THÈSE EN COTUTELLE

Etude expérimentale et modélisation des microstructures de déformation plastique intragranulaires discrètes

Présentée
à Metz
par
Camille PERRIN

Pour l'obtention des grades de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PAUL VERLAINE METZ
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LA SARRE

Discipline : Sciences des Matériaux
Spécialité : Mécanique des matériaux

Soutenue le 29 octobre 2010 à Metz.

Composition du jury :

Stefan Diebels	Professeur à l'Université de la Sarre, Faculté 8	Rapporteur
Patrick Franciosi	Directeur de Recherche CNRS au LPMTM, CNRS, Université de Paris 13	Rapporteur
Marcel Berveiller	Professeur à Arts et Métiers ParisTech de Metz	Co-directeur de thèse
Horst Vehoff	Professeur à l'Université de la Sarre, Faculté 8	Co-directeur de thèse
Stéphane Berbenni	Chargé de recherche CNRS, LPMM Metz	Co-encadrant de thèse
Frank Aubertin	Docteur à l'Université de la Sarre, Faculté 8	Examinateur
Olivier Bouaziz	Ingénieur de Recherche HDR, Arcelor Mittal	Examinateur
Walter Arnold	Professeur à l'Université de la Sarre, Faculté 8	Examinateur

Remerciements / Danksagung

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et de Mécanique des Matériaux (Université Paul Verlaine de Metz) et dans le département sciences de matériaux et méthode de l'université de la Sarre (Allemagne).

Je tiens tout particulièrement à remercier Marcel Berveiller de m'avoir permis de réaliser cette thèse au sein de l'équipe Rhéologie et Microstructure du Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM), et Stéphane Berbenni pour m'avoir encadré au cours de ces quatre années ainsi que pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques. J'ai pu grâce à votre confiance participer à un projet scientifique dans un environnement biculturel entre la France et l'Allemagne.

Mein Dank gilt auch insbesondere Herrn Prof. Dr. Horst Vehoff für die Betreuung dieser Arbeit, für sein Vertrauen, für seine zahlreichen Räte und für interessante Diskussionen.

Je remercie le soutien du collège doctoral franco-allemand (CDFA-06-09) (*"Evolution des microstructures lors des procédés de mise en forme des matériaux : développement de techniques expérimentales (CND) et de modélisation"*) piloté par les Professeurs Walter Arnold et Marcel Berveiller qui m'a permis d'effectuer une thèse en cotutelle franco-allemande dans de bonnes conditions.

Je remercie vivement Messieurs Patrick Franciosi (Directeur de recherche CNRS au LPMTM de l'Université Paris 13) et Stefan Diebels (Professeur à l'Université de la Sarre, Doyen de la Faculté 8) de l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'être

rapporteurs de ce travail, ainsi que Monsieur Walter Arnold (Président du jury, Professeur à l'Université de la Sarre, Faculté 8) et Messieurs Olivier Bouaziz (Ingénieur de recherche HDR, Arcelor Mittal) et Franck Aubertin (Docteur à l'Université de la Sarre, Faculté 8) pour leur participation au jury.

Mein Dank gilt den Mitarbeitern am WWM Institut : Frau Ohm, Rita, Andreas, Peter und Stephan für ihre Freundlichkeit, für ihre Unterstützung, für ihre Hilfen. Mein Dank gilt meinen Kollege und Freunde : Kerstin, Nousha, Afrooz, Wolfgang, Markus, Michael, Tao, Mohammad und Jules. Sie waren für mich sehr wichtig. Ich habe unvergessliche Zeit mit ihnen verbracht.

Je remercie Dominique Vincent, Anne-Martine Blum, Karima Siabdallah et Christelle Soliman du LPMM pour leurs aides précieuses.

Je remercie mes camarades doctorants du LPMM, Christine, Olivier, Baguer, Youssef, Yves, Nicolas, Hela pour leur soutien ainsi que leur amitié.

Je tiens à remercier Mr Eberhardt pour ses nombreux conseils et son aide précieuse.

Je remercie Sophie Berveiller, Raphaël Pesci, Marc Wary et Denis Bouscaud pour m'avoir fait partager leur expérience de l'enseignement.

Je remercie Christophe Collard pour son aide précieuse concernant l'informatique et les calculs scientifiques.

Je remercie Anna Utz pour ses cours d'allemand qui m'ont permis de prendre confiance dans la langue de Goethe.

Je remercie tous les amis que j'ai pu rencontrer lors de mes études, en particulier Abdelkader, Djilane, Dominique, Mamadou, Mohamed, Rémi, Rachid de l'université de Metz et Damien et Rémi de l'ENIM.

Je remercie mes amis Xavier, Hélène, Nicolas et Adeline pour nos nombreux fous rires, leur soutien inconditionnel et pour m'avoir permis de m'évader.

Je remercie mon ami Burç pour son soutien et pour m'avoir fait découvrir Sarrebruck comme personne et pour m'avoir présenté toute sa jolie famille. *Tesekkürler kanki !*

Je remercie toutes les personnes de "La Beugnatte è Souvenance" du club des retrou-

vailles de Dieuze pour m'avoir enseigné le Lorrain et pour tous les superbes moments que j'ai passé avec eux. Encore merci de m'avoir acceuilli si chaleureusement. *J'ato tojo bîn ahhe èvo vos !.*

Je remercie Roland Bastien de Flocourt, *C'at beun anlé, les chètes n'y vro-m'.*

Je remercie "Toto" pour son soutien inconditionel depuis 15 ans.

Je remercie également Georges, Manu, Edith et Django pour leur soutien à leur manière.

Enfin, le plus important, je remercie ma famille, tout d'abord mon père et ma mère pour leur soutien constant, ma soeur Violette, mon frère Henri et sa femme Véronique qui sont toujours à mes côtés dans les moments importants, mes grands parents Monique et Jeannot. J'ai également une pensée pour mes grands parents Adéle et Jeannot.

Table des matières

Remerciements iv

Table des matières xiii

Notations xiv

Résumé xvi

Abstract xviii

Kurze Zusammenfassung xx

Zusammenfassung xxii

Introduction générale 1

1 Hétérogénéités des champs plastiques intra-granulaires 7

1.1 Description des hétérogénéités plastiques 7

1.1.1 Les défauts individuels dans les cristaux - Rappels de base . . 7

1.1.2 Lignes et bandes de glissement plastiques 16

1.1.3 Cellules de dislocation 27

1.2 Impact des hétérogénéités plastiques intra-granulaires sur les propriétés mécaniques locales et globales 30

1.2.1 Impact sur les champs élastiques locaux 30

1.2.2 Effet de taille de grain et/ou de cellule de dislocations sur le comportement mécanique macroscopique de métaux polycristallins . . . 34
1.3 Conclusion . . . 36

2 Longueurs internes et approches de modélisation 39
2.1 Techniques d'homogénéisation à champs moyens . . . 40
2.1.1 Contexte de plasticité cristalline : le glissement plastique . . . 40
2.1.2 Loi de comportement du grain en élasto-plasticité . . . 43
2.1.3 Comportement du polycristal : approche en champs moyens avec les outils micromécaniques classiques pour la transition d'échelle . . . 45
2.1.4 Succès et insuffisances des modèles à champs moyens . . . 51
2.2 Introduction phénoménologique de la taille des grains et effets de dispersion de tailles des grains . . . 63
2.2.1 Loi de comportement locale dépendant de la taille de grain . . . 64
2.2.2 Quelques résultats . . . 68
2.3 Autres approches actuelles pour traiter les effets de longueurs internes 70
2.3.1 Approche à Champs Moyens à Longueurs Internes (ACMLI) . 70
2.3.2 Dynamique dislocations discrètes . . . 74
2.3.3 Mécanique des milieux généralisés . . . 76
2.4 Conclusions . . . 78

3 Modélisation micromécanique statique discrète des défauts 81
3.1 Introduction . . . 81
3.2 Equations de champs et thermodynamique . . . 85
3.2.1 Equations de champs . . . 85
3.2.2 Energie libre . . . 88
3.2.3 Incompatibilités . . . 88
3.3 Approche à champs moyens . . . 90
3.3.1 Théorie continue des défauts . . . 90

3.3.2 Application : solutions du problème classique d'inclusion d'Eshelby 94
3.3.3 Bilan sur les approches à champs moyens 98
3.4 Approche discrète 99
3.4.1 Préambule 99
3.4.2 Cas d'une boucle de glissement circulaire 101
3.4.3 Cas d'une distribution périodique de boucles de dislocation circulaires 108
3.4.4 Résultats 111
3.4.5 Conclusions 119
3.5 Un premier modèle d'homogénéisation à plasticité discrète 119
3.5.1 Contrainte cinématique moyenne dans le grain 120
3.5.2 Modèle de transition d'échelle dilué 121
3.5.3 Cas du modèle d'Eshelby dilué (approche à champ moyen) . . 122
3.5.4 Cas du modèle dilué avec des hétérogénéités plastiques intra-granulaires discrètes 123
3.5.5 Application à un modèle poly-cristallin indépendant du temps 124
3.5.6 Résultats numériques 124
3.5.7 Conclusion 127
3.6 Conclusions 128

4 Etude expérimentale des hétérogénéités plastiques intra-granulaires et validation du modèle par des mesures EBSD 131
4.1 Méthode expérimentale 132
4.1.1 Choix des matériaux étudiés 132
4.1.2 Présentation du matériau étudié 133
4.1.3 Traitements thermiques après laminage 134
4.1.4 Préparation de la surface des éprouvettes de traction 135
4.1.5 Essais de traction simple 138
4.1.6 Outils de caractérisation de la microstructure de déformation . 138
4.2 Résultats expérimentaux 140

4.2.1 Etude de grains déformés en glissement simple 140
4.2.2 Analyse des mesures par microscopie à force atomique 144
4.2.3 Mesure de la distance entre bandes de glissement 147
4.2.4 Analyse des mesures EBSD 148
4.3 Modélisation de la microstructure de déformation 152
4.3.1 Brève description du modèle micromécanique 152
4.3.2 Cas d'une distribution discrète non-uniforme 154
4.3.3 Cas d'une distribution discrète uniforme 154
4.3.4 Calcul de la désorientation intra-granulaire 155
4.3.5 Hypothèses du modèle pour les calculs 155
4.4 Confrontation du modèle aux résultats expérimentaux 160
4.4.1 Désorientations intra-granulaires 160
4.4.2 Estimation des contraintes internes et comparaison à l'approche d' Eshelby 164
4.5 Conclusions 166

5 Quelques possibilités d'extensions à des cas plus complexes 168
5.1 Plasticité discrète dans une inclusion plastique sphérique noyée dans une matrice plastique 170
5.1.1 Modèle d'Eshelby-Kröner : rappel 173
5.1.2 Modèle à plasticité discrète à glissements simples dans grain et matrice 175
5.1.3 Application : impact des phénomènes inter-granulaires et discrets sur les champs et l'énergie élastiques 179
5.1.4 Problème traité 179
5.1.5 Résultats 182
5.1.6 Conclusions 186
5.2 Cas des cellules de dislocations 187
5.2.1 Description du modèle 191
5.2.2 Résultats 195

5.3 Conclusions 195

Conclusion **200**

Bibliographie **204**

A Modélisation auto-cohérente du comportement élasto-viscoplastique de matériaux hétérogène (Procédure auto-cohérente à champ translaté) **222**

A.1 Comportement élasto-viscoplastique et équations de champs du problème 222

A.2 Opérateurs de projection et équation intégrale 225

A.2.1 Variations au premier ordre des propriétés élastiques et viscoplastiques 225

A.2.2 Opérateur de projection et propriétés remarquables 226

A.2.3 Equation intégrale 227

A.2.4 Procédure auto-cohérente : application de la technique des champs translatés 228

B Méthode des fonctions de Green pour un milieu infini élastique homogène et incompatible **236**

C Dérivation de l'énergie libre d'Helmholtz pour un solide avec une déformation libre **240**

D Méthode des transformées de Fourier pour un milieu infini élastique homogène et incompatible **242**

D.1 Solution générale en déplacements 242

D.2 Solution en déplacements en élasticité isotrope et plasticité incompressible 244

D.3 Energie élastique interne 246

E Champs élastiques de boucles de dislocation de glissement circu-

laire **248**

E.1 Distorsion et contrainte associé à une boucle de glissement circulaire . 248

E.1.1 Energie élastique interne 252

F Evolution des textures cristallographiques et désorientations **254**

F.1 Loi d'évolution des angles d'Euler 254

F.1.1 Définition des angles d'Euler 254

F.1.2 Evolution des angles d'Euler aux cours de la déformation . . . 256

F.2 Description d'une désorientation 257

F.2.1 Matrice de désorientation 257

F.2.2 Couple axe/angle 258

G Plasticité discrète dans la matrice **260**

G.1 Champ de déplacement associé à une fonction de Dirac 260

G.2 Calcul de l'énergie élastique dans le cas de deux distributions de boucles 263

G.2.1 Energie associée à deux boucles de dislocation coplanaire de même signe 264

G.2.2 Energie associée à deux boucles de dislocation coplanaire de signe contraire 265

Liste des tableaux **268**

Table des figures **284**

Notations

Notations

Notations condensées :

– d'un vecteur X : $\underline{X}$

– d'un tenseur X d'ordre 2 : $\underset{\sim}{X}$

– d'un tenseur X d'ordre 4 : $\underset{\approx}{X}$

Notations indicielles :

– d'un vecteur X : X_i

– d'un tenseur X d'ordre 2 : X_{ij}

– d'un tenseur X d'ordre 4 : X_{ijkl}

Notations sur les opérations tensorielles :

$\cdot$ représente le produit simple entre deux espèces, on a alors :

– entre deux vecteurs $\underline{A}$ et $\underline{B}$, $\underline{A} \cdot \underline{B} = A_i B_i$

– entre deux tenseurs d'ordre 2 $\underset{\sim}{A}$ et $\underset{\sim}{B}$, $\underset{\sim}{A} \cdot \underset{\sim}{B} = A_{ij} B_{jl}$

– entre deux tenseurs d'ordre 4 $\underset{\approx}{A}$ et $\underset{\approx}{B}$, $\underset{\approx}{A} \cdot \underset{\approx}{B} = A_{ijkl} B_{lmnp}$

: représente le produit contracté entre deux espèces, on a alors :

– entre deux tenseur d'ordre 2 $\underset{\sim}{A}$ et $\underset{\sim}{B}$, $\underset{\sim}{A} : \underset{\sim}{B} = A_{ij} B_{ij}$

– entre deux tenseurs d'ordre 4 $\underset{\approx}{A}$ et $\underset{\approx}{B}$, $\underset{\approx}{A} : \underset{\approx}{B} = A_{ijkl} B_{klmn}$

$\otimes$ représente le produit dyadique entre deux espèces, on a alors :

– entre deux vecteurs $\underline{A}$ et $\underline{B}$, $\underline{A} \otimes \underline{B} = A_i B_j$

– entre deux tenseurs d'ordre 2 $\underset{\sim}{A}$ et $\underset{\sim}{B}$, $\underset{\sim}{A} \otimes \underset{\sim}{B} = A_{ij} B_{kl}$

– entre deux tenseurs d'ordre 4 $\underset{\approx}{A}$ et $\underset{\approx}{B}$, $\underset{\approx}{A} \otimes \underset{\approx}{B} = A_{ijkl} B_{mnpq}$

Résumé

L'amélioration des techniques de caractérisation (EBSD, MET, AFM) permet actuellement une meilleure compréhension des mécanismes plastiques intra-granulaires pour des poly-cristallin déformé. Les observations expérimentales montrent que les processus de plastification sont fortement hétérogènes et intermittent à l'intérieur des grains. Les modèles micromécaniques à champs moyens développés ces dernières décennies ne considèrent pas proprement les hétérogénéités intra-granulaires du glissement plastique. Or il est aujourd'hui démontré (simulations de Dynamique des Dislocations Discrètes par exemple) que la prise en compte de l'auto-organisation des dislocations à l'intérieur des grains est fondamentale pour mieux comprendre et expliquer les effets de taille de grains sur le comportement mécanique des polycristaux. Dans cette étude, deux approches complémentaires ont été développées : Une approche théorique qui consiste aux calculs des champs élastiques (contrainte interne et rotation de réseau) dus à une distribution discrète de boucles de dislocations contraintes par le joint de grains, et une approche expérimentale dont le but est de caractériser quantitativement les longueurs caractéristiques (espacements inter-bandes, et niveau de plasticification dans les bandes) pour des polycristaux à plusieurs tailles de grains se déformant plastiquement et de mesurer les rotations de réseau locales associées (mesure EBSD de désorientation de réseau cristallin) en vue de les comparer au champs de rotations élastiques calculés par le modèle. Le modèle a également été étendu pour permettre l'étude à des microstructures plus complexes, comme par exemple, les cellules de dislocations.

Abstract

The improvement of the materials characterization techniques in the last years has given access to new important information about the microstructure of polycrystalline metals. From experimental studies of deformed polycrystals, plastic strain within grains is known to be strongly heterogeneous and intermittent. As a consequence of the collective motion of dislocations, sample surfaces are indeed characterized by the presence of slip lines and slip bands (as slip traces). In the present study, a new micromechanical approach is developed to derive the mechanical fields (stresses, distortion, lattice curvature, elastic energy) arising from the presence of an inelastic strain field representing a typical internal "microstructure" as the one observed during the plastification of metallic polycrystals. This "microstructure" is due to the formation of discrete (spatial-temporal) intra-granular plastic slip heterogeneities which are modelled using discrete distributions of circular glide dislocation loops for a grain embedded in an infinite elastic matrix. Then, field equations have been solved using the method of Fourier Transforms. In contrast with the mean field approach based on the Eshelby formalism, it is then found that stress and lattice curvature fields are not more uniform inside the grain. A grain boundary layer actually appears where strong gradients occur and whose thickness depends on the introduced internal lengths. These results are compared with experimental measurements of local lattice rotation fields obtained by orientation imaging mapping (OIM). The model is able to capture different behaviours between near grain boundary regions and grain interior. The model was also develop to allow the study of more complex microstructures like the dislocation cells.

Kurze Zusammenfassung

In den letzten Jahren hat die Forschung in Kontinuumsmechanik die intensive Untersuchung des plastischen Verhaltens von Metallen (Polykristall) erlaubt. Die experimentellen Untersuchungen zeigen, dass die plastische Verformung innerhalb der Körner stark heterogen ist. Als Folge der kollektiven Versetzungsbewegungen erscheinen Gleitlinien und Gleitbänder als Gleitenspuren auf der Oberfläche der Probe. Diese Gleitlinien können durch Lichtmikroskopie beobachtet werden, z.B. mit einem Nomarski Kontrast oder im Rasterkraftmikroskop. Hier werden statische Konfigurationen der intrakristallinen Super-versetzungen, die von einer sphärischen Korngrenze eingeschränkt werden, untersucht. Wir haben den Fall eines sphärischen Einschlusses mit Defekt betrachtet. Dieser ist eingebettet in einer unendlichen elastischen Matrix. Feldgleichungen werden im Fourier-Raum gelöst. Im Gegensatz zu klassischen "Durchschnittsfeld"-ansätzen, Indem es die diskrete Art von Plastizität berücksichtigt, ist das Modell in der Lage, die Heterogenität der intra-kristallinen elastischen Felder vorauszusagen. Dieses Ergebnis wurde aus dem mikromechanischen Modell mit den experimentellen Daten, die durch EBSD gemessen wurden, verglichen. Eine starke Veränderung der Gitterorientierungen tritt zwischen Korngrenzen nahen Regionen und dem Kornzentrum auf. Die Flexibilität dieses Modells ermöglicht auch die Studie verschiedener .Versetzungskonfigurationen. Zum Beispiel kann die Heterogenitäten der elastischen Felder im Falle von Versetzungenszellstrukturen untersucht werden.

Zusammenfassung

Experimentelle Untersuchung und Modellierung der intra-kristallinen Verformung

"Das Gleiche lässt uns in Ruhe, aber der Widerspruch ist es, der uns produktiv macht. ", Johann Wolfgang von Goethe.

Einleitung

Motivation

In den letzten Jahren hat die Forschung in Kontinuumsmechanik die intensive Untersuchung des plastischen Verhaltens von Metallen (Polykristall) erlaubt. Polykristalline Materialien sind von Natur aus heterogen: Polykristalle setzen sich aus mehreren Körnern zusammen, deren Größe und kristallographische Orientierung variieren; intra-kristalline Defekte (Versetzungen, Ausscheidungen, Einschlüsse...). Wegen dieser physischen Heterogenitäten können viele grundlegende Probleme nicht mit Hilfe der gewöhnlichen Werkzeuge der "klassischen Mechanik"gelöst werden. Einige von diesen Problemen sind jedoch für Wissenschaft und Industrie große Herausforderungen, wie zum Beispiel:
- Rekristallisationsphänomene bei plastischer Verformung (Fertigungsprozesse);
- Der Einfluss der Ausscheidungen auf die Festigkeit von Legierungen, deren Modellierung mit Berücksichtigung der Wechselwirkungen Versetzungen/Ausscheidungen;
- Größeneffekte auf die mechanischen Eigenschaften ([Hen07, HV05]) (z.B. dünne Filme).
Die klassischen Plastizitätsmodelle, die die mechanischen Eigenschaften anhand von Verhaltensgesetzen der individuellen Körner bestimmen, können die intra-kritalline Heterogenität nicht beschreiben. Ein solches Model ist das selbstkonsistente Model [Krö61, Hil65, Hut76, BZ79], das nach Eshelby [Esh57] auf dem plastischen Einschluss beruht. Diese Modelle benutzen einen "DurchschnittsfeldAnsatz. Das bedeutet also, dass die plastische Verformung innerhalb der Körner homogen angenommen wird. Diese (Mikro) - Homogenisierung war bis jetzt ausreichend, um die inter-kristalline interne Spannung und die globalen mechanischen Eigenschaften zu beschreiben. Dennoch impliziert diese Theorie die Benutzung von phänomenologischen internen Variablen (wie zum Beispiel das plastische Durchschnittsgleiten). Dies bedingt eine Unfähigkeit der Modelle die Auswirkungen der internen

Längen der Mikrostruktur vorherzusagen, insbesondere den Effekt der Korngröße ([Yan06, YVH+08]) zu beschreiben.
Der Hauptmangel dieser Modelle ist, dass das diskrete plastische Gleiten wegen der Versetzungsverteilungen und der Wechselwirkung zwischen Gleitbändern und Korngrenze nicht betrachtet wird. Infolgedessen können lokale Inkompatibilitäten (und lokale Gitterorientierung) durch das diskrete plastische Gleiten gestört werden, wie von Nye [Nye53] und Kröner [Krö58] eingeführt.

Experimentelle Beobachtungen der verformten polykristallinen Proben zeigen, dass die Plastizität stark heterogen innerhalb der Körner wahrnehmbar ist. Das entspricht den diskreten Mechanismen, wie z.B. Frank-Read-Quelle und Versetzungsbewegungen: diese wurden auf Oberflächen (Gleitlinien) [Neu83, MS75, Zai06, FMCC06] und im Volumen durch TEM [BBH85]) beobachtet. In diesen Fällen führen diese Heterogenitäten zu eine Gitterfehlorientierung innerhalb der Körner, die von der Korngröße [SP08] abhängen kann.
Roy et al. [RPGK08] haben vor kurzem gezeigt, dass es wichtig ist die Natur der Plastizität diskret anzunehmen. Das gilt besonders im Hinblick auf Kurzstreckenwechselwirkungen, die das lokale Spanungsfeld nahe bei Versetzungs-pile-ups an der Korngrenze wesentlich verändern können.

Gliederung der Arbeit

In dieser Untersuchung wird intra-kristallines plastisches Gleiten in einem mikromechanischen Ansatz beschrieben, der diskrete plastische Phänomene berücksichtigt. Dazu werden experimentelle Beobachtungen der verformten Mikrostrukturen während makroskopischer Zugversuche verwendet. Dieser Ansatz ist ein wichtiger Fortschritt im Vergleich zu klassischer Kontinuumsmechanik, die auf durchschnittlich homogenem Gleiten auf den verschiedenen aktiven Gleitsystemen basiert. Hier

werden im Gegensatz zur Versetzungsdynamik (DDD), die sich auf die Entwicklung der Versetzungen konzentriert (unter Verwendung der Peach-Koehler Kraft zum Berechnen einzelner Verzetzungsgeschwindigkeiten [Kub92, Ver98]), statische Konfigurationen der intrakristallinen Super-Versetzungen, die von einer sphärischen Korngrenze eingeschränkt werden, untersucht.

