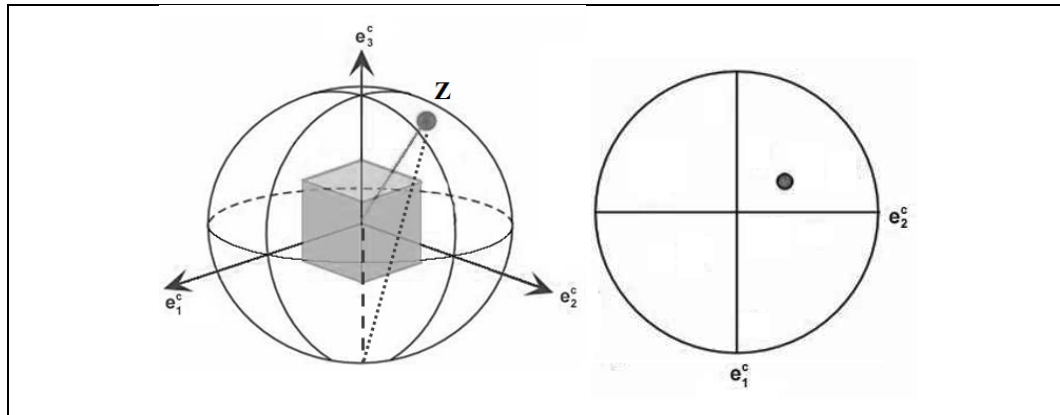


Figure 3.2 Repérage de l'axe macroscopique Z dans la base cristalline et pôle inverse de projection stéréographique associé

Une restriction doit être apportée concernant la lecture d'une projection stéréographique. En effet la forme cubique d'une maille CFC introduit 4 directions équivalentes sur chacune des 6 faces du cube soit un total de 24 équivalences pour un pôle Z donné (Figure 3.3). Les analyses peuvent alors être limitées à un seul domaine qui est celui du triangle standard ou figure de pôles inverse réduite. Ce dernier est délimité par trois sommets dont les coordonnées en indices de Miller (cf. 1.2.2), seront respectivement $[001]$, $[011]$ et $[111]$, comme montrées sur la Figure 3.3.

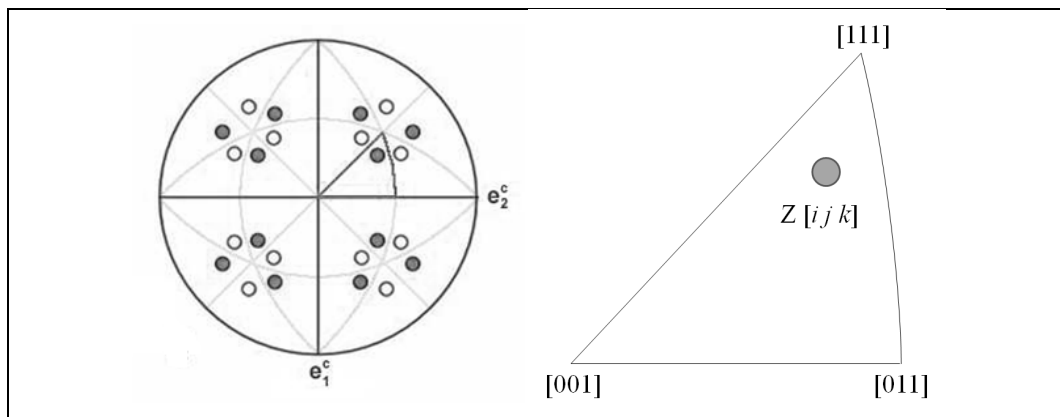


Figure 3.3 Figure de pôles inverse et représentation de l'axe Z dans le triangle standard $[001][011][111]$

La représentation en figure de pôles inverse réduite sera largement utilisée dans ce manuscrit. Un intérêt est aussi qu'un système de glissement (ex. $D4$ selon la nomenclature donnée au Tableau 1.1) est unique peu importe l'orientation cristalline dès lors que cette dernière se trouve dans le domaine du triangle standard $[001][011][111]$ et respecte les conditions sur les angles d'Euler tels que présentées dans le Tableau 3.1.

Tableau 3.1 Domaine des angles d'Euler dans le triangle standard $[001][011][111]$

Angle d'Euler	Domaine en degrés
ϕ_1	$[0; 360]$
ϕ	$[0; 54,736]$
ϕ_2	$[0; 45]$

3.2.2 Représentation en figure de pôles des critères d'anisotropie élastique et plastique

Les différents critères d'anisotropie ainsi que leur mode de calcul ont été introduits dans le premier chapitre (cf. 1.2.3), il s'agit du module élastique directionnel $E_{\vec{z}}$ et du facteur de Schmid μ_{α} associé à chaque système de glissement α . L'on peut tracer une carte de l'amplitude de ces facteurs en fonction de l'orientation cristallographique, soit en fonction de la position spatiale dans l'espace du triangle standard $[001][011][111]$. Cela offre un cadre visuel facilitant la lecture de ces critères et facilitera le choix d'orientations pour les analyses de comportement anisotrope élasto-plastique. Pour être pertinent, $E_{\vec{z}}$ et μ_{α} doivent être calculés et représentés par rapport à l'axe de chargement Z .

En outre, le rapport entre les deux facteurs de Schmid les plus élevés, nommés ici μ_1 et μ_2 , peuvent exprimer le mode de glissement (i.e. simple, double ou multiple). En effet le ratio $R_{\mu} = \mu_2/\mu_1$ détermine le potentiel d'activation du second glissement par rapport au premier système et peut ainsi constituer un quatrième critère dont il est intéressant d'en voir les effets sur le comportement plastique cristallin. L'ensemble des 4 critères $E_{\vec{z}}$, μ_1 , μ_2 et R_{μ} sont

tracés en termes d'amplitude dans le triangle standard $[001][011][111]$ sur la Figure 3.4. Les lignes à valeur constante sont les lieux des orientations équivalentes – en termes du critère.

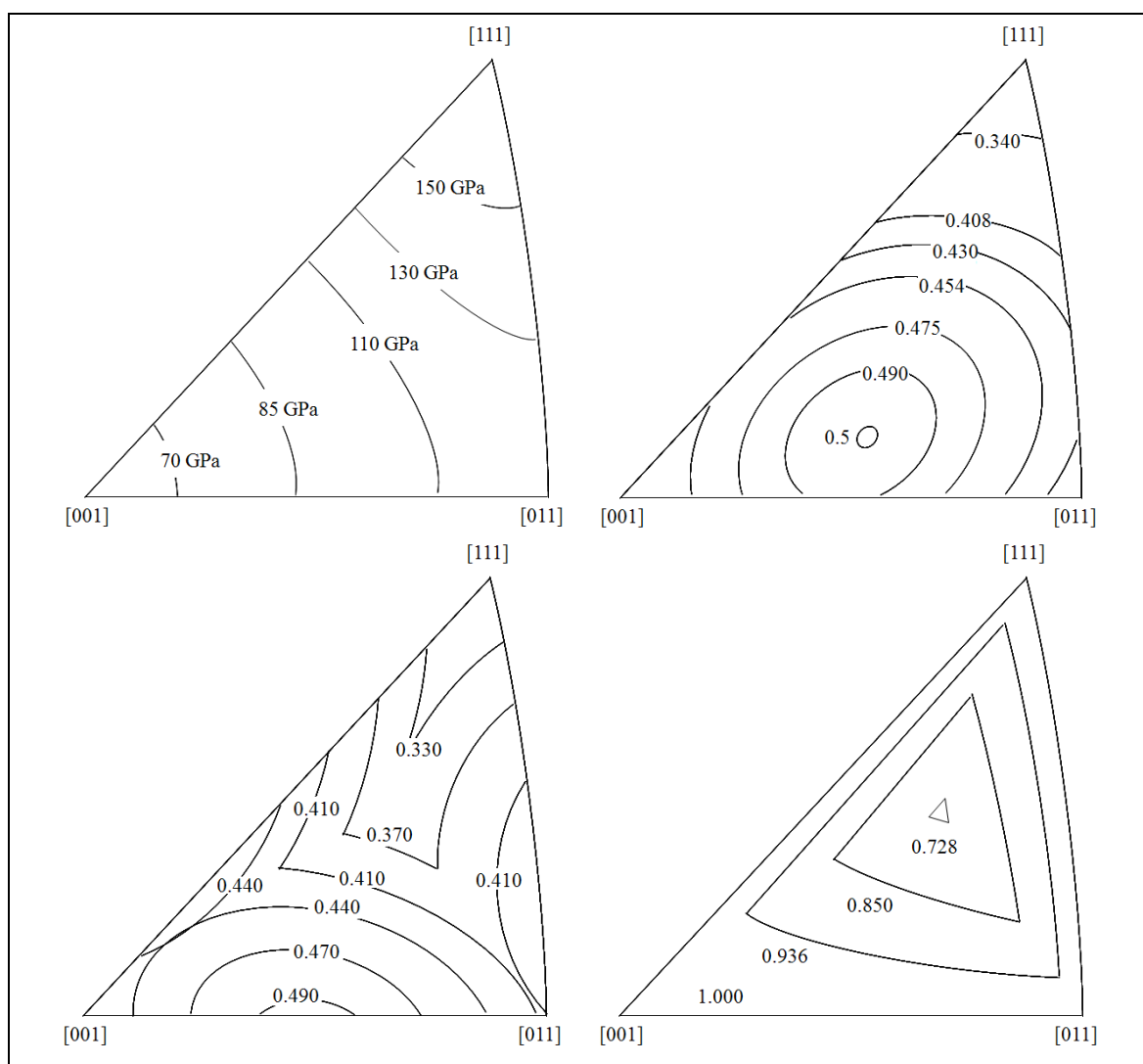


Figure 3.4 Représentation (selon Z) des lignes à critère d'anisotropie constant dans l'espace du triangle standard $[001][011][111]$. De gauche à droite et de haut en bas : le module élastique (module d'Young), le facteur de Schmid primaire μ_1 , le facteur de Schmid secondaire μ_2 , et le ratio des deux principaux facteurs de Schmid $R_\mu = \mu_2 / \mu_1$

3.2.3 Sélection d'orientations monocristallines et regroupement des orientations selon chaque critère

Les orientations ont été choisies de sorte à vérifier deux critères à la fois, soit le facteur de Schmid μ_1 et le ratio R_μ que l'on considère comme étant les deux plus importants. Cela se traduit par des pôles situés à l'intersection des lignes de critère (μ_1 et R_μ) constant. La signification physique est que ces orientations peuvent être regroupées en des ensembles ayant chacun le même facteur de Schmid par exemple, mais elles peuvent également être regroupées en des ensembles ayant chacun le même ratio R_μ c'est-à-dire le même nombre de glissements actifs.

Pour cela, un total de 41 orientations cristallographiques a été choisi sous ces deux critères, ce qui est montré dans la Figure 3.5 qui représente les pôles de projection stéréographique et leur numéro arbitrairement attribué. Par souci de temps et de clarté, seuls 22 monocristaux ont été retenus pour les simulations. Dans la Figure 3.5 il s'agit de ceux dont le numéro est encadré. Un tableau listant l'ensemble des orientations est donné en annexe III avec pour chaque orientation les paramètres leur correspondant (module élastique, facteur de Schmid primaire μ_1 , secondaire μ_2 et le ratio $R_\mu = \mu_2/\mu_1$).

Afin de faciliter la lecture graphique, un code de couleur est associé à chaque critère. Notamment l'on associera les couleurs vives aux niveaux les plus élevés de ces critères. Les codes de couleurs présentement appliqués aux figures de pôles inverses seront alors appliqués aux différentes courbes (contraintes, déformations, etc.).

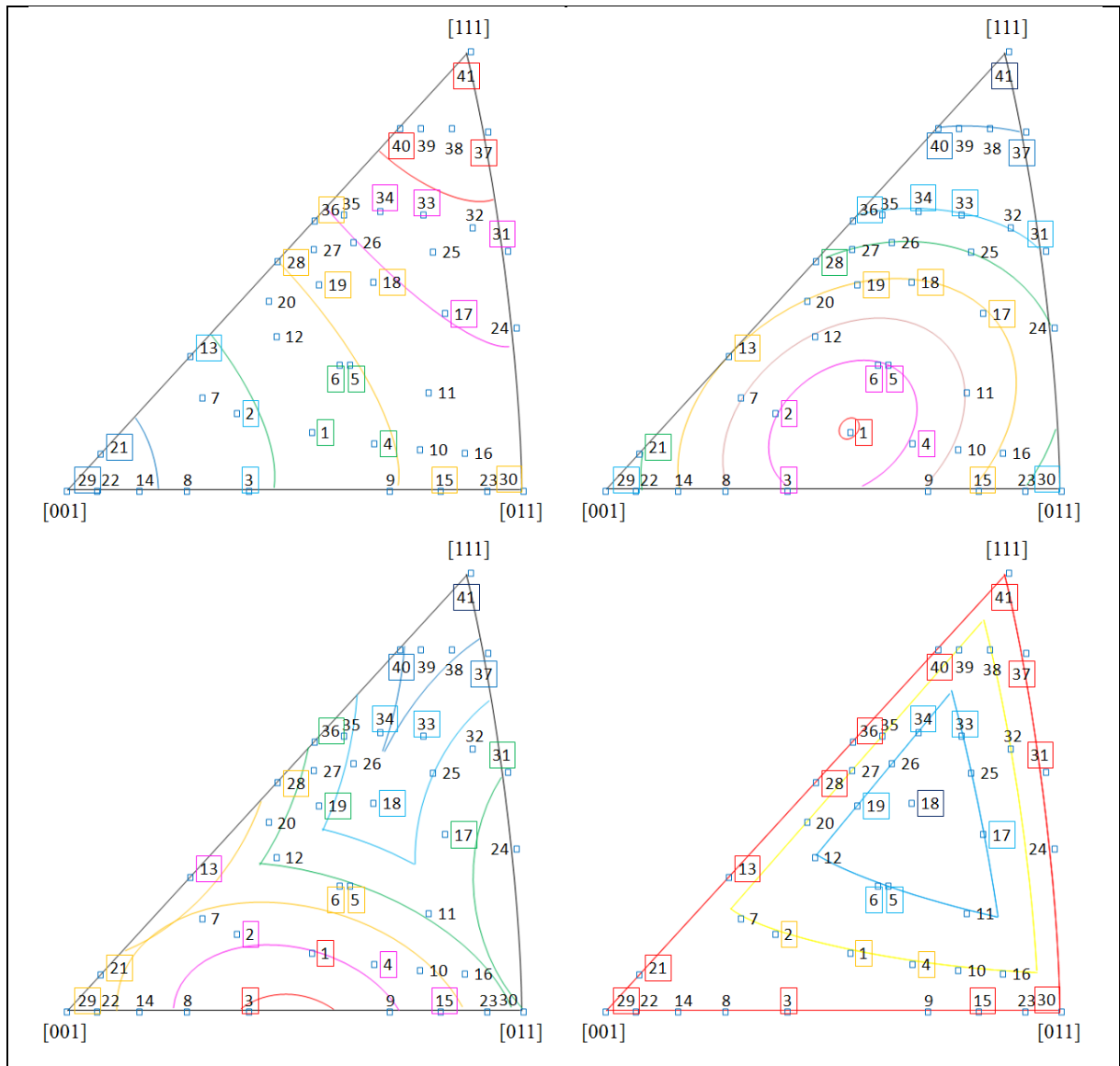


Figure 3.5 Représentation en figure de pôles inverse $[001][011][111]$ selon Z de l'ensemble des orientations cristallines en fonction des différents critères d'anisotropie. De gauche à droite et de haut en bas : le module élastique (module d'Young), le facteur de Schmid primaire μ_1 , le facteur de Schmid secondaire μ_2 et enfin le ratio des deux principaux facteurs de Schmid $R_\mu = \mu_2 / \mu_1$

3.3 Comparaison du comportement de quelques monocristaux avec des données expérimentales issues de la littérature

3.3.1 Conditions de simulation et pôles comparés

Les données expérimentales de Cuitinio et Ortiz (Cuitinio et Ortiz, 1992) ont été reprises pour les présentes comparaisons. Les courbes expérimentales du comportement des monocristaux de cuivre OFHC ont été obtenues par des tests de traction simple avec un contrôle de la vitesse de déformation. Cette dernière n'a pas été précisée dans la littérature, mais elle est généralement faible et peut être assumée de l'ordre de $1,0^{E-03} \text{ s}^{-1}$ afin de permettre un mouvement naturel des dislocations. Les simulations de traction ont été réalisées sur différentes orientations cristallographiques, repérées par leur pôle de projection stéréographique soient [001], [011], [111], [112], [122] et [012] (Figure 3.6). Ce dernier pôle i.e. [122] a uniquement été simulé pour la comparaison avec l'expérimental et n'a pas été prévu par notre liste d'orientations d'intérêt.

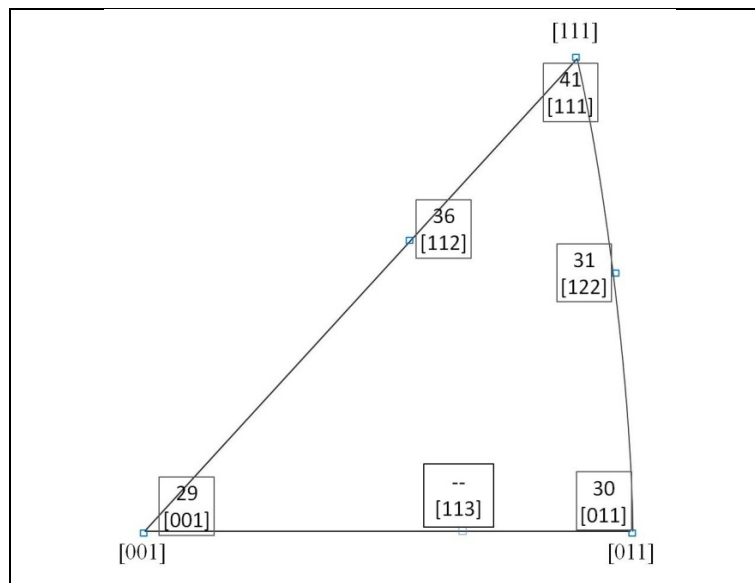


Figure 3.6 Représentation en figure de pôles inverse [001][011][111] des orientations comparées avec l'article de Cuitinio et Ortiz

3.3.2 Confrontation des courbes de comportement en traction et discussions

Les simulations ont été réalisées sur la géométrie à section carrée ($1 \times \frac{1}{4} \times \frac{1}{4} \text{ mm}^3$) avec des conditions aux bords similaires à celles de l'article soit une vitesse de déplacement imposée de 0,005 mm/s jusqu'à une déformation finale de 10 %. Les courbes de comportement sont alors reportées en Figure 3.7 et Figure 3.8.

On constate que seule la courbe [111] simulée correspond avec la courbe expérimentale, ce qui est en accord avec la vérification de concordance avec les données de Zaafarani faite au Chapitre 2 (Zaafarani *et al.*, 2006). En revanche les autres pôles ne coïncident pas et présentent un plus ou moins grand écart avec l'expérimental. En effet les écarts peuvent aller de 10 MPa pour le pôle [001] par exemple à plus de 70 MPa en larges déformations notamment pour les pôles [011] ou [122] (cf. Figure 3.7 et Figure 3.8). Les mesures expérimentales avaient été obtenues par la moyenne de plusieurs séries et chaque orientation montrait peu de dispersion de mesure. L'origine de tels écarts vient donc d'une incapacité du modèle dans sa version actuelle à rendre proprement compte de l'anisotropie du comportement plastique du cuivre.

Par exemple, les courbes des cristaux [001] et [011] sont confondues dans nos simulation alors que ces deux orientations se comportent clairement différemment en réalité (cf. symboles losanges et cercles sur la Figure 3.7). De même, les courbes des cristaux [112] et [122] sont aussi confondues dans les simulations et ce n'est pas le cas en réalité (Figure 3.8). Ces remarques sont simplement conformes à l'hypothèse de calcul qui est tel que c'est le facteur de Schmid qui dicte le comportement plastique. Effectivement les pôles montrant un même comportement plastique simulé sont bien des orientations à même facteur de Schmid.

Ensuite, le durcissement latent n'est pas pris en compte. En effet la fidélité du comportement simulé vis-à-vis du comportement expérimental peut être améliorée en décrivant l'anisotropie du durcissement (cf. Chapitre 1, 1.2.4). Ce point précis est cependant la plus critique en modélisation du fait de l'incapacité à mesurer le module instantané du durcissement sur

chaque système actif qui n'est en effet accessible à moins de recourir à la dynamique moléculaire ou la dynamique des dislocations discrètes à grande échelle ! L'hypothèse d'un durcissement isotrope est alors souvent assumée. Elle est simple à implémenter (le CRSS est un scalaire indépendant du système de glissement considéré) mais il en résulte une difficulté à calibrer « parfaitement » le comportement de chaque orientation : le stade II de déformation est simplement ignoré.

Enfin l'on constate aussi que la limite d'élasticité est supérieure globalement aux limites mesurées expérimentalement. La scission critique – fixée à 8 MPa pour nos simulations – pourrait alors être calibrée afin de palier à ces écarts observés. Cela aura pour effet de traduire les courbes vers le bas. Cependant, il faut rappeler que les objectifs de nos simulations ne sont pas situés en la calibration parfaite. Notre intérêt est davantage de comprendre les limitations de la loi, la finalité étant de l'appliquer aux bicristaux pour quantifier des effets d'interfaces. Ainsi les valeurs numériques tirées de la littérature seront conservées dans tout ce travail.

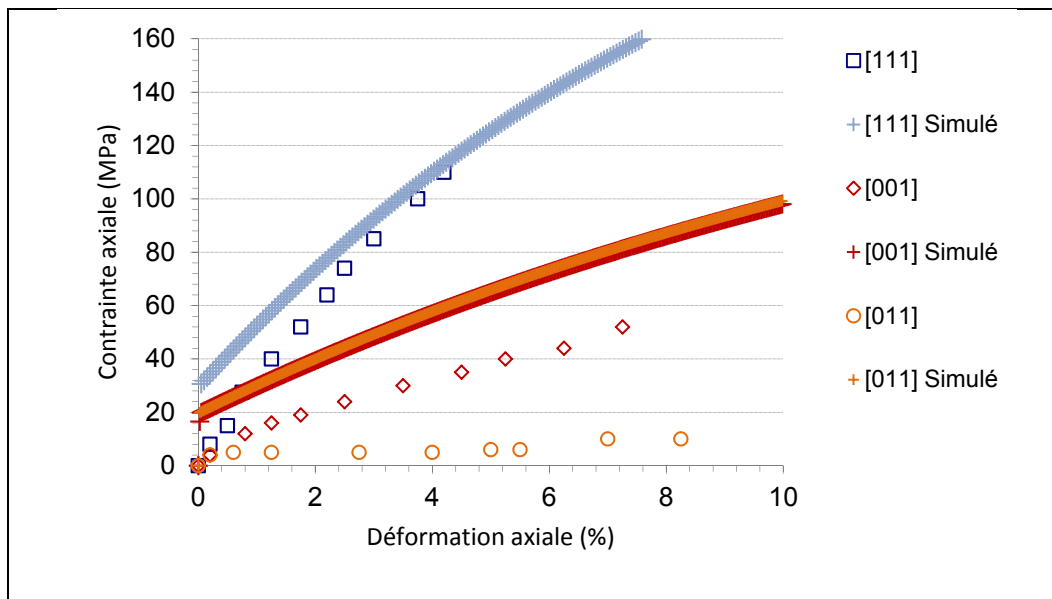


Figure 3.7 Courbes simulées et courbes expérimentales obtenues par Cuitinio et Ortiz

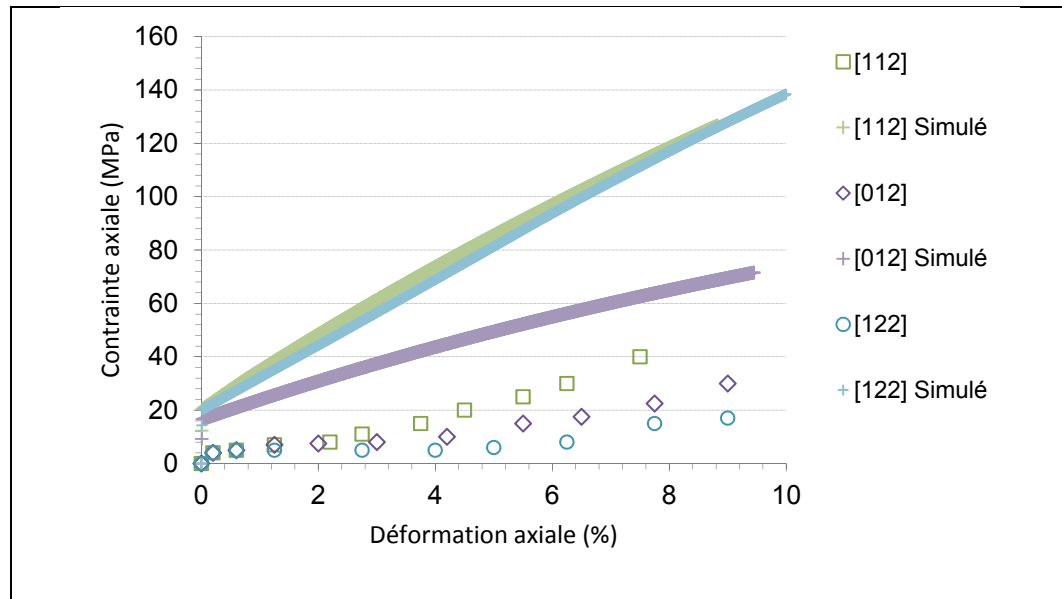


Figure 3.8 Courbes simulées et courbes expérimentales obtenues par Cuitinio et Ortiz (suite)

3.4 Analyse du comportement sur l'ensemble des monocristaux

3.4.1 Champs mécaniques d'intérêt

Les champs mécaniques d'intérêt (cf. Tableau 3.2) seront principalement la déformation, les contraintes et les rotations cristallographiques. Comme la loi de plasticité incorpore une variable « glissement cristallin », les taux de glissement seront aussi relevés. L'on étudiera en premier le comportement global ($\sigma - \epsilon$) où l'analyse se concentrera sur la transition élastique-plastique, ce afin de savoir quels critères pilotent ce phénomène. Ensuite les taux et les amplitudes des glissements de certains cristaux seront relevés et corrélés avec le profil de la déformation macroscopique. Enfin, les rotations cristallines sont relevées, premièrement en termes de profils et deuxièmement en termes de positionnement après traction des nouvelles orientations dans le triangle standard $[001][011][111]$.

Tableau 3.2 Récapitulatif des variables internes étudiées

Variables internes	Signification physique
ε_{33}	Composante axiale de la déformation
σ_{33}	Composante axiale de la contrainte
$\dot{\gamma}^{\alpha}$	Taux de glissement cristallin
θ	Angle de désorientation calculé pour chaque élément par rapport à l'orientation cristallographique initiale

3.4.2 Comportement mécanique en traction uniaxiale

3.4.2.1 Effets du module élastique

La Figure 3.9 montre l'ensemble des comportements mécaniques des 22 monocristaux retenus. Le code de couleur appliquée ici est le code iso-E, cf. codes préétablis en 3.2.3. Cela permet une distinction visuelle des groupes de cristaux selon leur module élastique. On constate logiquement que l'anisotropie élastique est bien représentée par différentes pentes du comportement, variant de 65,4 GPa pour le cristal 29 – équivalent au pôle [001], à 167 GPa pour le cristal 41 – équivalent au pôle [111].

Il est d'abord intéressant de commenter les comportements à même niveau de contrainte. Notamment à un niveau de charge donné, la différence de module élastique affecte beaucoup le niveau de déformation du cristal et dicte donc son mécanisme d'accommodation. Par exemple sous une contrainte constante de 15 MPa, la déformation du cristal le plus rigide est de 0,01 % tandis que celle du cristal plus souple atteint environ 0,025 %. Cette différence est encore plus marquée à 20 MPa : la déformation vaut 0,012 % dans le cristal 41 et reste élastique tandis que dans le cristal 1 est déjà largement déformé plastiquement, soit 0,5 %.

La simulation étant plus généralement contrôlée par rapport à l'allongement global, une interprétation par rapport à même déformation macroscopique est tout aussi pertinente. À titre d'exemple fixons un niveau de déformation de 0,030 % – trait discontinu « épais » sur la

Figure 3.9. On constate que le comportement du cristal 41 est déjà plastique et que sa contrainte est de $\sigma_{33}=30$ MPa pendant que contrairement la « souplesse » élastique du cristal 29 fait que celui-ci est encore en régime élastique avec une contrainte de $\sigma_{33}=18$ MPa. Ainsi ce niveau de déformation (0,030 %) a pour simple effet un comportement élastique pour certains cristaux alors que d'autres cristaux accommodent déjà par une activité des glissements. Cependant, le passage en régime plastique n'est pas seulement dicté par la souplesse élastique. Si tel était le cas, il est évident que la contrainte atteinte par le même cristal 41 à 0,030 % aurait été largement supérieure. En effet l'allongement élastique est surtout limité par la contrainte critique admissible par les plans cristallins, soit ce qui est déterminé par le facteur de Schmid. L'effet combiné du module élastique et du facteur de Schmid est donc important vis-à-vis de la transition élastique-plastique, ce qui est discuté dans la prochaine section.