In Kapitel 2 wird eine detaillierte Darstellung des Models gegeben. Die Hauptschritte, um die intra-kristallinen Felder (Verschiebung-, elastische Gitterdrehung- und Gitterfehlorientierungsfelder) aus der Versetzungsverteilung zu berechnen, werden detailliert aufgezeigt. Die experimentellen Methoden (Probenvorbereitung, AFM, EBSD) werden nachfolgend in Kapitel 3 eingeführt. Das mikromechanische Model wird auf solche Körner angewendet, für die ein einzelnes Gleitsystem aktiviert ist. Aus den AFM Messungen wird eine Gleitbänderverteilung eingeführt. Anschliessend wird das Ergebnis aus dem mikromechanischen Modell mit den experimentellen Daten, die durch EBSD gemessen wurden, verglichen. Schließlich wird das Modell weiterentwickelt, um andere komplexere Fälle (z.B. Versetzungszellstrukturen) zu untersuchen.

Intra-kristalline Plastizität: Theory

Kurze Darstellung des mikromechanischen Modells

Wir betrachten den Fall eines sphärischen Einschlusses I (mit einem Radius R) mit Defekt. Dieser ist eingebettet in einer unendlichen elastischen Matrix M. Feldgleichungen werden durch das Kräftegleichgewicht und die Kompatibilitätsbeziehung gegeben. Die totale Verzerrung β besteht aus der elastischen Verzerrung β^e und der plastischen Verzerrung β^p. Feldgleichungen führen zu den so genannten Navier

partiellen Differenzialgleichungen [BBR08] an jedem möglichem Positionsvektor x:

$$\begin{aligned} C_{ijkl}\mathbf{u}_{l,kj} - C_{ijkl}\beta^{p}_{kl,j} = 0 \\ \mathbf{u}^{\mathbf{d}}_{\mathbf{l}} = 0 \text{ auf } \partial V \end{aligned} \tag{1}$$

Hierbei ist u_l das Verschiebungfeld und C_{ijkl} das uniforme Elastizitätsmodul.
Nach Mura [Mur87] kann dieses Problem unter der Verwendung der Fourier Transformationsmethode gelöst werden. Das Verschiebungsfeld wird im Fourier-Raum gelöst und dann wird unter Verwendung der inversen Fourier-Transformation das Verschiebungsfeld in allen Punkten berechnet. Es sei $\underline{\xi}$ der Fourier-Vektor mit dem Betrag $\xi = \sqrt{\underline{\xi} \cdot \underline{\xi}}$ und den Komponenten ξ_i in kartesischen Koordinaten. Wir bezeichnen die imaginäre Einheit $i = \sqrt{-1}$ mit i. Es seien $\widetilde{u_k}\left(\underline{\xi}\right)$ und $\widetilde{\beta^{p}_{kl}}\left(\underline{\xi}\right)$ die Fourier-Transformierten der Verschiebungen und der plastischen Verzerrung wie folgt: $\widetilde{u_k}\left(\underline{\xi}\right) = \int\limits_V u_k\left(\underline{x}\right) e^{-i\underline{\xi}\cdot\underline{x}}$ und $\widetilde{\beta_k}\left(\underline{\xi}\right) = \int\limits_V \beta_k\left(\underline{x}\right) e^{-i\underline{\xi}\cdot\underline{x}}$.

Die vorliegende Untersuchung konzentriert sich auf eine diskrete Super-Versetzungsverteilung, die nicht notwendigerweise periodische verteilt ist und die von einer sphärisch Korngrenze eingeschränkt ist (Abb. 1).

In dieser Beschreibung kann jeder Super-Versetzungsloop durch seinen eigenen Burgersvektor mit einer Länge $B^{(n)} = k^{(n)}b$ charakterisieren werden. Hierbei ist b die Länge des Burgervektors für eine perfekt Versetzung.

Die experimentelle Beobachtung von verformtem polykristallinem Metall zeigt, dass die plastische Verformung in allen Körnern einsetzt. Um den Einfluss der diskreten intra-kristallinen Plastizität auf die elastischen Felder abzuschätzen, betrachten wir im folgenden Abschnitt Körner mit nur einem aktiven Gleitsystem. So kann die diskrete Versetzungsverteilung durch eine gegebene getrennte Verteilung für h^N abhängig von den räumlichen Positionen der Gleitbänder (N) innerhalb der Körner charakterisiert werden, die gemessen werden können. Das bedeutet, dass man nur zwei Parameter benötigt. In der Modellierung sollen diese besonderen Körner in einer unendlichen elastischen Matrix eingebettet werden, welche die umliegenden

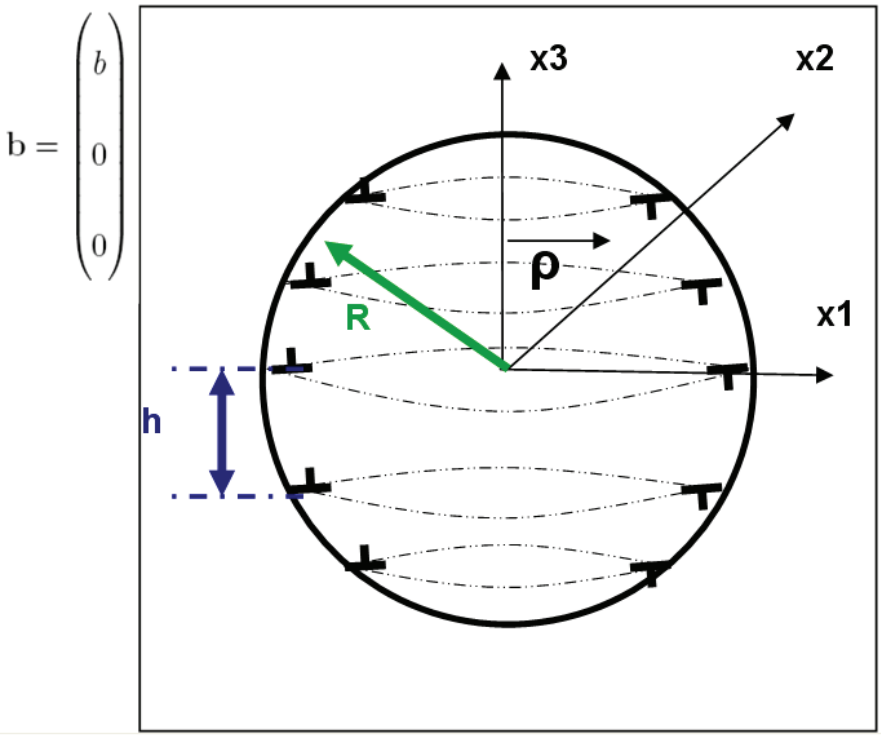

Abbildung 1: Sphärisches Korn (Radius R) mit einer diskreten Super-Versetzungsverteilung. Das Korn ist in einer unendlichen Matrix eingebettet [BBR08]

Körner darstellt. Die in der Realität existierende inter-kristalline Plastizität wird vernachlässigt, um sich nur auf den intra-kristallinen Beitrag zu konzentrieren.

Die Abstände innerhalb der diskreten Super-Versetzungsverteilung sollen ungleichmäßig gelassen werden. Die plastische Verzerrung $\underset{\sim}{\beta}^p(\underline{x})$ kann im lokalen Koordinatensystem (x_1, x_2, x_3) (Abb. 1) ausgedrückt werden. Es gibt nur ein aktives Gleitsystem. Die Normale der Gleitebene ($\underline{n} = (0, 0, 1)$) ist so, dass die einzige Komponente, die nicht null ist,

$$\beta_{31}^p = \sum_n B_1^{(n)} n_3 \delta(S^{(n)}) = \sum_n B^{(n)} H\left(1 - \frac{\rho}{a^{(n)}}\right) \delta\left(x_3\left(\left\{h^{(n)}\right\}\right)\right) \text{ ist.} \tag{2}$$

Hierbei sind $a^{(n)} = \left(R^2 - x_3\left(\left\{h^{(n)}\right\}\right)\right)^{0.5}$ der Loopradius und $x_3\left(\left\{h^{(n)}\right\}\right)$ die Höhe der Versetzungen, die für die diskrete Versetzungsverteilung $\left\{h^{(n)}\right\}$ bestimmt wurden.
ρ und x_3 sind die radiale Koordinate und die Höhe im Zylinderkoordinatensystem (ρ, θ, x_3) sodass $x_1 = \rho cos(\theta)$ und $x_2 = \rho sin(\theta)$ sind. $\delta\left(x_3\left(\left\{h^{(n)}\right\}\right)\right)$ ist die Delta-Funktion in Richtung (x_3) an $x_3\left(\left\{h^{(n)}\right\}\right)$. H ist die Heaviside Funktion, sodass

$$H\left(1 - \frac{\rho}{a^{(n)}}\right) = \begin{cases} 1 \; wenn \; \rho \leq a^{(n)} \\ 0 \; wenn \; \rho \leq a^{(n)} \end{cases} \quad \text{ist.} \tag{3}$$

Berechnung der intra-kristallinen Fehlorientierung

Um die experimentellen Messungen (Abb. 6) mit dem Modell zu vergleichen, wurde die Gitterdrehung, die durch die Versetzungen verursacht wurde, in jedem Punkt berechnet. Wir nehmen an, dass die Texturentwicklung nur mit der elastischen Rotation $\underset{\sim}{\omega}^e$ (anti-symmetrischer Teil der elastischen Verzerrung $\underset{\sim}{\beta}^e$) korreliert ist. Die Eulerwinkelentwicklung in allen Punkten des Kristalls wird berechnet, indem man

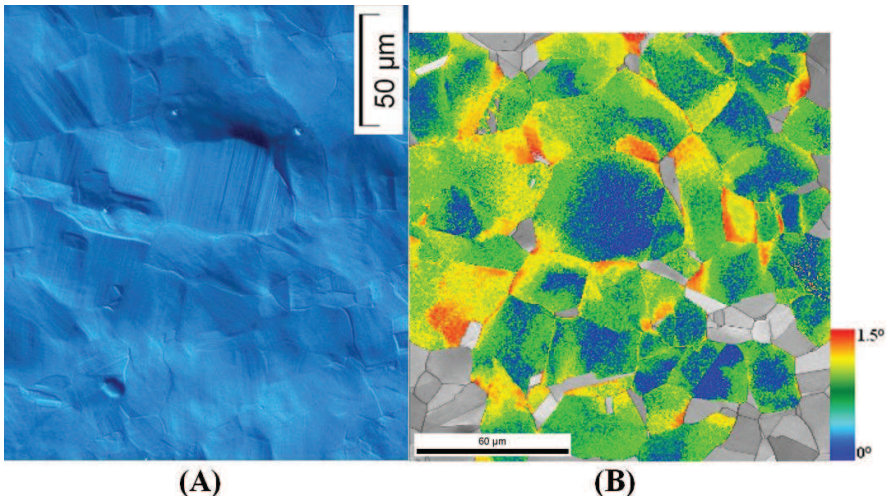

Abbildung 2: (a) Licht Mikrographie: Nickelvielkristalle nach einer plastischen Verformung von $1,5\%$ (b) EBSD Messung der intra-kristalline Fehlorientierungen im Vergleich zu einem Punkt in der Mitte nach einer plastischen Verformung von $1,5\%$

die folgende Formel benutzt:

$$\begin{cases} \Delta\varphi_1 = -\omega_{12}^e + \frac{cos(\Phi)}{sin(\Phi)}(\omega_{13}^e cos(\varphi_1) + \omega_{23}^e sin(\varphi_1)) \\ \Delta\Phi = -\omega_{23}^e cos(\varphi_1) + \omega_{13}^e sin(\varphi_1) \\ \Delta\varphi_2 = -\frac{cos(\varphi_1)}{sin(\Phi)}\omega_{13}^e - \frac{sin(\varphi_1)}{sin(\Phi)}\omega_{23}^e \end{cases} \tag{4}$$

Hierbei sind $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ die Eulerwinkel [Bun82]).

Experimenteller Aufbau

Materialauswahl und Probenpräparation

Die Wahl des Materials ist auf Nickel gefallen. Nickel ist ein kubisch-flächenzentriertes Metall, dessen plastisches Verhalten relativ gut bekannt ist (12 Gleitsysteme $\{111\}-\langle 110\rangle$). Das Material wurde durch Kaltwalzen um 75% verformt. Zugproben wurden

aus dem Ausgangsblech elektroerodiert. Die Geometrie der Zugproben ist in Abb. 3 dargestellt. Die Zugproben wurden anschließend an den Blechseitenflächen bis zu eine Körnung von 1000 geschliffen und bis $1\mu m$ poliert. Dann wurde die Probe zunächst eine Stunde bei $650°C$ unter Vakuum geglüht. Nach dem Glühen wurde eine Seite elektropoliert [BV08]:

- Lösung : 1-molare H_2SO_4 in Methanol
- Spannung : 30 V
- Dauer: 1 min

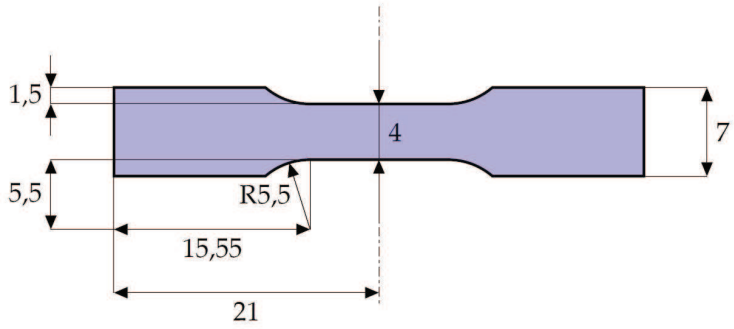

Abbildung 3: Geometrie der Zugproben (mm)

Die Zugversuche wurden in einer Zugmaschine von Instron, Modell 8513, mit 5kN-Kraftmessdose durchgeführt. Die Proben wurden um 1.5% plastisch verformt.

AFM-Messungen: Gleitbänderbeobachtung

Die experimentellen Untersuchungen zeigen, dass die plastische Verformung innerhalb der Körner stark heterogen ist [Zai06]. Als Folge der kollektiven Versetzungsbewegungen erscheinen Gleitlinien und Gleitbänder als Gleitspuren auf der Oberfläche der Probe [Neu83]. Diese Gleitlinien können durch Lichtmikroskopie beobach-

tet werden, z.B. mit einem Nomarski Kontrast [Neu83] oder im Rasterkraftmikroskop [FMCC06]. Gleitbänder treten wegen der Gleitung der Versetzungsloops an der Oberfläche aus. Alle Gleitbänder bestehen aus viele Gleitlinien, wie es von Neuhäuser beschrieben wurde [Neu83] (Abb. 4).
Gleitlinienbeobachtung ist ein wertvolles Werkzeug, um die plastische Heterogenität innerhalb der Körner zu untersuchen [Neu83]. Das Rasterkraftmikroskop (AFM) erlaubt die räumlichen Positionen und die Höhen von Gleitstufen auf der Probe zu bestimmen. Es wurde ein Veeco Dimension 3000 AFM benutzt. Die Messungen wurden bei Raumtemperatur unter Verwendung des Kontaktmodus durchgeführt.
In Abb. 4a wird die elektropolierte Oberfläche einer Nickelprobe nach einem Zugversuch dargestellt. Diese AFM-Abbildung zeigt die Oberflächenbeschaffenheit nach einer makroskopischen Vervormung von 1.5%. In Abb. 5 wird das Profil der Oberfläche dargestellt. Die Stufen, die mit dem AFM beobachtet werden, entsprechen den Gleitbändern, die durch das Modell modelliert werden sollen. Nur Stufen grösser als drei Nanometer wurden betrachtet, um die Abstandsverteilung der Gleitbänder zu definieren. Diese Verteilung kann direkt im Modell benutzt werden. Das aktivierte Gleitsystem kann identifiziert werden, indem man die EBSD- und AFM-Daten kombiniert. Für das Korn in Abb. 4 wurde ein durchschnittlicher Abstand von $2.16\mu m$ gemessen.

EBSD-Messungen

Für die Orientierungsmessungen wird das EBSD-System JEOL JSM-7000F REM mit TSL EBSD System verwendet. Hiermit wird die lokale Kristallorientierung mit Hilfe von Elektronenrückstreuung gemessen. Die Schrittweite der Messung war $0.5\mu m$. Die Winkelauflösung erreicht bis zu 2°, wenn die Fehlorientierungsauflösung kleiner als $0,5°$ ist. Um die intra-kristallinen Orientierungsfelder zu untersuchen, wurde die lokale Gitterorientierung gemessen (Abb. 6).

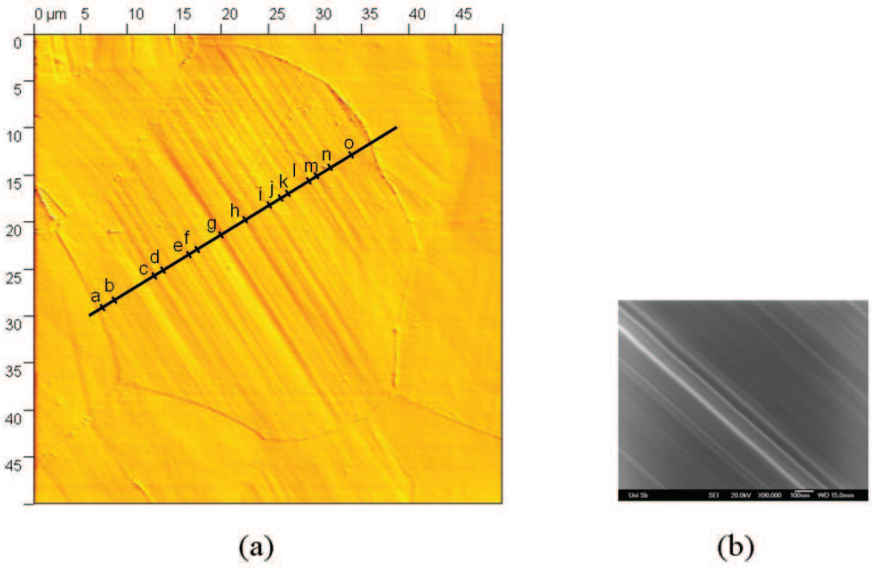

Abbildung 4: (a) AFM-Abbildung: Mikrostruktur nach einer makroskopischen Verformung von $1,5\%$ (b) REM-Abbildung des Gleitbandes "g"(Abb. 5) [PBVB10]

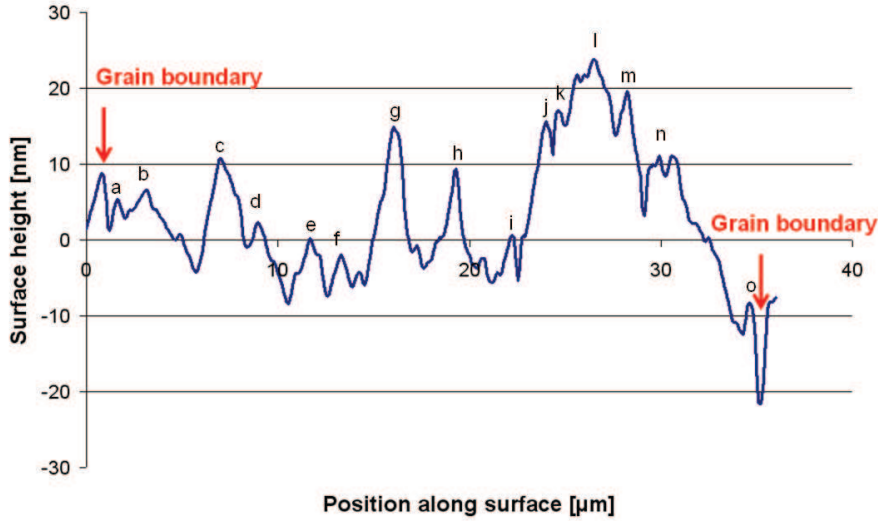

Abbildung 5: AFM-Profil der Gleitbänder

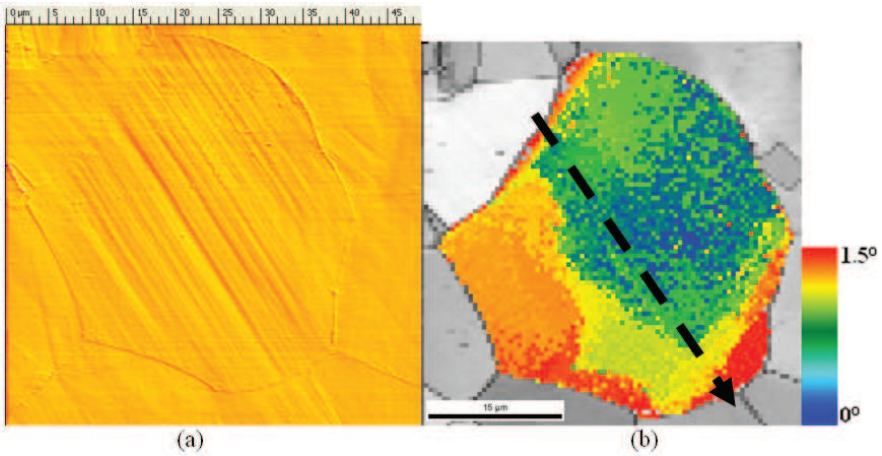

Abbildung 6: (a) AFM-Abbildung: Mikrostruktur nach einer makroskopischen Verformung von $1,5\%$; (b) OIM-Abbildung(Ïmage quality"Kontrast): Die Fehlorientierungen wurden im Vergleich zu einem Punkt in der Mitte berechnet. [PBVB10]

Diese Untersuchung zeigt deutlich, dass die Gitterrotation innerhalb der Körner stark heterogen ist. Ein Fehlorientierungsgradient an der Korngrenze kann beobachtet werden. Dieses Ergebnis ist ziemlich interessant, weil so direkte Vergleiche mit dem Modell möglich sind.

Ergebnisse und Diskussion

Unter Verwendung des im vorhergehenden Abschnitt (Abb. 1) beschriebenen Modells wurden die elastischen Felder berechnet, die mit der Deformationsmikrostruktur (Abb. 6) verbunden sind. Um diese Mikrostruktur zu beschreiben, wurden zwei mit dem AFM gemessene interne Länge verwendet: die Korngröße und die Gleitbänderabstandsverteilung extrahiert aus Abb. 4(a).
Die verschiedenen Annahmen des mikromechanischen Modells sind die folgenden: (i) Diskrete Plastizität in benachbarten Körnern wird nicht berücksichtigt. Die Matrix wird rein elastisch angenommen. Wir setzen den Akzent auf den Einfluss der

intra-kristallinen Mikrostruktur auf die lokalen Fehlorientierungen. Wie man auf der Abbildung beobachten kann, würde die zusätzliche Modellierung der Gleitbänderverteilung in den umgebenden Körnern viel komplizierter sein.
(ii) Die Gleitbänder, die mehrere Gleitlinien enthalten, werden durch einen von einer Korngrenze eingeschränkten SSuper-Versetzungs Loop modelliert. Das bedeutet, dass der Versetzungsaufstau nicht untersucht wird.
(iii) Jede Super-Versetzung hat die gleiche Burgersvektorgröße $B = nb$, wobei b die Größe des Burgervektors für eine perfekte Versetzung in Nickel ist und n die Anzahl der Versetzungen im Versetzungsaufstau.
(iv) B wird durch die Schätzung der durchschnittlichen plastischen Verformung an das studierte Korn angepasst:

$$\overline{\epsilon_{13}^{p}} = \frac{1}{2} B \sum_{n} \frac{S^{(n)}}{V}, \tag{5}$$

Hierbei ist $\overline{\epsilon_{13}^{p}}$ die durchnittliche plastische Verformung, $S^{(n)}$ ist die Oberfläche des Loops n, und V ist das Volumen des kugelförmigen Korns.
Dieses wird unter Verwendung eines relevanten selbstkonsistenten Modells (für elastisch-viskoplastische Metalle [BFLB04]) durchgeführt. Dieses Modell wird hier auf das unverformte polykristalline Nickel mit der gemessenen Gitterorientierungsverteilungsfunktion (gemessen mit EBSD) angewendet. So wird für eine makroskopische plastische Verformung von $1,5\%$ gefunden, dass die durchschnittliche plastische Verformung innerhalb dieses bestimmten Kornes mit den Eulerwinkeln $\varphi 1 = 97°$, $\phi = 51°$, $\varphi 2 = 35°$ ungefähr $1,3\%$ ist.