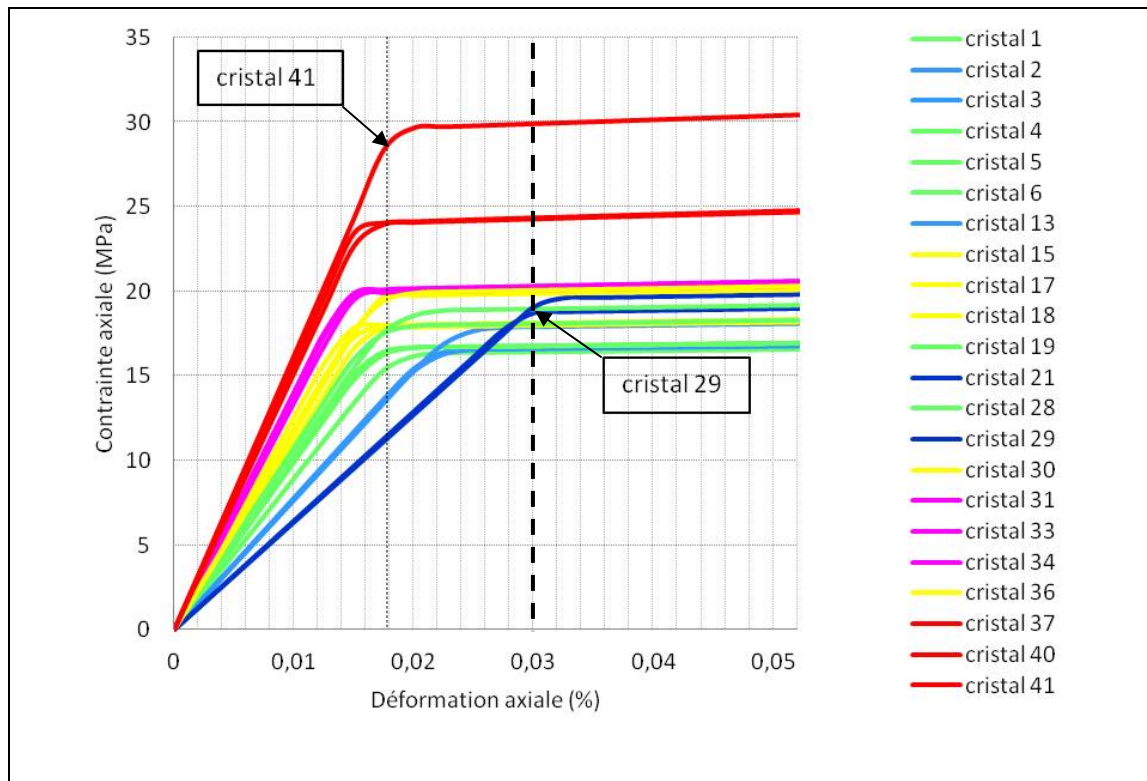


Figure 3.9 Comportements monocristallins à la transition élastique-plastique et application du code couleur associé aux iso-E

3.4.2.2 Effets du module élastique combiné au facteur de Schmid

La Figure 3.10 montre les mêmes courbes de comportement des 22 monocristaux mais ici, une représentation en code de couleur iso- μ_1 est utilisée pour permettre une distinction visuelle des groupes de cristaux selon leur facteur de Schmid μ_1 .

La représentation permet de noter logiquement que le niveau de la contrainte à la transition élastique-plastique est dicté par le facteur de Schmid du cristal (qui détermine la scission réduite d'un système par rapport à la direction de chargement). La contrainte de transition se situe entre 16 MPa pour le cristal 1 ($\mu_1 = 0,5$) et 28 MPa pour le cristal 41 ($\mu_1 = 0,272$). Les deux points de transition de ces cristaux sont représentés par des flèches noires sur la Figure 3.10.

D'un point de vue chronologique, il reste intéressant de voir quelle est la déformation macroscopique qui conduit à la plasticité. Ce niveau de déformation est déterminé par la combinaison du module élastique et du facteur de Schmid. En effet le module élastique représente la souplesse/rigidité d'une orientation donnée mais c'est le facteur de Schmid qui détermine ultimement si la déformation reste élastique ou non en définissant la contrainte critique. La Figure 3.10 montre par exemple que le cristal 41 est le plus rigide mais du fait que sa contrainte de limite élastique soit élevée, elle lui autorise un allongement important avant d'entrer en plasticité soit 0,018 %. Inversement le cristal 1 est souple mais le fait d'être le plus favorablement orienté ($\mu_1 = 0,5$) fera que son allongement soit faible, en l'occurrence il aura le même allongement que le 41 (0,018 %).

Bien que les niveaux de la déformation menant à la plasticité soient les mêmes (0,018 %) pour ce couple 1 et 41, il faut noter que dans un système bi- ou polycristallin, cette déformation ne sera pas atteinte au même instant. En effet, il faudrait pour cela que tous les grains voient le même niveau de déformation au même instant – qui plus est égal à la déformation macroscopique. Cela n'est pas le cas dans notre modèle qui est implémenté avec une hypothèse de contrainte uniforme. Ainsi pour un bicristal formé par les cristaux 1 et 41, la

plasticité dans les deux se produira effectivement à 0,018 % dans chacun des grains, mais cette déformation ne sera pas atteinte à même ϵ_{macro} ni forcément au même instant. Ce phénomène d'avance/retard de la plasticité sera étudié dans la section bicristalline au Chapitre 4.

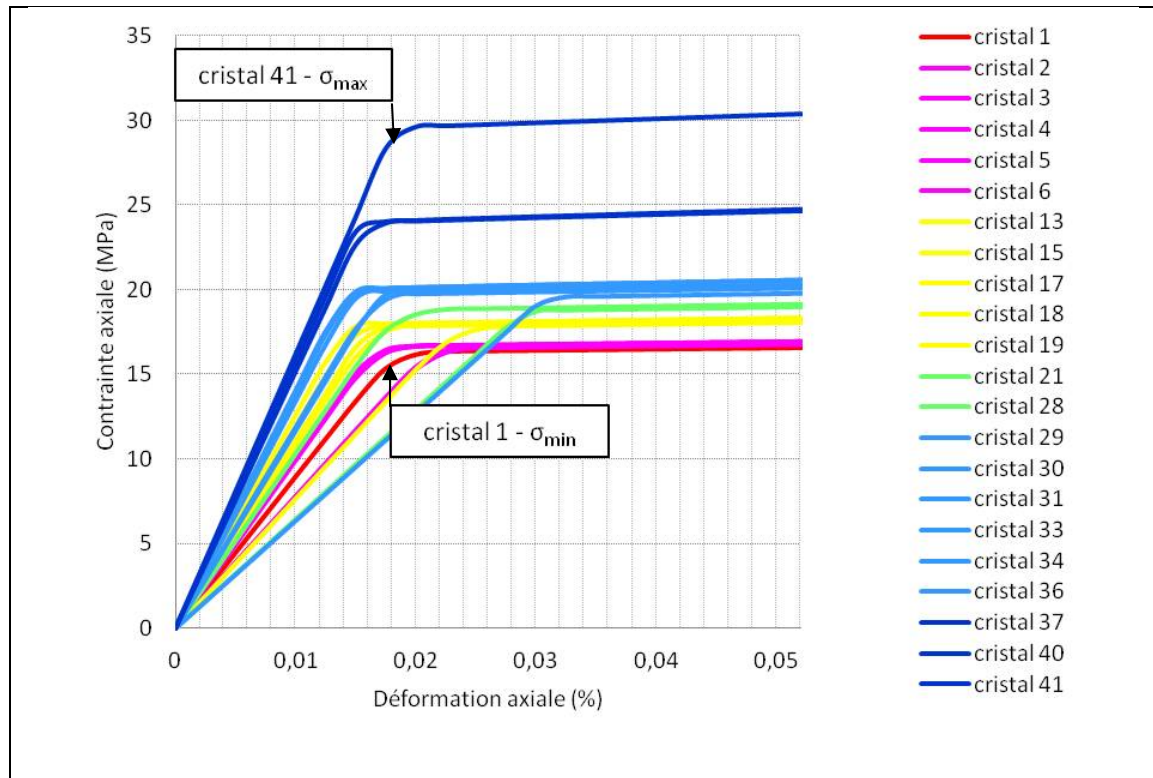


Figure 3.10 Comportements monocristallins à la transition élastique-plastique et application du code couleur iso- μ_1

3.4.2.3 Effet du rapport des facteurs de Schmid primaire et secondaire $R_\mu = \mu_2/\mu_1$

La Figure 3.11 montre l'amplitude des taux de glissement en fonction de la déformation macroscopique. L'application du code de couleur iso- R_μ permet de distinguer clairement le comportement cinématique des groupes de cristaux en fonction de leur ratio $R_\mu = \mu_2/\mu_1$ i.e. de leur nombre de glissement actif.

En effet les cristaux accommodant la plasticité avec un glissement unique (courbes bleues, $R_\mu = 0,850$) ont de fortes amplitudes du taux de glissement. Ensuite, plus il y a de systèmes de glissement actifs dans le cristal (courbes rouges correspondant à $R_\mu = 1,000$) plus l'amplitude du taux de glissement diminue. Par souci de clarté, seul le taux de glissement primaire a été reporté mais tous les cristaux ayant $R_\mu = 1,000$ ont tous au minimum deux glissements actifs. Ces courbes traduisent donc que lorsqu'un grain est orienté pour un glissement unique ($R_\mu \ll 1$), le taux (ou vitesse) de glissement est très élevé, toute la déformation étant accommodée par ce seul système. Ce taux élevé se traduit en le fait que la plasticité sur ce système s'accumule plus rapidement. Au contraire lorsque le grain est orienté pour du glissement multiple, le taux maximal baisse. Cela traduit le partitionnement de la déformation macroscopique sur les différents systèmes disponibles.

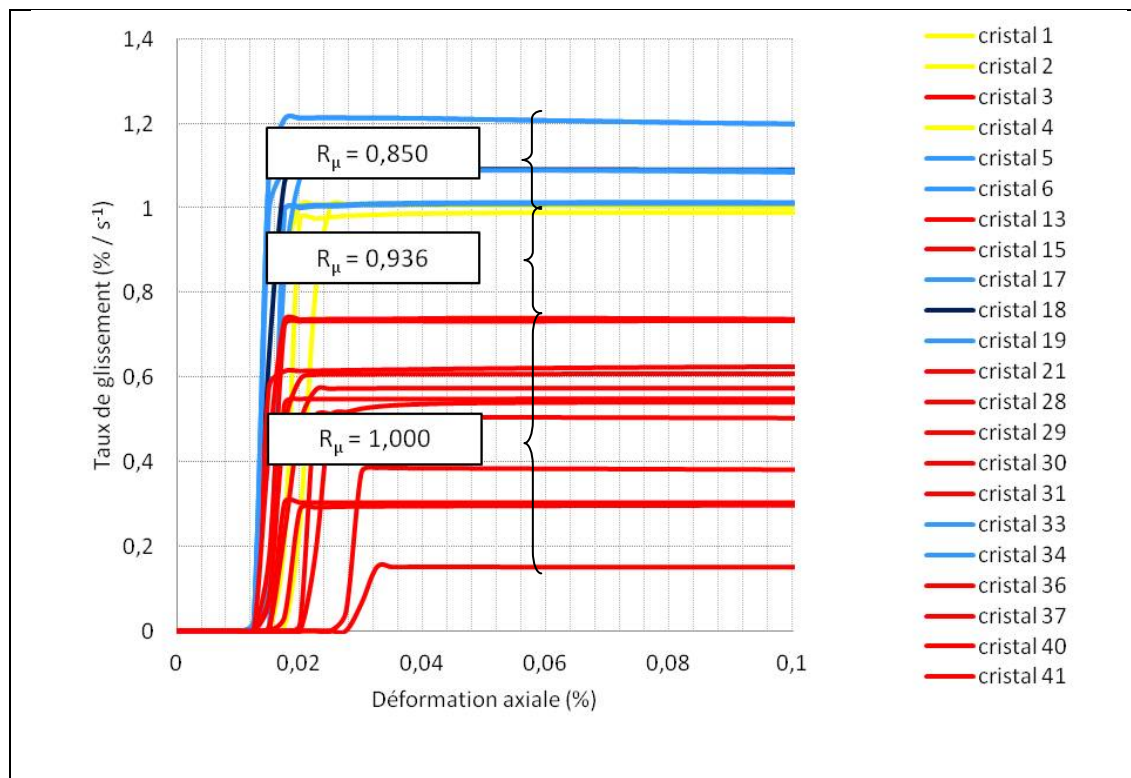


Figure 3.11 Application du code couleur associé aux iso- R_μ aux courbes des taux de glissement primaire

En conclusion, les trois critères du module élastique, du facteur de Schmid primaire, du ratio entre les deux facteurs de Schmid principaux (et donc indirectement le facteur de Schmid secondaire) jouent un rôle assez précis sur chaque aspect du comportement :

- L'ordre de transition élastique-plastique est dicté par une combinaison de E et de μ_1 . En effet le niveau de la contrainte à la transition élastique-plastique est dicté par le facteur de Schmid. Deux cristaux à même μ_1 auront par exemple la même contrainte de transition élastique-plastique mais auront un allongement élastique plus ou moins important selon ce que leur module élastique leur permet.
- Le rapport des deux premiers facteurs de Schmid dicte le mode d'accommodation de la déformation plastique, soit le mode « glissement unique » ou le mode « glissement multiple ». Ces deux modes impliquent respectivement que la déformation appliquée soit accommodée par un seul système de glissement, ou qu'au contraire soit partitionnée sur plusieurs systèmes. Le taux de glissement en mode « unique » est en général élevé.

Ce dernier aspect du comportement plastique impacte beaucoup sur le profil de la déformation du monocristal, qui varie alors d'un profil homogène (plusieurs systèmes actifs) à un profil de cisaillement pur (glissement unique). Ces deux natures sont discutées dans la prochaine section.

3.4.3 Hétérogénéité de comportement le long du monocristal sollicité en traction

Le profil de la déformation au sein d'un cristal orienté pour du glissement simple n'est pas le même que celle dans un cristal orienté pour du glissement multiple. En effet un caractère « simple » implique que la déformation soit totalement assurée par le glissement de ce seul système. Cela implique une cinématique de déformation de cisaillement pur. En revanche, lorsqu'un cristal est orienté pour du glissement double ou multiple, la déformation plastique est accommodée par une combinaison de systèmes cristallins. Cela favorise l'homogénéité de la déformation dans le cristal car les différents mouvements de cisaillement peuvent s'ajouter

et ainsi se compenser. Cela conduit notamment à un état de déformation à plus forte composante diagonale ε_{11} , ε_{22} et ε_{33} que de cisaillement.

À titre d'exemple, les Figure 3.12 et Figure 3.13 présentent les profils de déformation de deux cristaux à glissement unique (cristal 17) et respectivement à glissement multiple (cristal 13), avec leur variance sur chaque section de l'éprouvette, représentée par les barres verticales. Pour le premier, on voit clairement que la déformation est uniforme tout le long de l'éprouvette, cf. ligne jaune centrale. Cependant la grande variance constatée est signe que la déformation n'est pas homogène dans une section donnée. Ce qui montre bien le caractère cisaillement pur du cristal 17. Le profil de déformation du cristal 13 qui est à glissement multiple montre en revanche une déformation uniforme sur la longueur et on constate que la variance est presque nulle partout. Ce profil est caractéristique d'une déformation homogène en toute section de l'éprouvette et donc représente ce que doit être tout profil de déformation des cristaux orientés pour du glissement multiple – situés en périphérie du triangle standard. Nous notons enfin que des profils similaires ont été observés pour la contrainte axiale ainsi que la rotation de maille le long des éprouvettes monocristallines, i.e. caractérisés par une grande variance pour les groupes de cristaux situés vers le centre du triangle standard et inversement pour les groupes situés en périphérie du triangle.

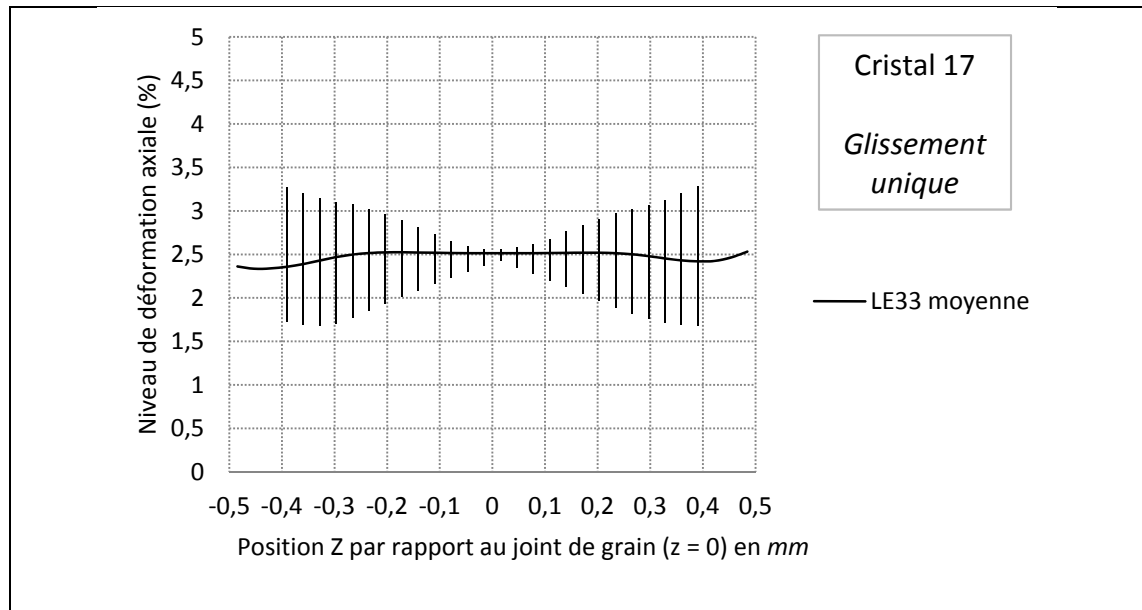


Figure 3.12 Profil de la déformation et de sa variance en glissement unique, exemple du cristal 17 ($\mu_1 = 0,454$)

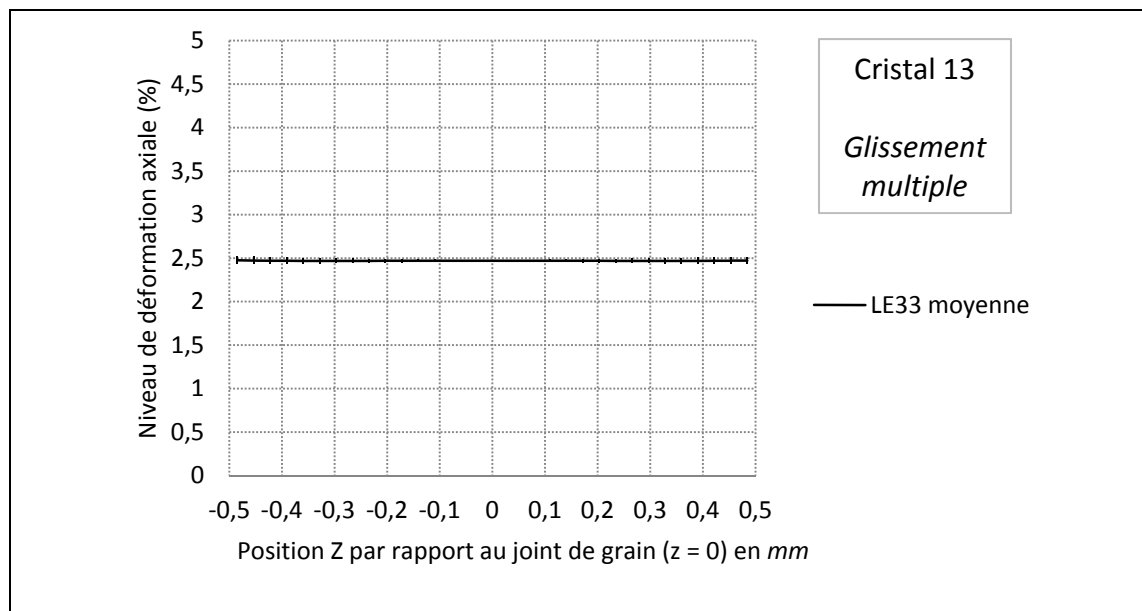


Figure 3.13 Profil de la déformation et de sa variance en glissement multiple, exemple du cristal 13 ($\mu_1 = 0,454$)

3.5 Rotations cristalline de la maille selon l'orientation cristallographique

3.5.1 Représentation des pôles issus de la simulation

La déformation plastique se caractérise par les glissements cristallographiques et est souvent accompagnée d'une rotation cristallographique. Une orientation cristalline étant composée d'un triplé d'angles d'Euler, la quantification entre avant et après déformation est plus facile à faire par l'angle unique θ de désorientation minimale entre les deux configurations.

La Figure 3.14 montre l'amplitude moyenne par section de cette dernière pour les différents cristaux. La représentation en iso- R_μ montre que les orientations à glissement multiple (courbes rouge) subissent globalement moins de rotation que les orientations à glissement unique qui ont une amplitude relativement plus élevée. Il a été vu que les cristaux à glissement unique ont une plasticité anisotrope, et contrairement, les cristaux à glissement multiple affichaient une déformation plastique plus homogène. L'amplitude de la rotation semble donc liée à l'anisotropie plastique mais cette tendance ne se généralise pas car par exemple, les cristaux 1 et 4 (courbes jaunes) n'ont pas le ratio R_μ le plus faible et pourtant leurs désorientations sont les plus élevées parmi toute la population de cristaux simulée. De même, le cristal 18 qui est supposément le cristal au ratio R_μ le plus faible (0,728) n'est pas celui qui a subi la plus forte de rotation de maille.

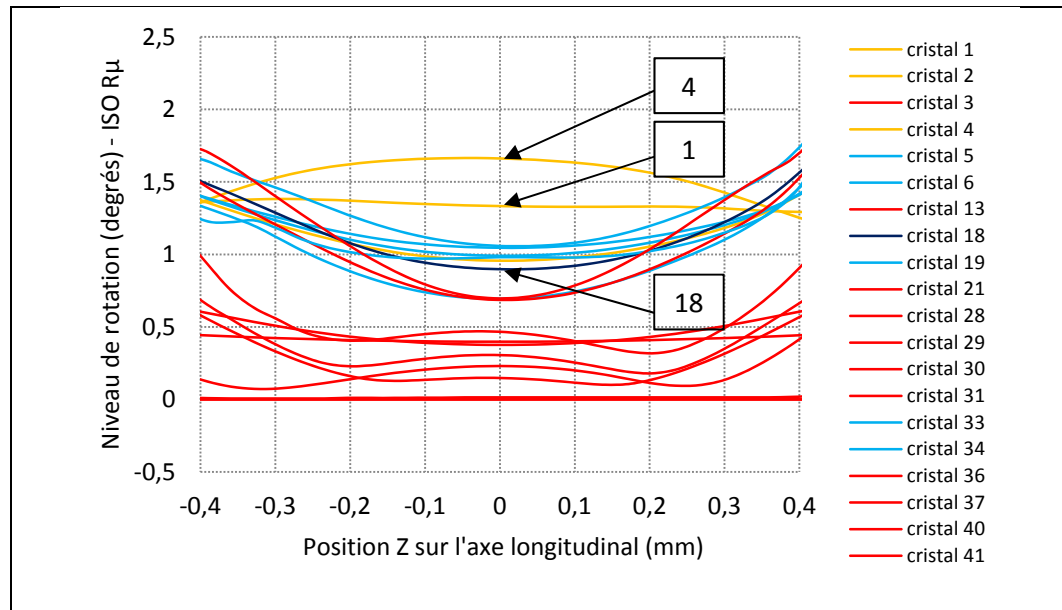


Figure 3.14 Profil des désorientations représenté en code iso- R_μ

La Figure 3.15 montre la position après traction des 22 cristaux sur la figure de pôles $[001][011][111]$. On remarque effectivement que les rotations sont plus marquées pour les orientations à glissement simple (situées vers l'intérieur du triangle standard) que pour les orientations à glissement double ou multiple (situées en périphérie du triangle).

Pour les pôles intérieurs au triangle, les rotations semblent avoir une même tendance générale qui est celle de converger vers le bord $[001][111]$ du triangle. D'après la littérature (Stinville, 2006) cette direction de rotation est celle qui permet au grain d'aligner la direction de son glissement avec la direction macroscopique du chargement. Dans le présent travail, le système D4 est le premier système de glissement. Il appartient au plan $(1\bar{1}\bar{1})$ et sa direction est $[101]$ (cf. nomenclature Tableau 1.1). Ainsi cette minimisation est possible lorsque le cristal tourne vers le pôle $[101]$ en passant par $[112]$ (ou $[211]$ selon la représentation considérée), ce qui est indiqué par la Figure 3.16. Aussi il faut que seul un système soit actif.

Pour les pôles situés en périphérie du triangle, autrement dit avec plusieurs systèmes de glissement activés, on relève trois pôles de convergence grâce au modèle de Schmid. Les

orientations situées sur le côté $[001][111]$ tendent vers le pôle 28, celles situées sur le côté $[001][011]$ tendent vers le pôle 29, et enfin celles situées sur le côté $[011][111]$ tendent vers le sommet 41. La désorientation de chaque cristal reportée ci-dessous provient directement de celle relevée dans un seul élément situé au centre de l'éprouvette. Cet élément a été choisie afin d'être représentatif de la rotation cristalline à cœur de grain mais il aurait été aussi pertinent de choisir l'élément en surface pour une éventuelle comparaison avec la tendance expérimentale.

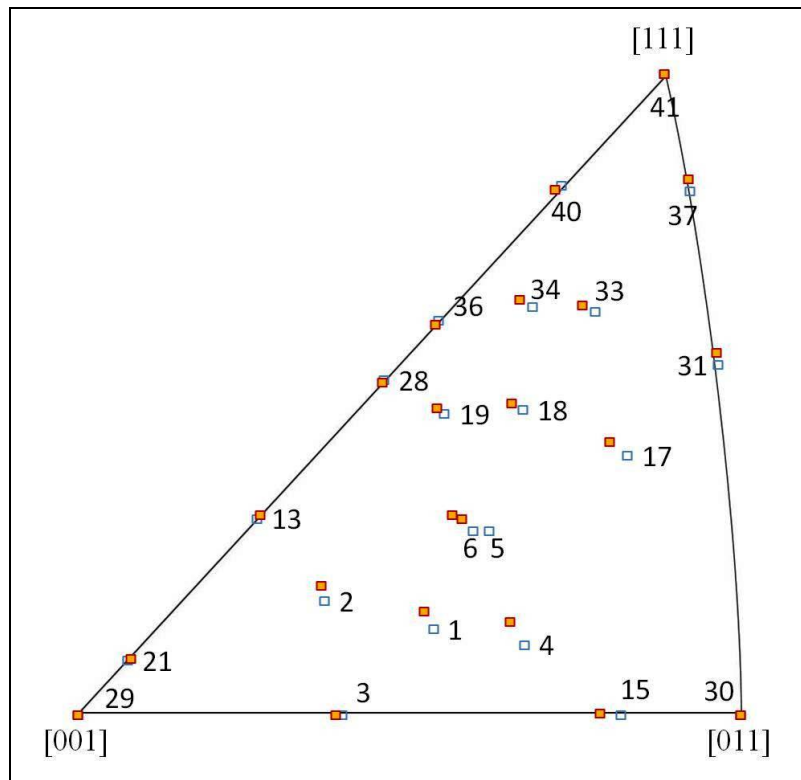


Figure 3.15 Évolution de l'orientation cristalline des 22 monocristaux, à cœur. Points vides : avant le test de traction; points pleins : après le test de traction

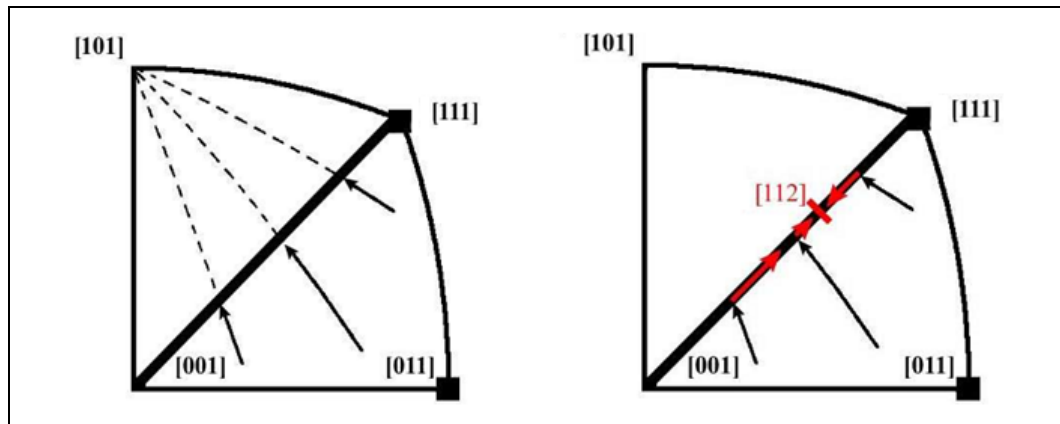


Figure 3.16 Convergence des orientations vers les pôles [101] en déformation par glissement simple, adaptée de (Stinville, 2006)

3.5.2 Validité de l'approche en contrainte uniforme

On peut rappeler les caractéristiques – en termes de contraintes, de déformation, rotation et de glissements cristallins – de notre approche :

- Il s'agit ici d'une approche en contrainte uniforme et le critère de transition élastique-plastique est une scission réduite suivant la loi de Schmid. Cette hypothèse implique que dans un système polycristallin par exemple, les premiers grains à se plastifier seront ceux à facteur de Schmid le plus élevé et, par équivalence, ceux à facteur de Schmid égal plastifieront en même temps, auquel cas seul le niveau de la déformation atteinte par chacun à ce moment diffèrera.
- L'approche considère un écrouissage isotrope, donc un durcissement égal sur tous les systèmes de glissement. Cette hypothèse fera que la loi ignore le durcissement latent et rend le comportement « approximatif » en faible déformation (cas ici) car le stade I n'est pas fidèlement décrit.
- L'approche ne permet pas de modéliser les grandes déformations ($> 5\%$). En effet d'après la littérature et notamment les courbes de la Figure 1.3, rendu à une certaine

amplitude, même les systèmes de glissements non-favorablement orientés s'activent en pratique faisant entrer en stade III de la déformation. Dans notre approche, seule l'atteinte de la scission critique résolue permet d'activer le glissement et à moins donc d'une réorientation cristallographique suffisamment importante permettant l'atteinte de cette scission sur les autres systèmes, ces derniers n'auront aucune chance d'être activés à la régulière.

- Les profils de déformations des cristaux orientés pour du glissement unique montrent que la déformation dans une section de l'éprouvette est hétérogène comparé à celle dans les cristaux orientés pour du glissement multiple. Cela vient du fait que lorsque la déformation est assurée par un seul système de glissement, la déformation devient à composante de « pur » cisaillement avec comme direction principale celle du glissement actif.
- Les rotations possèdent 3 pôles stables pour les cristaux situés en périphérie du triangle standard, et tendent vers $\langle 112 \rangle$ pour ceux situés à l'intérieur du triangle. Cependant les réorientations peuvent changer dans les cas de grandes déformations ($>> 5\%$), où la tendance de rotation se fera vers le pôle $[111]$ indépendamment de sa position initiale dans le triangle standard. Cela a été vérifié par des essais expérimentaux, reportés dans la littérature, et appuyés par des modèles de prédiction de Sachs ou de Taylor (Stinville, 2006). Les rotations issues de notre modèle ne sont donc non plus valables en grandes déformations.

CHAPITRE 4

INFLUENCES DES INTERFACES CRISTALLINES SUR LE COMPORTEMENT EN PROXIMITE ET LOIN DU JOINT DE GRAIN

4.1 Objectif

Le comportement mécanique monocristallin a été étudié précédemment et sera souvent ici pris comme référence pour quantifier les effets aux interfaces cristallines. Le présent chapitre traite de cas bicristallins et sera composé de deux sous-thèmes. Le premier a pour objectif de quantifier les différents effets de l'anisotropie élastique sur le comportement mécanique à interface cristalline (4.2). Le second consistera à en quantifier l'efficacité du modèle à prendre en compte les simples cas de compatibilité microscopique des systèmes de glissement (4.3). Dans ce contexte, certaines orientations parmi celles déjà étudiées au Chapitre 3 sont reprises pour former des couples bicristallins selon des critères bien définis et des simulations bicristallines sont alors réalisées. Les effets induits à l'interface cristalline seront quantifiés en termes de contraintes et de déformations caractéristiques. Concernant les effets des compatibilités microscopiques, l'aspect des glissements cristallins dans le joint « compatible » sera plus particulièrement analysé.

4.2 Effet de l'anisotropie élastique sur le comportement mécanique à l'interface

L'anisotropie élastique se traduit par la différence entre le module d'élasticité d'un grain et celui d'un autre du fait que leur orientation cristalline ne soit pas la même. Cette différence engendre des effets localisés au niveau du joint de grain qui est l'interface entre les deux grains. L'on cherche à quantifier ces effets, notamment en termes de contraintes élasto-plastiques, de déformations locales et de rotations. Deux bicristaux choisis selon les critères explicités ci-après (4.2.1) sont étudiés.

4.2.1 Choix des couples d'orientation cristalline

Les couples d'orientation pouvant satisfaire à cette étude sont logiquement des cristaux avec des modules élastiques éloignés, ce qui est pensé maximiser les effets induits au niveau du joint. Néanmoins il est important que le choix des orientations réduise au minimum les effets des autres paramètres qui contrôlent le comportement élasto-plastique, soient principalement les facteurs de Schmid des différents systèmes de glissements ainsi que le nombre de systèmes de glissement impliqués dans la déformation. Ainsi chaque bicristal se composera de deux cristaux ayant leur rigidité élastique éloignée et restreints aux conditions suivantes :

- Même facteur de Schmid primaire i.e. même seuil de contrainte de limite élastique;
- Même ratio R_{μ} – selon la notation du Chapitre 3 – entre les deux premiers facteurs de Schmid;
- Même contrainte seuil d'activation des systèmes secondaires qui n'est qu'une équivalence de la condition précédente.

Deux couples de cristaux vérifiant ces conditions et appartenant à la liste des orientations déjà étudiées au Chapitre 3 sont ceux formés par les grains 21 et 28, et respectivement les grains 19 et 17. Par la suite l'on conviendra de retenir les appellations 21-28 et 19-17 en référence au bicristal formé par le couple 21 et 28, et respectivement par le couple 19 et 17. Il est important de préciser qu'outre leur module élastique éloigné, l'idée d'avoir choisi deux couples différents (21-28 d'un côté et 19-17 de l'autre) est aussi justifiée par la volonté de comparer deux modes de déformation plastique (glissement multiple dans le bicristal 21-28 vs. glissement unique dans le 19-17). La différence sera intéressante à relever car on avait relevé une grande hétérogénéité dans l'un des cas. Ces deux couples sont représentés sur les figures de pôles inverses $[001][011][111]$ (Figure 4.1 et Figure 4.2) avec les iso-valeurs impliquant qu'ils vérifient chacun les trois conditions énoncées précédemment. L'ensemble de leurs propriétés caractéristiques sont récapitulés dans le Tableau 4.1.

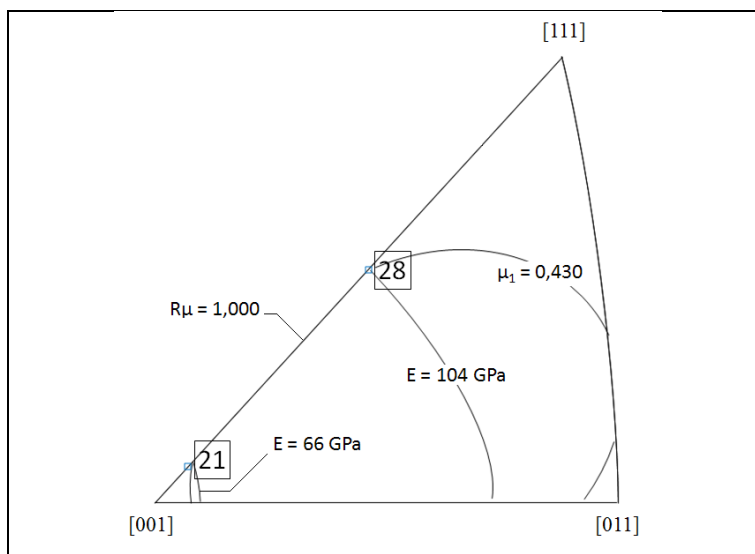


Figure 4.1 Représentation en figure de pôles inverse du bicristal 21-28 – FPI [001][011][111]

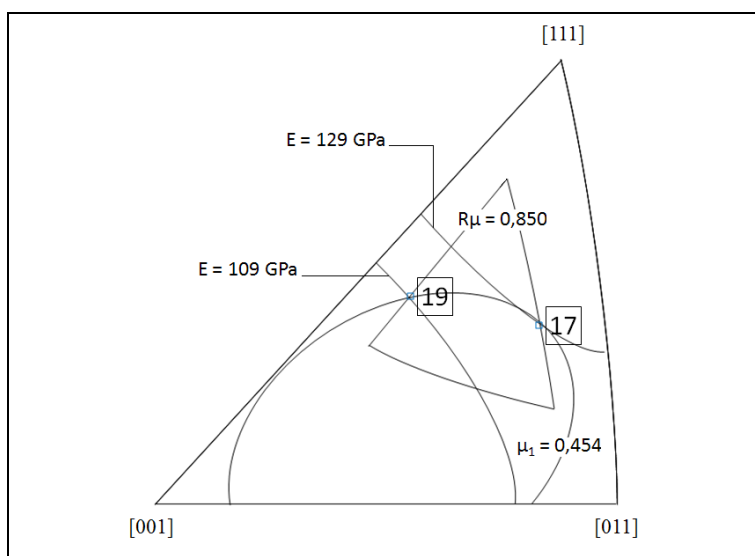


Figure 4.2 Représentation en figure de pôles inverse du bicristal 19-17 – FPI [001][011][111]

Tableau 4.1 Table récapitulative des propriétés des bicristaux 21-28 et 19-17

Bicristal	21-28		19-17	
Angles d'Euler ($\phi_1/\Phi/\phi_2$)	(0°/5°/45°)	(0°/30,2°/45°)	(0°/31,9°/36,9°)	(0°/41°/23,4°)
Module élastique	66 GPa	104 GPa	109 GPa	129 GPa
Facteur de Schmid primaire μ_1	0,430	0,430	0,454	0,454
Facteur de Schmid secondaire μ_2	0,430	0,430	0,386	0,386
Facteur de Schmid tertiaire μ_3	0,427	0,327	0,345	0,326
Facteur de Schmid quatrième μ_4	0,427	0,327	0,288	0,229
Ratio μ_2/μ_1	1,000	1,000	0,850	0,850
Désorientation (degrés)	25,2		16,3	

4.2.2 Représentativité des couples d'orientation choisis

Une mesure de la représentativité des couples d'orientation choisis est la désorientation intergranulaire. Ce paramètre n'est autre que l'un des 5 degrés de liberté qui permettent de définir un joint de grain (cf. Chapitre 1, 1.3.2.1). Elle représente l'écart angulaire minimal qui, associé à un axe de rotation, permet de passer de l'orientation cristalline d'un grain A à celle d'un grain B quelconque. La Figure 1.9 vue au Chapitre 1 reporte par exemple un diagramme de distribution des désorientations obtenu à partir d'un polycristal CFC non-texturé composé de 420 grains (Owusu-Boahen et King, 2000). Les deux désorientations 25,2° (bicristal 21-28) et 16,3° (bicristal 19-17) sont assez régulières et représentatives, la fréquence parfaite d'une distribution étant représentée par une ligne discontinue. On peut enfin rappeler que ces bicristaux choisis font partie des joints à haut angle de désorientation, la limite inférieure conventionnelle étant de 10°.

4.2.3 Comportement en traction monotone en présence d'un joint de grain

Le but de cette section est de voir comment la présence d'un joint de grain affecte le comportement global et surtout local dans le bicristal. L'étude du comportement global donne par exemple accès à l'état de contrainte et de déformation engendré dans l'éprouvette comparativement à ce qui est retrouvé dans le monocristal. L'étude des champs locaux

permettra plutôt de suivre l'évolution de la structure locale du joint et de voir le mécanisme impliqué – i.e. en termes de glissements et donc de champs de déformation plastique et de rotations cristallographiques.

Dans ce dernier contexte, 4 zones d'intérêt ont été définies dans l'éprouvette (Figure 4.3). Ces zones ont été choisies afin de pouvoir y étudier le comportement à cœur de grain et, respectivement le comportement à l'interface cristalline. Elles sont formées par les 4 groupes d'éléments tels que définis sur la Figure 4.3. L'éprouvette mesurant 1 mm en longueur, les 4 zones sont alors situées à $z = \pm 0,027 \text{ mm}$ pour B et C (interface au centre) et à $z = \pm 0,250 \text{ mm}$ pour les zones à cœur de grain A et D. Par convention, la zone A représentera le cœur du cristal « souple », à faible module élastique, tandis que la zone D celui du cristal « rigide », à module élastique le plus élevé. Les analyses sont extraites d'une traction monotone selon l'axe $\vec{z}$.

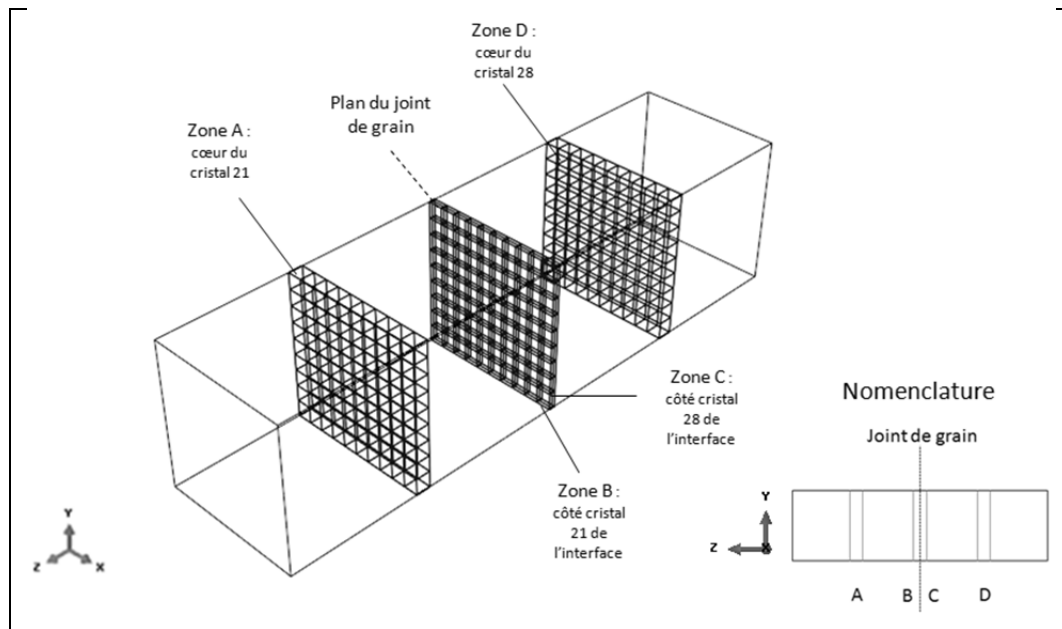


Figure 4.3 Groupes d'éléments représentant les 4 zones A, B, C et D pour l'étude du comportement mécanique et cinématique local des bicristaux

4.2.3.1 Contraintes et déformation macroscopique

La contrainte localement vue par le matériau aux zones A, B, C et D de l'éprouvette est d'abord tracée en fonction de l'allongement macroscopique $\Delta L/L_0$, cf. Figure 4.4 pour le bicristal 21-28 et Figure 4.5 pour le bicristal 19-17.

Ces dernières montrent que la contrainte moyenne vue par chaque section A, B, C et D est la même. En effet, plus généralement, la contrainte en toutes sections de l'éprouvette est égale à la contrainte moyenne vue par l'ensemble du système mécanique. Comme les propriétés élasto-plastiques sont différentes entre les deux grains (cristaux d'orientation différente), cette uniformité de la contrainte implique par nécessité la non-uniformité de la déformation tout le long de l'éprouvette. Afin de mettre cet aspect en évidence, l'on tracera la contrainte en fonction de la déformation « locale », ce qui est fait dans la section suivante (4.2.3.2).

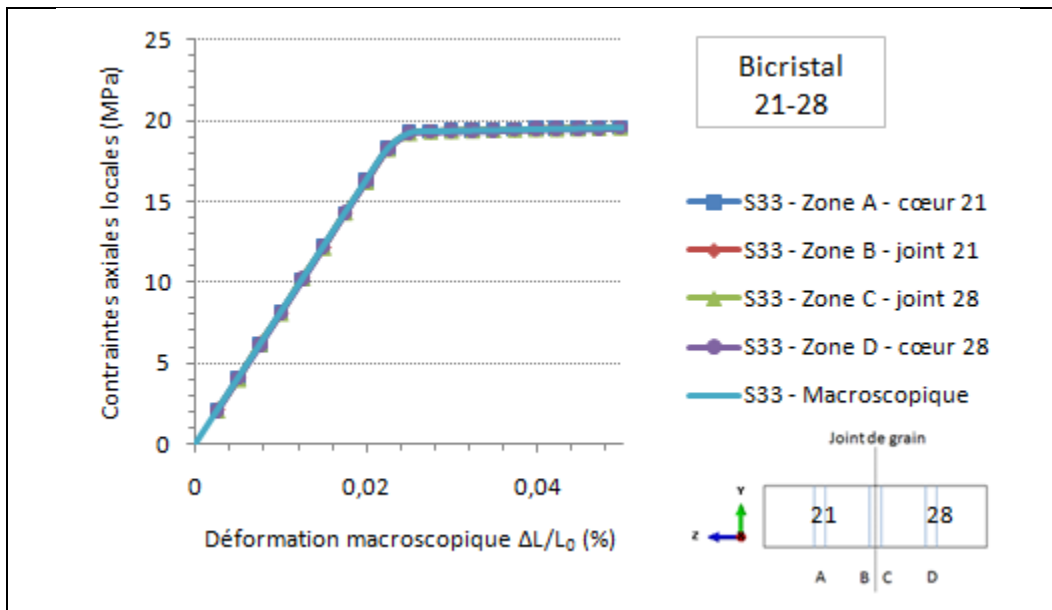


Figure 4.4 Courbes des contraintes axiales (S_{33} sur la légende)/déformation macroscopique dans les zones A, B, C et D du bicristal 21-28

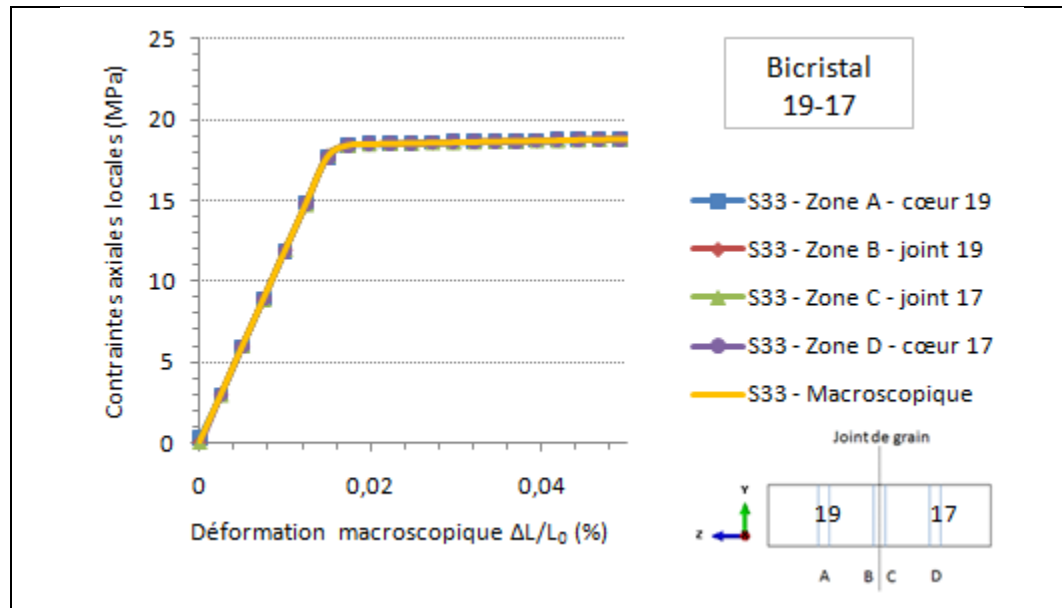


Figure 4.5 Courbes des contraintes axiales (S_{33} sur la légende)/déformation macroscopique dans les zones A, B, C et D du bicristal 19-17

4.2.3.2 Contraintes et déformation locale

L'on vient de voir que la contrainte moyenne en chacune des sections A, B, C et D de l'éprouvette était la même et que ces courbes macroscopiques ne permettaient pas de savoir si certaines zones se sont déjà plastifiées ou sont encore élastiques. Afin de repérer les différences en déformation de chacune, le comportement va être exprimé en fonction de la déformation locale c'est-à-dire de l'allongement de chacune des 4 sections. La relation entre contrainte et déformation est alors désormais « locale », les nouvelles conditions aux limites de chacune des sections étant le champ mécanique induit par les groupes d'éléments situés de part et d'autre de cette section.

Tout d'abord en guise de précision, la contrainte moyenne dans une section donnée de l'éprouvette peut être obtenue en faisant la moyenne des contraintes sur le groupe d'éléments qui forme cette section. En toute rigueur, la moyenne des contraintes dans une zone constituée de N éléments de l'éprouvette devrait être pondérée par le volume de cette zone. À titre d'exemple pour la zone A, cette pondération devrait être faite par la relation :

$$\bar{\sigma}_A = \frac{1}{V_A \cdot N_A} \sum_N (\sigma \cdot evol) \quad (4.1)$$

où V_A est le volume de la zone A constituée de N éléments et *evol* le volume d'un élément de maillage de cette zone. Cependant si l'on prend des éléments à même distance du joint i.e. tous appartenant au même plan, ces éléments auront le même volume et ainsi la moyenne des contraintes pondérée par le volume de chaque élément sera la même que la moyenne arithmétique, l'on pourra alors garder la moyenne arithmétique.

Les courbes de comportement local au cœur de chaque grain (zones A et D) sont reportées sur la Figure 4.6. Le comportement mécanique des monocristaux équivalents a également été reporté et on constate que le comportement au cœur de chaque cristal est assimilable au comportement du monocristal associé. Ainsi l'on retrouve bien l'anisotropie élastique qui se traduit par la différence de pente des courbes contrainte/déformation locales entre le cœur du grain 21 et 28.

En revanche le comportement de part et d'autre du joint de grain (Figure 4.7) présente un décrochage par rapport au comportement monocristallin. En effet l'on constate une augmentation de la pente du côté du joint du grain 21 plus souple (zone B sur la figure) et inversement on constate une baisse de celle-ci du côté du grain 28 plus rigide (zone C sur la figure). Théoriquement, le comportement élastique – qui se traduit par le module d'Young observé – ne devrait dépendre que de l'orientation cristalline. Cependant cette dernière peut s'expliquer par le fait que la déformation reportée en abscisse est une déformation locale, c'est-à-dire qu'elle représente l'allongement de la section considérée. La contrainte étant constante en toute section de l'éprouvette (cf. section précédente, 4.2.3.1), ces décrochages retraduisent donc tout simplement le fait que l'évolution de la déformation n'y est pas la même qu'à cœur.

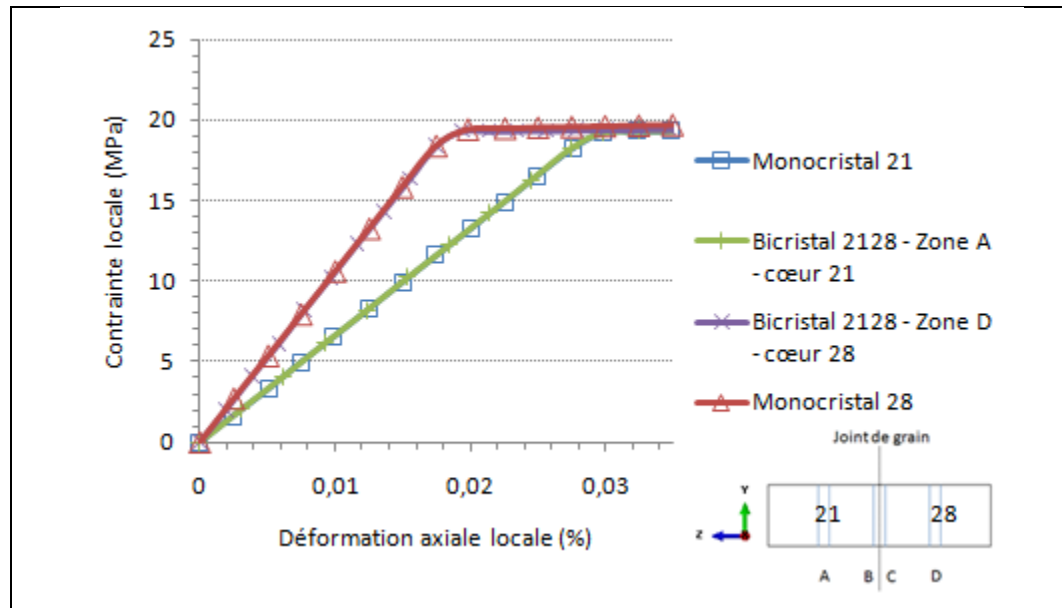


Figure 4.6 Comportement ($\sigma - \varepsilon$) des monocristaux 21 et 28, et comportement ($\sigma - \varepsilon$ local) dans le bicristal 21-28 à cœur de chaque cristal (zones A et D, respectivement)

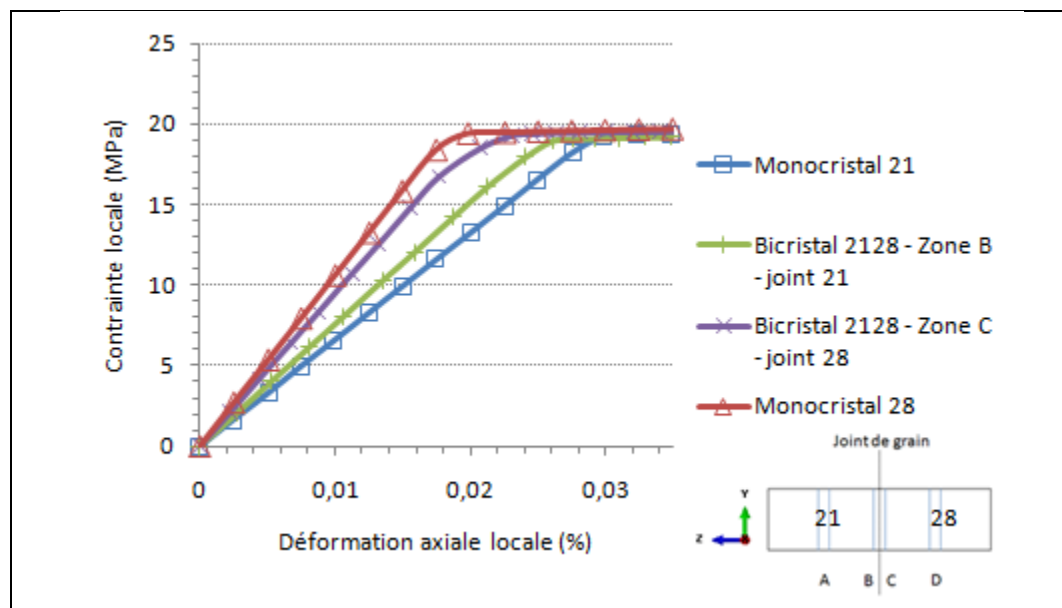


Figure 4.7 Comportement ($\sigma - \varepsilon$) des monocristaux 21 et 28, et comportement ($\sigma - \varepsilon$ local) dans le bicristal 21-28 au joint de chaque cristal (zones B et C, respectivement)

Les comportements locaux du bicristal 19-17 ont également été tracés dans le but de confirmer la tendance concernant les décrochages en déformation des zones A, B, C et D. Comme le montrent les résultats ci-dessous (Figure 4.8 et Figure 4.9), un comportement similaire au 21-28 est constaté mais la présence des décrochages du comportement est moins marquée que dans le cas du 21-28. Cela peut directement être expliqué par le fait que les modules élastiques du 19-17 sont plus rapprochés (différence de ~ 20 GPa contre ~ 40 GPa pour le bicristal 21-28).

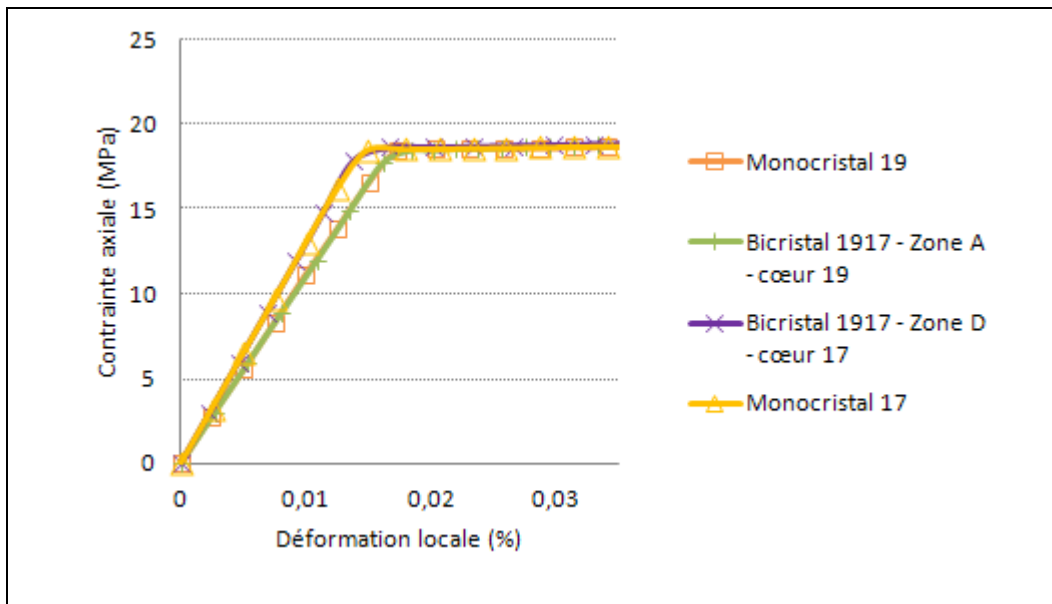


Figure 4.8 Comportement ($\sigma - \epsilon$) des monocristaux 19 et 17, et comportement ($\sigma - \epsilon$ local) dans le bicristal 19-17 au cœur de chaque cristal (zones A et D, respectivement)

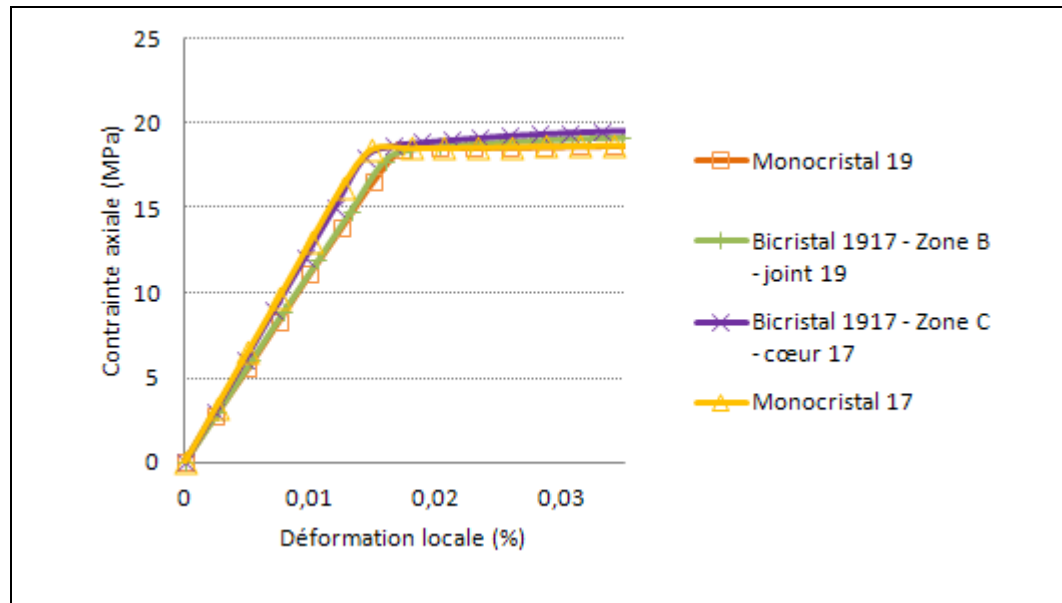


Figure 4.9 Comportement ($\sigma - \epsilon$) des monocristaux 19 et 17, et comportement ($\sigma - \epsilon$ local) dans le bicristal 19-17 au joint de chaque cristal (zones B et C, respectivement)

En conclusion, les courbes de comportement local donnent une idée purement relative de l'évolution de la déformation locale et donc l'ordre d'entrée en plasticité de chaque zone, les abscisses étant en coordonnées locales. Elles ne peuvent donc pas indiquer à quel niveau de la déformation macroscopique (i.e. de l'allongement globale) chacune de ces transitions locales se produiront. Dans ce contexte, les représentations en fonction de la déformation macroscopique seront préférées. Notamment le comportement cinématique (évolution des taux de cisaillement $\dot{\gamma}^\alpha$ sur chaque système de glissement α) va être étudié, cela permettrait de détecter et de chiffrer plus précisément à quel niveau de la déformation macroscopique la transition plastique de chaque zone aura lieu.