Um die lokalen intra-kristallinen Fehlorientierungen mit dem berechneten mikromechanischen Modell zu vergleichen, ist eine Linie, die zu den Gleitbändern in der Beobachtungsfläche parallel ist, ausgewählt worden (Abb. 6).

Die gemessenen Veränderungen dieser Fehlorientierung im Vergleich zu der Gitterorientierung des Zentrums des Kornes wird in Abb. 7 gezeigt.

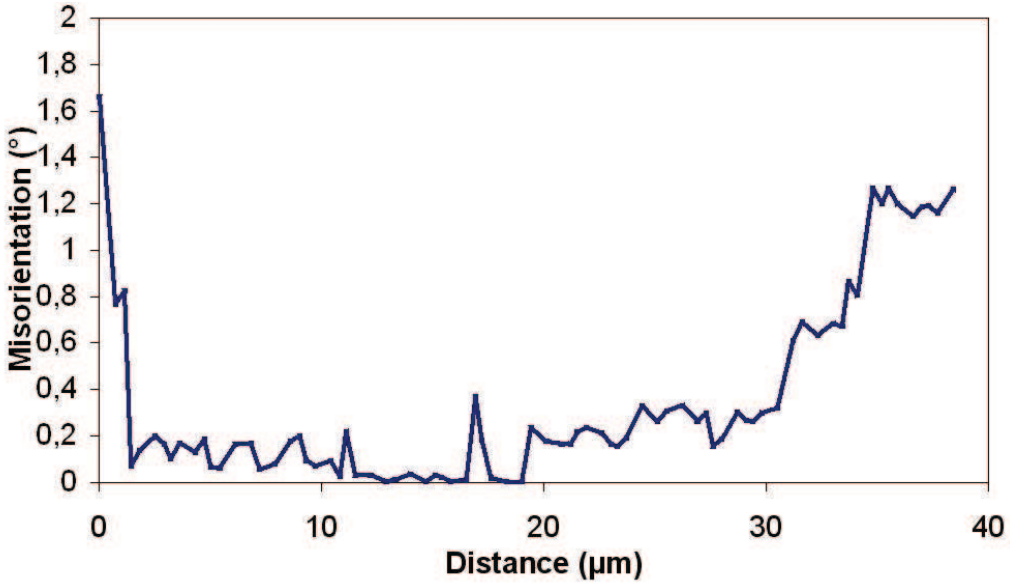

Abbildung 7: Die Veränderungen der Fehlorientierungen im Vergleich zu der Gitterorientierung des Zentrums des Kornes, gemessen an einer Linie parallel zu den Gleitlinien (Abb. 6(b)). [PBVB10]

Eine starke Veränderung tritt zwischen korngrenzennahen Regionen (mit einer maximalen Mißorientierung über $1,6°$) und dem Kornzentrum (keine Fehlorientierung) auf. In Abb. 8 werden die berechneten Mißorientierungen unter Verwendung der vorhergehenden Annahmen (i) bis (iv) für den Fall der durch AFM gemessenen Gleitbänderverteilung dargestellt. Es kann bewiesen werden, dass die modelierten Resultate ziemlich gut zu den experimentellen Resultaten passen, obwohl die obigen Annahmen verwendet wurden. Besonders an der Korngrenze (linke Seite in Abb. 7 im Abstand $0\mu m$), ist die Größe der durch Fehlorientierung gestörten Zonen und die Größenordnung der maximalen Fehlorientierung mit dem experimentellen Wert in Einklang. Indem es die diskrete Art von Plastizität berücksichtigt, ist das Modell in der Lage, die Heterogenität der intra-kristallinen elastischen Felder vorauszusagen. Diese Resultate zeigen einen Fortschritt im Vergleich zu klassischen "DurchschnittsfeldAnsätzen, die solche Phänomene nicht vorhersagen können. Im Falle der "DurchschnittsfeldAnsätze gibt es keine intra-kristalline Fehlorientierung,

weil die plastische Verformung innerhalb der Körner homogen ist. Die geringfügigen Diskrepanzen, die zwischen Abb. 7 und Abb. 8 beobachtet werden, haben sowohl theoretischen als auch experimentellen Ursprung.

Die beobachteten Unterschiede können durch die verschiedenen Näherungen erklärt werden, die im Modell vorhanden sind.

In der Nähe der Korngrenze, besonders im Bereich zwischen $20\mu m$ und $40\mu m$, ist der berechnete Fehlorientierungsgradient viel größer als im Experiment (Abb. 7).

Dieser Unterschied kann durch folgende Näherungen erklärt werden. Super-Versetzungen wurden anstelle eines diskreten Versetzungsaufstaus betrachtet. Quergleitphänomene und das diskrete plastische Verhalten der umgebenden Körner können auch einen Einfluss haben, besonders nahe an der Korngrenze.

Die experimentellen Bedingungen können die beobachteten Unterschiede ebenfalls erklären. Die Messungen sind an den Oberflächen der Proben durchgeführt worden, was einige Konsequenzen hat. Sie erlauben nur die Möglichkeit einer zweidimensionalen Ansicht, obgleich es ein dreidimensionales Problem ist. Die Form des Korns ist unbekannt. Sie ist wahrscheinlich nicht kugelförmig, wie im Modell idealisiert. In den studierten Körnern zeigt die Oberfläche fast nur ein aktiviertes Gleitsystem, aber unter der Oberfläche können mehrere Gleitsysteme aktiviert sein. Zuletzt hat der studierte Kristall wegen der freien Oberfläche einen zusätzlichen Freiheitsgrad verglichen mit dem Einschluss im Modell, wo das Korn vollständig in eine unendliche elastische Matrix eingebettet wird.

Das Modell ist auch geeignet, die internen Spannungen für die diskrete Konfiguration von Abb. 1 mit der theoretischen Rechnung, die durch die klassische Eshelby Lösung [Esh57] gegeben wird, zu vergleichen. Diese Berechnung betrachtet den Fall eines kugelförmigen plastischen Einschlusses mit der gleichen durchschnittlichen plastischen Verformung von $1,3\%$ innerhalb des Korns (Abb. 9).

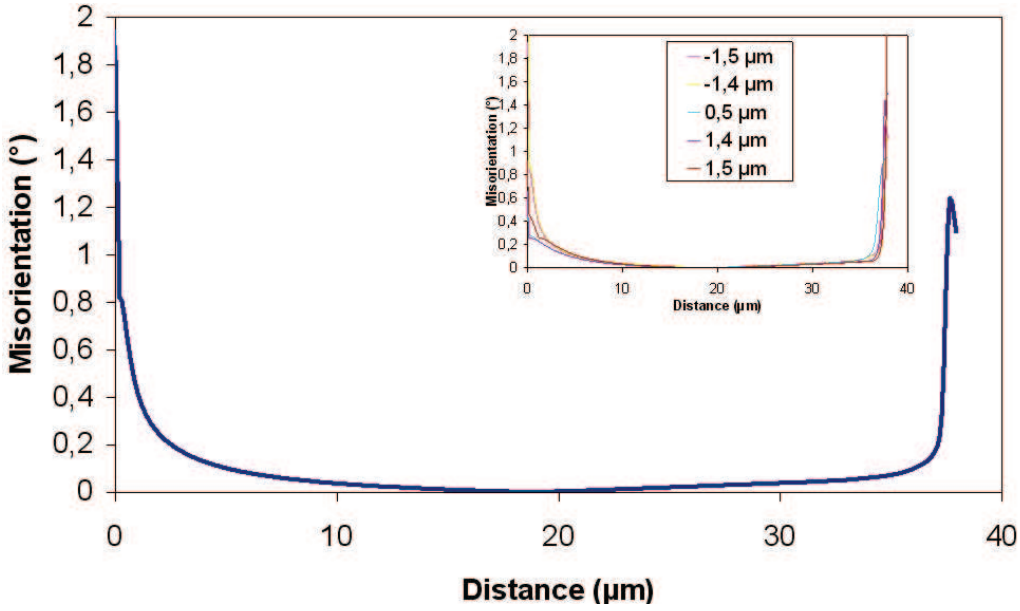

Abbildung 8: Für den Fall aus Abbildung 6 berechnte Veränderungen der Fehlorientierung im Vergleich zu der Gitterorientierung des Zentrums des Korns an einer Linie parallel zu den Gleitlinien (Abb. 6(b)) für eine durchschnittliche plastische Verformung im Korn von $1,3\%$ [PBVB10]

Die normalisierte Schubspannung (d.h. das Verhältnis zwischen den Komponenten σ_{13} und $\sigma_{13}^{Eshelby}$ in den lokalen Koordinaten (x_1, x_2, x_3)) ist berechnet worden (Abb. 9).

Wie Berbenni et al. in [BBR08] zeigen, wird die Eshelby-Lösung im Kornkern für eine genügende Anzahl von Loops wiedergefunden ([BBR08] wird die Versetzungsverteilung periodisch angenommen), aber nicht in der Nähe der Korngrenze, wo ein starker Gradient der internen Spannungen gefunden wird. Dieser Gradient kann nicht durch das Eshelby-Modell vorhergesagt werden. Aber gerade dieser Unterschied der internen Spanungen zwischen dem Eshelby-Modell und dem Ansatz aus dieser Arbeit kann, besonders nahe der Korngrenze, wichtig sein. Die Effekte der mit AFM gemessenen Gleitbänderverteilung auf die Veränderung des Verhältnisses $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}$ entlang der Linie, eingeführt in Abb. 6b (im globalen Koordinatensystem), wurde quantitativ bestimmt (Abb. 9).

Die Veränderung von $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}$ ist dem Resultat in der Kornkernregion ähnlich, aber diese Veränderung ist nicht konstant wie in der Eshelby-Lösung. Die gestörte Zone verbreitet sich auf 6-8 μm von den Kristallgrenzen mit einem Maximalwert von $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby} \approx 2$.

Verschiedene Anwendungen des Modelles

Dieser Arbeit konzentriert sich nur auf die Auswirkung der intra-kristallinen Heterogenitäten auf die elastischen Felder. Dafür wurden Vereinfachungen eingesetzt. So hat sich diese Studie auf Körner mit nur einem aktivierten Gleitsystem beschränkt. Die Anpassung der intra-kristallinen Verformung an den benachbarten Körner wird nur durch die Wechselwirkung mit einer unendlichen elastischen Matrix modelliert. Dennoch ermöglicht die Flexibilität dieses Modells die Studie verschiedener Versetzungskonfigurationen (Abb. 11). Die ersten Ergebnisse der Erweiterung des Mo-

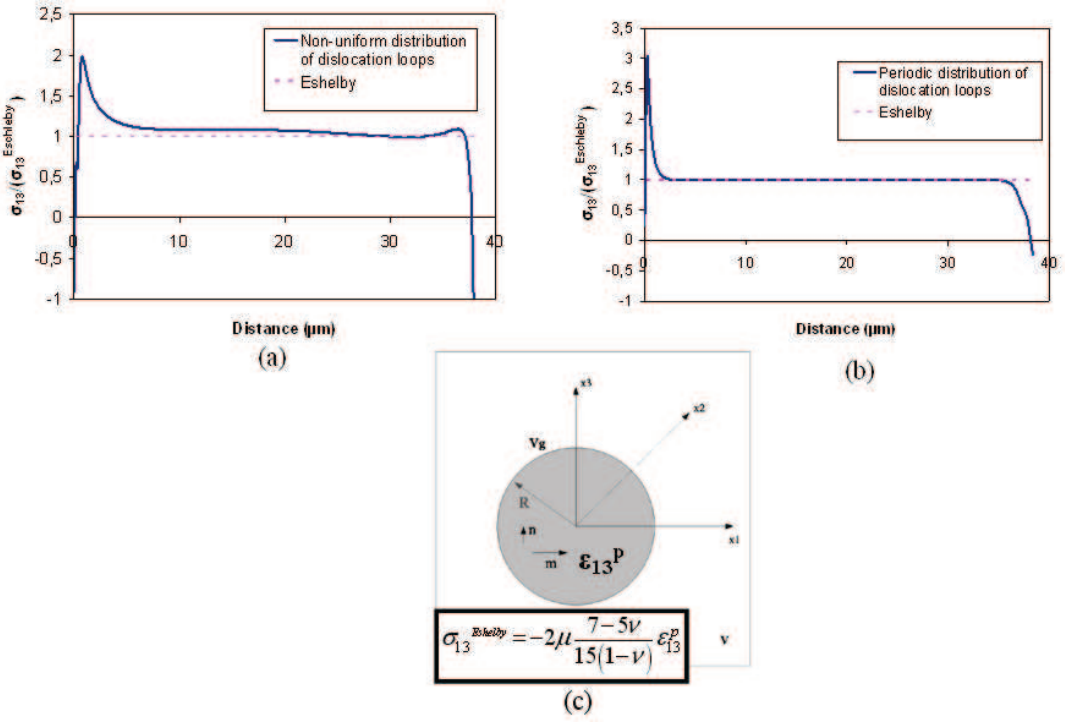

Abbildung 9: Veränderung von $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}$ in den lokalen Koordinaten (x_1, x_2, x_3)) an einer Linie parallel zu den Gleitlinien (Abb. 6(b)): (a) Diskreter Ansatz mit einem Vergleich mit der Eshelby-Lösung (gleiche Grösse der durchschnittlichen plastischen Verformung im Korn von $1,3\%$) (nicht-periodische Gleitbänderverteilungen) (b) Diskreter Ansatz mit einem Vergleich mit der Eshelby-Lösung (gleiche Grösse der durchschnittlichen plastischen Verformung im Korn von $1,3\%$) (periodische Gleitbänderverteilungen) (c) Eshelby-Lösung für ein sphärisches Korn. [PBVB10]

dells auf komplexere Fälle werden zusätzlich vorgestellt. Zunächst wird eine Studie vorgeschlagen, die die Notwendigkeit der Betrachtung und die Auswirkungen der inter-kristallinen Wechselwirkungen mit einem diskreten Konzept beweist.

Dieser Ansatz erlaubt die Untersuchung einphasiger oder mehrphasiger Metalle (Abb. 10. Der diskrete Ansatz zeigt den Vorteil gegenüber dem Ansatz durchschnittlicher Felder (Eshelby-Kröner-Modell [Krö61]), mehrere Versetzungsfamilien modellieren zu können. Zum Beispiel im Falle eines Duplex-Stahls (Abb. 10), liegen zwei Arten von Versetzungen (verschiedene Burgersvektoren) vor:

- im Austenit (kubisch-flächenzentriertes Kristallgitter)
- im Ferrit (kubisch-raumzentriertes Kristallgitter)

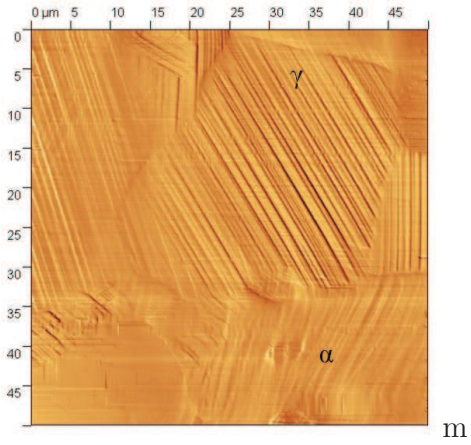

Abbildung 10: AFM-Abbildung: Mikrostruktur nach einer makroskopischen Verformung von $1,5\%$ (Duplex-Stahl: α : Ferrit, γ : Austenit)

Danach sollen die Heterogenitäten der elastischen Felder im Falle von Versetzungenszellstrukturen untersucht werden.

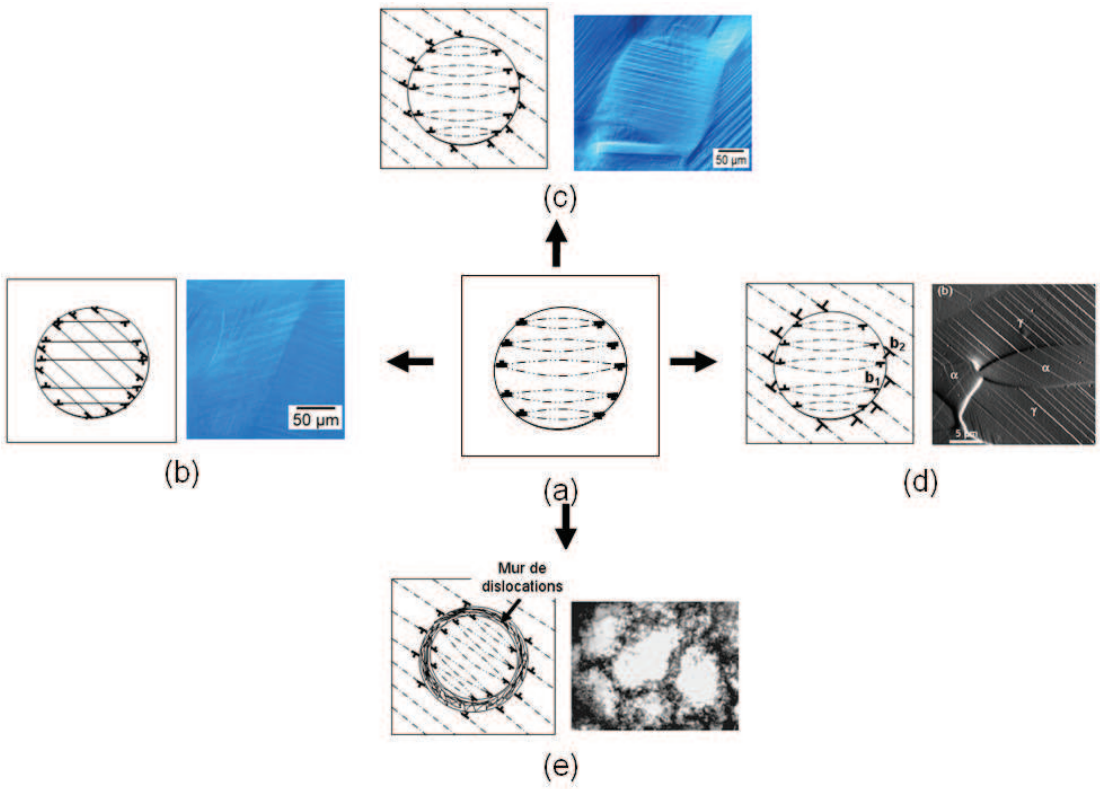

Abbildung 11: Verschiedene Anwendungen des Modelles: (a) vorher vorgestellter Fall (Abb. 1), (b) Vielfachgleiten, (c) sphärischer Bi-Kristall (Polykristallanwendung), (d) sphärischen Bi-Kristall (hier zum Beispiel ein Duplex-Stahl: Ferrit α, Austenit γ) [SSV08]) und (e) Versetzungenszellstrukturen [KSL+08] in einer Ni_3Al Legierung

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorgestellte Arbeit zeigt durch einen experimentellen und einen theoretischen Ansatz, wie wichtig die Berücksichtigung der lokalen Dehnungsinhomogenitäten in mikromechanischen Modellen ist. Eine bessere Kenntnis dieser Phänomene ist heute von fundamentaler Bedeutung und für die Modellierung der globalen mechanischen Eigenschaften der polykristallinen Werkstoffe unumgänglich.
Die diskrete Modellierung, welche in dieser Studie vorgestellt wurde, ist ein wichtiger Fortschritt im Vergleich zur klassischen Kontinuumsmechanik, die auf durchschnittlich homogenem Gleiten auf den verschiedenen aktiven Gleitsystemen basiert. Bisher berücksichtigte die klassische Beschreibung eine durchschnittliche Gleitung für alle Gleitsysteme innerhalb der Körner. Diese Arbeit schlägt vor, dem stark heterogenen Charakter der plastische Verformung größerere Bedeutung beizumessen. Dafür ist die Berücksichtigung der experimentell gemessenen mikrostrukturellen internen Längen wesentlich. Das Verständnis des polykristallinen Materialienverhaltens in Verbindung mit ihrer Mikrostruktur und den Verformungsmechanismen ist heute unentbehrlich, um neue Materialien zu optimieren und zu entwerfen.
Im ersten Kapitel wurde eine Literaturübersicht über die intra-kristalline Plastizität vorgestellt und insbesondere die Hauptergebnisse und Messmethoden zur Kristallplastizität. Die verschiedenen aktiven Mechanismen im Falle metallischer Polykristalle wurden dort aufgelistet (insbesondere für die kubisch-flächenzentrierten Metalle). Es scheint, dass die intra-kristalline Plastizität stark heterogen ist (kollektive Versetzungsbewegungen). Das plastische Gleiten konzentriert sich innerhalb der Gleitbänder. Zahlreiche Forschungsarbeiten haben gezeigt, dass diese plastischen Heterogenitäten, wichtige Auswirkungen auf die lokalen und globalen elastischen Felder haben. Allerdings sind diese Heterogenitäten die Quellen den Größeneffekte auf das globale mechanische Verhalten der Kristalle. Die Kenntnis dieser physikalischen Mechanismen der unelastischen Verformung sind also notwendig für die Modellentwicklung, die fähig sein soll, die internen Längenwirkungen vorherzusagen.

Das zweite Kapitel gibt eine Literaturübersicht über die mikromechanischen Methoden, welche die verschiedenen plastischen Heterogenitäten berücksichtigen. Ebenso werden die Erfolge und die Schwächen jedes Modells dargestellt. Dieses Kapitel zeigt auf, dass es notwendig ist, ein Zwischenkonzept zu entwickeln, das die diskrete Inkompatibilität der Kristalle (diskrete Versetzungsverteilungen) berücksichtigt, d.h. ein Modell, das die physikalische Natur der intra-kristallinen diskreten Ereignisse berücksichtigt.

In diesem Sinne wurde ein mikromechanisches Modell entwickelt (Kapitel 3), das die diskrete plastische Korn/Matrix-Inkompatibilität durch eine diskrete Versetzungsloop-Verteilung darstellt. Dieser diskrete Ansatz distanziert sich vom Eshelby-Modell, welches einen durchschnittlichen Ansatz beinhaltet. Mit Hilfe einer ziemlich einfachen Beschreibung der intra-granularen diskreten Phänomene (Gleitbänderverteilung) ist gezeigt worden, dass die elastischen Felder im Inneren der Körner stark heterogen sind, insbesondere in der Nähe von Korngrenzenflächen. Die Konsequenzen dieser intra-granularen diskreten Heterogenität sind zahlreich und bilden einen wichtigen Fortschritt im Vergleich zum klassischen Eshelby-Modell. Im Gegensatz zu dem durchschnittlichen Ansatz (Eshelby), erlaubt dieser diskrete Ansatz interne Längenwirkungen für das globale mechanische Verhalten vorherzusagen.

Um die plastische intra-granulare Heterogenität zu quantifizieren (Gleitbänderverteilung innerhalb Körner) waren experimentelle Untersuchungen notwendig. Diese Charakterisierungen ermöglichen eine bessere Beschreibung im Modell der plastischen Phänomene (z.B. nicht-periodische Gleitbänderverteilungen). Dies war Gegenstand von Kapitel 4, das sich auf die experimentelle Untersuchung der einfachen intra-granularen Konfiguration (durch nur ein Gleitsystem verformte Körner) beschränkt. Die mittels AFM gemessenen internen Längen (d.h. die Korngröße, sowie der Abstand zwischen den Gleitbändern), sind direkt im Modell benutzt worden, wie es in Kapitel 3 dargestellt wurde. Die elastischen Felder, die mit der unelastischen Verformungsmikrostruktur verbunden sind, sind auf diese Weise berechnet worden. Um die Tauglichkeit des Modells zu verifizieren wurden 2D-Kartographien der intra-granularen Fehlorientierungen mittels EBSD gemessen. Diese Messungen

sind mit theoretischen Berechnungen für nicht-periodische und periodische Gleitbänderverteilungen verglichen worden. Die theoretischen und experimentellen Ergebnisse zeigen starke Fehlorientierungsgradienten zwischen korngrenzennahen Regionen und dem Kornzentrum. Der Vergleich der experimentellen Ergebnisse liefert im Fall einer nicht-periodischen Gleitbänderverteilung bessere Ergebnisse als im Fall einer periodischen Verteilung.