4.2.4 Comportement cinématique ($\dot{\gamma} - \epsilon$)

Le comportement cinématique représente l'évolution du taux de glissement $\dot{\gamma}^\alpha$ (s^{-1}) d'un système de glissement α au cours de la déformation. De même qu'avec les courbes $\sigma - \epsilon$

précédentes, c'est la moyenne arithmétique sur une section qui sera prise en compte et présentement tracée.

L'on se concentrera en premier lieu sur le bicristal 21-28 et les notations des systèmes de glissements introduites au premier chapitre (cf. 1.2.2) sont utilisées. Un récapitulatif des différents systèmes de glissement impliqués dans le bicristal 21-28 est fourni dans le Tableau 4.2. Cependant, seul le comportement du système primaire D4 a été choisi d'être reporté dans la Figure 4.10 pour souci de clarté. Son taux de glissement $\dot{\gamma}^{D4}$ est alors tracé par rapport à la déformation macroscopique ε_{33} .

Tableau 4.2 Table récapitulatif des types de système de glissement du bicristal 21-28

	Grain 21	Grain 28
Système de glissement primaire	D4	D4
Système de glissement secondaire	C5 ex aequo avec D4	C5 ex aequo avec D4
Système de glissement tertiaire	A3	A3
Système de glissement quatrième	A6 ex aequo avec A3	A6 ex aequo avec A3

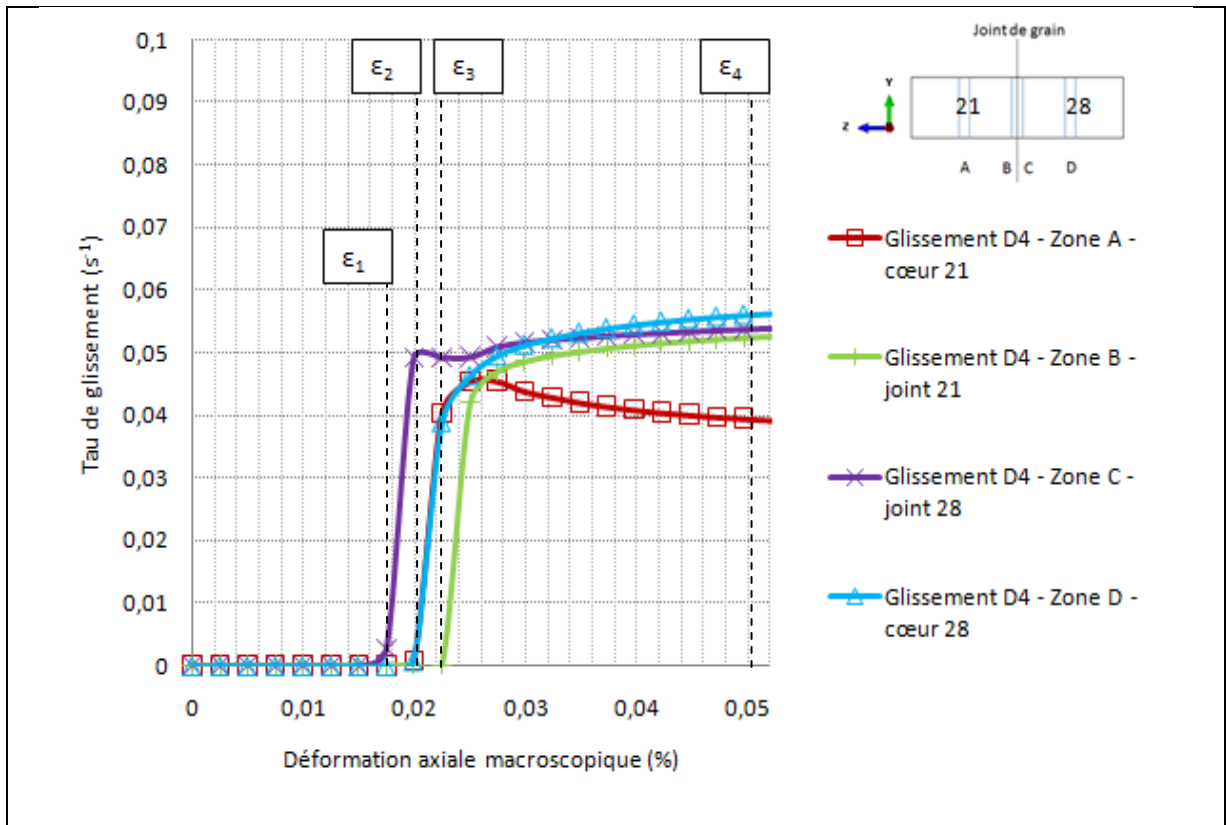


Figure 4.10 Amplitude du taux de glissement $\dot{\gamma}^{D4}$ (comportement cinématique) sur le système primaire D4 dans les 4 zones A, B, C et D du bicristal 21-28

D'abord à cœur de grain (zones A et D), les comportements cinématiques se superposent, signe que la plasticité débute au même instant ($\varepsilon_{33} \sim 0,020 \%$) dans les grains 21 et 28. Cela est normal car ces deux grains ont le même facteur de Schmid (cf. Tableau 4.1) et donc la même contrainte critique d'activation – qui est alors atteinte lorsque la déformation globale vaut $\varepsilon_{33} \sim 0,020 \%$.

Dans la région du joint de grain (zones B et C), l'on constate un décalage dans l'activation des glissements. Du côté du cristal 21 ($E_{\bar{z}} = 66 \text{ GPa}$), l'on assiste à un retard de l'activation de son système primaire D4 à $\varepsilon_{33} = 0,022 \%$ tandis que du côté du cristal 28 ($E_{\bar{z}} = 104 \text{ GPa}$), l'activation est en avance à $\varepsilon_{33} = 0,018 \%$. Ainsi, trois stades de la déformation peuvent être proprement repérés via les courbes de comportement cinématique du bicristal 21-28 :

- Un premier stade ϵ_1 qui est associé à l'activation au joint de grain côté rigide (28) ou zone C, qui se produit vers $\epsilon_{33} = 0,018 \%$;
- Un stade ϵ_2 qui correspond à l'activation au cœur des grains 21 et 28 ou zones A et D, qui se produit simultanément vers $\epsilon_{33} = 0,020 \%$;
- Un stade ϵ_3 qui correspond à l'activation au joint de grain côté souple (21) ou zone B, qui se produit vers $\epsilon_{33} = 0,022 \%$;
- Un dernier stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ va être volontairement ajouté, il ne correspond à aucun évènement en particulier mais simplement à un niveau de plasticité généralisé;

Les niveaux de déformation associés à chacun des stades que l'on nommera par ordre de déformation croissante ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 et ϵ_4 sont récapitulés dans le Tableau 4.3.

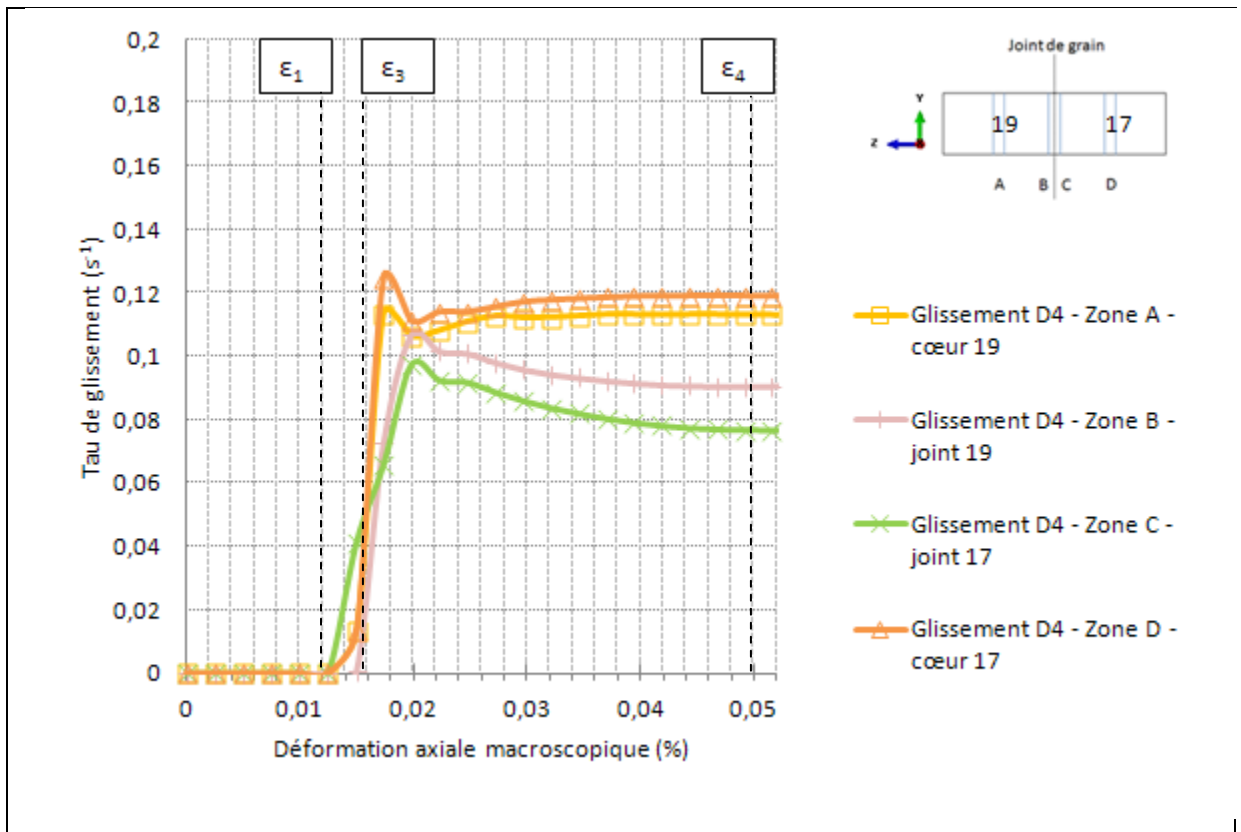
Tableau 4.3 Étapes d'intérêt et correspondance en déformation pour le bicristal 21-28

Étapes	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4
Déformation macroscopique (%)	$\epsilon_{33} = 0,018$	$\epsilon_{33} = 0,020$	$\epsilon_{33} = 0,022$	$\epsilon_{33} = 0,050$

Les comportements cinématiques des 4 zones d'intérêt du bicristal 19-17 ont également été tracés dans le but de valider la tendance observée chez le bicristal 21-28 notamment sur la présence des étapes associées à l'initiation de la plasticité. Les systèmes de glissement mis en jeu dans le bicristal 19-17 sont récapitulés dans le Tableau 4.4 mais là aussi seul le comportement cinématique $\dot{\gamma}^{D4}$ du premier système D4 a été choisi d'être tracé par souci de clarté, cf. Figure 4.11.

Tableau 4.4 Table récapitulatif des types de système de glissement du bicristal 19-17

	Grain 19	Grain 17
Système de glissement primaire	D4	D4
Système de glissement secondaire	C5	D1
Système de glissement tertiaire	A3	A3
Système de glissement quatrième	D1	C5 ex aequo avec A2

Figure 4.11 Amplitude du taux de glissement $\dot{\gamma}^{D4}$ (comportement cinématique) sur le système primaire D4 dans les 4 zones A, B, C et D du bicristal 19-17

La Figure 4.11 laisse premièrement constater que dans le bicristal 19-17, les glissements s'activent globalement plus tôt. Cela est normal du fait du plus grand facteur de Schmid ($\mu_{D4} = 0,454$ dans le bicristal 19-17 contre 0,430 dans le bicristal 21-28). En effet le bicristal 19-17 est composé de grains à « orientation forte » ou à orientation favorable. Deuxièmement

les amplitudes des taux de glissement sont deux fois supérieures dans le bicristal 19-17 que dans le bicristal 21-28. Cela est associable au nombre de système de glissement actif dans chaque bicristal. En effet comme il a été vu au Chapitre 3, plus le nombre de systèmes actifs augmente, plus leur taux de glissement diminue car plusieurs systèmes se partagent alors la déformation. Présentement, le système D4 seul assure effectivement l'essentiel de la déformation au sein du bicristal 19-17 alors que les systèmes D4 et C5 partageaient cette déformation au sein des grains du bicristal 21-28.

Concernant les écarts à l'initiation des glissements entre les 4 zones A, B, C et D, ils sont beaucoup plus faibles dans le bicristal 19-17 que dans le bicristal 21-28 et le stade ϵ_2 ne peut pas être distingué. On peut néanmoins constater que les glissements à cœur des deux grains s'initient simultanément à un niveau de déformation intermédiaire, situé entre ϵ_1 et ϵ_3 sans que l'on puisse préciser cette valeur intermédiaire (nommée ϵ_2 dans le cas du bicristal 21-28). Malgré cette incertitude, on peut néanmoins confirmer l'hypothèse d'un retard d'activation du côté du joint de grain souple et une avance de celle-ci du côté rigide. L'ensemble de ces étapes est récapitulé dans le Tableau 4.5.

Tableau 4.5 Étapes d'intérêt et correspondance en déformation pour le bicristal 19-17

Étapes	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4
Déformation macroscopique (%)	$\epsilon_{33} = 0,012$	--	$\epsilon_{33} = 0,015$	$\epsilon_{33} = 0,050$

4.2.5 Représentation du profil des glissements aux différents stades de déformation

Dans la section précédente, un seul glissement a été considéré et son comportement cinématique observé. Dans cette section, l'ensemble des systèmes de glissement seront considérés dans le but de connaître leur répartition tout le long de l'éprouvette.

Les profils sont représentés en termes de valeur booléenne (i.e. soit le glissement est actif soit non) en fonction de la position par rapport au plan de joint situé au centre de l'éprouvette.

L'axe $\vec{z}$ de l'éprouvette est reporté en abscisse tandis que le numéro du système activé est reporté en ordonnée. Le glissement vaudra alors 0 si inactif, et vaudra son numéro (1 à 12) une fois activé. Le numéro du système de glissement est attribué par ordre croissant de facteur de Schmid avec le système 1 ayant le facteur de Schmid maximum et le système 12, le facteur de Schmid minimum. Un système α est considéré comme activé lorsque la valeur numérique de son taux de cisaillement $\dot{\gamma}^\alpha$ est au moins égal soit au taux de cisaillement de référence $\dot{\gamma}_0 = 1,0^{E-03} \text{ s}^{-1}$ pour le système primaire. Ce seuil a été abaissé à $\dot{\gamma}_0/10 = 1,0^{E-04} \text{ s}^{-1}$ pour les systèmes secondaires et tertiaires car ces derniers ont usuellement des taux de glissement beaucoup plus faibles.

Enfin, on précise que le point d'abscisse $z = 0 \text{ mm}$ correspond à la position du plan de l'interface cristalline situé au centre de l'éprouvette. L'ensemble des profils de glissement aux différents stades de déformation ($\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$) sont alors reportés dans les sections qui suivent. Les deux cas 21-28 et 19-17 sont traités séparément par souci de simplicité.

4.2.5.1 Profil des glissements le long du bicristal 21-28

Les quatre figures ci-après (Figure 4.12 à Figure 4.15) présentent les profils des glissements au sein de l'éprouvette 21-28 aux étapes de déformation $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$.

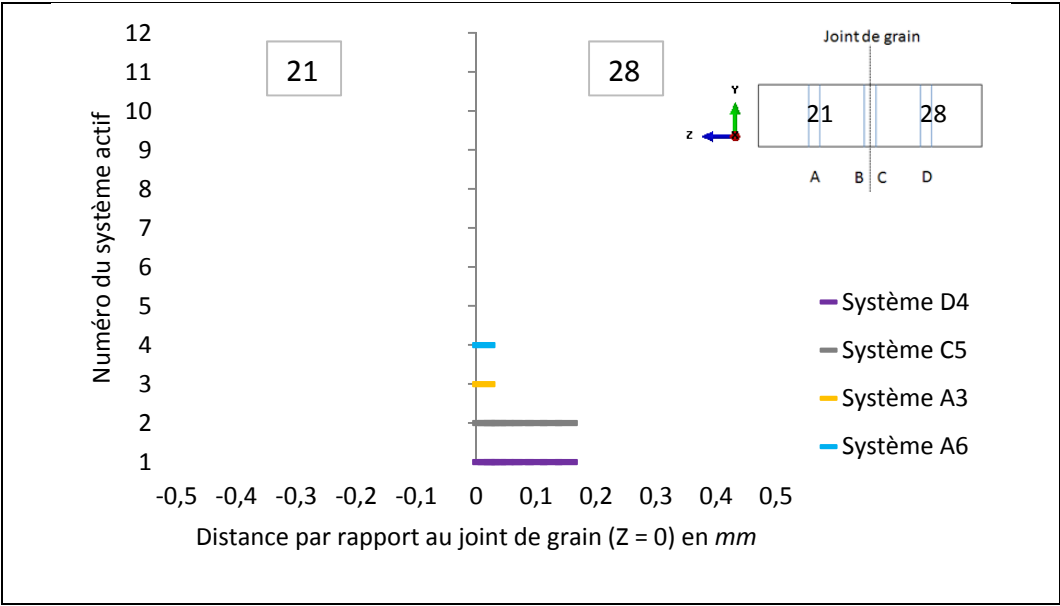


Figure 4.12 Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_1 = 0.018\%$ dans le bicristal 21-28

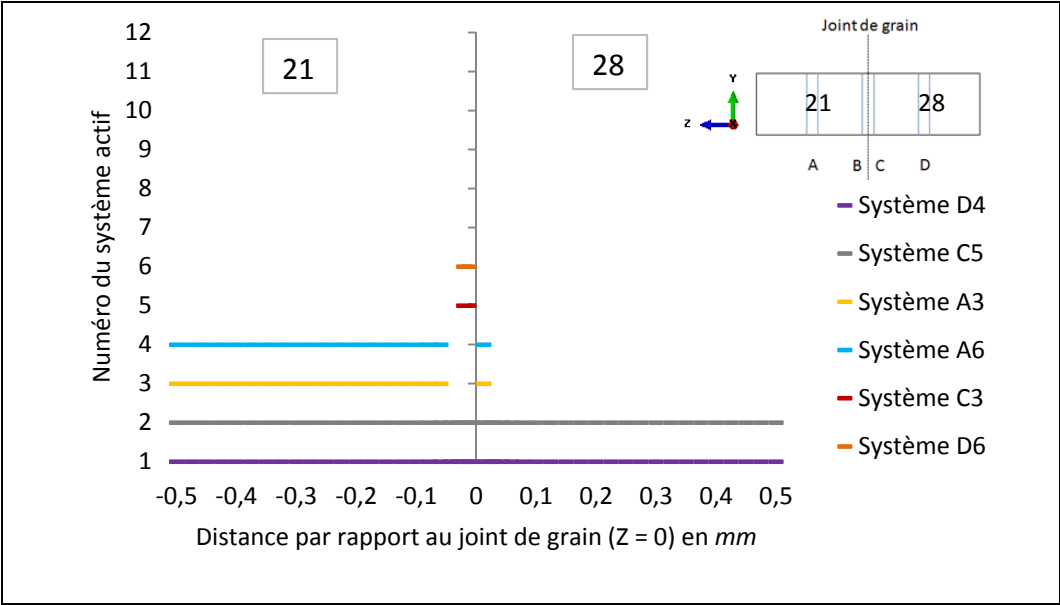


Figure 4.13 Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_2 = 0.020\%$ dans le bicristal 21-28

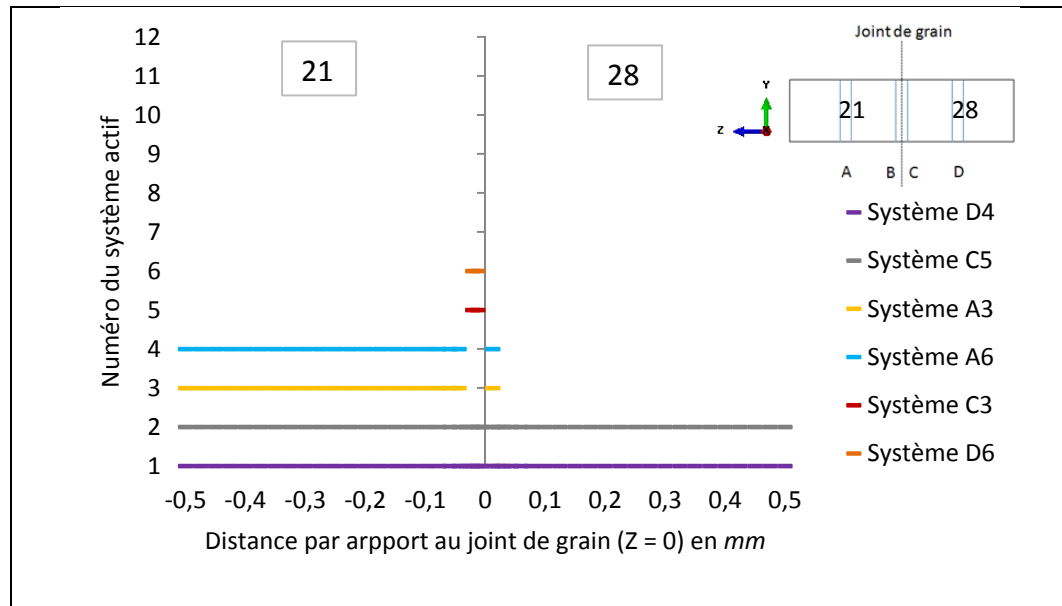


Figure 4.14 Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_3 = 0,022 \%$ dans le bicristal 21-28

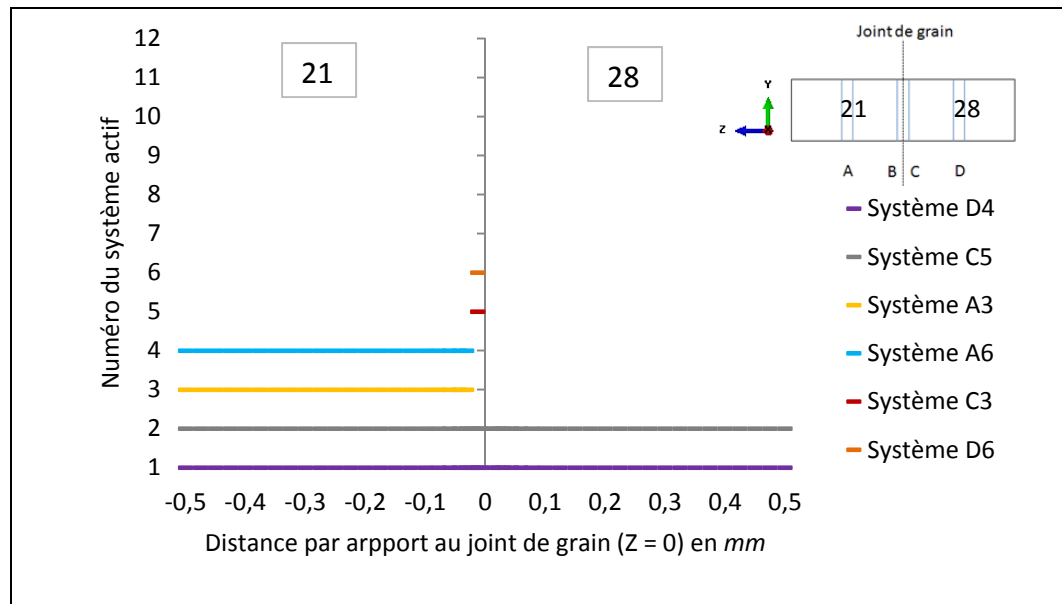


Figure 4.15 Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ (plasticité généralisée) dans le bicristal 21-28

Au stade ε_1 (Figure 4.12), on observe que les systèmes primaires D4 et secondaires C5 sont activés dans la région du joint de grain du côté 28, avec $\dot{\gamma}^{D4} = \dot{\gamma}^{C5}$ ($\mu_{D4} = \mu_{C5} = 0,430$). Cela est en accord avec le comportement cinématique du bicristal 21-28 (Figure 4.10) qui montrait une avance de l'activation des glissements à cet endroit par rapport au reste de l'éprouvette. La corrélation entre le comportement cinématique et le profil des glissements au stade ε_1 confirme donc qu'à une interface où l'anisotropie élastique est prononcée, la microplastification s'initie bien du côté rigide du joint. Également, on observe localement l'activation de deux autres systèmes de glissement tertiaires A3 et quatrième A6, avec aussi $\dot{\gamma}^{A3} = \dot{\gamma}^{A6}$ ($\mu_{A3} = \mu_{A6} = 0,327$). Cela n'est en revanche pas normal car leur très faible facteur de Schmid ne pourrait leur permettre une activation sous la scission critique. Une examination du comportement monocristallin (21 et 28) a de plus confirmé que ces glissements ne s'y activent pas. Leur activation au joint dans le cas bicristallin résulte donc à priori de la présence de l'interface.

Au stade ε_2 (Figure 4.13), les deux systèmes primaires D4 et secondaires C5 se sont généralisés dans l'ensemble de l'éprouvette. Les systèmes A3 et A6 se sont quant à eux généralisés mais uniquement dans le grain 21. Dans ce dernier, l'activation suite aux premiers systèmes est normale car $\mu_{A3} = \mu_{A6} = 0,427$, ce qui est très proche de μ_{D4} . En revanche, on note la présence des systèmes cinquièmes C3 et sixièmes D6. Leur facteur de Schmid vaut $\mu_{C3} = \mu_{D6} = 0,380$ et ne leur permet pas de s'activer sous scission critique. Là aussi, la présence de l'interface cristalline peut être considérée comme étant à l'origine de ce comportement. En termes purement numériques, le besoin d'assurer la continuité de la déformation au travers de cette interface peut impliquer que des glissements appartenant à des plans non-favorables soient activés.

Enfin aux stades ε_3 et ε_4 (Figure 4.13 et Figure 4.14), on remarque que les précédents glissements secondaires A3 et A6 progressent petit à petit vers le joint de grain mais ne parviennent toujours pas vers celui-ci, tandis que leur activité du côté du grain 28 semble s'être estompée.

4.2.5.2 Profil des glissements le long du bicristal 19-17

Les deux figures ci-après (Figure 4.16 et Figure 4.17) présentent les profils des glissements au sein de l'éprouvette 19-17 aux étapes de déformation ε_1 et ε_4 . En effet, les observations et interprétations en stade intermédiaire sont très similaires à celles dans le bicristal 21-28.

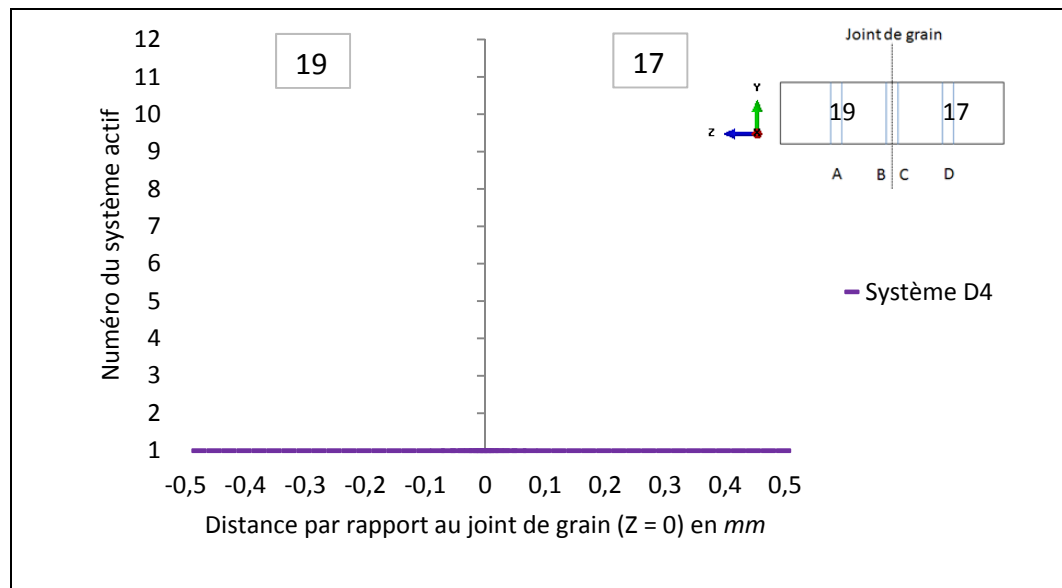


Figure 4.16 Systèmes de glissements impliqués au stade $\varepsilon_1 = 0,012\%$ dans le bicristal 19-17

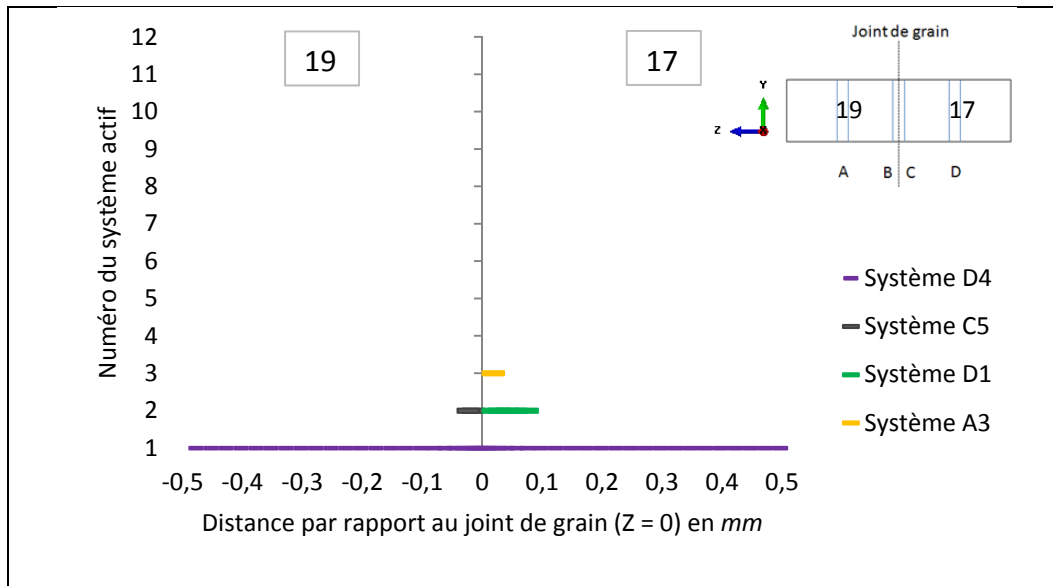


Figure 4.17 Systèmes de glissements impliqués au stade $\epsilon_4 = 0,050 \%$ dans le bicristal 19-17

Le même constat que pour le bicristal 21-28 peut être tiré du profil d'activation du bicristal 19-17 au stade ϵ_1 (Figure 4.16). Bien qu'une activation du système primaire D4 sur toute la longueur soit observée, l'analyse des amplitudes locales a révélé que l'activité plastique commence bien au niveau du joint de grain du côté du grain 17 qui est plus rigide. Le bicristal 19-17 étant un couple orienté pour du glissement simple, aucune entrée en activité d'autres systèmes n'est repérée. En effet les facteurs de Schmid des seconds et troisièmes systèmes valent $\mu_{C5} = \mu_{D1} = 0,386$ impliquant que ces systèmes ne font pas partie de ceux potentiellement activables par atteinte de la scission critique résolue.

Au stade ϵ_4 (Figure 4.17), des glissements supplémentaires localisés dans la région du joint de grain se sont activés et ce malgré leur « non-favorabilité », il s'agit des systèmes C5 et D1. Notamment le grain 17 affiche une plus large zone d'activité du système D1. Cela conforte également l'hypothèse selon laquelle à l'interface entre un grain souple et un grain plus rigide, le glissement est plus actif du côté rigide. Le système tertiaire A3 (commun aux grains 19 et 17) est quant à lui activé mais uniquement du côté du grain 17. Étant donnée la faible

amplitude mesurée des systèmes D1 et A3, ils seront alors classifiés en tant que glissement « d'accommodation ».

À l'issue de cette section, on peut rappeler les hypothèses qui ont été confortées :

- Dans la configuration étudiée (modules élastiques très écartés dans les deux cristaux) le glissement plastique se produit prématurément dans la région du joint de grain du côté du grain le plus rigide, ensuite à cœur – les deux grains ayant le même facteur de Schmid principal, et en dernier dans le joint du côté souple.
- Le fait d'avoir plusieurs systèmes favorablement orientés – cas des cristaux situés à proximité du pôle [001] – augmente les possibilités d'avoir des glissements d'accommodation dans le joint de grain.
- L'augmentation du nombre de systèmes actifs durant une déformation contribue à la diminution du taux de glissement de chaque système activé. L'activation de plusieurs systèmes simultanément conduit uniquement au partitionnement de la déformation sur l'ensemble de ces systèmes et il est intéressant de consulter les profils de déformation et de contrainte pour voir l'effet de ces activités supplémentaires.

4.2.6 Déformations et contraintes induites

4.2.6.1 Déformations associées à l'état de glissement local

Les Figure 4.18 à Figure 4.21 donnent le profil de déformation moyenne le long de l'éprouvette 21-28, i.e. de $z = -0,5$ mm à $z = +0,5$ mm. Les barres de variance min-max (barres verticales) de la déformation à plusieurs distances du joint ont aussi été reportées. De plus, une barre horizontale en trait épais discontinu rapporte le niveau de la déformation macroscopique appliquée ou élongation globale. Enfin, deux barres horizontales en traits discontinus mais plus fins placées de part et d'autre du joint rapportent le niveau moyen de

déformation de transition élastique-plastique de chaque monocristal fourni par les calculs monocristallins du Chapitre 3.

Au stade $\varepsilon_1 = 0,018 \%$ (Figure 4.18) le profil de déformation constaté est en « escalier » i.e. à deux niveaux, ce qui est logique et caractéristique car les grains n'ont pas la même rigidité élastique ($E = 66 \text{ GPa}$ pour le cristal 21 contre $E = 104 \text{ GPa}$ pour le cristal 28). Le cristal souple (grain 21) a un niveau de déformation plus élevé $\sim 0,022 \%$ que le cristal rigide (grain 28) qui a une déformation moyenne de $\sim 0,012 \%$. Bien qu'aucun des deux cristaux n'ait atteint la déformation de transition élastique-plastique, il est intéressant de constater que très localement au joint de grain du côté 28, la déformation atteint la barre limite de transition élastique-plastique, signalant que cette zone y est très proche de se plastifier.

Au stade $\varepsilon_2 = 0,020 \%$ de déformation macroscopique (Figure 4.19), un profil similaire est constaté. Les déformations respectives des deux cristaux atteignent simultanément la barre limite de transition élastique-plastique. Cette simultanéité résulte du fait que ces deux grains ont le même facteur de Schmid $\mu_1 = 0,430$. La région du joint de grain côté souple (grain 21) quant à elle reste en-dessous de la barre limite de transition élastique-plastique, mais au stade $\varepsilon_3 = 0,022 \%$ (Figure 4.20), elle entre finalement en plasticité.

Enfin au stade $\varepsilon_4 = 0,050 \%$ (Figure 4.21), le régime plastique s'est généralisé. Le profil de déformation a alors une tendance à se « lisser » au passage au travers du joint de grain. Les profils d'activité des glissements précédemment constatés (cf. paragraphe 4.2.5.1) aux stades ε_1 , ε_2 , ε_3 et ε_4 semble alors se justifier : l'activité plastique prend place en premier lieu dans la région du joint de grain du côté du grain le plus rigide, et où un surplus de déformation est localement nécessaire. La déformation tend ensuite à s'hétérogénéiser lorsqu'elle est entièrement plastique : les variances deviennent plus importantes.

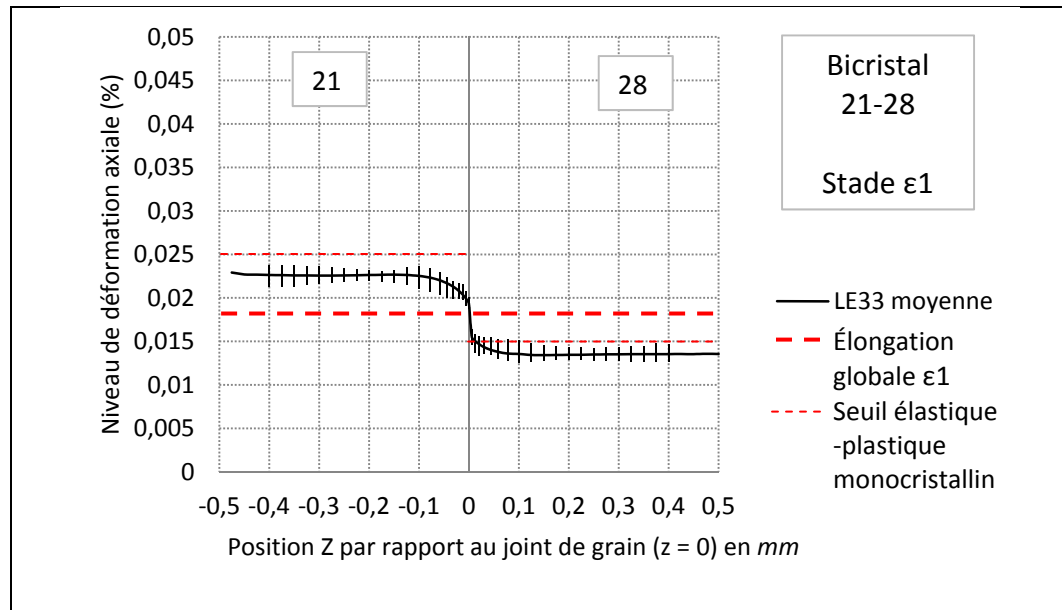


Figure 4.18 Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_1 = 0,018\%$ dans le bicristal 21-28

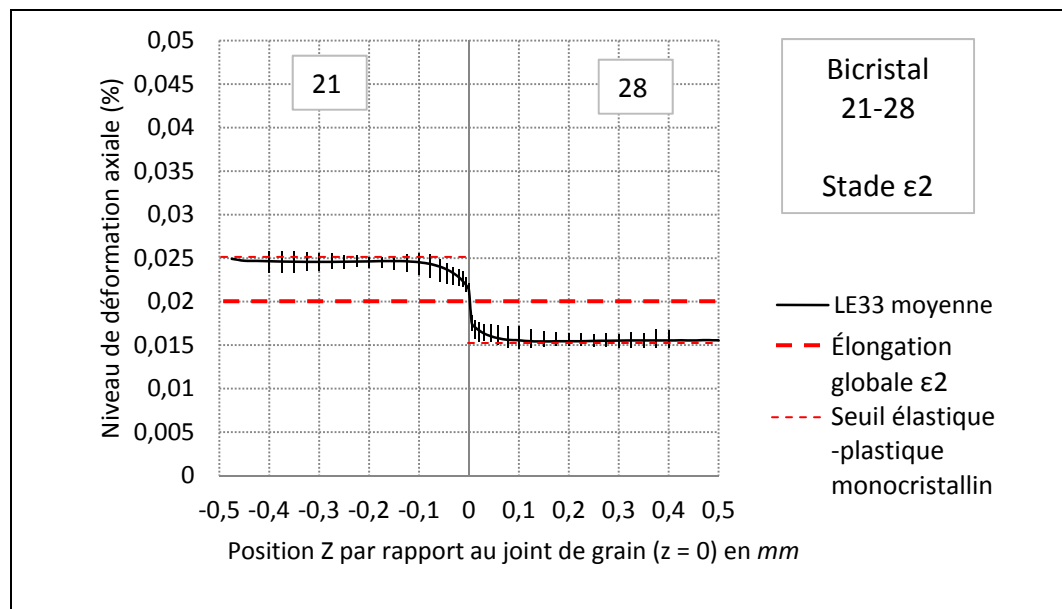


Figure 4.19 Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_2 = 0,020\%$ dans le bicristal 21-28

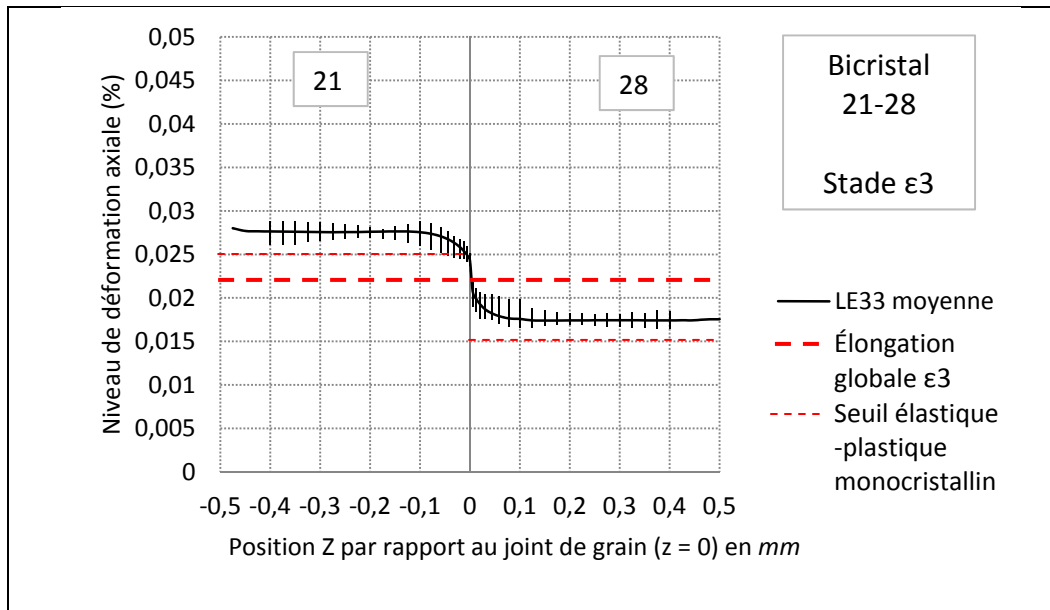


Figure 4.20 Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_3 = 0,022\%$ dans le bicristal 21-28

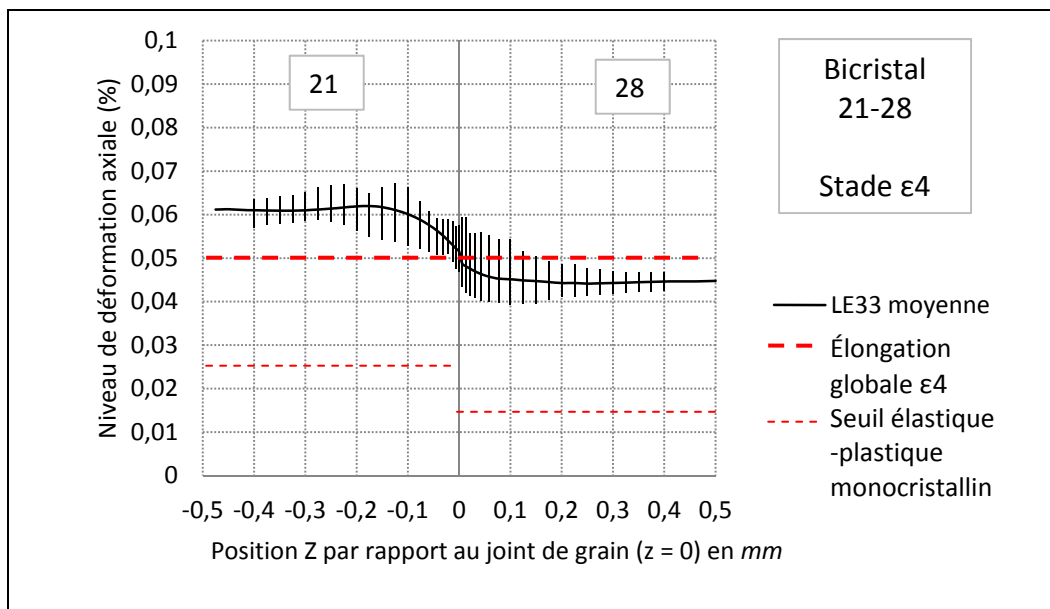


Figure 4.21 Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_4 = 0,050\%$ dans le bicristal 21-28

Pour le bicristal 19-17, seuls les profils de déformation aux stades ϵ_1 et ϵ_4 ont été reportés (Figure 4.22 et Figure 4.23) par souci de légèreté. En régime ϵ_1 , le profil de déformation est similaire à celui du bicristal 21-28 et est caractérisé par deux niveaux de déformation, avec, dans la région du joint le même profil que dans le 21-28. Il s'agit d'une « sur-extension » du côté rigide et d'une « sous-extension » du côté souple. Un raisonnement similaire à celui dans le cas du 21-28 permet de conclure que la déformation plastique commence dans la zone du joint côté rigide (joint de grain côté 17, zone C), ensuite prend place simultanément à cœur (zone A et D) et finalement prend place – en retard – dans la zone du joint côté souple (joint de grain côté 19, zone B). Les différences d'extension sont néanmoins ici très légères, le fait d'avoir un plus faible écart des modules élastiques entre les grains 19 et 17 comparé à ceux entre les grains 21 et 28 peut expliquer ce constat.

Au stade de plasticité généralisée ϵ_4 (Figure 4.21), de grandes amplitudes des variances sont constatées. De plus la présence de deux niveaux de déformation (profil « escalier ») semble s'être estompée en faveur d'une plus importante variation intragranulaire caractérisé par un minima local prononcé de la déformation à l'interface cristalline. La forte variance observée est elle associable à l'évolution anisotrope de la déformation plastique. Une mise en parallèle du profil avec les « profils d'activation des glissements » permet d'associer cette variance à l'activité d'un système de glissement agissant seul (le système D4). Cette remarque rejoint ce qui a déjà été observé au Chapitre 3, cf. 3.4.3. On signale en plus la présence d'un maxima local prononcé de la variance côté 19 du joint de grain, qui est plus important que ce qui a pu être observé dans le bicristal 21-28 à glissements multiples.

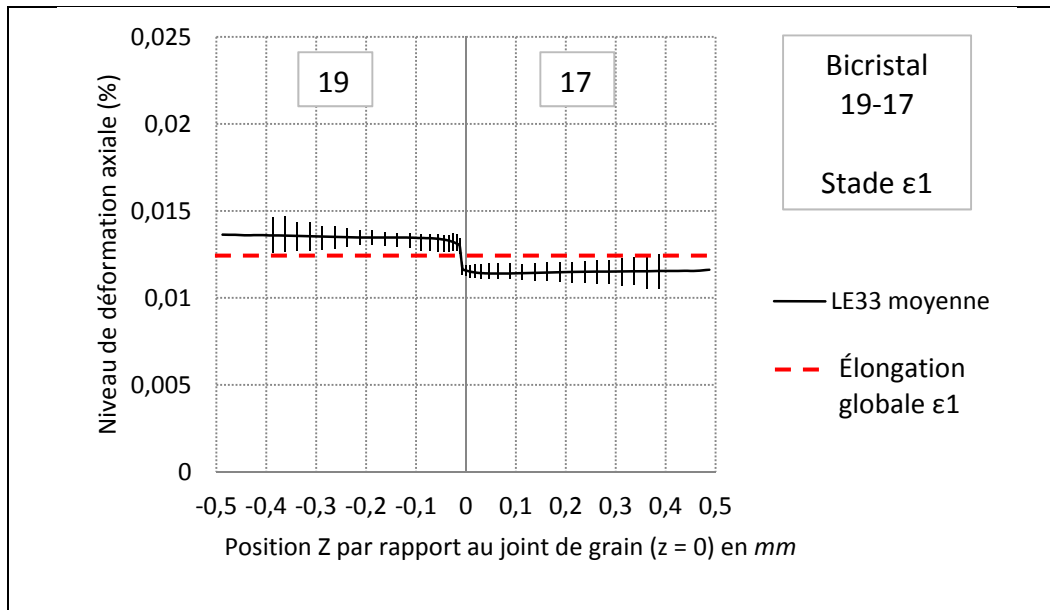


Figure 4.22 Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_1 = 0,012\%$ dans le bicristal 19-17

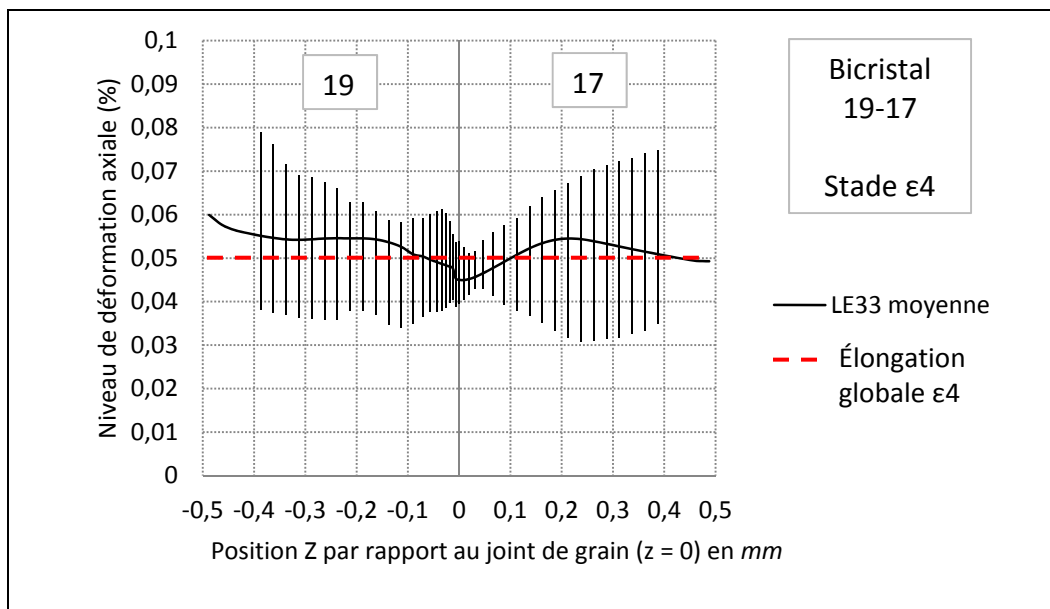


Figure 4.23 Profil de la déformation axiale et sa variance à différentes distances du joint de grain au stade $\epsilon_4 = 0,050\%$ dans le bicristal 19-17

4.2.6.2 État des contraintes induites

Le profil moyen de la contrainte axiale a été tracé sur la Figure 4.24 en fonction de la distance z par rapport au joint de grain. Cette moyenne reste constante dans toute la longueur de l'éprouvette et vaut 16 MPa au stade ϵ_1 . Des maxima de contraintes sont cependant relevés dans la région centrale.

Au stade ϵ_1 par exemple, bien que la contrainte moyenne soit inférieure à la limite d'activation (courbe rouge à $\sigma = 18,6$ MPa), on voit que le maxima égale presque cette limite dans le grain 28, à proximité du joint. On relève l'abscisse du maxima qui est alors située à $z = + 0,031$ mm de l'interface cristalline. Dans le grain 21, le maxima de contrainte est situé à $z = - 0,056$ mm. Le comportement du bicristal au stade ϵ_1 reste donc globalement élastique mais la plasticité est très proche d'être atteinte localement justifiant aussi le comportement cinématique, le profil de glissement, et le profil de déformation dans cette région. La variance de la contrainte est réduite progressivement en s'éloignant du joint de grain pour se rapprocher de la valeur de la contrainte moyenne.

Au stade ϵ_2 et ϵ_3 (non représentés ici), une similitude du profil avec le stade ϵ_1 est notée. Malgré une translation globale vers un niveau supérieur, la position des maxima sur l'abscisse z reste caractéristique. Ainsi la date d'entrée en plasticité de chaque section de l'éprouvette n'est pas la même : elle se produit en premier dans la zone C à $z = + 0,031$ mm.

Le stade ϵ_4 représenté en Figure 4.25 est caractérisé par une contrainte moyenne supérieure à la limite d'écoulement plastique actuelle et la variance est partout nulle, signe d'homogénéité de la contrainte, sauf dans la région critique du grain 28 ($z = + 0,031$ mm) où la contrainte maximale semble de nouveau très élevée. En revanche, ce maxima a disparu du côté du grain 21, ce qui pourrait être associé à une zone de relaxation de la contrainte. Une corrélation avec les profils des glissements permet d'associer la présence de maxima à l'accumulation locale de la déformation, des systèmes purement accommodants (C3 et D6) y étant activés. Il est à noter que ces maxima ne se produisent pas dans le joint mais à courte distance de celui-ci.

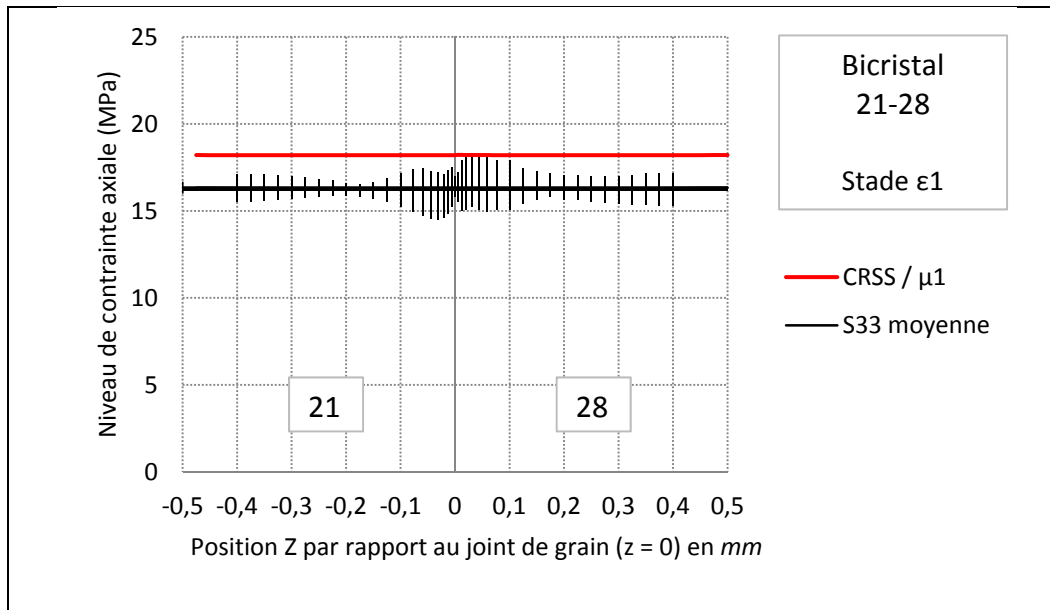


Figure 4.24 Profil de la contrainte axiale et sa variance au stade ϵ_1 le long du bicristal 21-28 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire $CRSS / \mu_1$

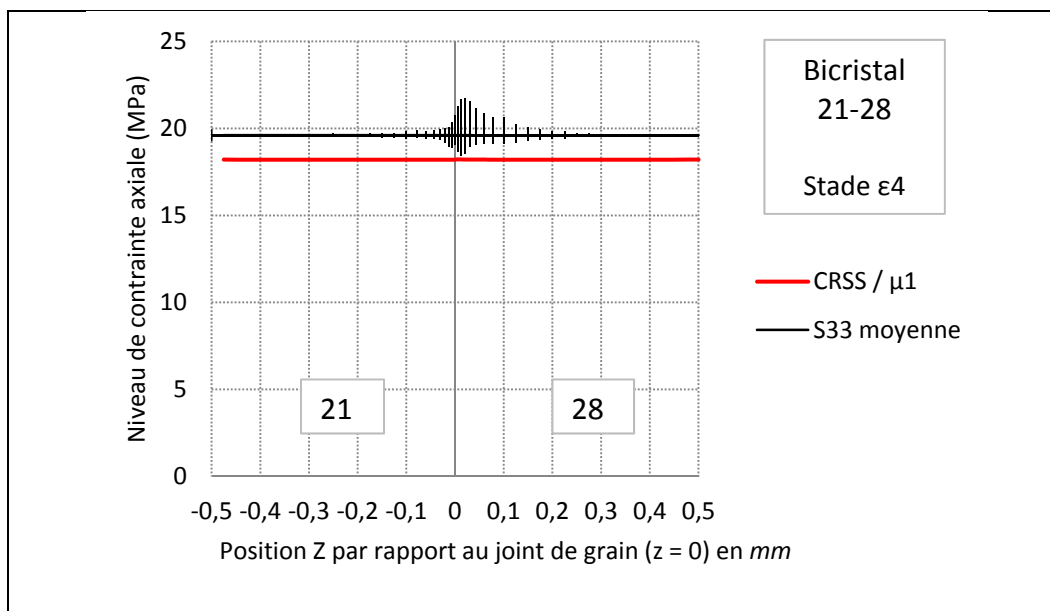
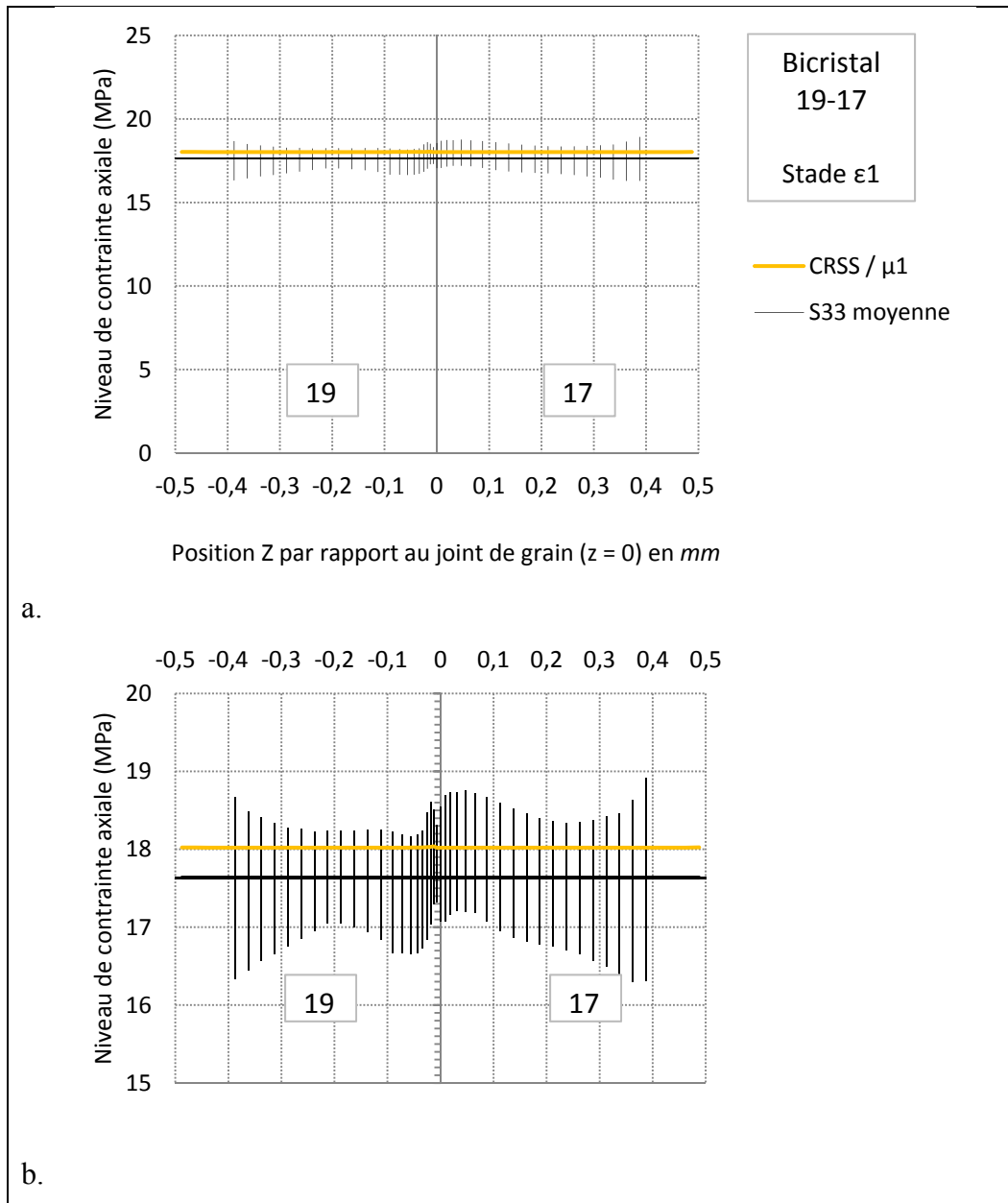


Figure 4.25 Profil de la contrainte axiale et sa variance au stade ϵ_4 le long du bicristal 21-28 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire $CRSS / \mu_1$

Les mêmes représentations que pour le cas du bicristal 21-28 ont été faites pour le bicristal 19-17, soit un profil de contraintes aux stades ε_1 et ε_4 (Figure 4.26 et Figure 4.27). D'après la Figure 4.26.a, la contrainte est assez uniforme au stade ε_1 , sa variance est globalement faible. Cela peut directement être lié la plus faible différence entre leur module élastique ($\Delta E \sim 20$ GPa contre $\Delta E \sim 40$ GPa pour le bicristal 21-28) qui est la seule propriété mécanique intervenant au stade ε_1 . Une refocalisation de l'axe des ordonnées (Figure 4.26.b) a permis de noter une certaine similitude de la variance avec celle du bicristal 21-28. Il s'agit de la présence de maxima local du côté du grain 17 plus rigide. Cette observation est bien cohérente avec les profils des systèmes de glissements relevés dans les sections précédentes et qui prédisaient l'entrée en activité d'un premier système à l'interface du côté du grain 17. Enfin le stade ε_4 (Figure 4.27) est caractérisé par une augmentation de la variance de la contrainte à proximité du joint de grain où l'on note la présence de deux maxima de part et d'autre du – et non dans le – joint de grain.