Das in Kapitel 3 und 4 vorgestellte Modell konzentriert sich lediglich auf die Auswirkung der intra-granularen Heterogenitäten auf die elastischen Felder, jedoch ist es flexibel hinsichtlich der Wahl der Konfiguration der Loopversetzungen. In Kapitel 5 ist gezeigt worden, dass es möglich ist, komplexere plastische Heterogenitätsverhältnisse zu modellieren wie beispielsweise der Fall von intra- und inter-granularen Heterogenitäten beim plastischen Gleiten oder der Fall von Versetzungszellstrukturen. Erste Ergebnisse sind erzielt worden und zeigen, dass zusätzliche Wirkungen insbesondere hinsichtlich des Eshelby-Kröner-Modells beteiligt sind.

Um die besonderen Auswirkungen der mikrostrukturellen internen Längen zu bestimmen, und so die aktuellen Modelle zu verbessern, erweisen sich Technik wie EBSD als notwendig. Diese Charakterisierungen müssen so durchgeführt werden, wie in Kapitel 4 entwickelt, in den diskreten mikromechanischen Modellen benutzt werden.

Introduction générale

Contexte général

Cette thèse a la particularité d'être une thèse en cotutelle, c'est-à-dire qu'elle a été réalisée à la fois à l'université Paul-Verlaine de Metz en France et à l'université de la Sarre en Allemagne. Ceci m'a par conséquent permis de bénéficier d'un environnement biculturel. Dans cette étude, deux approches ont été développées :
- Une approche théorique, qui s'est déroulée au sein du Laboratoire de Physique et de Mécanique des Matériaux (Université Paul Verlaine de Metz, Arts et Métiers Paristech de Metz),
- Une approche expérimentale, qui s'est déroulée au sein du département sciences de matériaux et méthodes de caractérisation de l'Université de la Sarre (Allemagne).

Préambule

Les progrès et les innovations que l'on peut attendre dans le secteur de la mise en forme et la tenue en service de produit proviennent essentiellement des recherches portant sur les matériaux, c'est-à-dire leurs élaborations, leurs microstructures, mécanismes. L'objectif de ces développements est de créer, maîtriser et optimiser la

chaîne "procédé, microstructure et propriétés mécaniques" pour pouvoir ensuite par analyse inverse concevoir les microstructures et leurs voies d'élaboration afin de satisfaire un cahier des charges sur les fonctions mécaniques désirées. Les principales caractéristiques recherchées sont l'allégement des structures, l'augmentation de la résistance mécanique, l'augmentation de la ductilité. Ces caractéristiques étant souvent contradictoires, des compromis sont à trouver. Le développement des relations entres les microstructures et leurs comportements nécessitent donc des compétences multidisciplinaires [Bou05]. Ce travail s'intéresse aux relations entre la microstructure de matériaux poly-cristallin métalliques et leurs propriétés mécaniques.

L'amélioration d'un matériau, l'optimisation et la modélisation de son comportement passe par une maîtrise parfaite de sa microstructure. Il faut pouvoir identifier précisément les mécanismes responsables des propriétés mécaniques. Les recherches dans ce secteur s'appuient fortement sur des techniques expérimentales fines et avancées (caractérisations microstructurales par microscopie électronique, microscopie à champs proches, nano-indentation, etc). L'amélioration des techniques de caractérisation durant les dernières années a permis l'accès à de nouvelles données importantes sur les microstructures de poly-cristaux métalliques. L'observation expérimentale de la déformation plastique, par exemple, a connu ces dernières années des avancées majeures grâce à l'apparition des microscopes à champs proches comme le microscope à force atomique. Ces avancées conduisent actuellement à une vision renouvelée de la plasticité [Zai06]. Les développements de la technique EBSD ("Electron BackScatter Diffraction" dans les microscopes électroniques à balayage a également permis de réaliser des progrès considérables dans l'étude des microstructures et des leurs textures en comparaison avec les méthodes classiques de métallographie [Hum01] . Cette technique est capable de mesurer l'orientation locale du réseau cristallin et donc donne des informations sur les champs élastiques intra-granulaires alors que les techniques de diffractions des rayons X ne mesurent que les textures cristallographiques globales. De récentes observations montrent clairement que les champs de rotation de réseau intra-granulaires sont hétérogènes [RHJ96, KWT05a, Hum01, SP08]. Lors de la déformation plastique, il a été observé

de fortes désorientations de réseau impliquant de forte densité de dislocations en excès dans les zones proches des joints de grain.Par exemple, Kamaya et al [KWT05a] ont réalisé des mesures d'orientation cristallographique par EBSD sur des aciers inoxydables austénitiques polycristallins déformés en traction. Dans un grain orienté <111>, une désorientation de 4° a été decelée entre la région de la frontière du grain et le centre du grain pour une déformation plastique macroscopique de $14,4\%$.

Le Chapitre 1 constitue une étude bibliographique des différentes hétérogénéités plastiques ainsi que leurs conséquences sur les champs mécaniques.

Les modèles classiques de plasticité déterminant le comportement plastique global des polycristaux tel que le modèle de Bishop-Hill [Tay38, BH51] ou les modèles auto-cohérents au premier ordre [Krö61, Hil65, Hut76] (basé sur le problème de l'inclusion d'Eshelby [Esh57]) ne sont pas capables de prévoir les hétérogénéités intra granulaires qui ont été montrées par les mesures EBSD. Dans ces approches à champs moyens dont onrappellera les atouts et sutout les limites dans le Chapitre 2, la microstructure initiale est uniquement caractérisée par l'orientation globale de chaque grain à travers la fonction de distribution de l'orientation (ODF) ainsi qu'une description approximative de la forme des grains (ellipsoïdale dans le cas des schémas auto-cohérents [Krö61, Hil65, Hut76]). En utilisant les approches à champs moyens, il est cependant possible de décrire certains types d'hétérogénéité intra-granulaire en considérant différents domaines dans les grains avec différents systèmes de glissement activés. Pour des métaux cubiques, Berveiller et al. [BBFL88] tout comme Wert and Thorning [WT05] montrent que qu'après une déformation plastique, la rotation de réseau diffère significativement d'une zone à l'autre à l'intérieur d'un même grain. Les formules classiques de plasticité pour les poly cristaux ont également été utilisées dans le cadre de modèle de type éléments finis. Ces modèles sont capables de capter les hétérogénéités des champs à l'intérieur des grains mais la déformation plastique est seulement décrite par un glissement homogène en chaque point de l'intégration [SM03, ER04]. Le principal défaut de ces approches continues réside dans le fait que le caractère discret du glissement dû aux distributions de dislocation et aux interactions entre elles et les joints de grains n'est pas pris en

considération. Par conséquent, des incompatibilités locales, comme évoquées par Nye [Nye53] et Kröner [Krö81], peuvent être perturbées par la nature discrète du glissement plastique intra-granulaire. Les observations expérimentales effectuées sur des échantillons de polycristaux déformés montrent que la plasticité est très hétérogène à l'intérieur des grains. Cette hétérogénéité est le fait de mécanismes spatio-temporels discrets (création et mouvement des dislocations) observables en surface au travers des bandes ou lignes de glissement [Neu83, MS75, Zai06, FMCC06], ainsi que dans le volume par microscopie électronique à transmission [BBH85]. On observe physiquement que les dislocations viennent former des empilements de dislocations aux joints de grains. Les grains peuvent également être partagés en plusieurs sous-grains bordés par des réseaux de dislocation (cellules de dislocations, murs de dislocations [KW02]). Ces hétérogénéités entraînent la formation de désorientations de réseau à l'intérieur des grains. Ainsi, les rotations de réseau se déroulant pendant la déformation plastique apparaissent comme étant inhomogènes et pouvant aussi dépendre de la taille du grain [SP08]. Utilisant les observations expérimentales de microstructure de déformation durant le déformation macroscopique en traction, les hétérogénéités intra-granulaires du glissement plastique sont décrites au travers d'une approche micromécanique prenant en compte l'aspect discret de la plasticité. Ceci est l'objet du Chapitre 3, où des configurations statiques de boucles de super-dislocations contraintes par un joint de grain sphérique ont été étudiées. on donne dans ce chapitre une description de la théorie micromécanique mise en place, ainsi qu'une comparaison avec l'approche classique d'Eshelby. Les principales étapes pour obtenir des champs mécaniques intra-granulaires (déplacements, contraintes) et l'énergie élastique à partir de la connaissance de la distribution spatiale des bandes de glissement considérées comme des boucles de dislocations sont développées.

Dans le chapitre 4, le materiau étudié (nickel polycristallin) ainsi que les méthodes expérimentales sont introduites (préparation de l'échantillon, test mécanique, AFM, EBSD). Le modèle micromécanique développé dans le Chapitre 3 est appliqué à des grains particuliers pour lesquels le glissement simple est prédominant. A partir des mesures AFM, les distributions spatiales de bande de glissement sont obtenues et in-

troduites dans le modèle. Les champs de désorientation intra-granulaire ont ensuite été calculés et comparés à des mesures de désorientation effectuées par un MEB-EBSD. Ces résultats ont fait l'objet d'une publication récente dans Acta Materialia [PBVB10].

Le Chapitre 5 étend la modélisation à quelques cas plus complexes (plasticité discrète dans un grain et dans la matrice, cellules de dislocations).

Chapitre 1

Hétérogénéités des champs plastiques intra-granulaires

1.1 Description des hétérogénéités plastiques

1.1.1 Les défauts individuels dans les cristaux - Rappels de base

Le "cristal parfait" est un modèle utilisé pour représenter les structures périodiques de la matière cristalline. Ce modèle considère qu'un cristal parfait est un empilement 3D ordonné et infini d'atomes. Cette notion est trop idéale pour représenter un cristal réel. Il n'existe pas de milieux triplement périodiques et infinis. Tous les solides réels sont bornés par des surfaces, constituant un premier type de défaut [Jao65]. Les poly-cristaux réels ont des structures qui différent de cet arrangement périodique car ils sont le siège de défauts de différentes natures. Ces défauts peuvent être sans dimension (défauts "ponctuels"), à une dimension (dislocations),

à deux dimensions (joints de grains, macles) ou à trois dimensions (précipité).
De nombreux travaux théoriques et expérimentaux sur ces défauts de structure ont clairement montré que leurs comportements déterminaient les propriétés mécaniques des métaux.

1.1.1.1 Les défauts ponctuels

Ce sont des défauts sans dimension qui ont la taille de l'ordre de la distance interatomique. Il existe trois types de défaut ponctuel : les lacunes, les interstitiels et atomes en substitution, comme décrit sur la figure (cf. figure 1.1). Les lacunes

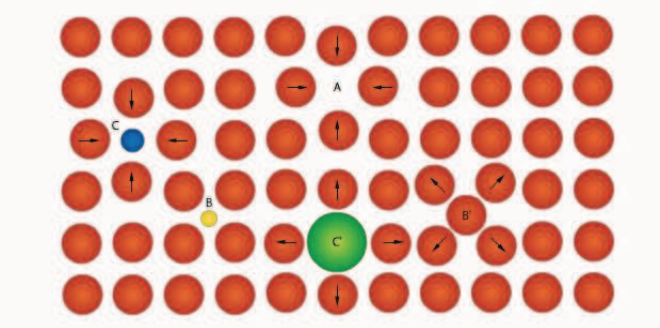

FIGURE 1.1 – Différents types de défaut ponctuel dans les cristaux : (a) lacune, (b) atome étranger interstitiel, (b') auto-interstitiel et (c) atome étranger en substitution.

correspondent à des sites atomiques inoccupés dans la structure. Un atome voisin d'une lacune peut sauter dans le site laissé libre. Celles-ci jouent un rôle fondamental dans la diffusion à l'état solide qui engendre des déplacements d'atomes sur des longues distances, et sont à la base des traitements thermiques.
Les interstitiels sont des atomes qui s'insèrent dans les espaces vides du réseau cristallin. Si l'atome en insertion est lui-même un atome du réseau cristallin, on parle d'auto-interstitiel. Les défauts interstitiels jouent un grand rôle dans la constitution des alliages.

Les atomes en substitution sont des atomes étrangers qui se placent à un noeud du réseau cristallin. Ce type de défaut a également un rôle important dans la constitution des alliages.

1.1.1.2 Les défauts linéaires

Le glissement plastique cristallographique correspond à une translation d'une partie du cristal par rapport à l'autre dans une direction appelée direction de glissement et selon un plan de séparation appelé plan de glissement. Ce sont le plus souvent les plans denses associés à la maille du cristal parfait. Lors du déplacement des dislocations, le cristal se déforme par glissement. La déformation élémentaire propagée lors du déplacement d'une dislocation peut être représentée par un vecteur $\underline{b}$ appelé vecteur de Burgers. Il existe sur ce plan une ligne frontière qui sépare la surface sur laquelle le glissement s'est déjà produit. Cette ligne frontière est appelée ligne de dislocation.
Cette translation ne s'effectue pas en bloc, elle débute en un ou plusieurs endroits d'un plan de glissement et se propage progressivement à la totalité du plan. Pour décrire le fait que le glissement s'effectue progressivement, on utilise souvent l'image du mouvement d'une vague ou d'un tapis de Mott (cf. figure 1.2). On dit que la dislocation est coin si le vecteur de Burgers est perpendiculaire à la ligne de dislocation (cf. figure 1.3), qu'elle est vis si il est parallèle à la ligne (cf. figure 1.4), et, qu'elle est mixte dans les autres cas (cf. figure 1.5). Le glissement sous l'effet d'une contrainte de cisaillement τ est schématisé pour le cas d'une dislocation coin sur la figure 1.6. La traversée du matériau par une dislocation induit donc une translation de $\underline{b}$, le vecteur de Burgers de cette dislocation (cf. figure 1.7). La densité de dislocations initiale présentes dans un cristal recuit ne peut pas produire une déformation plastique importante. Il doit donc y avoir une multiplication des dislocations au cours de la déformation plastique. Franck et Read [FR50], ont proposé un mécanisme de moulin (cf. figure 1.8) bien vérifié expérimentalement (cf. figure 1.9) [Das58]. Initialement, le

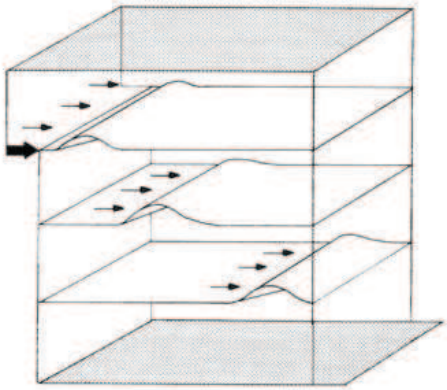

FIGURE 1.2 – Mouvement global d'un tapis par passage d'un pli : schématisation du passage d'une dislocation dans un volume monocristallin [Cha09]

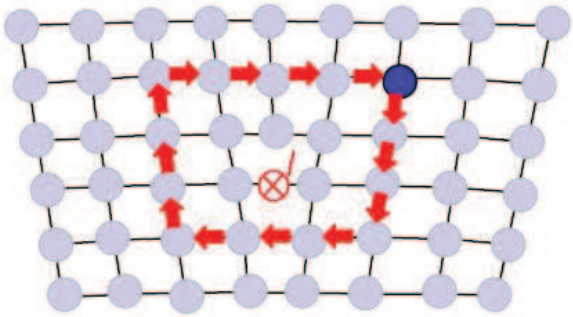

FIGURE 1.3 – Dislocation coin (circuit de Burgers)

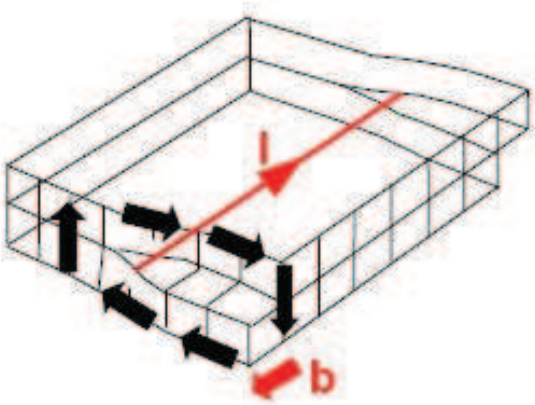

FIGURE 1.4 – Dislocation vis (circuit de Burgers)

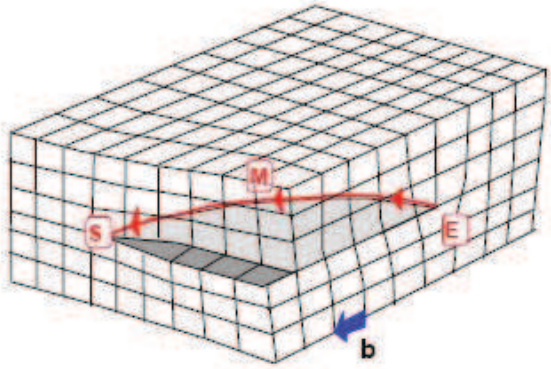

FIGURE 1.5 – Dislocation mixte

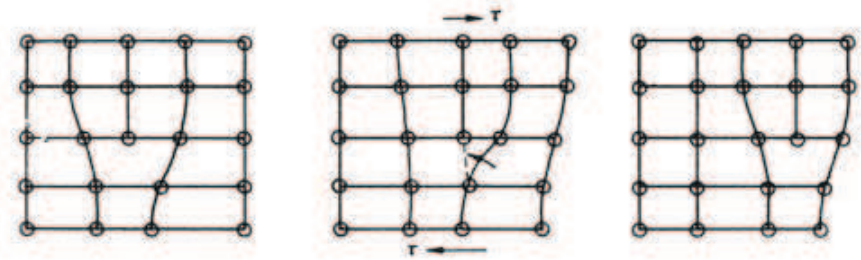

FIGURE 1.6 – Déplacement d'une dislocation coin dans un cristal

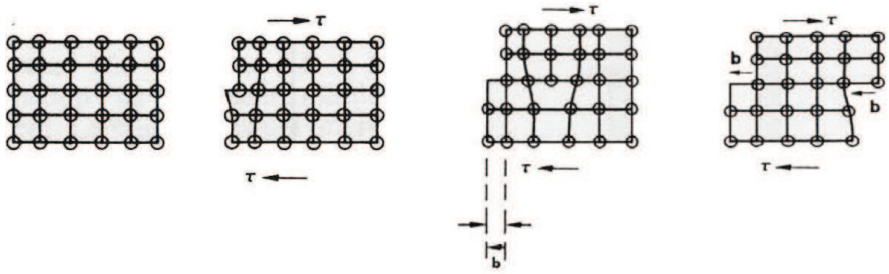

FIGURE 1.7 – Glissement d'une partie d'un cristal dû au passage d'une dislocation coin

segment de dislocation est ancré par ses deux extrémités dans le plan cristallin à des impuretés ou des défauts. Sous l'effet d'une contrainte locale, la ligne de dislocation devient instable et commence à se courber sous l'effet de sa tension de ligne. Elle finit par se courber sur elle-même. Lorsqu'ils arrivent en contact, les deux bras de la boucle de Franck et Read s'annihilent et l'on est en présence d'une boucle autonome de dislocation et d'un arc de dislocation avec lequel l'opération peut recommencer.

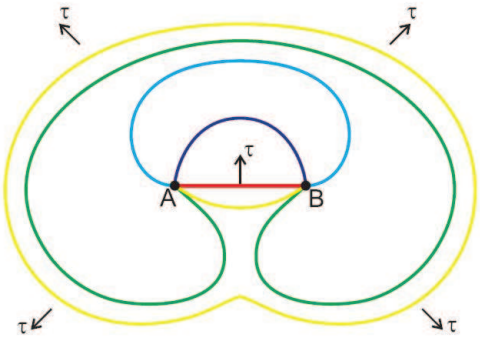

FIGURE 1.8 – Schéma d'une source de Franck-Read à deux points d'ancrage

Par nature, les dislocations sont des défauts discrets et elles dépendent de la structure cristallographique du cristal. De ce fait, l'écoulement plastique à l'échelle des dislocations individuelles est nécessairement inhomogène spatialement [Ric06], et le rôle collectif des dislocations sur la déformation plastique sera étudié en détail dans la suite de ce manuscrit.

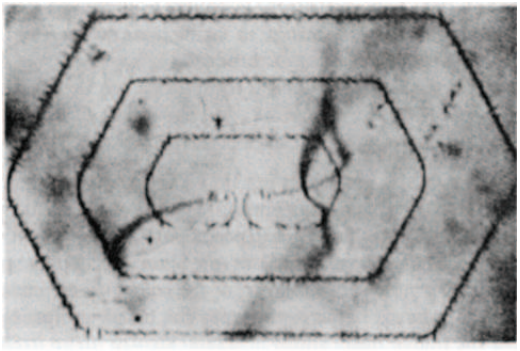

FIGURE 1.9 – Source de Franck-Read dans un échantillon de silicium [Das58]

1.1.1.3 Les défauts surfaciques ou inter-faciaux

Les joints de grains

Les matériaux cristallins couramment utilisés sont généralement poly-cristallins. Ils ne sont donc pas généralement formés d'un seul cristal (excepté les monocristaux) mais d'agrégats de cristaux (ou grains) de taille plus ou moins grande (selon le mode d'élaboration et les traitements thermomécaniques subis par les matériaux). L'interface des grains se fait à travers une couche d'environ 1 nm d'épaisseur appelé joint de grains [MK89]. Ils jouent un rôle important dans la déformation plastique puisqu'ils peuvent induire des sources de dislocations sous l'effet d'une contrainte et constituer des obstacles aux mouvements des dislocations (empilement de dislocations aux joints de grains). Du glissement aux joints de grains peut également être observé.

Les défauts d'empilement et les macles

Le cristal peut être considéré comme un empilement régulier de plans suivant un certain motif qui se répète indéfiniment. On peut caractériser cela par une séquence d'empilement. Par exemple, dans les structures cubiques à faces centrées, la

séquence d'empilement de plan {111} est de type ABCABC (cf. figure 1.10). On

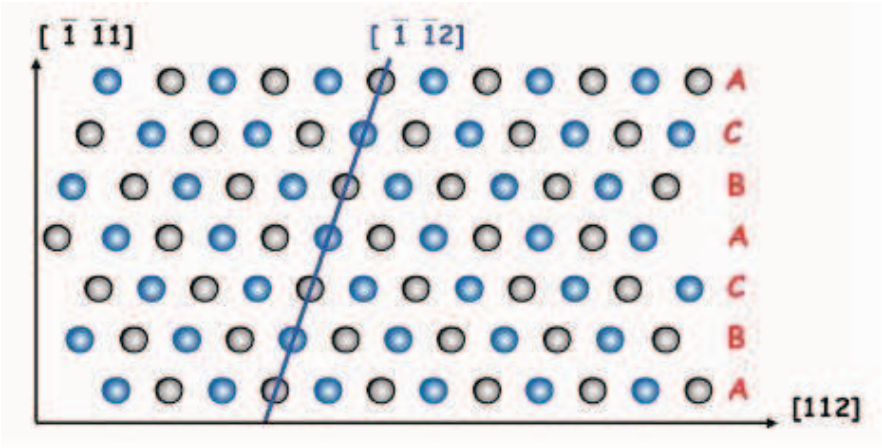

FIGURE 1.10 – Empilement de plan compact {111} dans la structure CFC [Lou05]

appelle défaut d'empilement une modification de la séquence d'empilement. Ces défauts peuvent être :

- Intrinsèques : ceci correspond au retrait partiel d'un plan et se traduit par une séquence d'empilement du type ABC ACA ABC. Les défauts intrinsèques peuvent également apparaître si l'on déplace la partie supérieure par rapport à la partie inférieure du cristal de $\frac{a}{6}$ [112] de manière à ramener le plan B en position C (cf. figure 1.11)

-Extrinsèques : ceci correspond à l'ajout d'un plan et se traduit par une séquence

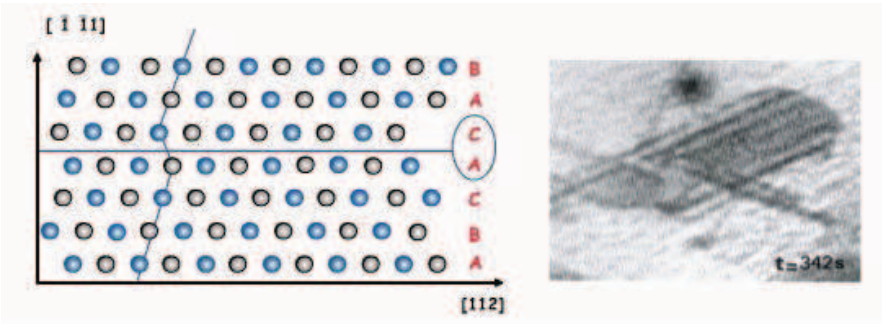

FIGURE 1.11 – Défaut d'empilement intrinsèque de la structure CFC : Schéma et micrographie électronique d'un défaut [Lou05]

d'empilement du type ABC ACB ABC. On peut obtenir cette séquence en déplaçant la partie inférieure du cristal de $\frac{a}{6}[112]$ de manière à amener le plan C en position A et la partie inférieure par rapport à la partie supérieur de $\frac{a}{6}[112]$ pour amener A en position C.
Si le défaut d'empilement ne traverse pas tout le cristal, il est alors borné par une dislocation dont le vecteur de Burgers n'est pas une translation du réseau mais de type $\frac{a}{6}[112]$ (dislocation partielle).
Il peut arriver également que la séquence ABC ABC ABC se transforme localement en une structure symétrique CBA CBA CBA au cours de la solidification ou de la recristallisation. La séquence résultante est ABC ABC ACA CBA CBA. Le défaut d'empilement occasionné par cette altération de la séquence est appelé macle.
Les macles peuvent également être induite par la déformation, notament dans les aciers TWIP par exemple [SFIC09].

1.1.1.4 Les défauts volumiques

Les inclusions et les précipités sont par exemple des défauts tridimensionnels. Ils remplacent une partie du cristal par un volume qui diffère par sa composition chimique et/ou sa cristallographie. Les précipités sont des particules de seconde phase qui sont formés par combinaison entre les atomes du métal et les atomes des éléments d'alliage. Les inclusions correspondent à des impuretés qui proviennent généralement de son élaboration depuis l'état liquide (par exemple les inclusions de type MnS dans les aciers bainitiques type 16MND5 [Llo94]). La taille et la distribution des précipités et des inclusions jouent un rôle dans les propriétés mécaniques des matériaux [NC96, DB98].

1.1.2 Lignes et bandes de glissement plastiques

L'analyse microscopique après la déformation plastique de la surface d'un échantillon, qu'il soit mono- ou poly-cristallin, permet de mettre en évidence l'hétérogénéité spatiale de la déformation plastique. Les premières expériences, qui ont permis d'observer des bandes de glissement, ont été réalisées sur des monocristaux d'aluminium polis puis déformés par Yamaguchi en 1928 [Yam28]. On peut alors observer que la déformation plastique dans les cristaux se produit par glissement, qui a lieu sur quelques plans de glissement cristallographique. Le glissement par plan actif peut être considérable [FHP52]. On se limitera cependant dans toute cette étude au cas des métaux poly-cristallins.

1.1.2.1 Définition

L'observation de la surface d'échantillon cristallin poli électrolytiquement et déformé [Jao65] montre l'apparition de marches. Ces marches correspondent à l'émergence de boucles de dislocation à la surface. Les lignes observées sont l'intersection entre la surface libre et les plans de glissement.
On définit une ligne de glissement comme l'émergence d'une ou plusieurs boucles de dislocation à la surface provenant d'un même plan cristallographique (cf. figure 1.12a) [Neu83]. Une structuration des lignes de glissement dans des bandes appelées bandes de glissement est souvent observée (cf. figure 1.12b). Ces bandes correspondent à un groupement de lignes de glissement dû à l'émergence de plusieurs dislocations sur quelques plans de glissement espacés de 10 à 100 Å[Neu83]. Ces marches mettent en évidence les mouvements collectifs de dislocations entraînant une forte localisation de la déformation plastique (on parle d'avalanches de dislocations). En effet, le glissement plastique dans les bandes (figure 1.12b) est important et localisé (fortes hétérogénéités). Une description qui prend en compte seulement le

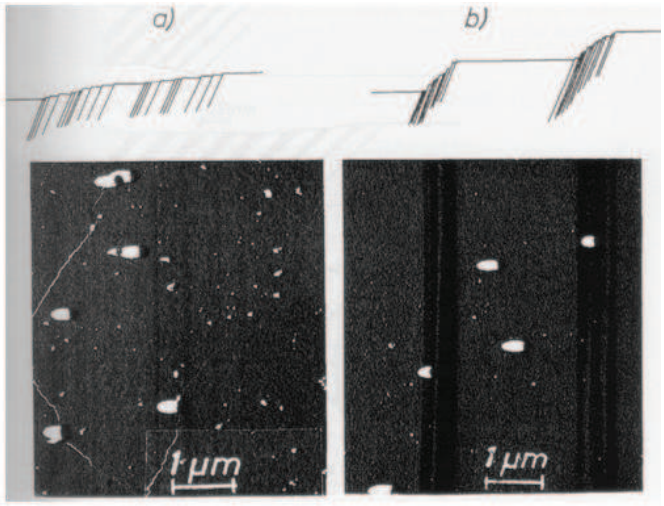

FIGURE 1.12 – Exemple de distributions de lignes de glissement à la surface d'un monocristal de cuivre (a : Distribution homogène de lignes de glissement, b : Distribution hétérogène de lignes de glissement : Bandes de glissement) [Neu83]

.

glissement plastique moyen est donc insuffisant pour décrire ce phénomène collectif. Ces bandes sont observables à l'aide d'un microscope optique (en contraste Nomarski) [Jao65, Neu83], par microscopie électronique [Mad57, Neu83] ou par microscopie à force atomique [FMCC06, SSV08].

1.1.2.2 Cas des métaux à structure cubique à faces centrées (cfc)

La plupart des études sur les lignes de glissement ont porté sur des poly-cristaux de cuivre, d'aluminium ou de nickel ainsi que leurs alliages [Jao65] qui sont des métaux de type cfc (cubique à faces centrées). Le glissement dans ces métaux est parfaitement identifié, il a lieu dans les plans et les directions les plus denses. C'est en effet dans ces directions et ces plans que l'énergie nécessaire pour propager un glissement est la plus faible. Ces systèmes actifs sont toujours du type $\{111\}-\langle 110\rangle$. Comme on peut l'observer en figure 1.13, les bandes de glissement à la surface des

métaux sont rectilignes et donc facilement observables. En moyenne, deux systèmes

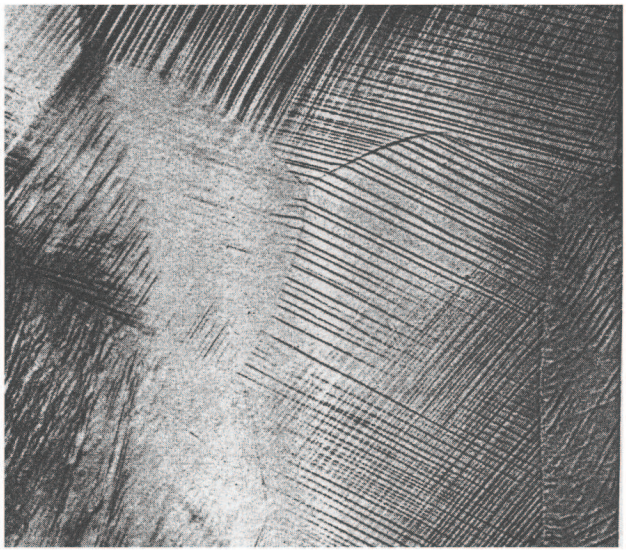

FIGURE 1.13 – Lignes de glissement dans un poly-cristal d'aluminium raffiné déformé de 10% avec un grossissement de 150 [Jao65]

.

de glissement couvrent l'ensemble des grains. Dans certaines régions apparaît un troisième système (figure 1.13).

Le développement des lignes de glissement est fortement dépendant de l'énergie de faute d'empilement. Dans le cas de métaux cfc à forte énergie de faute d'empilement (dislocations faiblement dissociées) tel que le cuivre, l'aluminium ou le nickel, les glissements apparaissent simultanément dès le début de la déformation plastique dans un grand nombre de grains avec une forte probabilité de glissements déviés. On observe une répartition homogène de lignes de glissement [Mad57, Neu83, Zan63, ERW68] (cf. figures 1.12a et 1.14). Cette simultanéité explique les faibles valeurs des limites élastiques du cuivre, aluminium et nickel [TBF73]. Lorsque les déformations sont plus importantes (déformations supérieures à 1%), une structuration des lignes de glissement apparaît pour former des bandes de glissement (cf. figure 1.12b). A partir d'une certaine déformation, qui varie avec la nature du métal, apparaissent

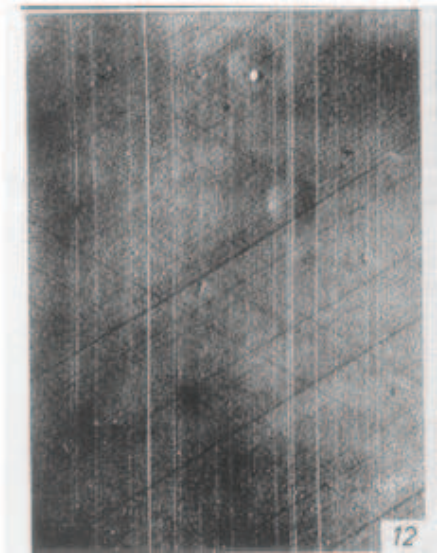

FIGURE 1.14 – Lignes de glissement dans un grain d'un poly-cristal de nickel déformé en traction pure (ϵ=0,3% ; grossissement : 5000) [Zan63]

des glissements déviés. C'est le cas par exemple à partir d'une déformation de 1.5% pour un aluminium pur à 99.99% [Jao65].

Le développement des lignes de glissement est différent pour les métaux cfc à faible énergie de faute d'empilement tels que les alliages Cu-Zn ou Cu-Al par exemple. Dans ces structures cfc, une dislocation peut être considérée comme un ruban de fautes d'empilement limité par deux dislocations partielles [Ebe06]. On observe dans ces alliages dès le début de la déformation plastique une forte localisation de la déformation. Les bandes de glissement apparaissent dès les premiers stades de la déformation [Neu83, Haa96] (cf. figure 1.15). Dans les métaux cfc à faible énergie de faute d'empilement tels que le laiton ou l'acier inoxydable austénitique, le glissement dévié des parties vis des dislocations est très difficile [Ebe06], celles-ci restent confinées dans leur plan de glissement. Cette absence de glissement dévié dans le laiton permet notamment d'expliquer la différence entre les textures de déformation observées pour le cuivre et le laiton [Jao65]. L'énergie de faute d'empilement a un effet sur l'écrouissage latent. De manière générale pour les métaux c.f.c. plus l'énergie de faute d'empilement est faible et plus le rapport d'écrouissage latent est fort

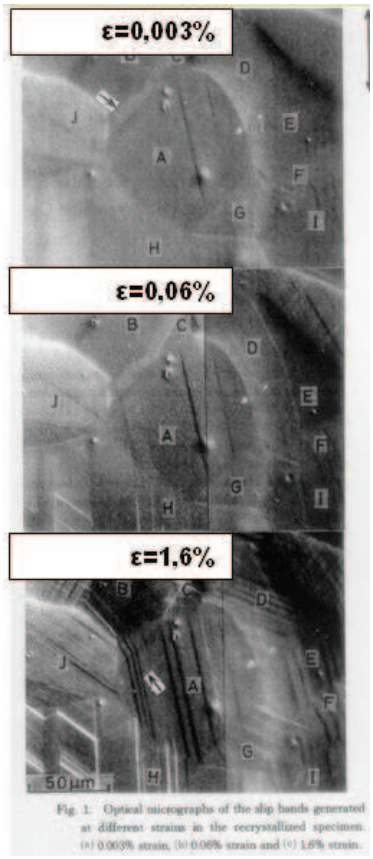

FIGURE 1.15 – Micrographies optiques de bandes de glissement sur un poly-cristal de laiton à différents taux de déformation [UMAT94]

.

[EC65, Fra85]. Par exemple, l'écrouissage latent est plus important dans le cuivre que dans l'aluminium.

1.1.2.3 Cas des métaux à structure cubique centrées (cc)

Dans le cas de métaux à structure cubique centrée tels que le fer-α par exemple, les mécanismes semblent plus complexes. Peu d'études de lignes de glissement ont été réalisées pour ces métaux [Jao65]. Les lignes de glissement sont mal définies et sinueuses [BN59, Jao65] (cf. figure 1.16). La direction de glissement est toujours celle

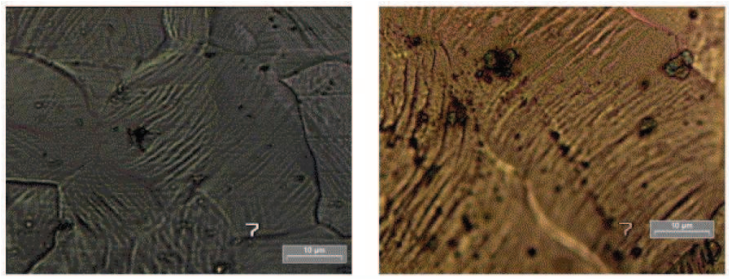

FIGURE 1.16 – Clichés sur acier DC04 réalisés au Microscope Electronique à Balayage d'éprouvettes de traction polies en surface et déformées (zones de déformation homogènes) : a. traction lente (vitesse de déformation de $0.008s^{-1}$), b. traction dynamique (vitesse de déformation de $105s^{-1}$) [Ber02]

qui correspond à la plus grande densité atomique. Par contre, les métaux cubiques centrés sont différents des autres par le fait que les glissements n'ont pas lieu sur des plans bien définis (on parle alors de "pencil glide"). La détermination des plans activés est beaucoup plus complexe que dans le cas des métaux cfc. De plus, on ne parle plus de plan de glissement mais plutôt de surface de glissement [Jao65].

1.1.2.4 Distributions spatiales des bandes de glissement

Il existe très peu de statistiques dans la littérature [Han85] sur les longueurs internes caractéristiques induites par la déformation plastique, comme l'espacement entre bandes de glissement par exemple. Margolin et Stanescu [MS75] ont mesuré l'évolution de la distance entre bandes de glissement dans le cas de poly-cristaux de Titane-β (Ti-9,8%Mg) sollicités en traction pure (structure cubique centrée) en fonction du taux de déformation plastique ainsi que de la taille de grain (cf. figure 1.17). Il est intéressant de noter que l'espacement entre bandes de glissement (3 types

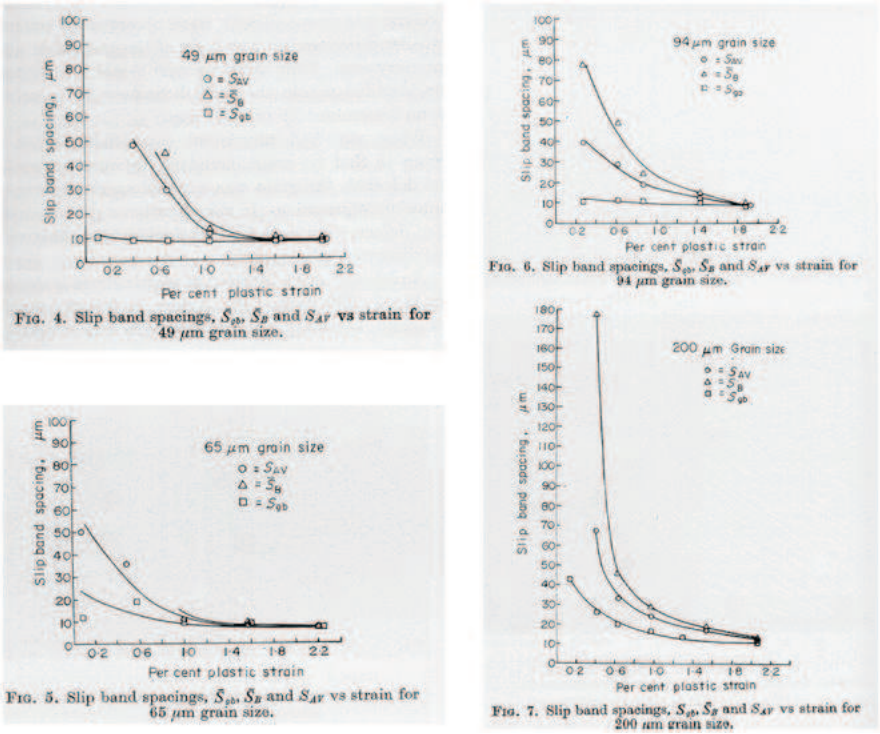

Fig. 4. Slip band spacings, S_{gb}, S_B and S_{AV} vs strain for 49 μm grain size.

Fig. 6. Slip band spacings, S_{gb}, S_B and S_{AV} vs strain for 94 μm grain size.

Fig. 5. Slip band spacings, S_{gb}, S_B and S_{AV} vs strain for 65 μm grain size.

Fig. 7. Slip band spacings, S_{gb}, S_B and S_{AV} vs strain for 200 μm grain size.

FIGURE 1.17 – Evolution de l'espacement entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de Titane-β) (S_{av}, S_B, et S_{gb} sont respectivement l'espacement moyen entre bandes de glissement sur tout le grain, l'espacement moyen au centre des grains, et l'espacement moyen dans la région proche des joints de grain) [MS75]

d'espacement mesurés : moyen sur tout le grain, moyen vers les joints de grains et

moyen au centre) converge vers des valeurs, qui sont légèrement plus élevées pour des gros grains que pour les grains plus fins.
La même tendance a été observée par Barlow et al. [BBH85] dans le cas de poly-cristaux d'aluminium pur (99.998%) laminé. Le tableau (1.1) montre que la distance entre bandes de glissement décroît fortement pour de faibles déformations (4%). Ceci n'est plus vrai pour de plus grandes déformations (15%).

Taille de grain (μm)	Déformation (%)	Espacement entre bandes (μm) Mean	Espacement entre bandes (μm) Minimum
50	4	2.0±0.2	1.4
50	15	2.13±0.12	1.6
300	4	4.0±0.4	2.7
300	15	2.5±0.3	1.4

TABLE 1.1 – Espacements entre bandes de glissement dans des poly-cristaux d'aluminium [BBH85]

Ces deux résultats montrent que la taille des grains a une influence sur la répartition spatiale des lignes de glissement à l'intérieur des grains surtout à faibles déformations plastiques mais les différences sont de moins en moins marquées à mesure que la déformation augmente.

L'espacement entre bandes de glissement dans un nickel pur poly-cristallin (taille de grain : 130 μm) a été mesuré dans le cadre d'une étude sur l'influence de l'hydrogène [MTB80]. Les expériences ont été réalisées avec et sans hydrogène. On s'intéresse uniquement au cas du nickel non chargé en hydrogène. Cette étude porte sur les lignes de glissement superficielles (cf. figure 1.18) et "intérieures" sur des répliques de carbone à partir d'échantillons de nickel déformés en compression à la température ambiante. Les lignes de glissement "intérieures" sont obtenues par une méthode de pré-déformation/polissage/re-déformation permettant de minimiser les

effets dus à une surface libre.

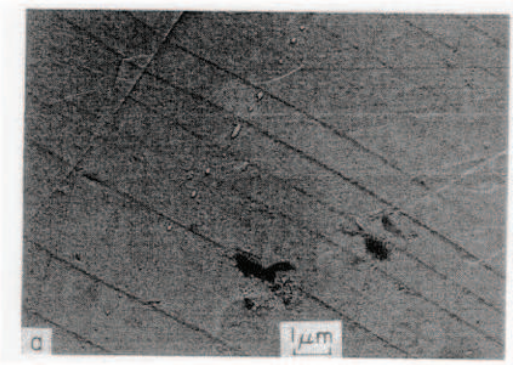

FIGURE 1.18 – Micrographie obtenue par MEB (Réplique C-Pt) : bandes de glissement à la surface d'un poly-cristal de nickel déformé à taux de 5% [MTB80]

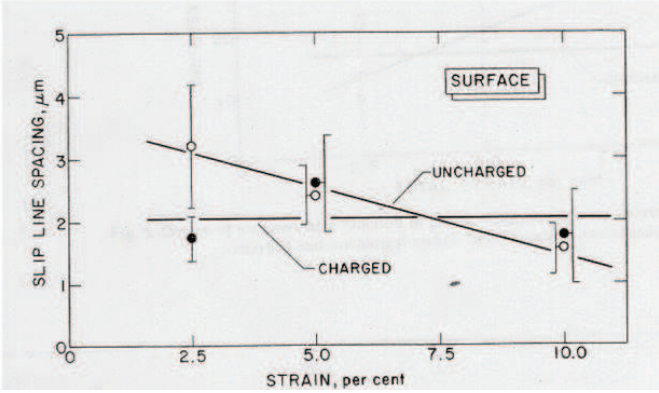

FIGURE 1.19 – Espacements entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de nickel pur chargé et non chargé en hydrogène [MTB80]

L'échantillon non chargé en hydrogène montre qu'une augmentation de la déformation provoque de nouvelles lignes de glissement, et, par conséquent une diminution de la distance entre bandes (cf. figure 1.19). L'espacement entre les lignes de glissement "intérieures" augmentent avec l'augmentation de la déformation. Ceci est expliqué par le fait que certaines bandes de glissement existantes s'élargissent (cf. figure 1.20). Lorsque le métal se déforme, les bandes de glissement se forment jusqu'à ce un état d'équilibre de l'espacement entre bandes. Lorsque la déformation continue, alors seule une fraction de bandes de glissement reste active.

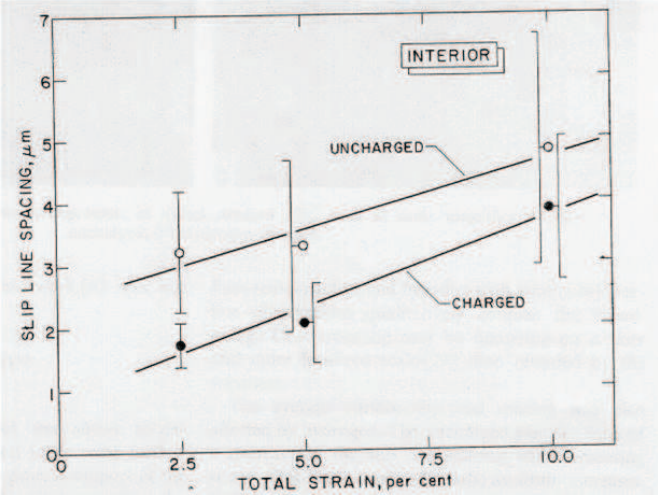

FIGURE 1.20 – Espacements "intérieurs" entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de nickel pur chargé et non chargé en hydrogène [MTB80]

Il a été montré que les joints de grains ont une influence sur la formation des bandes de glissement. L'espacement entre bandes de glissement a été mesuré dans la région des joints de grain et comparé à celui mesuré à l'intérieur des grains par l'équipe de Margolin [MS75, ML79]. Cette étude a été réalisée pour deux types de poly-cristaux : du Titane-β (Ti-9,8%Mg)(cubique) et du Titane-α (Ti-5Al) (hexagonal). Dans les deux cas (dans les premiers stades de la déformation un espacement entre bandes de glissement plus grand à l'intérieur des grains (S_i) que dans la région proche des joints de grain (S_{gb}). En comparant les courbes des tailles de grain de 49 μm et 200 μm (cf. figure 1.17), il est intéressant de noter que S_i et S_{gb}) convergent à partir d'une déformation plus élevée pour les gros grains.