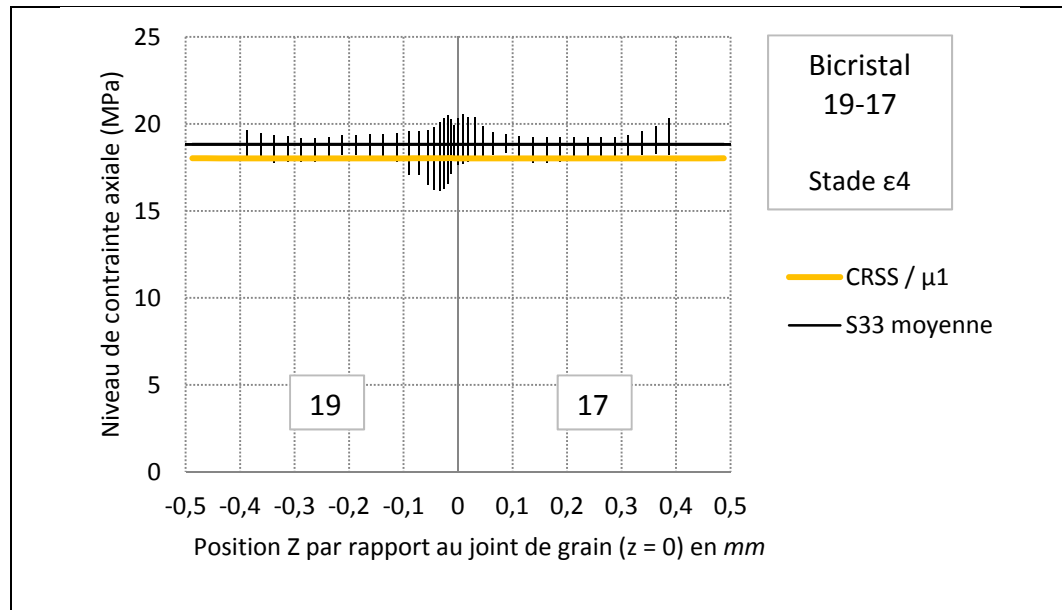


Figure 4.27 Profil de la contrainte axiale et variance à différentes distances du joint de grain au stade ϵ_4 dans le bicristal 19-17 avec la contrainte critique résolue sur le système primaire CRSS / μ_1

4.2.6.3 Définition d'une zone du joint mécaniquement affectée

Bien que les précédents profils de déformation et de contrainte proviennent de deux cas particulier de joint de grain, une zone dite mécaniquement affectée (ZAM) est intéressante à évaluer de part et d'autre du joint. Cette grandeur peut par exemple être prise comme étant la distance entre le plan de joint et le maxima de la déformation (ou contrainte). Le Tableau 4.6 récapitule ces tailles caractéristiques. Ces valeurs sont reportées à titre indicatif et relatif car il est difficile sinon impossible de retrouver de telles quantités dans la littérature.

Tableau 4.6 Taille des zones mécaniquement affectées dans les deux bicristaux

	Bicristal 21-28	Bicristal 19-17
Taille de la zone affectée à $\epsilon = 0,050\%$ (macroscopique)	$\Delta z = 31\ \mu\text{m}$ (-0,00 μm à + 31 μm)	$\Delta z = 36\ \mu\text{m}$ (-18 μm à + 18 μm)

4.2.7 Rotations locales

Les rotations locales ont été quantifiées en termes de désorientation par rapport à l'orientation cristalline initiale. Les Figure 4.28 et Figure 4.29 représentent les niveaux de désorientation sur toute la longueur de l'éprouvette à 2,5 % d'allongement – les rotations étant négligeables ($\ll 10^{E-03}^\circ$) aux stades ε_1 , ε_2 , ε_3 et ε_4 .

Dans le bicristal 21-28 (Figure 4.28), le passage au travers du joint de grain montre une discontinuité, se traduisant par une désorientation de $\sim 0,15^\circ$ du côté du grain 21 contre $\sim 0,80^\circ$ du côté du grain 28, ce qui présente un écart important. Cela vient vraisemblablement d'une différence du nombre de glissement – le cristal 21 étant proche du pôle [001] qui est celui capable d'activer jusqu'à 8 systèmes de glissement faisant que sa rotation de maille soit plus faible.

Dans le bicristal 19-17 (Figure 4.29), la tendance de rotation de chaque côté de l'interface est similaire. Cela se traduit par la quasi-absence de discontinuité des courbes de rotation au passage du joint de grain. L'effet du mode de glissement unique est prononcé : le niveau de rotation est assez élevé dans ce bicristal (entre 1° et 2°) qui est en accord avec l'ordre de grandeur trouvé au Chapitre 3 sur les monocristaux correspondants. La variance (min-max) est également importante ce qui signifie une forte hétérogénéité intragranulaire.

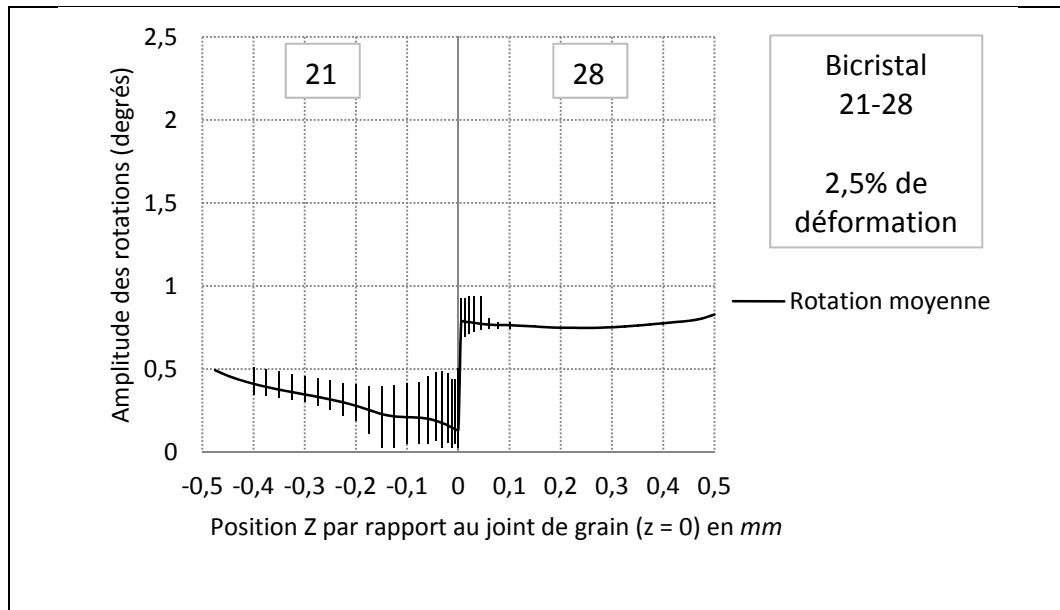


Figure 4.28 Profil du niveau de désorientation dans le bicristal 21-28

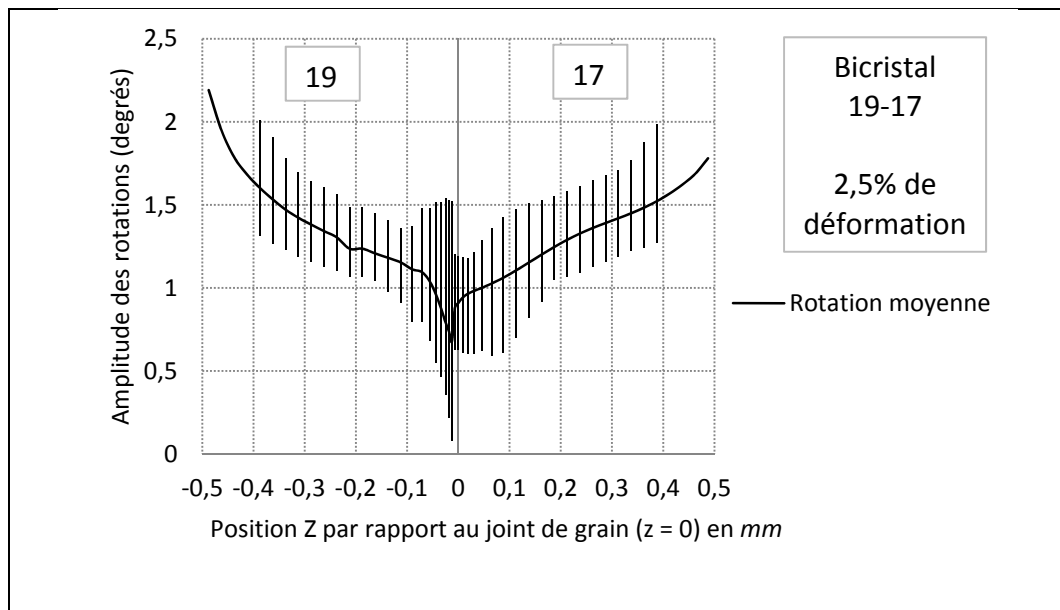


Figure 4.29 Profil du niveau de désorientation dans le bicristal 19-17

4.3 Effets des compatibilités microscopiques sur le comportement d'une interface cristalline

4.3.1 Définition des compatibilités microscopiques

Les compatibilités microscopiques représentent certaines configurations cristallographiques dans lesquelles la disposition géométrique des systèmes de glissement de part et d'autre du joint de grain joue un rôle à priori favorable sur l'activité plastique locale. La position géométrique des systèmes de glissement dans le repère associé au plan du joint est généralement repérée par 7 paramètres de compatibilité dont 4 vecteurs et 3 angles (Figure 4.30) :

- $\vec{b}_1$ et $\vec{b}_2$ sont les directions du glissement de chacun des grains;
- $\vec{n}_1$ et $\vec{n}_2$ la normale à leur plan de glissement d'appartenance;
- les angles κ , Ψ , θ : ce sont respectivement l'angle formé par les deux directions de glissement i.e. l'écart à la colinéarité parfaite, l'angle formé par les deux normales au plan de glissement i.e. l'écart à la coplanarité parfaite, et enfin l'angle formé par la trace de ces glissements, des traces compatibles dans le plan de l'interface étant donc assurées par la condition $\theta = 0^\circ$.

Dans la réalité, ces cas de compatibilité sont difficiles à quantifier, tant au niveau de leur représentativité statistique qu'au niveau de leurs effets sur la microplasticité du joint. Le cas de compatibilité des traces de glissement est néanmoins signalé dans la littérature comme jouant un rôle dans les phénomènes de transfert de glissement dans la microplasticité locale (Sangid *et al.*, 2011; Zhang et Wang, 2003; Zhang, Wang et Hu, 1999a). Cela nous conduira à en faire l'objet de ce second cas d'analyse de notre étude, ce qui permettra aussi de délimiter la sensibilité de notre cadre numérique.

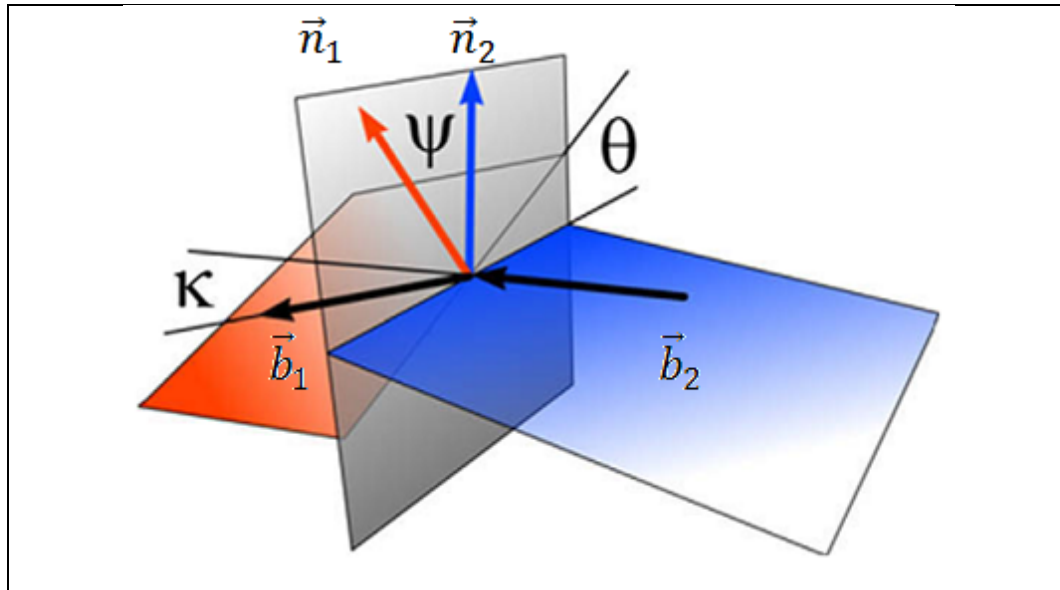


Figure 4.30 Repérage des angles et des vecteurs permettant de quantifier une compatibilité microscopique, adaptée de (Roters *et al.*, 2010)

En plus de la simulation d'un cas de traces compatibles ($\theta = 0^\circ$), il a semblé nécessaire d'étudier préalablement l'effet d'une opération de rotation suivant l'axe de chargement. En effet cette opération de rotation dite aussi « twist » pourrait induire des effets de localisation. L'on souhaite alors savoir si ces effets peuvent masquer les effets qui nous intéressent (effets de la compatibilité des traces). Ainsi, deux cas de figure additionnels ont été générés : le premier consiste en une opération qui prend un monocristal et amène celui-ci vers un état bicristallin dans lequel l'orientation du second grain a été obtenue par rotation $\vec{z}$ de $+45^\circ$. Le second cas consiste en une opération similaire mais de $+90^\circ$. Une relation bicristalline de ce type est appelée joint « twist ». Cette terminologie sera conservée dans le reste du document.

Le Tableau 4.7 donne les trois bicristaux concernés dans cette étude. L'on nommera 17-17A et 17-17B les bicristaux « twist » de $+45^\circ$ et $+90^\circ$ respectivement. Le troisième que l'on nommera 19C-17 n'est autre que le bicristal 19-17, modifié dans le sens que le grain 19 a été tourné autour de l'axe de chargement (axe $\vec{z}$). Cela ne change pas les propriétés cristallographiques du grain mais annule l'angle θ pour une coïncidence de leur trace de

glissement primaire. L'on souligne que ce choix est justifié par le besoin de pouvoir confronter le résultat du cas compatible au cas incompatible ayant déjà été étudié.

Tableau 4.7 Table récapitulatif des trois bicristaux « twist » et de leurs propriétés cristallographiques

Référencement	17-17A		17-17B		19C-17	
Angles d'Euler (ϕ_1/ϕ_2)	(352°/5°/45°)	(307°/41°/23,4°)	(352°/5°/45°)	(262°/41°/23,4°)	(315,5°/31,9°/36,9°)	(352°/5°/45°)
Module élastique	129 GPa	129 GPa	129 GPa	129 GPa	109 GPa	129 GPa
Facteur de Schmid μ_1	0,454	0,454	0,454	0,454	0,454	0,454
Facteur de Schmid μ_2	0,386	0,386	0,386	0,386	0,386	0,386
Ratio μ_2/μ_1	0,850	0,850	0,850	0,850	0,850	0,850
Glissements primaire et secondaire	D4 D1	D4 D1	D4 D1	D4 D1	D4 C5	D4 D1
Désorientation (degrés)	45,00		44,55		28,26	

4.3.1.1 Comportement cinématique local des joints « twistés » : $\theta_{T1} = +45^\circ$ et $\theta_{T2} = +90^\circ$

Les comportements cinématique locaux des bicristaux 17-17A et 17-17B ont été tracés afin de caractériser l'activité du glissement cristallin notamment en termes de « date » d'initiation des glissements et d'amplitude du taux de glissement (Figure 4.31 et Figure 4.32). Comme références, la courbe monocristalline du grain 17 est également reportée sur chaque figure.

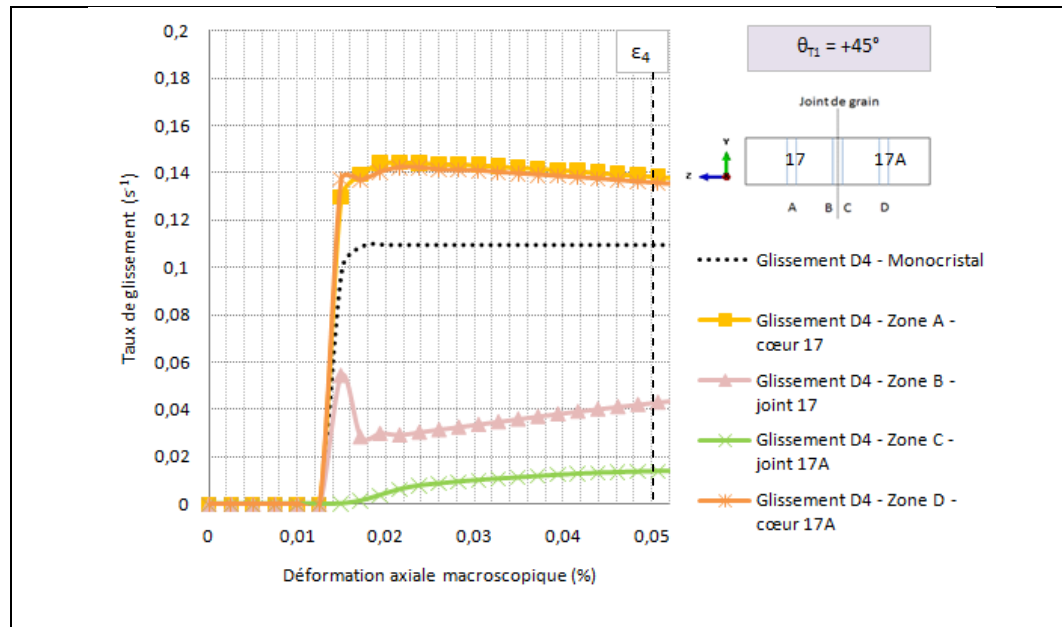


Figure 4.31 Comportement du glissement primaire aux zones A, B, C et D dans le 17-17A

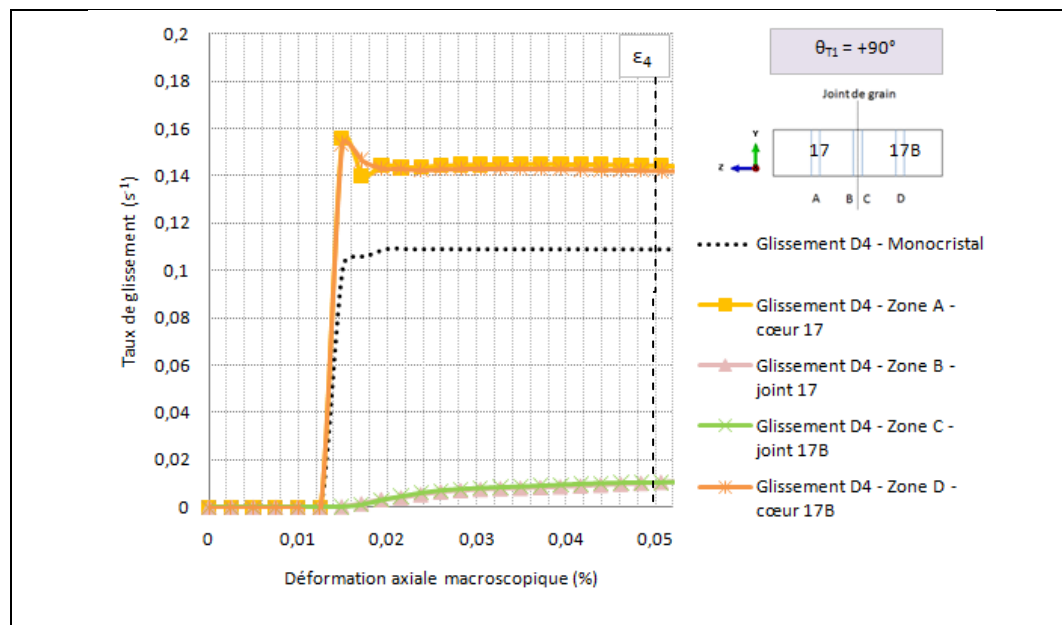


Figure 4.32 Comportement du glissement primaire aux zones A, B, C et D dans le 17-17B

Dans le bicristal 17-17A (Figure 4.31), une première remarque est que la date d'activation du système primaire est la même, toutes sections considérées, A, B, C et D. Cela est logique car les couples ne sont autres que des dérivées « twistés » du monocristal 17 (et donc mêmes propriétés cristallographiques). La plasticité s'initie alors au même moment à $\epsilon_{33} = 0,011 \%$. En revanche la magnitude du taux de glissement présente certaines différences. À cœur (zones A et D) les amplitudes du taux de glissement $\dot{\gamma}$ sont élevées et inversement au joint (zones B et C) elles y sont beaucoup plus faibles. Le Chapitre 3 avait notamment montré que la diminution du taux de glissement d'un système indiquait l'activation d'autres systèmes, partitionnant alors la déformation plastique. Le profil des glissements du 17-17A (Figure 4.33) montre effectivement que les systèmes secondaires (D1 et A3) se sont activés dans la zone C.

Dans le bicristal 17-17B (Figure 4.32), on remarque une tendance similaire soit une faible amplitude des taux de glissement dans la région du joint de grain (zones B et C). Cette fois-ci, ces deux derniers montrent exactement la même amplitude du taux de glissement. Comme précédemment, le faible taux de glissement s'explique par l'activation d'autres systèmes de glissement dans les zones B et C, il s'agit notamment des systèmes D1 et A3. Le profil des glissements associé (Figure 4.34) montre que ces derniers sont spatialement symétriques par rapport au plan de joint, ce qui est causé par la symétrie de la configuration « twist » de $+90^\circ$.

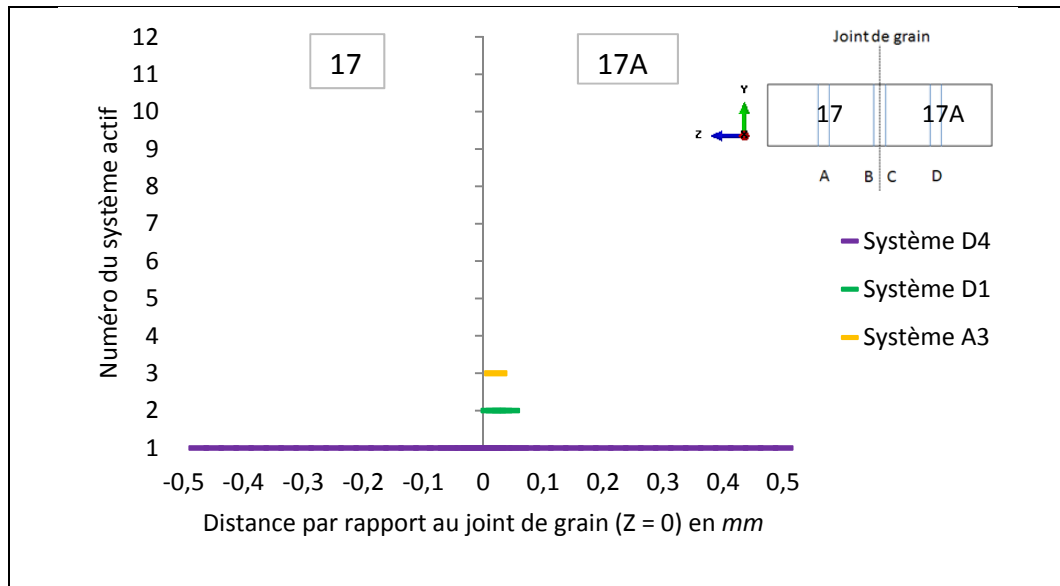


Figure 4.33 Profils et types de glissement dans le bicristal 17-17A ($\theta_{T1} = +45^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

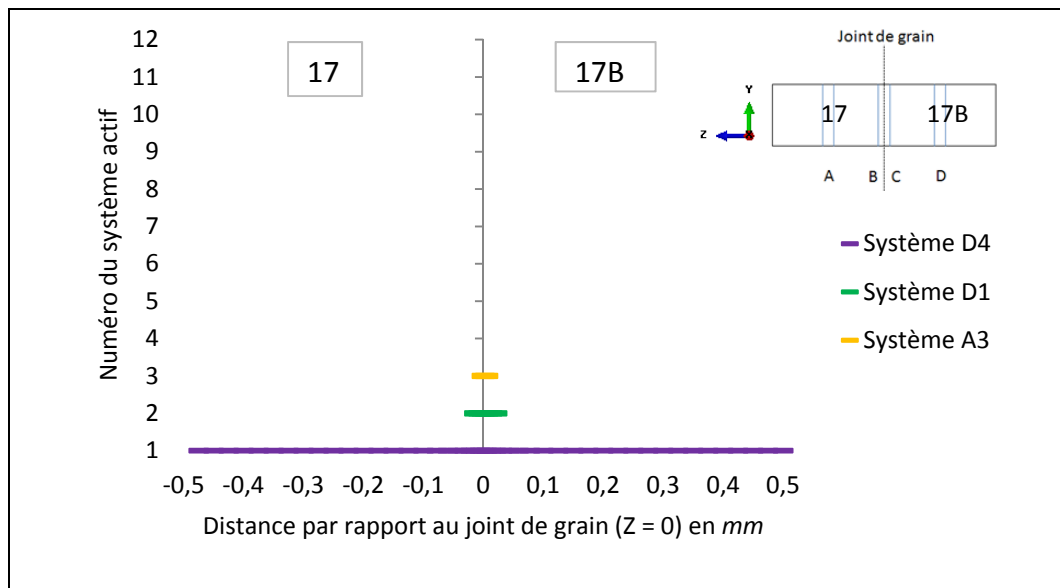


Figure 4.34 Profils et types de glissements dans le bicristal 17-17B ($\theta_{T2} = +90^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

4.3.1.2 Profil de la déformation dans les bicristaux « twistés »

Les profils de déformation en régime plastique des bicristaux 17-17A et 17-17B sont présentés sur la Figure 4.35 et Figure 4.36 respectivement. Comme les propriétés mécaniques (module d'Young, facteurs de Schmid, etc.) sont conservées (égales à celles du monocristal 17) lors d'une rotation « twist », un niveau de déformation constante est attendu sur la longueur de l'éprouvette. On constate pourtant un profil fortement « creusé » au centre, effet accentué pour le cas du bicristal 17-17B.

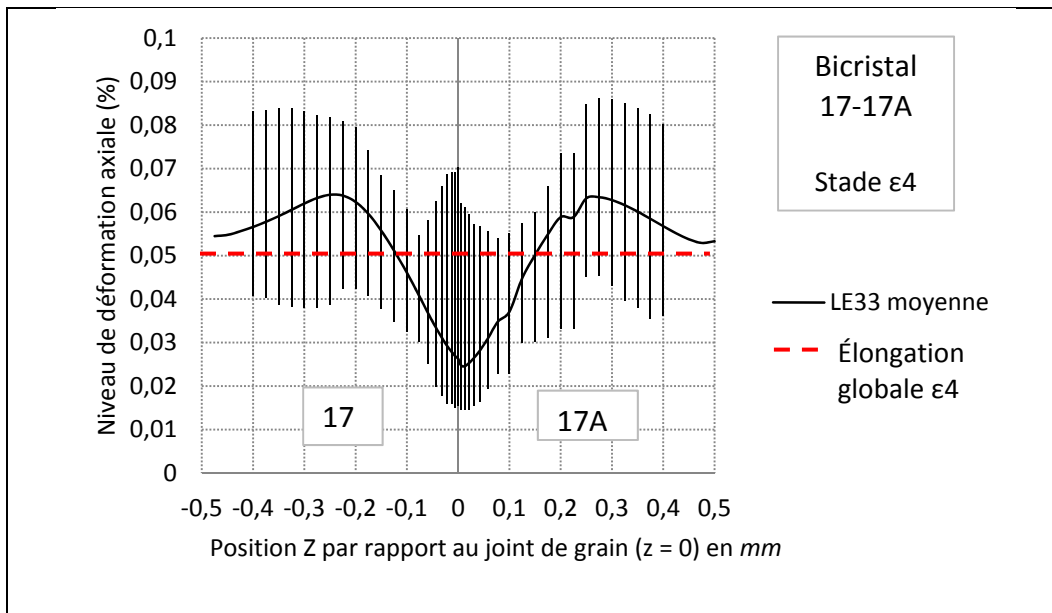


Figure 4.35 Profil de la déformation axiale dans le bicristal 17-17A ($\theta_{T1} = +45^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

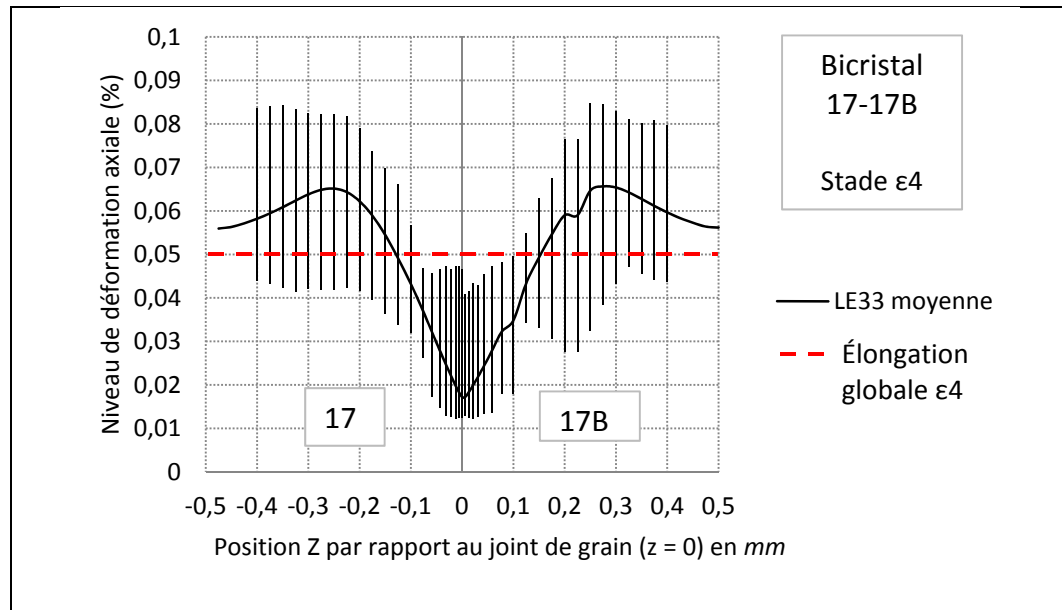


Figure 4.36 Profil de la déformation axiale dans le bicristal 17-17B ($\theta_{T2} = +90^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

La baisse significative de la déformation au niveau du joint n'est pas aisée à corrélérer avec un phénomène local – si tel est effectivement le cas. En réalité le comportement semble davantage piloté par un mouvement global des cristaux. Le fait d'avoir uniquement un glissement actif rend le comportement plastique global très directionnel – suivant principalement le plan de cisaillement du système D4 dans le grain – et devient alors par nature fortement anisotrope.