1.1.2.5 Glissement multiple hétérogène

Ce phénomène correspond à une subdivision des grains en différentes zones de glissement multiple homogène [Rey88a]. On observe que certaines zones du grain voient des combinaisons de systèmes actifs différentes d'une zone à l'autre (cf. figures

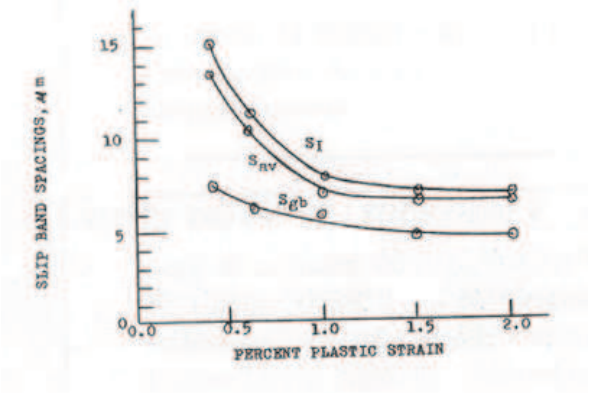

FIGURE 1.21 – Evolution de l'espacement entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de Titane-β (évolution de l'espacement entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de Titane-α (S_{av}, S_i et S_{gb} sont respectivement l'espacement moyen entre bandes de glissement : sur tout le grain, au centre des grains, et dans la région proche des joints de grain) [ML79]

1.22 et 1.13). On parle de glissement multiple hétérogène. L'origine de cette hétérogénéité est reliée d'une part à la nature discrète des interactions inter-granulaires et d'autre part aux joints triples.

G. Zankl dans sa thèse [Zan63] a étudié l'évolution des lignes de glissement dans les premiers stades de la déformation dans des poly-cristaux de nickel. Jusqu'a 1 % de déformation, la longueur des lignes de glissement est égale au diamètre respectif des grains. Plusieurs systèmes de glissement sont constamment activés de manière assez homogène dans les grains. A partir de 1 % de déformation, la longueur des lignes de glissement diminue. On observe un morcellement des grains en zones dans lesquelles un système dominant est activé. Les lignes de glissement sont concentrées dans des bandes de glissement.

Les mêmes observations ont été faites dans des poly-cristaux de cuivre pur [ERW68]. Pour des déformations supérieures à 1%, les grains se divisent en domaines où un mode de glissement simple domine. Des observations effectuées à l'aide d'un microscope électronique à transmission montrent que les dislocations s'accumulent dans

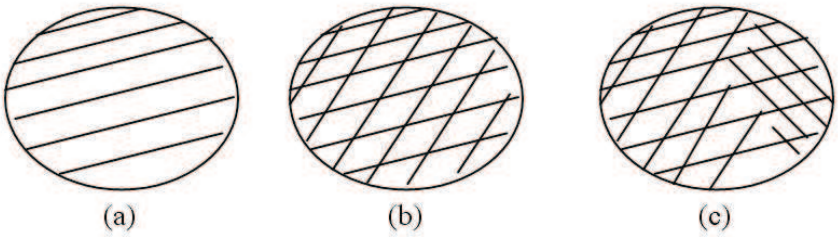

FIGURE 1.22 – Bandes de glissement après une déformation plastique : cas (a) glissement simple, cas (b) glissement multiple "homogène" et cas (c) glissement multiple "hétérogène"

la zone frontière entre les régions formées (encore appelée sous-joint de grains). Les mêmes observations expérimentales sont reportées par Berveiller et al. [BBFL88] et Wert et al. [WT05] dans le cas de poly-cristaux de cuivre.

1.1.3 Cellules de dislocation

Les cellules de dislocation constitue une autre manifestation du caractère discret de la déformation plastique. Que ce soit en chargement cyclique ou monotone, la déformation plastique intra-granulaire ou dans un monocristal n'est pas uniforme à l'échelle du μm.

A partir d'une température de déformation dite critique (typiquement entre $0.1T_F$ et $0.2T_F$ pour les métaux cubiques centrés ; T_F étant la température de fusion, on observe la formation d'une structure cellulaire de dislocations sous formes de cellules à faible densité de dislocations et des parois à forte densité de dislocations [Lem95, Lan00].

L'observation de la formation des cellules de dislocation dans des monocristaux de Fer [PPL75] révèle différents stades de déformation au niveau de la contrainte d'écoulement :

1. Stade 0 : un grand nombre de dislocations mobiles est créé par des sources de dislocation (moulin de Franck et Read [FR50]) sur le système de glissement principal.

2. Stade 1 : une partie des dislocations est bloquée par des défauts (défauts ponctuels, précipités non cisaillables, ou d'autres dislocations) et forment des amas de boucles de dislocations.

3. Stade 2 : on entre dans un domaine de glissement double ou multiple. Il y a une interaction des dislocations secondaires avec celles du système primaire.

4. Stade 3 : la structuration cellulaire des dislocations est installée. La forme et l'orientation des cellules sont liées au réseau cristallographique.

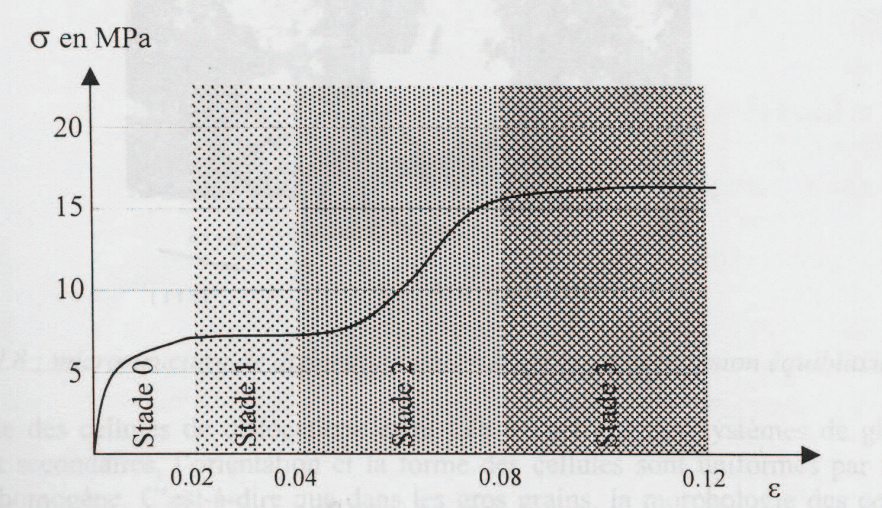

FIGURE 1.23 – Les différents stades de formation de la microstructure de dislocations visibles sur les courbes contrainte-déformation de monocristaux de fer [Lan00]

La topologie des cellules étant liée à l'activité des systèmes de glissement primaires et secondaires, l'orientation et la forme des cellules sont uniformes par zone de glissement homogène. Ainsi, dans les gros grains, la morphologie des cellules de dis-

locations peut être distincte d'un endroit à l'autre du grain en cas de glissements multiples hétérogènes [JH90]. Les zones de glissement homogène à l'intérieur des grains étant désorientées les unes part rapport aux autres, on observe une accumulation de dislocations aux frontières de ces sous-domaines. Ces dislocations forment des murs denses de dislocations qui contrairement aux joints de grains sont des frontières mobiles au cours de la déformation plastique même si cette dernière n'est pas très sévère [Lan00]. Dans les petits grains (typiquement de taille inférieure à 50 μm), les structures intra-granulaires restent uniformes (cf. figure 1.24).

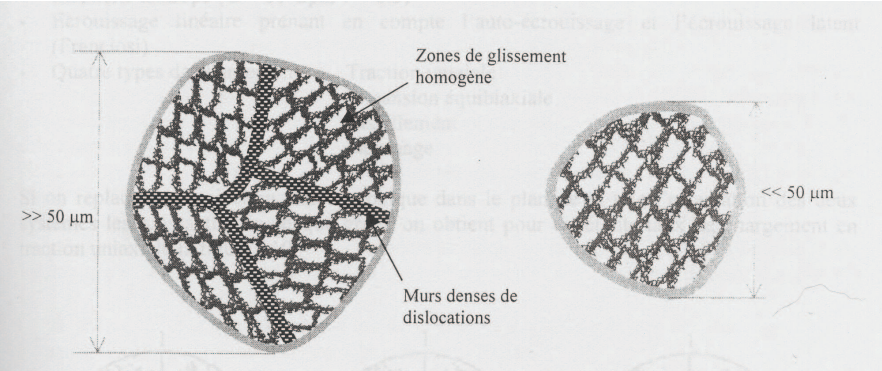

FIGURE 1.24 – Subdivision des gros grains en zones à morphologie de cellules de dislocations uniforme séparées par des murs denses de dislocations [Lan00]

1.2 Impact des hétérogénéités plastiques intra-granulaires sur les propriétés mécaniques locales et globales

1.2.1 Impact sur les champs élastiques locaux

Partant du constat que le glissement plastique est fortement hétérogène comme on a pu le voir dans la section précédente, des champs élastiques induits par ce glissement non compatible ne sont pas uniformes dans les grains. Les champs élastiques mesurés indirectement sont les rotations élastiques, assimilées aux rotations de réseau du cristal, au travers de mesures d'évolutions d'orientations cristallographiques locales.

Les désorientations relatives entre les différentes régions d'un même grain (dues à l'hétérogénéité des rotations élastique) peuvent être mises en évidence expérimentalement à l'aide de la technique de micro-diffraction de Kossel [Ber80]. Cette technique permet en effet des mesures fines locales (intra-granulaires). Dans un même grain d'un polycristal de cuivre (déformation plastique moyenne de 1.8%), trois clichés, correspondant à trois zones du même grain, ont été effectués. L'analyse micrographique avait montré qu'à chacune de ces zones correspond un mécanisme de glissement différent. Comme on peut le voir sur la figure de pole inverse (cf. figure 1.25), la rotation de réseau due à l'activité plastique dans le grain n'est pas homogène.

L'amélioration de la technique EBSD a permis une automatisation des mesures locales d'orientation de réseaux cristallins [Hum01]. Les observations de microstructures déformées par cette technique montrent clairement que les champs de rotation de réseau intra-granulaires sont hétérogènes [RHJ96, KWT05a, SP08, BFG+09, SR95]. Tous ces auteurs reportent de forts gradients de désorientation locale de réseau, spécialement dans les zones proches des joints de grains.

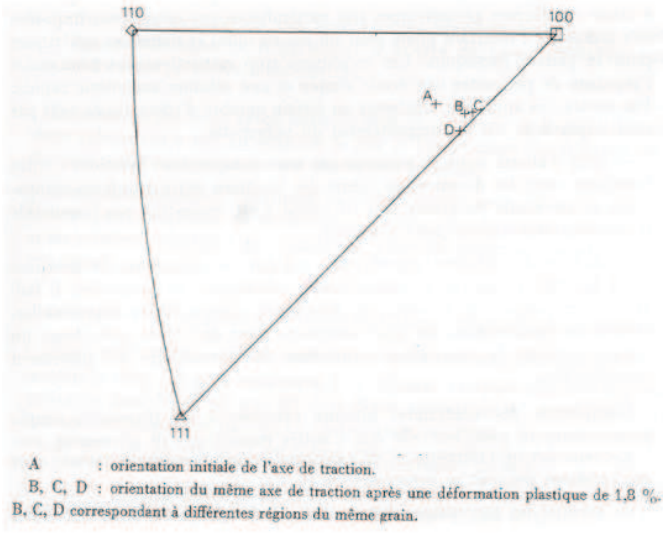

FIGURE 1.25 – Représentation stéréographique des changements d'orientation intervenus dans un même grain d'un poly-cristal de cuivre au cours d'un essai de traction simple [Ber80]

.

Randle et al. [RHJ96] ont réalisé des mesures EBSD pour caractériser les désorientations de réseau dans le cas d'aluminium déformé par laminage. Il a été montré que l'orientation du réseau cristallin est perturbée dans les zones proches des joints de grains et des joints triples. Par exemple, une désorientation de 6° est reportée entre la zone proche des joints de grains et l'orientation moyenne du grain étudié pour une réduction de 30% par laminage.

Kamaya et al. [KWT05a] ont également utilisé la technique EBSD pour quantifier les fluctuations de l'orientation cristallographique durant des essais de traction réalisés sur des poly-cristaux d'acier inoxydable austénitique. Dans un grain proche de l'orientation $\langle 111 \rangle$, une désorientation de l'ordre de 4° a été trouvée dans la région proche des joints de grains par rapport au centre du grain pour une déformation plastique moyenne de 14,4% (cf. figure 1.26). Les mêmes phénomènes ont été observés dans les cas de différents métaux purs tels que le nickel, le cuivre et le fer [SP08]. Cette étude porte sur des plages de tailles de grain de $300nm$ à $100\mu m$. Il a été montré que la désorientation moyenne dans les grains après un essai de traction uni-axiale dépend de la taille de grain. La désorientation moyenne décroit quand la taille de grain moyenne augmente.

Skjervold et al. [SR95] ont observé l'apparition de désorientations locales lors de la déformation d'un alliage d'aluminium Al-1.2% Si en compression, et spécialement dans les zones proches de joints triples, de joints de grain, ou, de particules de seconde phase. L'amplitude de ces désorientations reste constante lorsque la déformation augmente de 20% à 40%). L'amplitude des désorientations est en général comprise entre 5 et 10 °, avec cependant un maximum atteignant 17°. Bien que l'amplitude des désorientations reste constante, les gradients de désorientation augmentent avec la déformation plastique.

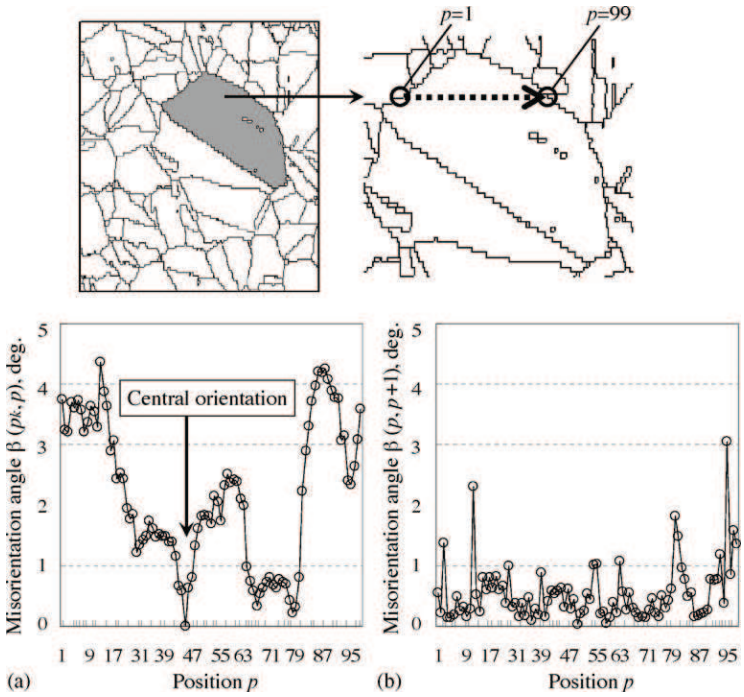

FIGURE 1.26 – Représentation de la désorientation intra-granulaire le long d'une ligne tracée en pointillés, dans la direction transverse, sur un grain pour une déformation de l'éprouvette de 14,4%. (a) Désorientation par rapport à l'orientation cristallographique du centre du grain, (b) Gradient de désorientation [KWT05a]

.

1.2.2 Effet de taille de grain et/ou de cellule de dislocations sur le comportement mécanique macroscopique de métaux poly-cristallins

A partir des année 1950, il a été montré expérimentalement que la limite d'élasticité de nombreux matériaux suit la relation de Hall-Petch [Hal51, Pet53]. Cette relation traduit une dépendance inversement proportionnelle à la racine carrée de la taille moyenne des grains constituant le poly-cristal. A l'origine, cette relation a été attribuée au développement d'empilement de dislocations intra-granulaires au joint de grain [EFN51]. La longueur des ces empilements serait proportionnelle à la taille des grains. Cependant, ces calculs ont été effectués dans le cas d'empilement de dislocations sur un joint de grain supposé plan, ce qui ne permet pas de définir un grain. Plus tard, Li et Liu (cf [LL67]) ont amélioré la description des défauts avec empilements de dislocations circulaires.
Les propriétés mécaniques sont le plus souvent mesurées par des tests en traction ou compression à vitesse de déformation imposée sur des échantillons avec des tailles de grain moyennes différentes. Dans ces conditions, il a été observé que la limite d'élasticité σ_e dépend de la taille de grain moyenne D :

$$\sigma_e = \sigma_0 + kD^{-n} \tag{1.1}$$

où σ_0 est la limite d'élasticité du monocristal liée à la friction des dislocations avec le réseau, k est une constante dépendant du matériau et n est un exposant généralement compris entre 0 et 1.
D'après cette relation, la limite d'élasticité augmente quand la taille des grains diminue. Ceci est expliqué par le fait que les empilements de dislocations dans les matériaux à grains fins contiennent peu de dislocations, la contrainte à la pointe des empilements de dislocations diminue et donc une contrainte plus importante est nécessaire pour générer des dislocations dans les grains adjacents [CF07].

Il a été montré que le même type de relation s'applique pour la contrainte d'écoulement (cf. figure 1.27) ou encore à la contrainte à rupture pour de nombreux métaux et alliages [ACDP62].

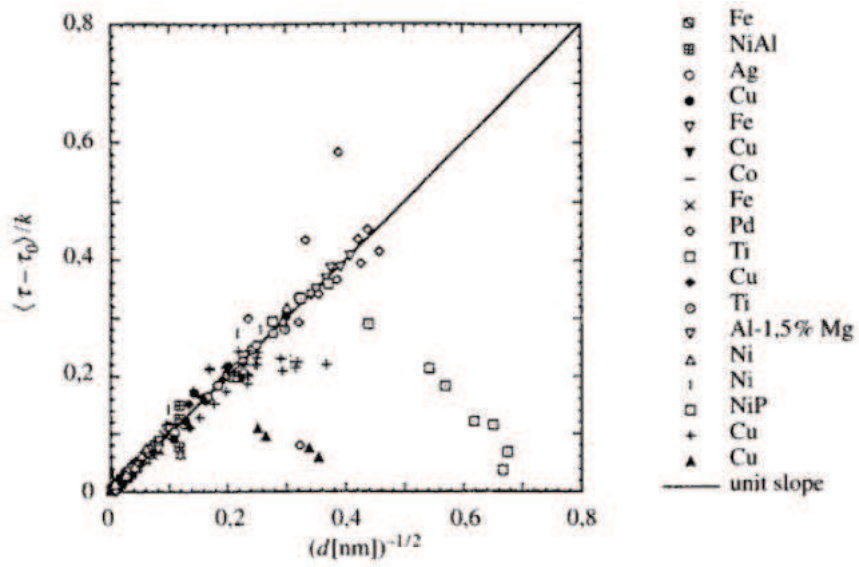

FIGURE 1.27 – Compilation de mesures de contraintes d'écoulement en fonction de la taille des grains pour divers systèmes métalliques [JI01]

.

L'effet Hall-Petch n'est cependant pas vérifié pour toutes les tailles de grain, notamment dans le cas des poly-cristaux nanocristallins, où la taille des grains rend impossible les mécanismes classiques de plasticité dus au mouvement collectifs de dislocations dont les sources sont à l'intérieur des grains (sources de Franck-Read, empilement de dislocations aux joints de grains, multiplication de dislocations due à la forêt de dislocations présentes) [Han04]. En effet, pour des tailles de grains inférieures à 10 nm [NW91, Han04], une inversion de la loi de Hall-Petch, appelée effet Hall-Petch inverse, est observée (figure 1.28).

Des données expérimentales [SH72] ainsi que des simulations numériques [OO07] basées sur l'énergie libre des dislocations géométriquement nécessaire montrent que la taille des cellules de dislocation a un effet sur la limite d'élasticité des métaux (cf.

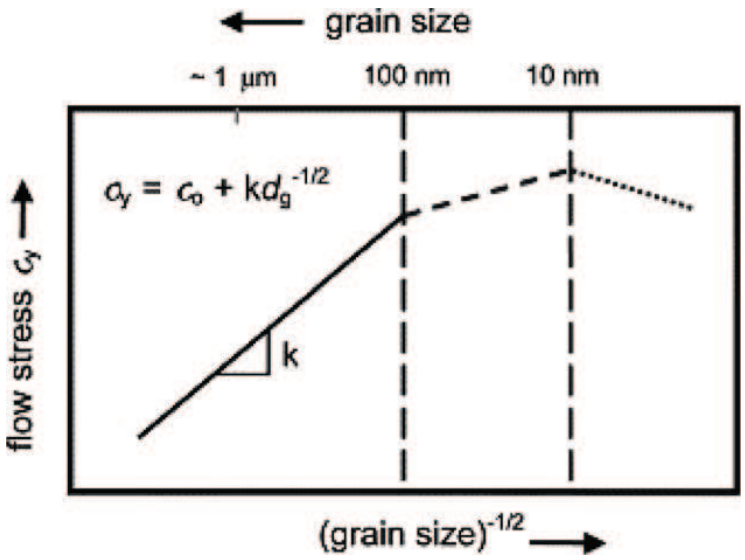

FIGURE 1.28 – Dépendance à la taille de grain de la limite d'élasticité pour des tailles de grain micro- et nanométriques

figure 1.29). L'effet de taille des cellules de dislocation sur la limite d'élasticité suit également une loi de type Hall-Petch.

1.3 Conclusion

Ce chapitre montre à partir d'études expérimentales le rôle important des hétérogénéités plastiques sur les propriétés mécaniques des poly-cristaux métalliques. Les approches phénoménologiques macroscopiques de modélisation, découlant de la mécanique des solides classique, sont incapables de prendre en compte la nature physique des mécanismes élémentaires de déformation plastique à l'échelle de défauts de réseau, du grain ou de l'agrégat et sont par conséquent incapables de prédire les effets dus aux hétérogénéités plastiques. L'utilisation d'approches microscopiques prenant en compte la structure granulaire des métaux s'avère donc nécessaire. Le chapitre suivant donne une vision succincte et synthétique de l'état actuel du savoir-faire en

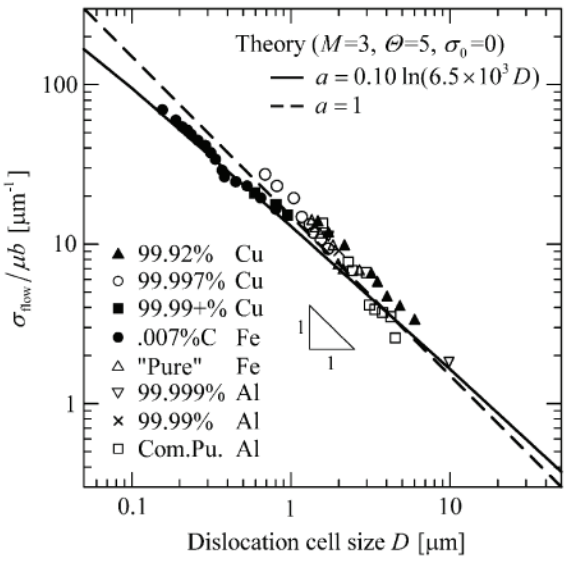

FIGURE 1.29 – Effet de taille des cellules de dislocation sur la limite d'élasticité pour le cuivre, le fer et l'aluminium [OO07]

matière de modélisation de la déformation plastique des métaux poly-cristallins.

Chapitre 2

Longueurs internes et approches de modélisation

Un des enjeux majeurs de la micromécanique actuelle est de concevoir des modèles capables de prédire des effets de longueurs internes sur le comportement mécanique effectif des poly-cristaux tels que ceux présentés dans le chapitre précédent. Dans ce chapitre, on passe en revue différentes méthodes de modélisations micromécaniques permettant de prendre en compte différents types d'hétérogénéités plastiques. Dans un premier temps, le schéma auto-cohérent "adopté" écrit dans le cadre de l'élastoplasticité est présenté en détail. C'est une approche à champs moyens, ce qui implique l'utilisation de variables internes phénoménologiques (glissement plastique moyen). Les insuffisances de ces modèles inhérentes à l'utilisation de variables internes phénoménologiques sont exposées. Dans un second temps, d'autres types de modélisations (discrètes ou continues) permettant de capter des longueurs internes sont présentés ainsi que leurs avantages et inconvénients. A la suite de ce chapitre, il apparaît ainsi nécessaire de proposer de nouvelles formulations basées sur la physique des mécanismes microscopiques et non plus sur des variables phénoménologiques moyennes, afin de traduire l'influence des longueurs internes sur les

champs locaux et les propriétés mécaniques macroscopiques.

2.1 Techniques d'homogénéisation à champs moyens

2.1.1 Contexte de plasticité cristalline : le glissement plastique

Etant donné la complexité de l'état disloqué d'un cristal, l'analyse cinématique adoptée dans le cadre de la plasticité cristalline se contente d'une description grossière fondée sur la notion de glissement plastique moyen (micro-homogénéisation du glissement), qui recouvre de manière globale l'évolution des distributions de dislocations. Les premiers travaux sur la description quantitative de la déformation plastique des métaux par glissement cristallographique ont été effectués par Sachs [Sac28] et Taylor [Tay38]. Hill et Rice [HR72] ont ensuite introduit la description du comportement élastoplastique du monocristal en transformation finie. La contribution des dislocations à la déformation plastique dans une description continue du glissement plastique a été généralisée aux cas des transformations finies [Asa83].
Considérons un élément de volume dV d'une structure monocristalline soumise à une sollicitation mécanique. Le gradient de déformation $\underset{\sim}{F}$ peut être décomposé en une contribution (visco)plastique $\underset{\sim}{F}^p$ (déplacement de la matière dans le réseau cristallin non déformé) et une contribution élastique $\underset{\sim}{F}^e$ qui tourne et distord le réseau cristallin. Dans la configuration intermédiaire relâchée représentée en figure 2.1, l'élément de volume est extrait du milieu environnant. Celui-ci est alors libre de toute contrainte.

Le gradient de la transformation totale $\underset{\sim}{F}$ s'écrit alors :

$$\underset{\sim}{F} = \underset{\sim}{F}^e.\underset{\sim}{F}^p. \tag{2.1}$$

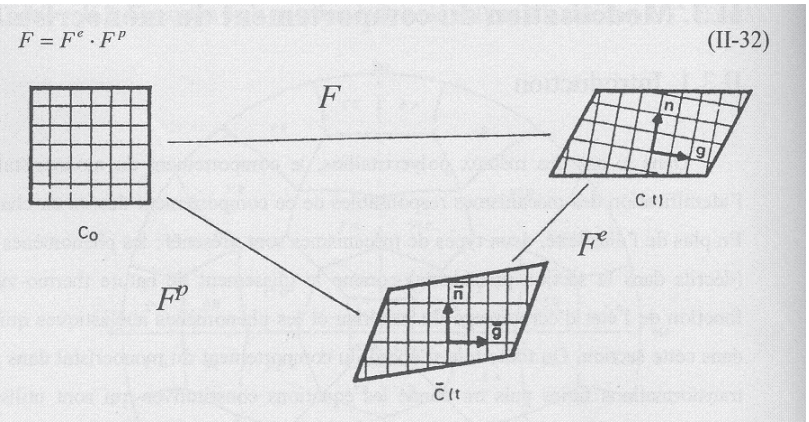

FIGURE 2.1 – Déformations et rotations du monocristal en élastoplasticité en transformations finies [Ber02].

A partir de la relation 2.1, l'expression du gradient de vitesse eulérien $\underset{\sim}{L}$ est :

$$\underset{\sim}{L} = \dot{\underset{\sim}{F}}.\underset{\sim}{F}^{-1} = \underset{\sim}{L}^e + \underset{\sim}{L}^p, \tag{2.2}$$

où $\underset{\sim}{L}^e$ et $\underset{\sim}{L}^p$ sont respectivement les parties élastiques et plastiques de $\underset{\sim}{L}$.

Pour chaque système de glissement (s), on note $\left(\underline{m}^{(s)}, \underline{n}^{(s)}\right)$ le couple de vecteurs orthogonaux et unitaires qui dans un monocristal non déformé désignent respectivement la direction de glissement et la normale au plan de glissement. Dans le cadre de la modélisation classique de la plasticité cristalline continue (et des approches à champs moyens), la quantité de glissement plastique moyen $\gamma^{(s)}$ pour chaque système de glissement (s) décrit les mouvements collectifs de dislocations. La contribution des N systèmes de glissement à la déformation plastique s'écrit :

$$\underset{\sim}{L}^p = \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^{(s)} \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)}. \tag{2.3}$$

La décomposition polaire de la déformation élastique $\underset{\sim}{F}^e$ permet de distinguer la distorsion élastique $\underset{\sim}{S}^e$ symétrique d'une rotation d'ensemble $\underset{\sim}{R}^e$:

$$\underset{\sim}{F}^e = \underset{\sim}{S}^e \cdot \underset{\sim}{R}^e. \tag{2.4}$$

Dans le cas des matériaux métalliques, la distorsion élastique est souvent négligeable devant l'ampleur des déformation plastique de sorte de la rotation $\underset{\sim}{R}^e$ s'inter-

prète comme la rotation de réseau cristallin par rapport à l'orientation de référence [FF04a]. Dans l'hypothèse des petites déformations et des petites rotations, on introduit les parties symétriques $\underset{\sim}{\epsilon}^e$, $\underset{\sim}{\epsilon}^p$ et antisymétriques $\underset{\sim}{\omega}^e$, $\underset{\sim}{\omega}^p$ des tenseurs $\underset{\sim}{S}^e$, $\underset{\sim}{R}^e$ et $\underset{\sim}{F}^e$, de telle sorte que :

$$\begin{aligned} \underset{\sim}{F} = \underset{\sim}{S}^e \cdot \underset{\sim}{R}^e \cdot \underset{\sim}{F}^p \approx \left(1 + \underset{\sim}{\epsilon}^e\right) \cdot \left(1 + \underset{\sim}{\omega}^e\right) \cdot \left(1 + \underset{\sim}{\epsilon}^p + \underset{\sim}{\omega}^p\right) \\ \approx 1 + \underset{\sim}{\epsilon}^e + \underset{\sim}{\omega}^e + \underset{\sim}{\epsilon}^p + \underset{\sim}{\omega}^p, \end{aligned} \tag{2.5}$$

et :

$$\dot{\underset{\sim}{F}} \cdot \underset{\sim}{F}^{-1} \approx \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^e + \dot{\underset{\sim}{\omega}}^e + \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^p + \dot{\underset{\sim}{\omega}}^p = \dot{\underset{\sim}{\epsilon}} + \dot{\underset{\sim}{\omega}}, \tag{2.6}$$

avec $\dot{\underset{\sim}{\epsilon}} = \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^e + \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^p$ et $\dot{\underset{\sim}{\omega}} = \dot{\underset{\sim}{\omega}}^e + \dot{\underset{\sim}{\omega}}^p$

Les taux de déformations plastiques se réduisent alors à :

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^p = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^{(s)} \left(\underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)} + \underline{n}^{(s)} \otimes \underline{m}^{(s)} \right), \tag{2.7}$$

ou

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^p = \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^{(s)} \underset{\sim}{R}^{(s)}, \tag{2.8}$$

avec

$$\underset{\sim}{R}^{(s)} = \frac{1}{2} \left(\underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)} + \underline{n}^{(s)} \otimes \underline{m}^{(s)} \right). \tag{2.9}$$

$\underset{\sim}{R}^{(s)}$ est le tenseur d'orientation (ou tenseur de Schmid) associé au système de glissement (s). Celui-ci constitue une variable interne susceptible d'évoluer.
Les taux de rotation plastique s'écrivent :

$$\dot{\underset{\sim}{\omega}}^p = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^{(s)} \left(\underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)} - \underline{n}^{(s)} \otimes \underline{m}^{(s)} \right). \tag{2.10}$$

2.1.2 Loi de comportement du grain en élasto-plasticité

Il est possible de décrire le comportement élasto-plastique du monocristal par une formulation en vitesse, sous la forme tangente $\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\approx}{l} : \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}$ [Hil65, LBRM95], qui relie le taux des contraintes $\dot{\underset{\sim}{\sigma}}$ aux taux des déformations $\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}$ par l'intermédiaire des modules tangents élasto-plastiques $\underset{\approx}{l}$.
Pour déterminer la relation de comportement élasto-plastique $\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\approx}{l} : \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}$, on part de la loi de Hooke :

$$\dot{\underset{\sim}{\sigma}} = \underset{\approx}{c} : \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{e} = \underset{\approx}{c} : \left(\dot{\underset{\sim}{\epsilon}} - \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{p} \right), \tag{2.11}$$

avec :

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{p} = \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^{(s)} \underset{\sim}{R}^{(s)}, \tag{2.12}$$

Dans le cadre de la plasticité classique (indépendante du temps physique), l'accroissement du glissement plastique $\dot{\gamma}^{(s)}$ n'est possible que si la force motrice $\tau^{(s)}$ atteint une valeur critique $\tau_c^{(s)}$, appelée cission critique (selon le critère de Schmid). La cission critique dépend de l'état d'écrouissage des systèmes de glissement. L'expression du taux d'écrouissage des systèmes de glissement (s) est donnée par :

$$\dot{\tau}_c^{(s)} \equiv \frac{\delta \tau_c^{(s)}}{\delta t} = \sum_{h=1}^{N} \frac{\partial \tau_c^{(s)}}{\partial \gamma^{(h)}} \frac{\partial \gamma^{(h)}}{\partial t} = \sum_{h=1}^{N} H^{(sh)} \dot{\gamma}^{(h)}, \tag{2.13}$$

où $H^{(sh)}$ est appelée matrice d'écrouissage. Les termes diagonaux correspondent à l'écrouissage propre d'un système, alors que les autres termes correspondent à l'écrouissage latent. Les termes de cette matrice peuvent être évalués à partir d'expériences mécaniques sur des monocristaux [Fra84]. La relation scalaire de durcissement isotrope classiquement utilisée en métallurgie physique [Tay08] est :

$$\tau_c = \tau_c^0 + \alpha \mu b \sqrt{\rho} \tag{2.14}$$

où α est une constante décrivant la force des interactions entre dislocations sécantes, μ est le module de cisaillement, ρ est la densité de dislocations, b est le module du vecteur de Burgers. A partir de cette dernière, une généralisation à la plasticité cristalline est obtenue en introduisant la matrice d'anisotropie $a^{(sh)}$ contenue dans

$H^{(sh)}$ telle que :

$$\tau_c^{(s)} = \tau_c^{0(s)} + \alpha\mu b\sqrt{\sum_{h=1}^{N} a^{(sh)}\rho^{(h)}}, \tag{2.15}$$

où $\rho^{(h)}$ est la densité de dislocations statistiquement stockées delon le système (h). L'activité des systèmes de glissement est alors décrite par les relations suivantes :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = 0 \text{ si } \tau^{(s)} = R_{ij}^{(s)}\sigma_{ij} < \tau_c^{(s)} \text{ (systèmes inactifs) ,} \tag{2.16}$$

$$\dot{\gamma}^{(s)} = 0 \text{ si } \tau^{(s)} = \tau_c^{(s)} \,;\, \dot{\tau^{(s)}} < \dot{\tau_c^{(s)}} \text{ (systèmes potentiellement actifs) ,} \tag{2.17}$$

$$\dot{\gamma}^{(s)} > 0 \text{ si } \tau^{(s)} = \tau_c^{(s)} \,;\, \dot{\tau^{(s)}} = \dot{\tau_c^{(s)}} \text{ (systèmes actifs ; condition de consistance).} \tag{2.18}$$

A partir des équations (2.7), (2.1.2) et (2.13), l'expression de $\underset{\sim}{\dot{\epsilon}^p}$ en fonction de $\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}$ s'écrit en notation indicielle :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_{s=1}^{N}\sum_{h=1}^{N} R_{ij}^{(s)}\left(H^{(hs)} + \underset{\sim}{R}^{(h)} : \underset{\approx}{c} : \underset{\sim}{R}^{(s)}\right)^{-1} R_{mn}^{(h)} c_{mnkl}\dot{\epsilon}_{kl} \tag{2.19}$$

d'où la relation de comportement élasto-plastique pour le monocristal :

$$\dot{\sigma}_{ij} = \left[c_{ijkl} - c_{ijmn}\sum_{s=1}^{N}\sum_{h=1}^{N} R_{mn}^{(s)}\left(H^{(hs)} + \underset{\sim}{R}^{(h)} : \underset{\approx}{c} : \underset{\sim}{R}^{(s)}\right)^{-1} R_{pq}^{(h)} c_{pqkl}\right]\dot{\epsilon}_{kl} \tag{2.20}$$

qui définit les modules tangents $\underset{\approx}{l}$ par l'expression :

$$l_{ijkl} = c_{ijkl} - c_{ijmn}\left[\sum_{s=1}^{N}\sum_{h=1}^{N} R_{mn}^{(s)}\left(H^{(hs)} + \underset{\sim}{R}^{(h)} : \underset{\approx}{c} : \underset{\sim}{R}^{(s)}\right)^{-1} R_{pq}^{(h)}\right] c_{pqkl}. \tag{2.21}$$

Ce module tangent ne comporte pas de longueur interne (comme la taille de grain).

2.1.3 Comportement du polycristal : approche en champs moyens avec les outils micromécaniques classiques pour la transition d'échelle

Un élément de volume d'un polycristal constitue un système fortement hétérogène. L'établissement d'une loi de comportement élasto-plastique macroscopique est par conséquent bien plus compliqué que dans le cas d'un monocristal. La démarche micromécanique de changement d'échelles de celle du grain à celle du polycristal consiste à remplacer la réalité micro-hétérogène complexe d'un matériau par un milieu fictif homogène équivalent du point de vue mécanique [BZ00]. Cette démarche permet d'intégrer de manière simplifiée la microstructure (joints de grain, orientations du réseau cristallin) ainsi que les phénomènes associés (contraintes internes, rotations de réseau). Ceci serait bien sûr impossible avec une approche purement phénoménologique, sauf si on utilise la méthode des éléments finis.

2.1.3.1 Méthode d'homogénéisation : approche micromécanique

On considère un Volume Elémentaire Représentatif (V.E.R.) V du polycristal. Cela veut dire que ce volume doit être petit par rapport à l'échelle de la structure mais assez grand pour être statistiquement représentatif du polycristal. V est soumis à ses frontières ∂V à des conditions aux limites homogènes. Pour des conditions de vitesses imposées, on aura alors en tout point $\underline{x}$ de ∂V.

$$\dot{\underline{u}}^d = \underset{\sim}{\dot{E}}.\underline{x} \tag{2.22}$$

où $\underset{\sim}{\dot{E}}$ désigne la vitesse de déformation totale imposée.
Ce chargement entraîne dans V des champs locaux de taux de déformations locaux $\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}$, de taux de rotations $\underset{\sim}{\dot{\omega}}$ et de taux de contraintes $\underset{\sim}{\dot{\sigma}}$ qui fluctuent du fait des hétérogénéités spatiales dans le polycristal (grains).

Le taux de contraintes macroscopiques $\dot{\underset{\sim}{\Sigma}}$ sont définies comme les moyennes volumiques des taux de contraintes microscopiques $\dot{\underset{\sim}{\sigma}}(\underline{x})$ par la relation suivante :

$$\dot{\underset{\sim}{\Sigma}} = \frac{1}{V}\int_V \dot{\underset{\sim}{\sigma}}(\underline{x})dV. \tag{2.23}$$

Les champs mécaniques locaux et macroscopiques ne sont pas égaux du fait des hétérogénéités microstructurales ($\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}(\underline{x}) \neq \dot{\underset{\sim}{E}}$). Il faut donc introduire une étape dite de localisation des taux de déformations comme suit :
La relation de localisation s'écrit :

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}(\underline{x}) = \underset{\approx}{A}(\underline{x}) : \dot{\underset{\sim}{E}}, \tag{2.24}$$

où $\underset{\approx}{A}$ est le tenseur de localisation des taux de déformations. Ce tenseur dépend des éléments suivants [BZ00] :

- morphologie des constituants du matériau (ici les grains),
- comportement mécanique locale dans les constituants (décrit à une certaine échelle),
- position spatiale des constituants,
- choix de la transition d'échelle utilisée (méthode auto-cohérente etc).

Dans ce qui suit, on spécifie la démarche auto-cohérente (dite " à 1 site ") afin d'estimer le comportement effectif des polycristaux de nature élasto-plastique. Cette méthode s'adapte très bien aux milieux aléatoires comme le sont les polycristaux métalliques. On insiste sur les résultats et les succès de cette approche aujourd'hui communément utilisée mais aussi sur ses insuffisances.

2.1.3.2 Equations de champs

Les schémas auto-cohérents utilisent une représentation sphérique ou ellipsoïdale des grains. Ils reposent sur l'assimilation des interactions mécaniques entre chaque

élément d'un agrégat hétérogène et l'ensemble de tous les autres à celle entre cet élément et le milieu homogène équivalent de comportement inconnu par lequel on cherche à représenter l'agrégat hétérogène [BZ80].
Ce dernier problème se ramène à celui de l'interaction entre une inclusion et une matrice infinie (le milieu homogène équivalent) et à une solution explicite dans un grand nombre de cas (cf. figure 2.2). On rappelle ici l'approche auto-cohérente de Hill

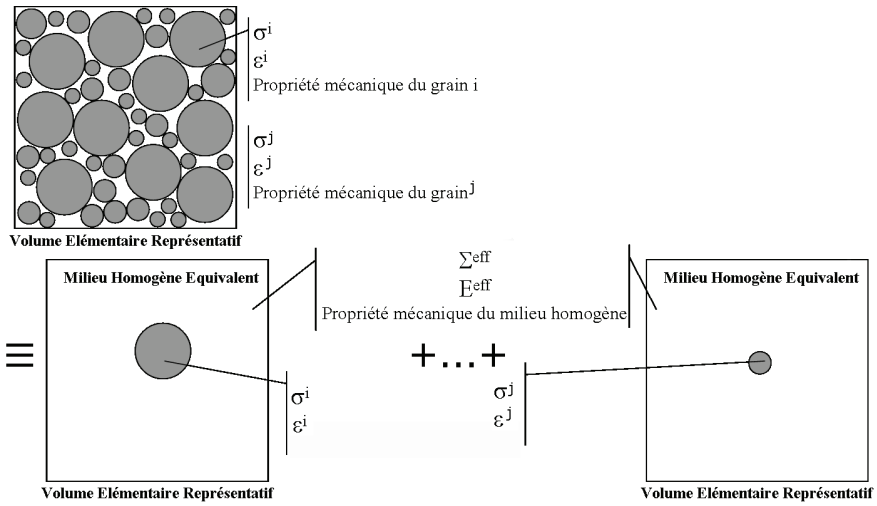

FIGURE 2.2 – Représentation du schéma auto-cohérent à un site [Nic09]

[Hil65] permettant de déterminer les propriétés élasto-plastiques effectives d'agrégats polycristallins.

Un matériau hétérogène à comportement élasto-plastique comme celui décrit en 2.1.2. est considéré. Les hypothèses suivantes sont utilisées :

- les chargements sont supposés quasi statiques, donc sans effet d'inertie,
- le matériau n'est soumis à aucune force de volume,
- seul le cas des petites déformations est envisagé, même si les techniques présentées peuvent être étendues aux cas des transformations finies.

Les équations de champs incrémentales s'écrivent :

$$\text{div } \underset{\sim}{\dot{\sigma}}(\underline{x}) = 0, \tag{2.25}$$

$$\underset{\sim}{\dot{\sigma}}(\underline{x}) = \underset{\approx}{l}(\underline{x}) : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}(\underline{x}), \tag{2.26}$$

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}(\underline{x}) = \frac{1}{2}\left(\nabla \underline{\dot{u}} +^t \nabla \underline{\dot{u}}\right), \tag{2.27}$$

$$\underline{\dot{u}}^d = \underset{\sim}{\dot{E}}.\underline{x} \text{ sur } \partial V. \tag{2.28}$$

On introduit des fluctuations des modules tangents élastoplastiques notées $\underset{\approx}{\delta l}(\underline{x})$ comme suit :

$$\underset{\approx}{l}(\underline{x}) = \underset{\approx}{L}^0 + \underset{\approx}{\delta l}(\underline{x}), \tag{2.29}$$

où $\underset{\approx}{L}^0$ sont les modules élastoplastiques tangents d'un milieu homogène infini de référence. En introduisant ces fluctuations dans les équations de champs, on obtient un système d'équations aux dérivées partielles contenant l'opérateur de Navier $\underset{\approx}{L}^0\nabla\nabla$ lié aux modules homogènes et une partie liée aux fluctuations spatiales des modules tangents. Cela donne en notation indicielle :

$$L^0_{ijkl}\dot{u}_{l,ki} + \left(\delta l_{ijkl}\epsilon_{kl}\right)_{,i} = 0, \tag{2.30}$$

La résolution du problème micro-hétérogène conduit à l'équation intégrale en vitesses [LBRM95, BZ00] :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}(\underline{x}) = \underset{\sim}{\dot{E}} + \int_V \underset{\approx}{\Gamma}(\underline{x} - \underline{x}') : \underset{\approx}{\delta l}(\underline{x}') : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}(\underline{x}')dV', \tag{2.31}$$

où $\underset{\approx}{\Gamma}$ est le tenseur de Green modifié associé à $\underset{\approx}{L}^0$ [Krö89] défini en notation indicielle par :

$$\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') = -\frac{1}{2}\left(G_{ik,jl}(\underline{x} - \underline{x}') + G_{jk,il}(\underline{x} - \underline{x}')\right) \tag{2.32}$$

2.1.3.3 Milieux granulaires et schéma auto-cohérent à 1 site

L'approximation auto-cohérente suppose que les modules tangents $\underset{\approx}{l}(\underline{x})$ sont constants par morceaux suivant la microstructure granulaire du polycristal, ce qui sous-entend qu'ils sont uniformes par grain (cf. figure 2.3). Les modules tangents peuvent alors s'écrire :

$$\underset{\approx}{l}(\underline{x}) = \sum_N \underset{\approx}{l}^I \Theta^I(\underline{x}) \tag{2.33}$$

avec :

$\Theta^I(\underline{x}) = 0$ si $\underline{x} \notin V^I$

et

$\Theta^I(\underline{x}) = 1$ si $\underline{x} \in V^I$. L'équation intégrale se simplifie alors (en supposant N grains

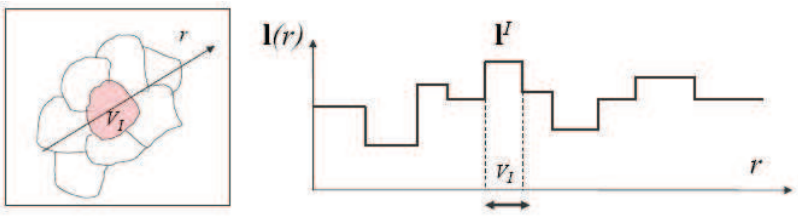

FIGURE 2.3 – Décomposition par morceaux guidée par les hétérogénéités granulaires (c'est-à-dire les hétérogénéités intra-granulaires initiales et induites par la déformation plastique sont ici négligées)

dans le V.E.R.) :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}(\underline{x}) = \underset{\sim}{\dot{E}} + \sum_{J=1}^{N} \int_{V_J} \underset{\approx}{\Gamma}(\underline{x} - \underline{x}') : \underset{\approx}{\delta l}^J : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^J dV' \tag{2.34}$$

avec :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^J = \frac{1}{V^J} \int_{V^J} \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}(\underline{x}) dV \tag{2.35}$$

L'équation intégrale pour le I^{ème} constituant s'écrit :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I = \underset{\sim}{\dot{E}} + \frac{1}{V^I} \int_{V^I} \sum_{J=1}^{N} \int_{V_J} \underset{\approx}{\Gamma}(\underline{x} - \underline{x}') : \underset{\approx}{\delta l}^J : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^J dV' dV. \tag{2.36}$$

L'équation (2.36) peut être compactée ainsi :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I = \underset{\sim}{\dot{E}} + \sum_{J=1}^{N} \underset{\approx}{T}^{IJ} : \underset{\approx}{\delta l}^J : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^J, \tag{2.37}$$

où :

$$\underset{\approx}{T}^{IJ} = \frac{1}{V^I} \int_{V^I} \int_{V_J} \underset{\approx}{\Gamma}(\underline{x} - \underline{x'}) dV' dV. \tag{2.38}$$

Ainsi :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I = \underset{\sim}{\dot{E}} + \underset{\approx}{T}^{II} : \underset{\approx}{\delta l}^I : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I + \sum_{J \neq I} \underset{\approx}{T}^{IJ} : \underset{\approx}{\delta l}^J : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^J. \tag{2.39}$$

Cette décomposition laisse apparaître trois contributions :

- contribution des conditions aux limites,
- contribution propre (interactions propres des constituants),
- contribution non-locale (interactions entre les I^{ème} et les $J^{ème}$ constituants).