4.3.1.3 Considération de l'effet poisson plastique

Du fait de la plasticité anisotrope, on peut facilement imaginer une contraction/tension au niveau de l'interface cristalline par effet Poisson. Le terme « effet Poisson » est ici utilisé dans un sens plus générique qu'en élasticité. Il caractérise la contraction transversale d'un matériau lorsque celui-ci est soumis à une déformation d'allongement axial. Les composantes transversales de la déformation (ϵ_{11} et ϵ_{22}) valent $\epsilon_{33}/2$ lorsque le matériau est isotrope mais dans le cas anisotrope tel un système bicristallin, ces composantes ne sont pas égales, favorisant une contraction dans l'une des deux directions. Cette section vise à vérifier

l'amplitude de ces composantes transversales afin d'évaluer leur rôle éventuel dans la plasticité locale.

On peut alors d'ores et déjà prédire que l'effet Poisson causera un état de déformation transversale hétérogène à l'interface cristalline des bicristaux 17-17A et 17-17B. Un effet plus prononcé est attendu pour ce dernier. En effet la rotation « twist » de $+90^\circ$ implique l'intervertissement des composantes ε_{11} et ε_{22} de la déformation au passage au travers du joint de grain. A titre d'exemple les Figure 4.37 et Figure 4.38 montrent les profils des déformations transversales (ε_{11} et ε_{22}), et notamment dans le bicristal 17-17B, l'intervertissement de ces deux composantes au passage du joint de grain.

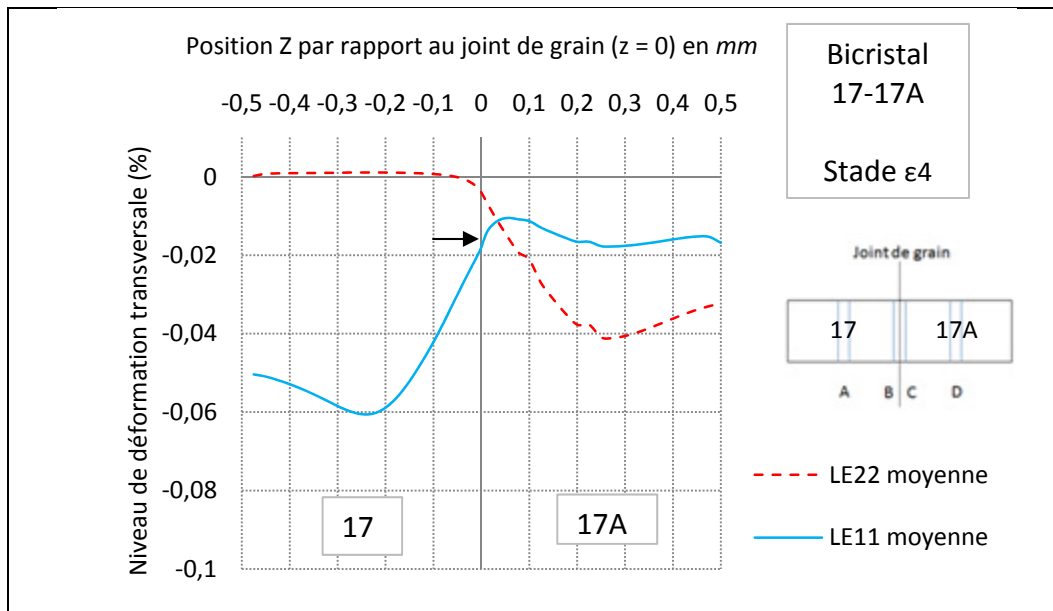


Figure 4.37 Déformations transversales (LE11 et LE22 sur la légende) pour la quantification de l'effet poisson dû à une rotation « twist » de $+45^\circ$ (bicristal 17-17A)

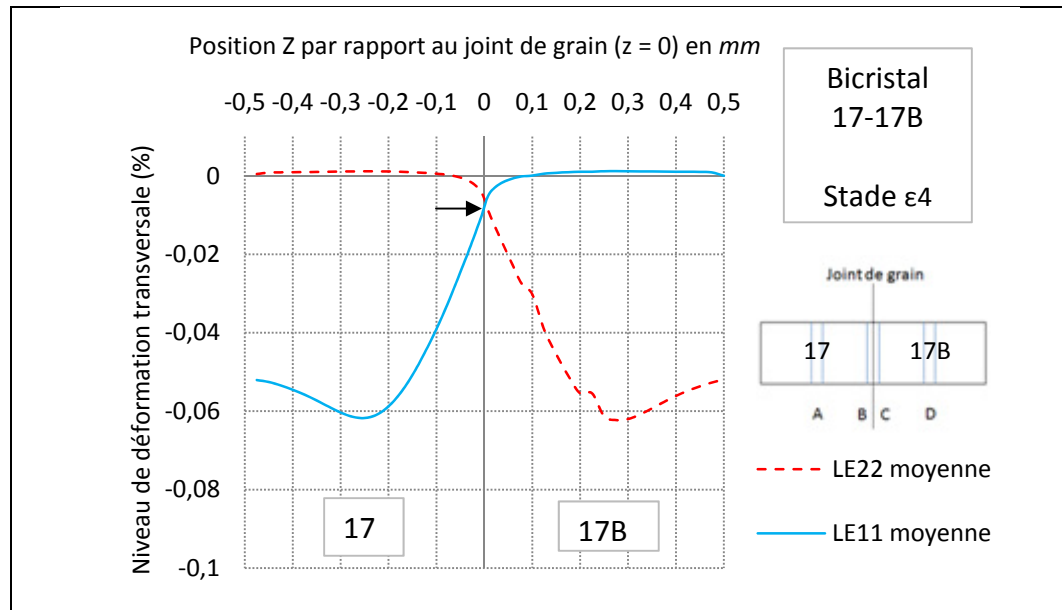


Figure 4.38 Déformations transversales (LE11 et LE22 sur la légende) pour la quantification de l'effet poisson dû à une rotation « twist » de $+90^\circ$ (bicristal 17-17B)

Dans chaque cas, on constate une relative importance de ces composantes de la déformation, soit, du même ordre que la déformation axiale ($\sim 10^{-02} \%$). La contraction maximale est de 0,060 %. Cependant localement au niveau de l'interface, ces déformations sont de faible amplitude (cf. flèches noires sur les courbes) soit respectivement $\epsilon_{11} = -0,020 \%$ pour le couple 17-17A et $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = -0,008 \%$ pour le couple 17-17B. Cela nous conduit à dire que la microplasticité locale n'est finalement pas affectée par ces composantes ϵ_{11} et ϵ_{22} . Néanmoins il est recommandé à l'avenir de vérifier leur variance respective car des points importants ne sont pas à exclure.

4.3.1.4 Profils des contraintes dans les bicristaux « twistés »

En termes de contraintes plastiques, les profils sont assez caractéristiques de ceux déjà étudiés. La Figure 4.39 reporte le profil de contrainte axiale (moyenne et écart-type) du bicristal 17-17A et Figure 4.40 reporte celui du bicristal 17-17B. Les deux affichent une contrainte uniforme tandis que la variance est très forte dans une zone de $\Delta z = \pm 100 \mu\text{m}$ du

joint de grain. Comme mentionné pour la déformation, il serait plus vraisemblable que l'origine du profil observé soit plutôt de l'ordre de l'anisotropie plastique globale du système mécanique. Pour rappel, cette anisotropie provient elle-même du fait d'activer uniquement un seul système cristallin.

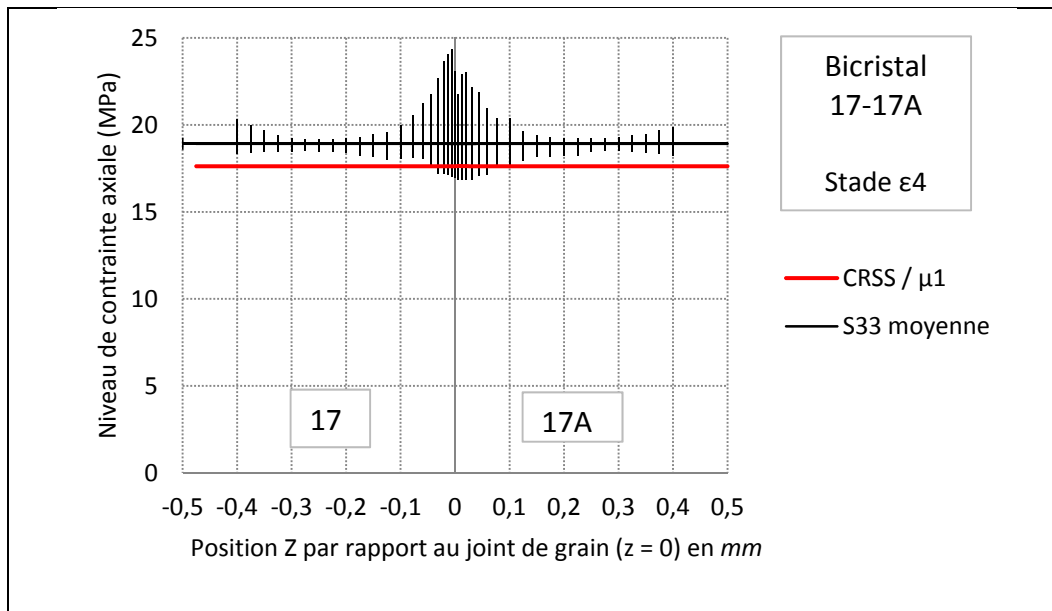


Figure 4.39 Profil de la contrainte axiale dans le bicristal 17-17A ($\theta_{T1} = +45^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

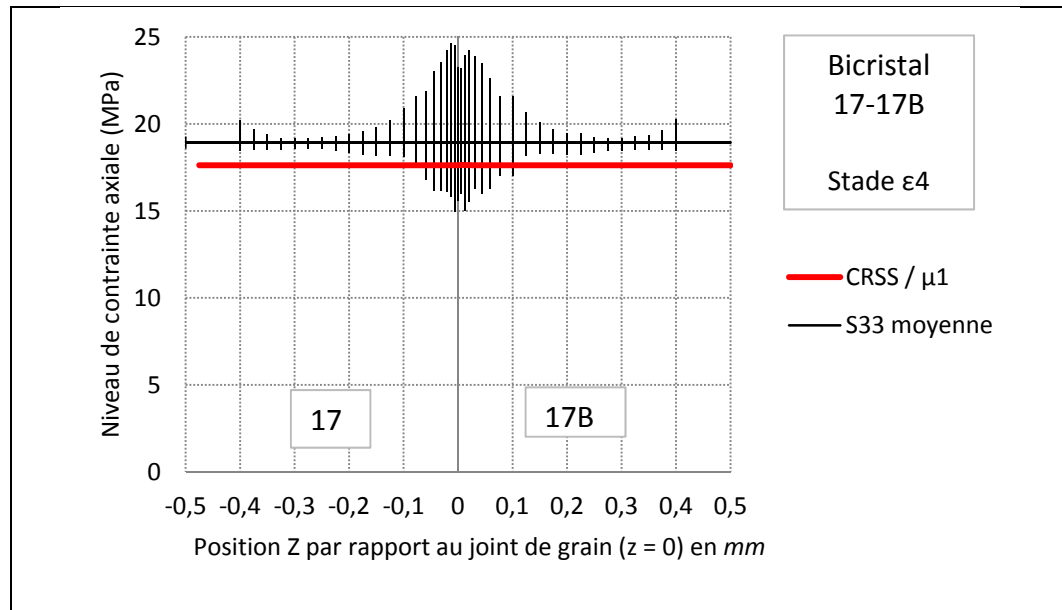


Figure 4.40 Profil de la contrainte axiale dans le bicristal 17-17B ($\theta_{T2} = +90^\circ$) au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

4.3.2 Effets d'une compatibilité des traces de glissement ($\theta = 0^\circ$)

4.3.2.1 Comportement cinématique et profil des glissements

La présente analyse implique la compatibilité de la trace des glissements dans le plan du joint de grain. Le bicristal noté 19C-17 vérifiant cette condition n'est autre que le 19-17 dans lequel le grain 19 a été tourné par rotation « twist » jusqu'à obtenir la condition de compatibilité des traces de glissement. Tout d'abord le comportement cinématique dans les 4 sections A, B, C, et D de l'éprouvette est tracé (Figure 4.41) suivi du profil de glissement associé (Figure 4.42).

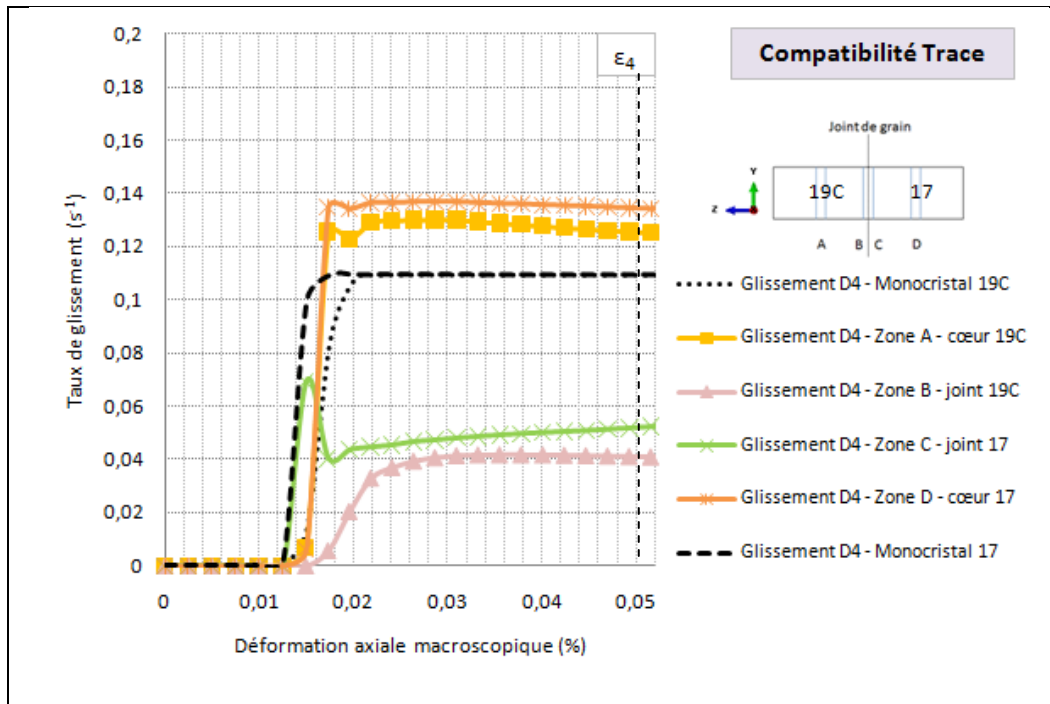


Figure 4.41 Comportement cinématique du glissement primaire D4 dans le bicristal 19C-17 avec compatibilité de la trace de glissement

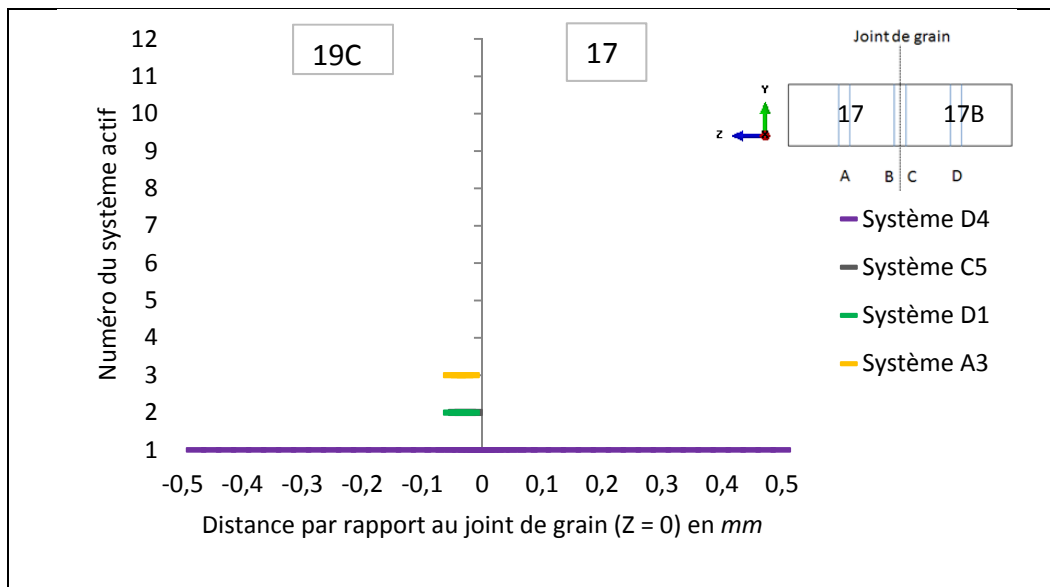


Figure 4.42 Profils et types de glissements dans le bicristal 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée, à noter que C5 et D1 sont superposés

Le comportement cinématique montre que les glissements primaires D4 dans la région du joint de grain sont initiés avec un certain décalage. Plus précisément, on constate une avance en C et un retard en B, comme cela avait exactement été le cas pour le bicristal 19-17 (cf. 4.2.4). Donc, compatible ou non, l'ordre d'activation des glissements par zone est le même.

On constate également que le taux de glissement dans la zone B est légèrement inférieur à celui dans la zone adjacente C. En adoptant le même raisonnement que dans l'ensemble des sections précédentes, cette baisse indique l'entrée en activité d'autres systèmes. Le profil de glissement Figure 4.42 confirme qu'effectivement les glissements secondaires C5/D1 et tertiaires A3 sont intervenus dans la zone B concernée – soit du côté du grain 19C.

En revanche le fait que la trace du système D4 soit compatible au niveau de l'interface cristalline devrait hypothétiquement induire une certaine favorisation du taux de glissement au voisinage du joint de grain. Cette hypothèse suivrait les observations physiques des phénomènes tels que la transmission du glissement au travers de ces interfaces – notamment en fatigue à haut cycle. Or ici, c'est le contraire qui est pourtant constaté. La Figure 4.43 montre une comparaison entre le bicristal 19C-17 et le bicristal 19-17 sur leur profil du taux de cisaillement $\dot{\gamma}^{D4}$. Une baisse encore plus conséquente de celui-ci est constatée dans le voisinage du joint de grain. Donc, soit la compatibilité des traces n'induit aucune favorisation du taux de glissement dans le voisinage du joint de grain, ce qui infirme notre hypothèse sur la facilitation du transfert du glissement, soit cette compatibilité favorise bien ce taux de glissement mais d'autres phénomènes plus significatifs pilotent le niveau général du taux de glissement dans cette région du bicristal. On pourrait citer à titre d'exemple l'anisotropie plastique explicitée précédemment (cf. 4.3.1.2) ou l'effet poisson. Il n'est pas exclu que la désorientation (cristalline ?/plans glissements ?) puisse y jouer un rôle.

L'effet de la condition de traces compatibles ne peut pas être directement corrélé avec le comportement cinématique et une conclusion de ce travail serait l'incapacité du présent modèle de prendre en compte de façon réaliste des mécanismes de type transmission de glissement par compatibilité des plans de glissements le long d'une interface.

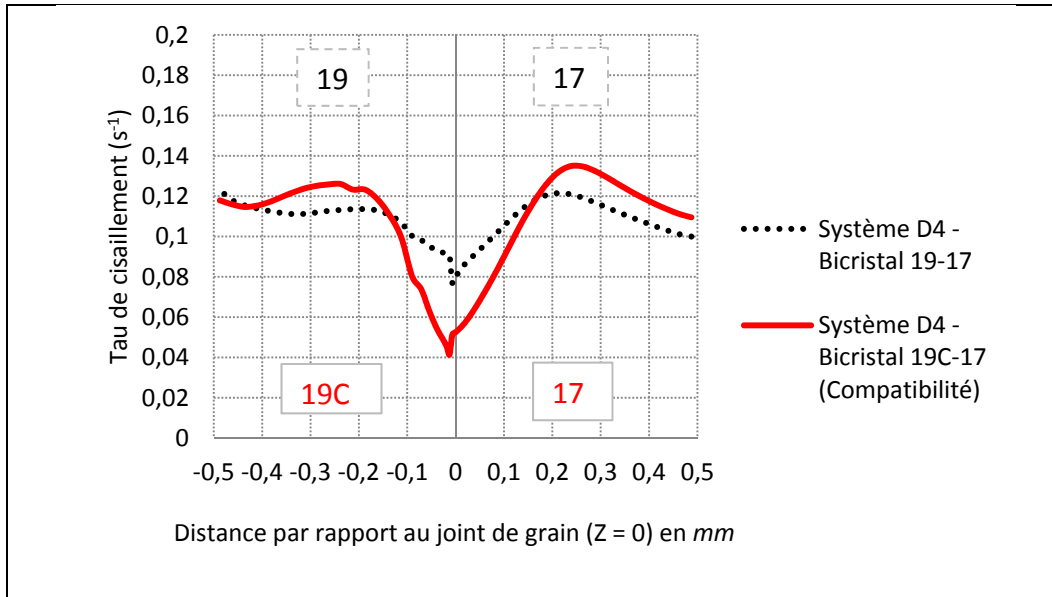


Figure 4.43 Profils du taux de cisaillement sur le système primaire ($\dot{\gamma}^{D4}$) dans les bicristaux 19-17 et 19C-17 au stade ε_4 de plasticité généralisée ($\varepsilon_{33} = 0,05\%$)

4.3.2.2 Profil de la déformation et des contraintes

Le profil de déformation du bicristal 19C-17 (Figure 4.44) ressemble davantage à celui des cas « twistés » 17-17A et 17-17B qu'à celui de son équivalent « non-twisté » 19-17. Il est caractérisé par un minimum de déformation dans la section centrale de l'éprouvette et inversement, deux maximums de 0,06 % sont relevés à -250 μm et +250 μm (cœur de grain). Le profil du taux de cisaillement $\dot{\gamma}^{D4}$ étant très similaire au profil de déformation, on pense que les deux sont mutuellement liés.

Quant à la variance de la déformation, elle est très élevée tout le long du bicristal, ce qui indique une plus grande hétérogénéité intragranulaire (que dans son homologue 19-17). On signale en plus la présence d'un maxima local prononcé de la variance du côté 17, qui, mis en parallèle avec la Figure 4.42, est associé à l'unicité du glissement à cet endroit. Là encore, le 19-17 avait montré exactement le même phénomène.

Le profil de la contrainte (Figure 4.45) indique une relative homogénéité spatiale. Néanmoins la variance augmente à l'approche du joint de grain et un maximum est constaté du côté du grain 17. Cela indiquant une fois de plus que l'activité plasticité est plus favorisée dans la région plus « rigide » du joint de grain (comme cela a été constaté dans les couples 21-28 et 19-17).

Concernant l'influence de la compatibilité des traces de glissement, il est impossible d'affirmer le lien entre compatibilité de trace et le comportement local. En effet, ce dernier semble davantage plus sensible à la désorientation angulaire entre les grains. Le bicristal 19C-17 qui a une plus forte désorientation que le 19-17 affiche en effet un maxima plus significatif au niveau du joint.

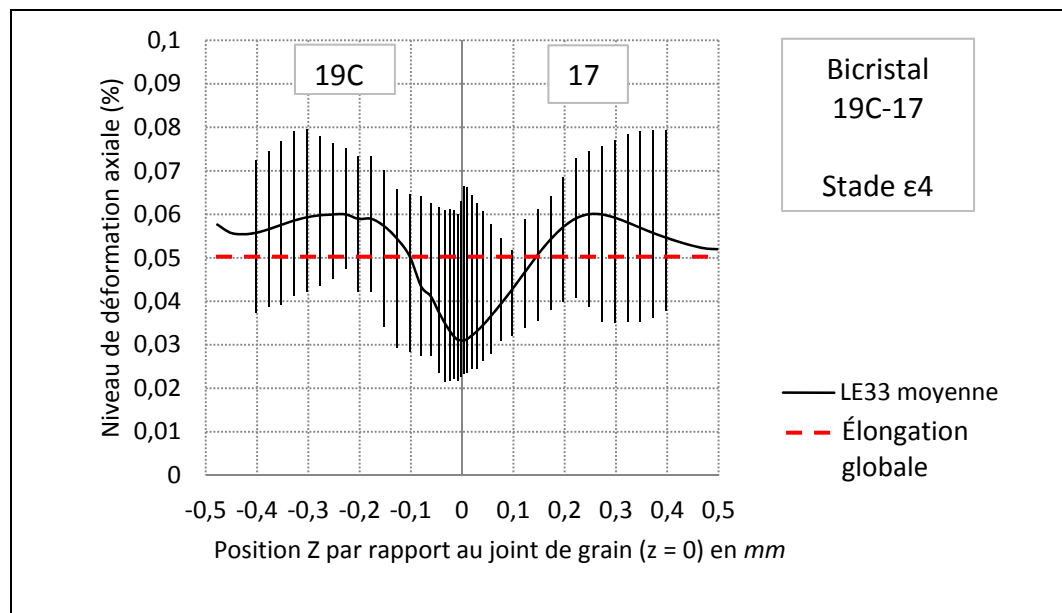


Figure 4.44 Profil de la déformation axiale dans le bicristal 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée ($\epsilon_{33} = 0,05$ %)

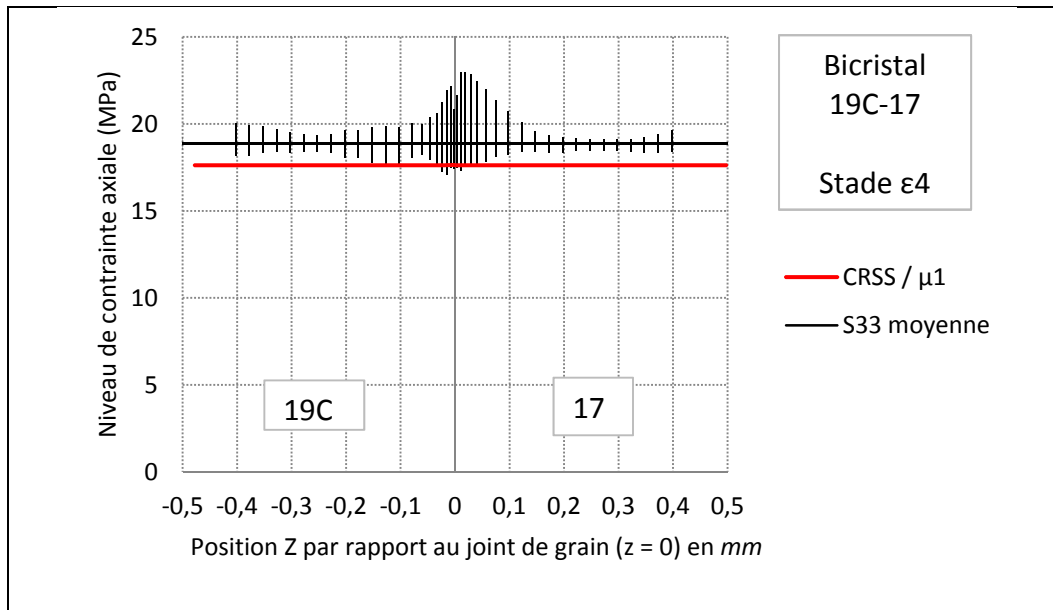


Figure 4.45 Profil de la contrainte axiale dans le bicristal 19C-17 au stade ϵ_4 de plasticité généralisée

4.3.3 Rotations locales

Le profil de désorientation a été pris à la fin du chargement à 2,5 % d'allongement. Il est similaire à celui du 19-17 non-compatible. La seule différence se trouve du côté du grain 19C où comparativement au grain 19 la rotation et sa variance sont plus intenses. Dans le plan du joint de grain, la variance atteint une amplitude de $\sim 2,5^\circ$. Bien que la corrélation avec le fait qu'il s'agisse d'un joint compatibles n'a pas pu être mise en évidence, les trois courbes de désorientation de ce chapitre (Figure 4.28, Figure 4.29 et enfin Figure 4.46) montrent un profil caractéristique : de faibles rotations pour les grains à glissement multiple (cas du bicristal 21-28) et une réorientation plus importante dans les grains à glissement unique (cas des bicristaux 19-17 et 19C-17). Cela reste cohérent avec ce qui a été observé en traction monocristalline où les grains du centre du triangle standard $[001][011][111]$ sont les plus désorientés à la fin du chargement. La variance de la rotation – beaucoup plus importante que dans le cas 19-17 simple – semble quant à elle être influencée par la désorientation ($\sim 28,6^\circ$ pour le 19C-17 contre $16,8^\circ$ pour le 19-17 simple).

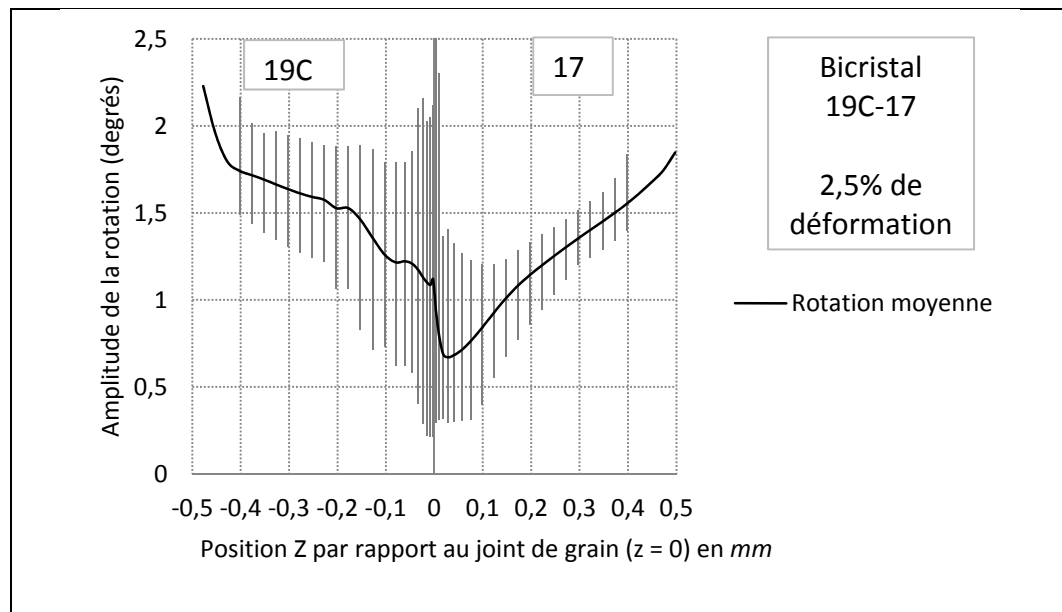


Figure 4.46 Profil de la désorientation locale dans le bicristal 19C-17

4.3.4 Conclusion

Cette section a permis de conclure les éléments suivants :

- L'utilisation de la loi de Schmid assume de travailler en hypothèse de contrainte moyenne uniforme. Cela implique, par conservation de l'équilibre mécanique, que la déformation ne soit pas uniforme dans un système bicristallin.
- La loi de Schmid ne prévoit pas d'activation de systèmes autres que ceux favorablement orientés. On constate pourtant au niveau des joints de grains que des systèmes y sont localement actifs (ici appelés systèmes d'accommodation). Ces derniers ne sont actifs nulle part dans le monocristal. Néanmoins, les systèmes de glissements actifs aux joints sont souvent parmi les cinq premiers prédits par la loi de Schmid.
- Le profil de la déformation dans un bicristal est dépendant de la désorientation des grains, plus faible est celle-ci, plus le profil de la déformation est uniforme.

- Dans le profil de déformation en régime plastique, un minimal de déformation est systématiquement constaté au centre de l'éprouvette, i.e. au niveau du joint de grain. L'origine de ce minima est pour l'instant difficile à associer à une quelconque propriété microscopique (– macroscopique ?).
- Le glissement plastique se produit prématurément dans la région du joint de grain du côté du grain le plus rigide, ensuite à cœur, et en dernier dans le joint du côté souple. Cela a été constaté par l'intermédiaire du profil de la contrainte pour les 3 cas bicristallins 21-28, 19-17 et 19C-17.
- Le fait d'avoir plusieurs systèmes favorablement orientés – cas des cristaux situés à proximité du pôle [001] – augmente les possibilités d'avoir des systèmes de glissement additionnels activés dans le joint de grain pour accommoder la déformation locale.
- L'augmentation du nombre de systèmes actifs durant une déformation ne fait que diminuer taux de glissement de chaque système activé. L'activation de plusieurs systèmes simultanément conduit au partitionnement de la déformation sur l'ensemble de ces systèmes et conduit également à une diminution de la variance de la déformation globale.

Par ailleurs, il serait intéressant de réaliser les post-traitements en excluant les éléments en contact avec la surface de l'éprouvette. En effet l'intersection entre le plan du joint et les arêtes de l'éprouvette provoque par exemple des effets concentrateurs de contraintes dus à l'acuité géométrique du modèle éléments finis.

CONCLUSION

Le comportement mécanique bicristallin a été étudié par un modèle de plasticité cristalline basé sur la loi de Schmid et une hypothèse en contrainte uniforme est assumée.

Quatre critères importants dictant le comportement mécanique cristallin ont d'abord été identifiés. Il s'agit de la rigidité élastique, du facteur de Schmid maximal, et enfin du ratio entre ces deux facteurs de Schmid principaux. Un choix judicieux d'orientation cristalline a permis d'évaluer l'impact de chaque critère sur le comportement monocristallin : le module élastique détermine l'allongement admissible en élasticité pure, le facteur de Schmid détermine la contrainte limite d'élasticité, le rapport des deux principaux facteurs de Schmid détermine enfin le niveau du taux de cisaillement et donc du taux d'écrouissage sur chaque système de glissement. Ainsi ce taux baisse lorsque davantage de systèmes sont activés, inversement ce taux est au maximum lorsque le glissement est unique.

Les aspects limitatifs de notre approche ont pu être dégagés de manière qualitative. D'abord lors de la comparaison avec les données expérimentales (littéraires) le fait d'assumer une hypothèse de durcissement isotrope (i.e. durcissement latent non-pris en compte) induit déjà des écarts par rapport aux comportements monocristallins réels comme cela a été expliqué au Chapitre 3 (cf. 3.3). Une conséquence ayant été soulevée est que le durcissement évolue quasi-linéairement avec la déformation peu importe le système actif. De ce fait les systèmes initialement défavorables à l'activation le deviennent de plus en plus et il n'y a pas possibilité de reproduire la phase II de plasticité. Il en découle qu'en grandes déformations ($> 5\%$) les comportements réel et numériques ne seront vraiment plus comparables. Enfin, les rotations ne correspondent plus non plus en grandes déformation car l'activation de glissements généralisés entraîne une autre tendance de rotation que seules des hypothèses de Taylor ou Sachs sont plus aptes à modéliser.

Les calculs bicristallins ont ensuite mis en évidence des activités plastiques particulières dans le joint de grain. Elles semblent provenir d'une nécessité à assurer la compatibilité de la

déformation car elles n'existaient nulle part dans les monocristaux. Aussi il en a résulté que le profil de la déformation dans le sens longitudinal de l'éprouvette dépend de la désorientation angulaire entre les deux cristaux, le « creux » de déformation au centre de l'éprouvette étant plus important lorsque la désorientation est forte. Quant à l'hétérogénéité de la déformation en chaque section de l'éprouvette, elle semble surtout liée au caractère fortement anisotrope de la plasticité. Cette hétérogénéité est forte lorsque la déformation est en mode « glissement unique » i.e. cisaillement pur. Enfin, un cas bicristallin qui présentait une compatibilité microscopique des traces de glissement dans le plan du joint de grain a été étudié. Cependant, aucune corrélation avec/influence sur le profil des glissements n'a été relevée, une cause macroscopique étant plus vraisemblablement à l'origine du profil observé.

Comme perspectives, trois axes d'étude (numérique) sont proposés. Premièrement, il serait utile d'élaborer un peu plus l'aspect compatibilités microscopiques. Plus précisément, on pense que la compatibilité des traces n'a pas été concluante sur la (non-) favorisation du phénomène de transfert des glissements. Les directions de glissement peuvent en effet être très divergentes malgré une trace compatible (et inversement), ce qui mérite une clarification. Deuxièmement, l'étude des joints de macles $\Sigma 3$ serait un bon complément au présent travail car ce type de joint est très fréquemment rencontré dans le polycristal à faible EFE. Finalement, l'étude de bicristaux à joints inclinés constituerait une bonne transition vers les polycristaux. En effet l'hypothèse de contrainte (σ_{33}) uniforme pourrait ne plus être respectée et l'action du facteur de Schmid localement serait alors très différente. Ces trois axes sont intéressants à mener avec toujours la version actuelle de notre modèle, l'objectif étant de caractériser un joint de grain « judicieusement » avant de passer à d'éventuelles lois avec effet de taille ou de durcissement spécifique aux joints de grains.

ANNEXE I

CALCUL DU FACTEUR DE SCHMID DANS UN CFC

Les glissements cristallins se produisent suivant les plans et les directions atomiques denses. Dans les structures CFC, on repère un glissement par son plan d'appartenance noté par trois indices de Miller (ijk) et sa direction de glissement également à trois indices notée $[hkl]$, l'ensemble formant un système de glissement. Un exemple de système de glissement s'écrit $(111) [1\bar{1}0]$, plus généralement on note les systèmes du CFC par la famille de plan $|111|$ ainsi que par la famille des directions $\langle 110 \rangle$ (cf. Figure AI-1). On calcule le facteur de Schmid μ associé à chacun des 12 systèmes de glissement par la relation angulaire :

$$\mu = \cos \chi \cdot \cos \theta \quad (4.2)$$

Le facteur de Schmid relie l'angle formé par la normale au plan de glissement χ et l'axe de sollicitation, à l'angle formé par la direction du glissement θ et l'axe de sollicitation (cf. Figure AI-2). L'initiation du glissement est ainsi dictée par le facteur de Schmid, et commence par les systèmes au facteur de Schmid le plus élevé (proche de 0,5).

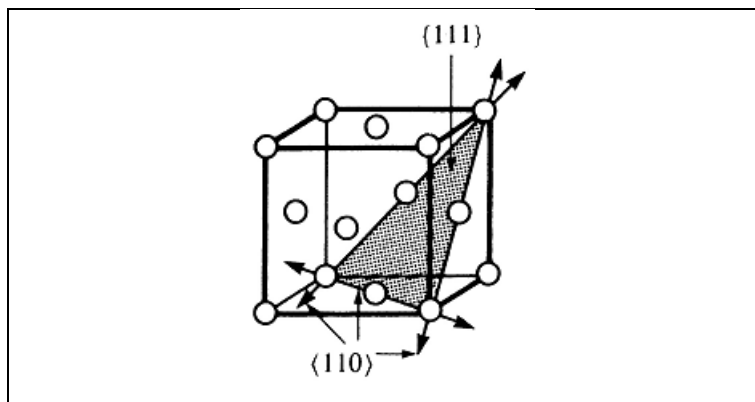


Figure AI-1 Exemple de famille de système de glissement pour un CFC

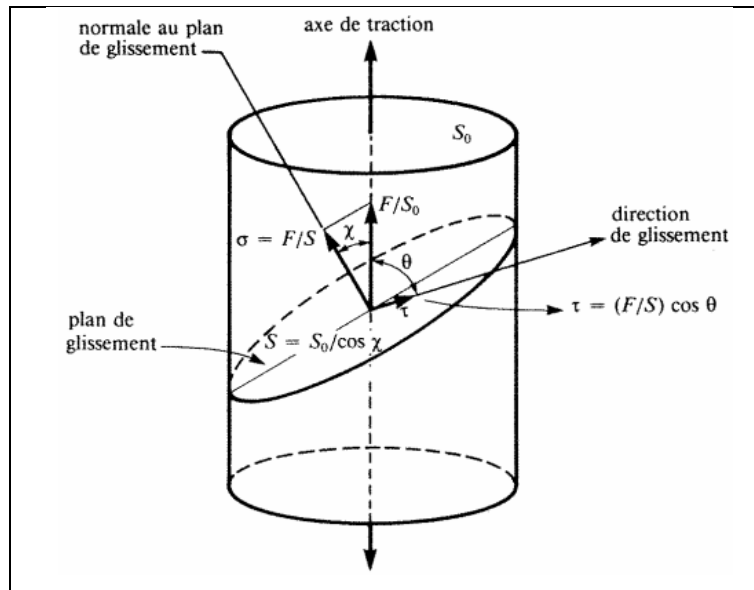


Figure AI-2 Représentation géométrique des angles pour le calcul du facteur de Schmid

ANNEXE II

ANGLES D'EULER ET MATRICE DE ROTATION

L'orientation cristallographique locale se définit par la relation entre les axes principaux de la maille cristalline e_1^C , e_2^C et e_3^C et les axes principaux X, Y et Z de l'échantillon (Figure AII-1). Pour un plus simple repérage, une orientation cristallographique est le plus souvent associée à un triplé d'angle d'Euler (ϕ_1, Φ, ϕ_2) qui détermine entièrement l'orientation de la maille par rapport au repère de l'échantillon par l'intermédiaire de trois rotations successives. L'ordre des rotations, leur axe et leur sens sont régis par une convention. Ainsi la convention de rotation utilisée dans ce manuscrit est celle de Bunge. Elle est illustrée sur la Figure AII-2, et est décrite par la somme des rotations suivantes :

- Une première rotation d'angle ϕ_1 et d'axe Z ramenant X et Y vers une première direction intermédiaire X' et Y' ;
- Une seconde rotation d'angle Φ et d'axe X' ramenant ainsi Y' et Z vers une seconde direction intermédiaire Y'' et Z' ;
- Une troisième rotation d'angle ϕ_2 et d'axe Z' faisant coïncider les axes X'' et Y'' avec les axes cristallins e_1^C et e_2^C .

La matrice rotation associée au changement de base est donnée par le produit matriciel des trois rotations. La matrice finale R ainsi que ses termes sont alors :

$$R = \begin{matrix} & \begin{matrix} X & Y & Z \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix} & \begin{matrix} e_1^C \\ e_2^C \\ e_3^C \end{matrix} \end{matrix}$$

$$r_{11} = \cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi$$

$$r_{22} = -\sin\phi_1 \sin\phi_2 + \cos\phi_1 \cos\phi_2 \cos\Phi$$

$$r_{33} = \cos\Phi$$

$$r_{12} = \sin\phi_1 \cos\phi_2 + \cos\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi$$

$$r_{13} = \sin\phi_2 \sin\Phi$$

$$r_{21} = -\cos\phi_1 \sin\phi_2 - \sin\phi_1 \cos\phi_2 \cos\Phi$$

$$r_{23} = \cos\phi_2 \sin\Phi$$

$$r_{31} = \sin\phi_1 \sin\Phi$$

$$r_{32} = -\cos\phi_1 \sin\Phi$$

Il s'agit d'une matrice rotation vérifiant la relation $[R]^T = [R]^{-1}$. Le sens de l'application doit être tel que cette dernière, i.e. $[R]$ amène la base macroscopique vers la base cristalline, l'opération inverse s'effectuant par transposition/inversement de $[R]$. Ainsi les lignes de la matrice correspondent aux coordonnées cristallines tandis que les colonnes correspondent aux coordonnées macroscopiques.

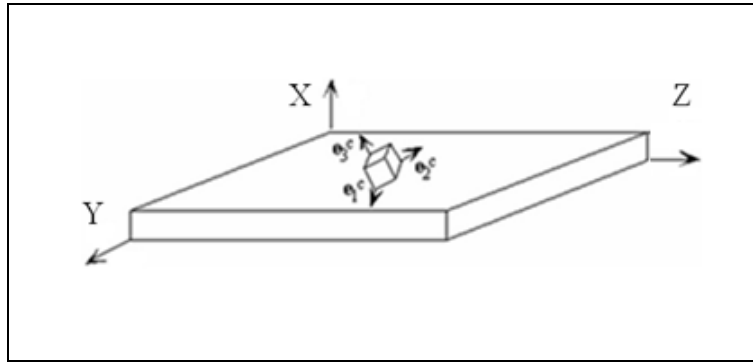


Figure AII-1 Repérage de l'orientation cristalline dans le repère macroscopique

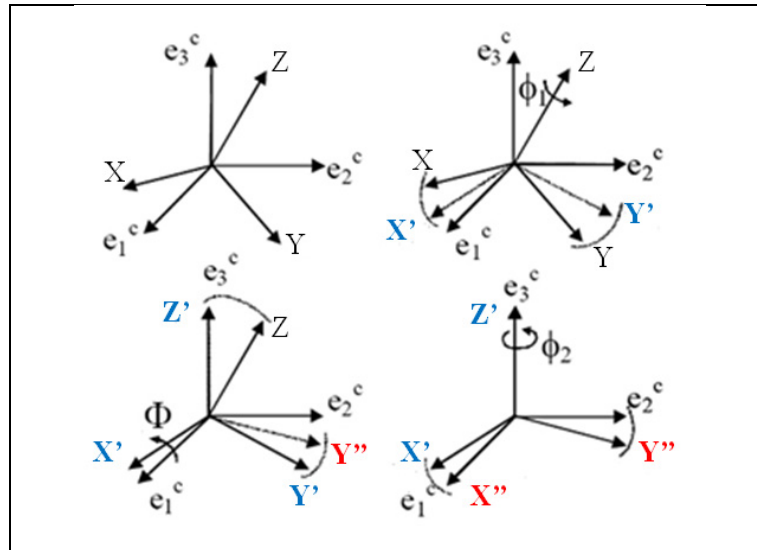


Figure AII-2 Convention de Bunge pour l'ordre, les angles, et les axes des trois rotations successives

ANNEXE III

LISTE DES ANGLES D'EULER ET COORDONNÉES CARTÉSIENNES DANS LE TRIANGLE STANDARD

Figure AIII-1 Table des orientations cristallographiques et pôles retenus dans le cadre de la maîtrise (lignes surlignées en gris)

Numéro du cristal	Facteur de Schmid #1	Facteur de Schmid #2	Ratio entre les facteurs #1/#2	Module d'Young	Phi 1 (degré)	PHI (degré)	Phi 2 (degré)
1	0,5	0,468	0,936	90800	0	25,6	12,4
2	0,49	0,458	0,936	79300	0	19	23
3	0,49	0,49	1	78600	0	18,7	0,1
4	0,49	0,459	0,936	103000	0	31,5	8,2
5	0,49	0,417	0,85	102000	0	30	23
6	0,49	0,417	0,85	100000	0	29,4	24,1
7	0,475	0,444	0,936	76000	0	16,6	32,5
8	0,475	0,475	1	71100	0	12,4	0,1
9	0,475	0,475	1	105000	0	32,7	0,04
10	0,475	0,445	0,936	111000	0	35,7	6,3
11	0,475	0,404	0,85	116000	0	37,4	14,1
12	0,475	0,403	0,85	92800	0	25,9	34,2
13	0,454	0,454	1	78000	0	18	45
14	0,454	0,454	1	67500	0	7,5	0,01
15	0,454	0,454	1	114000	0	37,5	0,01
16	0,454	0,425	0,936	117000	0	39,8	5,03
17	0,454	0,386	0,85	129000	0	41	23,4
18	0,454	0,331	0,728	121000	0	36,3	32,1
19	0,454	0,386	0,85	109000	0	31,9	36,9
20	0,454	0,425	0,936	96300	0	27,2	40,9
21	0,43	0,43	1	66300	0	5	45
22	0,43	0,43	1	65800	0	3,2	0,01
23	0,43	0,43	1	119000	0	41,7	0,01
24	0,43	0,43	1	131000	0	46,5	18,4
25	0,43	0,366	0,85	137000	0	42,3	31
26	0,43	0,365	0,85	125000	0	36,8	38,5
27	0,43	0,402	0,936	114000	0	33,5	41,92
28	0,43	0,43	1	104000	0	30,2	45,01
29	0,408	0,408	1	65400	0	0,01	0,02
30	0,408	0,408	1	120000	0	45,01	0,02

31	0,408	0,408	1	142000	0	48,2	26,6
32	0,408	0,382	0,936	146000	0	46,38	30,7
33	0,408	0,347	0,85	143000	0	43,32	35,46
34	0,408	0,347	0,85	136000	0	40,35	39,37
35	0,408	0,382	0,936	128000	0	37,6	42,42
36	0,408	0,408	1	120000	0	35,3	45
37	0,34	0,34	1	161000	0	51,76	38
38	0,34	0,318	0,936	161000	0	49,54	40,86
39	0,34	0,318	0,936	158000	0	47,6	43,3
40	0,34	0,34	1	155000	0	46,2	45
41	0,272	0,272	1	167000	0	54,74	45,01

BIBLIOGRAPHIE

- Abaqus, V6.8 2008. « Abaqus Version 6.8 Documentation Collection ».
- Baïlon, J.-P. et Dorlot, J.-M. 2001. *Des matériaux*. École polytechnique de Montréal.
- Barbe, F. 2002. « Étude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins ». Paris, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Bassani, J. L. et Wu, T.-Y. 1991. « Latent Hardening in Single Crystals II. Analytical Characterization and Predictions ». *Proceedings of the Royal Society of London: Mathematical and Physical Sciences*, vol. 435, n° 1893, p. 22-41.
- Bassani, J. L., Wu, T.-Y. et Laird, C. 1991. « Latent Hardening in Single Crystals I. Theory and Experiment ». *Proceedings of the Royal Society of London: Mathematical and Physical Sciences*, vol. 435, n° 1893, p. 1-19.
- Boas, W. et Schmid, E. 1933. « Zur Fließbedingung von Kristallen ». *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, vol. 86, n° 11, p. 828-830.
- Bridier, F. 2006. « Analyse expérimentale des modes de déformation et d'endommagement par fatigue à 20°C d'alliages de titane. Aspects cristallographiques à différentes échelles. ». Poitiers, Université de Poitiers.
- Cailletaud, G. 2009. « An overview of the anatomy of crystal plasticity models ». *Advanced Engineering Materials*.
- Chan, K. S. 2010. « Roles of microstructure in fatigue crack initiation ». *International Journal of Fatigue*, vol. 32, n° 9, p. 1428-1447.
- Chen, C. R., Li, S. X. et Wang, Z. G. 1998. « Characteristics of strain and resolved shear stress in a bicrystal with the grain boundary perpendicular to the tensile axis ». *Materials Science and Engineering A*, vol. 247, n° 1-2, p. 15-22.
- Cuitinio, A. M. et Ortiz, M. 1992. « Computational modelling of single crystals ». *Modelling Simulation, Materials Science and Engineering*, vol. 1, p. 225-263.
- Delaire, F., Raphanel, J. L. et Rey, C. 2000. « Plastic heterogeneities of a copper multicrystal study and finite element simulations ». *Acta Materialia*, vol. 48, p. 1075-1087.
- Dexet, M. 2006. « Méthode de couplage entre expérimentations et simulations numériques en vue de l'identification de lois de comportement intercristallin. Application aux alliages de Zirconium ». Paris, Ecole Polytechnique de Paris.

- Dingreville, R. 2010. « Role of microstructure in microscale crystal plasticity ». In. Ecole de Technologie Supérieure - Montréal.
- Dingreville, R., Corbett, C. Battaile, Luke N. Brewer, Elizabeth A. Holm et Brad L. Boyce. 2010. « The effect of microstructural representation on simulations of microplastic ratcheting ». *International Journal of Plasticity*, vol. In Press, Corrected Proof.
- Forest, S. et Fivel, M. 2004a. « Modèles discrets et continus de la plasticité des métaux : du monocristal au polycristal ». In *Conference V*.
- Forest, S. et Fivel, M. 2004b. « Plasticité cristalline : cas du monocristal ». *Technique de l'ingénieur*.
- Forest, S. et Fivel, M. 2004c. « Plasticité cristalline : cas du polycristal ». *Technique de l'ingénieur*.
- Franciosi, P. et Zaoui, A. 1982. « Multislip in FCC crystals a theoretical approach compared with experimental data ». *Acta Metallurgica*, vol. 30, p. 1627-1637.
- Glenn, T. et Bradley, W. 1973. « The origin of strain-rate sensitivity in OFHC copper ». *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 4, n° 10, p. 2343-2348.
- Harewood, F. J. et McHugh, P. E. 2006. « Comparison of the implicit and explicit finite element methods using crystal plasticity ». vol. 39, p. 481-494.
- Heripre, E. 2006. « Méthode de couplage multi-échelles entre simulations numériques polycristallines et mesures de champs pour l'identification des paramètres de lois de comportement et de fissuration des matériaux métalliques ». Paris, Ecole Polytechnique de Paris.
- Hertzberg, R. W. 1996. *Deformation and Fracture Mechanical of Engineering Materials*, Fourth Edition. Wiley.
- Hirth, J.P. 1972. « The influence of grain boundary on mechanical properties ». *The American Society for Metals*.
- Hu, Y. M. et Wang, Z. G. 1998. « Grain boundary effects on the fatigue deformation and cracking behavior of copper bicrystals ». *International Journal of Fatigue*, vol. 20, n° 6, p. 463-469.
- Hutchinson, J. W. 1976. « Bounds and self consistent estimate for creep of polycrystalline materials ». *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 348, p. 101-127.
- Kutt, L. M., Allan, B., Pifko, J. A. et Papazian, J. M. 1998. « Slow-dynamic finite element simulation of manufacturing processes ». vol. 66, p. 1-17.

- Llanes, L., Rollett, A. D., Laird, C. et Bassani J. L. 1993. « Effect of grain size and annealing texture on cyclic response and the substructure evolution of polycrystalline copper ». *Acta Materialia*, vol. 41, p. 2667 - 2679.
- Marin, E. B. 2006. *On the formulation of a Crystal Plasticity Model*. Albuquerque: Sandia National Laboratories.
- Méric, L., Cailletaud, G. et Gaspérini, M. 1994. « F.E. calculation of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests ». *Acta metallurgica materialia*, vol. 42, n° 3, p. 921-935.
- Meyer, M.-A. et Chawla, K. 1999. *Mechanical behavior of materials*.
- Miao, J., Tresa, M., Pollock, A. M. et Wayne, J. 2009. « Crystallographic fatigue crack initiation in nickel-based superalloy René 88DT at elevated temperature ». *Acta Materialia*, vol. 57, n° 20, p. 5964-5974.
- Owusu-Boahen, K., et King, A. H. 2000. « Analysis of the grain boundary misorientation distribution in polycrystalline gold thin films using minimal data ». *Scripta Materialia*, vol. 42, n° 3, p. 301-306.
- Peralta, P. 1996. « Cyclic deformation and crack propagation behavior of Bicrystal an Polycrystal copper ». Pennsylvania, The University of Pennsylvania.
- Priester, L. 2011. *Joints de grains et plasticité cristalline*. Coll. « Mécanique et Ingénierie des Matériaux ». Croydon Engineering, Lavoisier.
- Przybyla, C., Prasannavenkatesan, R., Salajegheh, N. et McDowell, D. L. 2009. « Microstructure-sensitive modeling of high cycle fatigue ». *International Journal of Fatigue*, vol. 32, n° 3, p. 512-525.
- Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D. D., Bieler, T. R. et Raabe, D. 2010. « Overview of constitutive laws, kinematics, homogeneization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications ». *Acta Materialia*, vol. 58, p. 1152-1211.
- Salma, C., et Cizeron, G. 1997. « Étude du comportement structural de l'alliage NC 19 Fe Nb (IN718) ». *Journal of Physics*, vol. 3, n° 7, p. 665-688.
- Sangid, M. D., Ezaz, T., Sehitoglu, H. et Robertson, I. M. 2011. « Energy of slip transmission and nucleation at grain boundaries ». *Acta Materialia*, vol. 59, n° 1, p. 283-296.

- Sieböberger, D., Knake, H. et Glatzel, U. 2001. « Temperature dependance of the elastic moduli of the Ni-base superalloy cmsx-4 and its isolated phase ». *Materials Science and Engineering A*, vol. A298, p. 26-33.
- Siegel, D. J. 2005. « Generalized stacking fault energies, ductilities, and twinnabilities of Ni and selected Ni alloys ». *Applied Physics Letters*, vol. 87, n° 12, p. 121901-121901-3.
- Soer, W. A. 2006. « Interaction between dislocations and grain boundary ». Groningen, University of Groningen.
- Stinville, J.-C. 2006. « Evolution des microstructures et textures locales par nitruration plasma de l'acier 316L. Répercussion sur la durabilité en fatigue. ». Poitiers, Université de Poitiers.
- Wan, J., et Yue, Z. 2003. « Non-uniform stress field and stress concentration induced by grain boundary and triple junction of tricrystal ». *journal of Materials Science and technology*, vol. 19, n° 4, p. 303-308.
- Xiao, L., Chen, D. L. et Chaturvedi, M. C. 2008. « Cyclic deformation mechanisms of precipitation-hardened Inconel 718 superalloy ». *Materials Science and Engineering: A*, vol. 483-484, p. 369-372.
- Zaafarani, N., Raabe, D., Singh, R. N., Roters, F. et Zaefferer, S. 2006. « Three-dimensional investigation of the texture and microstructure below a nanoindent in a Cu single crystal using 3D EBSD and crystal plasticity finite element simulations ». *Acta Materialia*, vol. 54, n° 7, p. 1863-1876.
- Zhang, J, et Jiang, Y. 2007. « An experimental study of the formation of typical dislocation patterns in polycrystalline copper under cyclic shear ». *Acta Materialia*, vol. 55, n° 5, p. 1831-1842.
- Zhang, Z. F. et Wang, Z. G. 1998. « Effect of component crsyal orientations on the cyclic stress-strain behavior of copper bicrystals ». *Materials Science and Engineering A*, vol. A255, p. 148-153.
- Zhang, Z. F. et Wang, Z. G. 2003. « Fatigue-cracking characteristics of a copper bicrystal when slip bands transfer through the grain boundary ». *Materials Science and Engineering A*, vol. 343, n° 1-2, p. 308-313.
- Zhang, Z. F. et Wang, Z. G. et Hu, Y. M. 1999a. « Effects of grain boundary on slip morphology and dislocation patterns in a fatigued copper bicrystal ». *Scripta Materialia*, vol. 40, n° 12, p. 1353-1358.

Zhang, Z. F., Wang, Z. G. et Hu, Y. M. 1999b. « Cyclic deformation behavior and intergranular fatigue cracking of a copper bicrystal with a parallel grain boudary ». *Materials Science and Engineering A*, vol. A272, p. 410-417.