Le problème consiste à chercher le module tangent $\underset{\approx}{L}^{eff}$ reliant le taux de déformation macroscopique $\underset{\sim}{\dot{E}}$ au taux de contrainte macroscopique $\underset{\sim}{\dot{\Sigma}}$:

$$\underset{\sim}{\dot{\Sigma}} = \underset{\approx}{L}^{eff} : \underset{\sim}{\dot{E}}. \tag{2.40}$$

Dans le schéma auto-cohérent à un site (figure 2.2), on néglige les contributions non-locales des tenseurs de Green modifiés :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I = \underset{\sim}{\dot{E}} + \underset{\approx}{T}^{II} : \delta \underset{\approx}{l}^I : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I. \tag{2.41}$$

Les modules tangents du milieu homogène de référence sont choisis tels que $\underset{\approx}{L}^0 = \underset{\approx}{L}^{eff}$.
L'équation de concentration pour I s'écrit :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I = \underset{\approx}{A}^I : \underset{\sim}{\dot{E}} \tag{2.42}$$

avec $\underset{\approx}{A}^I = \left(\underset{\approx}{I} - \underset{\approx}{T}^{II} : \delta \underset{\approx}{l}^I\right)^{-1}$.
Le comportement élasto-plastique effectif pour le polycristal s'écrit alors :

$$\underset{\sim}{\dot{\Sigma}} = \overline{\underset{\approx}{l}^I : \underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^I} = \overline{\underset{\approx}{l}^I : \underset{\approx}{A}^I} : \underset{\sim}{\dot{E}} \tag{2.43}$$

où :

$$\underset{\approx}{L}^{eff} = \overline{\underset{\approx}{l}^I : \left(\underset{\approx}{I} - \underset{\approx}{T}^{II} : \underset{\approx}{\delta l}^I\right)^{-1}} \tag{2.44}$$

Etant donnés que $\underset{\approx}{T}^{II}$ et $\underset{\approx}{\delta l}^J$ dépendent de $\underset{\approx}{L}^{eff}$, cette équation est implicite et nécessite donc un schéma numérique de résolution de type itératif.

2.1.4 Succès et insuffisances des modèles à champs moyens

2.1.4.1 Résultats et succès de ces modèles

Les modèles auto-cohérents [Esh57, Krö61, Hil65, Hut76, BZ79] basés sur le problème de l'inclusion d'Eshelby (cf. paragraphe précédent) utilisent des approches à champs moyens ne permettant qu'une description simpliste de la plasticité intragranulaire. Dans ces approches, la microstructure initiale est seulement caractérisée par :

- l'orientation globale des grains au travers d'une fonction de distribution d'orientation décrivant la texture cristallographique initiale (obtenue en général par diffraction des rayons X)
- une description approximative de la forme des grains obtenue par les micrographies. La forme des grains est supposée ellipsoïdale (morphologie des grains allongée dans une direction ou applatie peut être prise en compte) dans le schéma auto-cohérent.
Malgré cette description relativement simpliste qui ignore les hétérogénéités à l'échelle intra-granulaire (d'ordre 3), les résultats obtenus par ces modèles sont en bon accord avec des mesures expérimentales obtenues pour des chargements monotones et multi-axés. Ils concernent la texture cristalline, les contraintes internes, les surfaces de plasticité, et l'anisotropie plastique.
Les résultats présentés proviennent des travaux de Berveiller et Zaoui [BZ00]. Ils portent sur la simulation du comportement de tôle d'acier à faible teneur en carbone et montrent clairement l'intérêt industriel de tel modèle.
Les paramètres matériaux d'entrée du modèle ont été obtenus à partir de caractérisation expérimentale du matériau étudié :
- la texture cristallographique initiale mesurée par diffraction des rayons X
- la forme des grains obtenue à partir des micrographies de la microstructure initiale
- une courbe de traction uni-axiale permet de déterminer les paramètres composant la matrice d'écrouissage.
L'élasticité a été supposée isotrope et se réduit à deux modules de Lamé : $\lambda = 120GPa$ et $\mu = 80MPa$ (coefficients de Lamé).
La structure du réseau cristallin de cette acier est cubique centrée. Le glissement plastique a été décrit par deux familles de systèmes de glissement $\{110\}\langle 111\rangle$ et $\{112\}\langle 111\rangle$.

La figure 2.4 montre l'évolution de la texture de déformation lors d'une opération de " rétreint suivi d'un repassage ". On retrouve un bon accord entre les figures de pôles expérimentales et simulées.

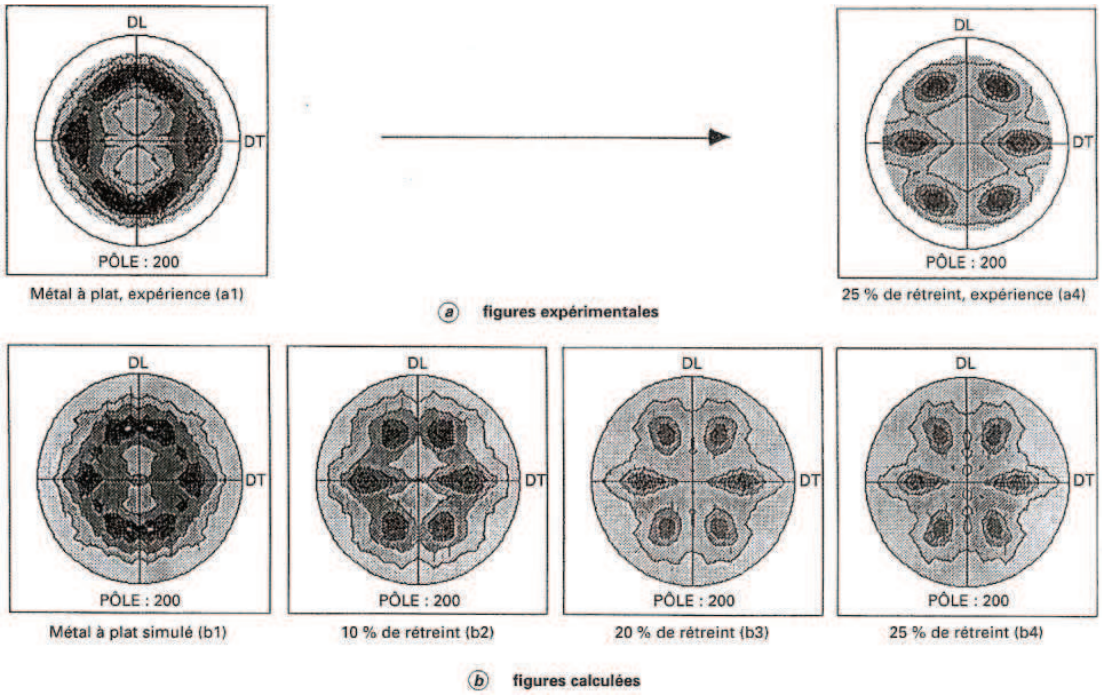

FIGURE 2.4 – Evolution de la texture (figure de pôle (200) lors d'une opération de rétreint [BZ00]

La figure 2.5 présente une coupe de la surface de plasticité dans le plan DL-DT. Après un chargement complexe (ici rétreint + repassage), la forme des surfaces de plasticité est fortement modifiée, mettant en évidence à la fois un écrouissage isotrope et cinématique. Les deux points expérimentaux de cette figure montrent que les phénomènes complexes d'écrouissage sont bien pris en compte.

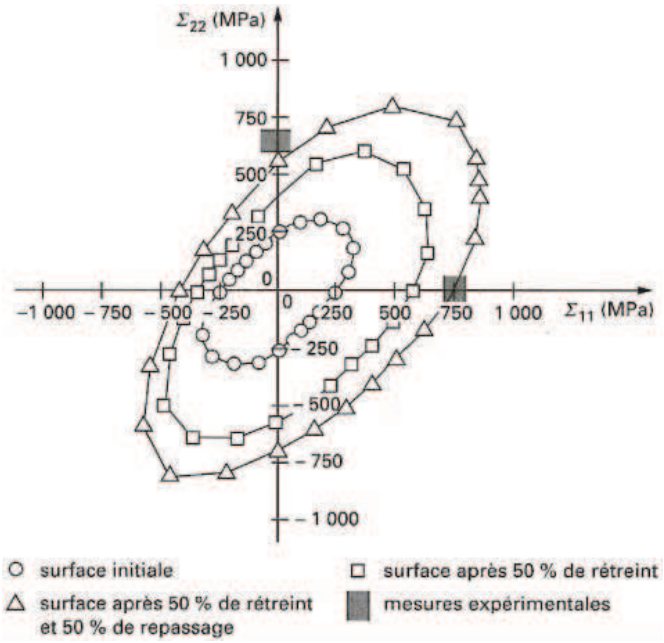

FIGURE 2.5 – Evolution de la surface de plasticité lors d'un chargement complexe dans le plan DL-DT [BZ00]

L'analyse des champs de contraintes et de déformations dans chaque grain de l'agrégat pour un chargement donné fait clairement apparaître le caractère hétérogène du polycristal. La figure 2.6 montre pour une déformation plastique macroscopique de 30% que les déformations microscopiques sont étalées entre 22 et 35% et pour les contraintes varient de 410 à 630 MPa.

Ces modèles sont non seulement capables de prédire la formation des textures mais également de prendre en compte l'anisotropie plastique des polycristaux. L'ani-

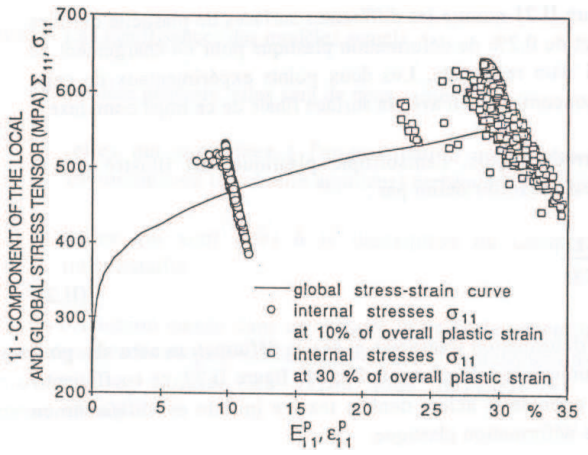

FIGURE 2.6 – Courbe contrainte-déformation macroscopique pour une traction uniaxiale (Σ_{11}) et valeurs microscopiques des grains du polycristal pour deux niveaux (10% et 30%) de la déformation plastique E^p [LBRM95]

sotropie plastique est illustrée par le coefficient de Lankford défini par :

$$r = \frac{\epsilon_{22}}{\epsilon_{33}} \tag{2.45}$$

où ϵ_{22} est la déformation transverse et ϵ_{33} la déformation normale, pour une traction selon l'axe 1.

Les mesures du coefficient de Lankford à 10% de déformation (figure 2.8) montrent que l'anisotropie plastique due à la texture cristallographique est relativement bien prise en compte par le modèle. Pour conclure, on peut dire que le comportement macroscopique ainsi que l'évolution de texture et d'anisotropie plastique sont relativement bien décrits par les modèles auto-cohérents.

2.1.4.2 Insuffisances de ces modèles

Les insuffisances de ces modèles sont principalement :

– une difficulté à travailler et à multiplier les échelles (échelles de l'atome à

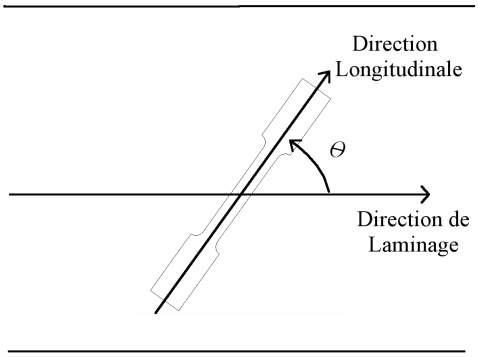

FIGURE 2.7 – Orientation géométrique d'une éprouvette en vue d'essais de traction pour caractériser les coefficients de Lankford

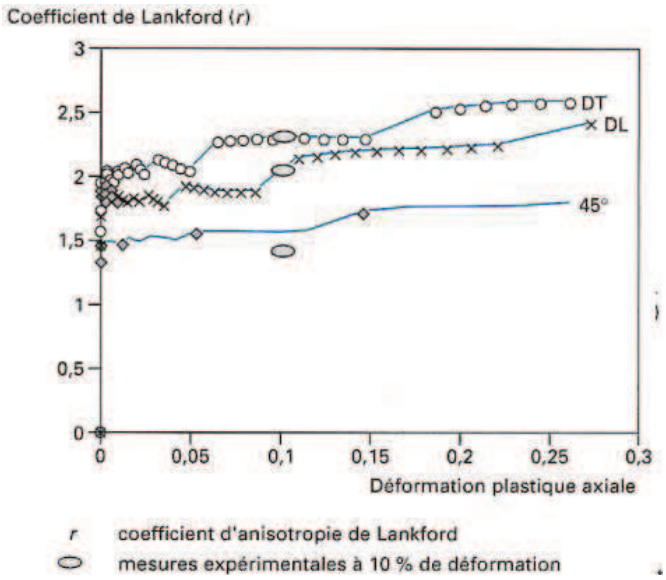

FIGURE 2.8 – Evolution du coefficient de Lankford calculé pour des essais de traction dans le sens du laminage DL, dans la direction transverse DT et à 45° [BZ00]

l'échelle microscopique) et une micro-homogénéisation trop précoce,
- une incapacité à décrire les hétérogénéités intra-granulaires (champs moyens), seules les hétérogénéités inter-granulaires sont décrites,
- une incapacité à prédire ab-initio des effets de longueurs internes (taille de grains).

Les matériaux cristallins sont par nature très hétérogènes (cf. paragraphe 2.1.). Ils comportent des défauts pouvant être ponctuels, linéaires, surfaciques et volumiques. Des modélisations spécifiques à chacune des échelles ont vu le jour (dynamique moléculaire, dynamique des dislocations). Grâce aux progrès réalisés dans le domaine informatique, on dispose de moyens de calcul de plus en plus puissants. Pour chaque modèle spécifique aux diverses situations rencontrées lors des procédés de mise en forme, les volumes et les temps physiques qu'il est possible de simuler, sont toujours plus importants (figure 2.9). Il est cependant aujourd'hui inimaginable de penser simuler directement un procédé de mise en forme (laminage, emboutissage) à partir de la dynamique moléculaire ou même de la dynamique des dislocations. Par contre les résultats de ce type de modélisation peuvent être utilisés pour fournir des informations aux modélisations à des échelles supérieures [FF04a].
Les modèles (à l'échelle des milieux continus) utilisant des lois purement phénoménologiques ont progressivement laissé place à des modèles intégrant de plus en plus la physique des mécanismes de déformation. Par exemple, pour ces modèles dits "à champs moyens", le comportement collectif des dislocations intra-granulaires est décrit de façon moyenne au travers du glissement plastique cristallographique. Cela conduit cependant toujours à des relations de comportement plus ou mois phénoménologique.

Dans les 10 dernières années, la micromécanique des matériaux hétérogènes est passée des approches à "champs moyens" [Zao02] vers des approches d'homogénéisation plus fines prenant en compte les fluctuations des champs intra-granulaires

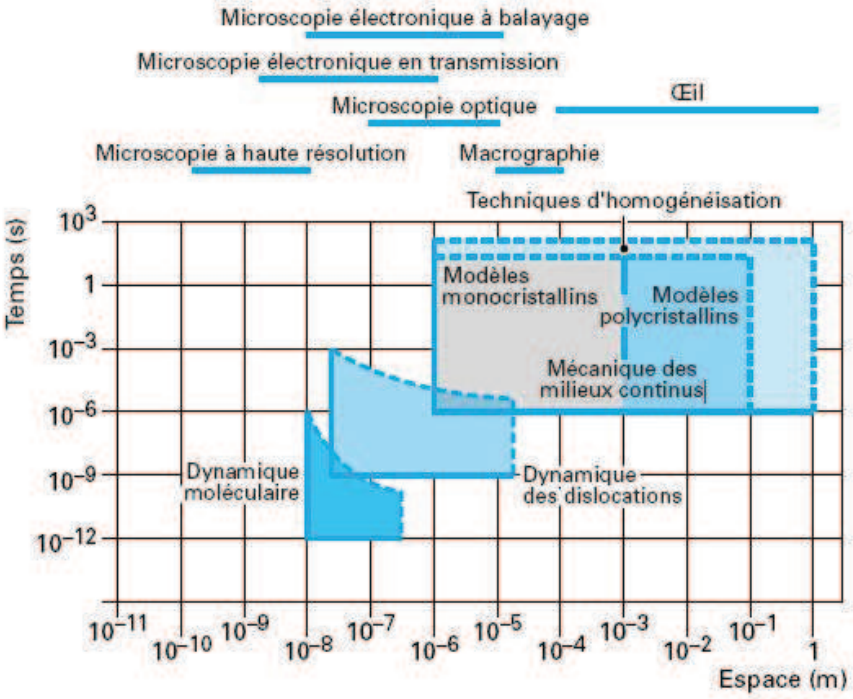

FIGURE 2.9 – Représentation schématique des possibilités de simuler et d'observer le comportement plastique d'un volume de matière de taille donnée pendant un temps physique [FF04a]

par des structures multi-stratifiées décrivant le glissement multiple intra-cristallin [ORS00, FB07], ou, des méthodes autocohérentes de second ordre permettant de considérer les seconds moments de contraintes et de déformations intra-phases [BCB04]. Plus récemment, grâce à l'apport du calcul parallèle, les approches à champs complets basées sur la technique FFT (Transformées de Fourier Rapide) [Leb01, MS03] sont également employées pour saisir les hétérogénéités intra-granulaires [LBCR08].

A notre avis, la principale faiblesse des approches à champs moyens réside dans la description trop simpliste des phénomènes plastiques *discrets* à l'échelle intra-granulaire tels que les lignes et bandes de glissement observées expérimentalement (cf. Chapitre 1).

L'opération de moyenne effectuée (micro-homogénéisation) dans les approches à champs moyens rend impossible la prise en compte des phénomènes discrets du glissement plastique. Les distributions de dislocations discrètes formant les bandes de glissement et leurs interactions ne sont pas décrites. Berbenni et al [BBR08] et Roy et al [RPGK08] ont récemment démontré l'importance de considérer la nature discrète de la plasticité, particulièrement les interactions à courtes distances qui modifient les champs de contraintes aux joints de grains.
La principale conséquence de la non-prise en compte des hétérogénéités du glissement plastique intra-granulaire est l'incapacité de ces modèles à rendre compte des effets de longueurs internes sur le comportement mécanique, tel que les effets de taille de grains ou les effets de taille de structure.

Effet de taille de grain

Les modèles classiques de plasticité basés sur le problème d'inclusion plastique d'Eshelby [Esh57, Krö61, Hil65, Hut76, BZ79] supposent les champs uniformes par morceaux dans les grains. Les champs de contraintes et de déformations sont donc également uniformes à l'intérieur des grains. Cette description de plasticité est trop

simpliste et par conséquent entraîne une perte d'information. Les empilements de dislocation aux joints de grains dans les bandes de glissement (cf. figure 2.10) ne sont pas décris. Ce sont ces empilements qui sont à l'origine des effets de taille de

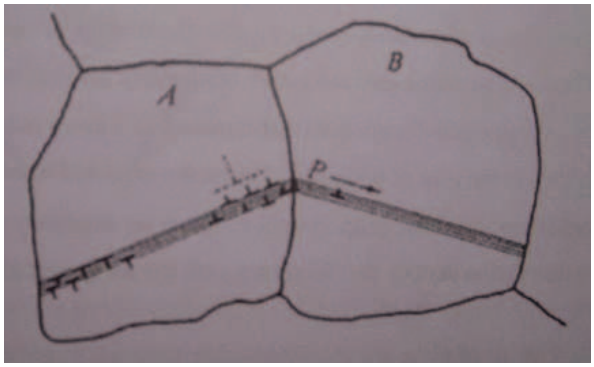

FIGURE 2.10 – Empilements de dislocations aux joints de grains [Yan06].

grain sur les propriétés mécaniques macroscopiques (cf. section (1.2.)). La principale conséquence de cette simplification est qu'aucun effet de taille de grains ne peut être déduit. La dépendance à la taille de grains ne peut qu'être prise en compte de manière phénoménologique, en introduisant une loi d'écrouissage dépendante de la taille de grains pour la contrainte de référence. Weng [Wen83] a introduit une loi de type Hall-Petch au travers de la cission critique τ_c sur chaque système de glissement en plasticité cristalline :

$$\tau_c(d, \gamma^p) = \tau_0 + k \cdot \overline{d}^{-1/2} + \left(h + a\overline{d}^{-1/2}\right) \gamma^{p^n} \tag{2.46}$$

où τ_c est la cission critique sur un système de glissement, τ_0 est la cission critique initiale provenant de la friction de réseau, k est le paramètre de Hall-Petch, $\overline{d}$ est à la taille moyenne des grains dans l'agrégat, h est le coefficient d'écrouissage indépendant de la taille de grain, a est le coefficient d'écrouissage prenant en compte l'effet de taille de grain et γ^p correspond au glissement plastique.
La prise en compte de la taille du grain au niveau de la cission critique permet alors

d'obtenir un effet de taille sur le comportement mécanique en traction simple d'un matériau tel que le cuivre polycristallin [Wen83].

Effet de taille de structure

Lorsque les structures mécanique étudiées deviennent petites (microsystème par exemple) alors les propriétés mécaniques peuvent varier significativement avec les dimensions de la structure [EBPS05]. Il est alors impossible de définir un volume élémentaire représentatif (VER). Les modèles classiques à champs moyens ne sont alors plus performants pour de telles structures.
Depuis quelques années, cet effet est étudié au moyen de l'étude de micro-piliers (plus connu sous le nom anglais "micropillar"). A l'aide d'un microscope électronique à balayage équipé d'un FIB ("Focused Ion Beam"), il est possible d'usiner des cylindres de compression à l'intérieur des grains, dont le diamètre et de l'ordre de grandeur du micromètre. Une fois préparé, ces échantillons sont testés à l'aide d'un nano-indentateur conventionnel équipé d'une pointe d'indentation présentant un méplat appelés "flat-punch". Celle-ci permet d'effectuer sur les micro-piliers un essai de compression.
De nombreux travaux expérimentaux [UDFN04, GON05, VL06] ont montré une évidente dépendance des propriétés mécaniques aux diamètres des micro-piliers lors d'essais de compression (cf. figure 2.11). La limite d'élasticité ainsi que la contrainte d'écoulement augmente quand le diamètre des piliers diminue.

Dans la section suivante, on décrit ensuite une première manière simple de remédier aux insuffisances des approches à champs moyens classiques par l'introduction de longueurs internes (comme la taille des grains) de manière phénoménologique au niveau des lois de comportement des grains : ce type d'approches est baptisée " Approches à Champs Moyens à Longueurs Internes "‘[Nic09] et sera décrit brièvement dans ce chapitre ainsi que les principaux résultats obtenus (effets de taille de grains et de dispersion de taille de grain sur le comportement mécanique des aciers IF).

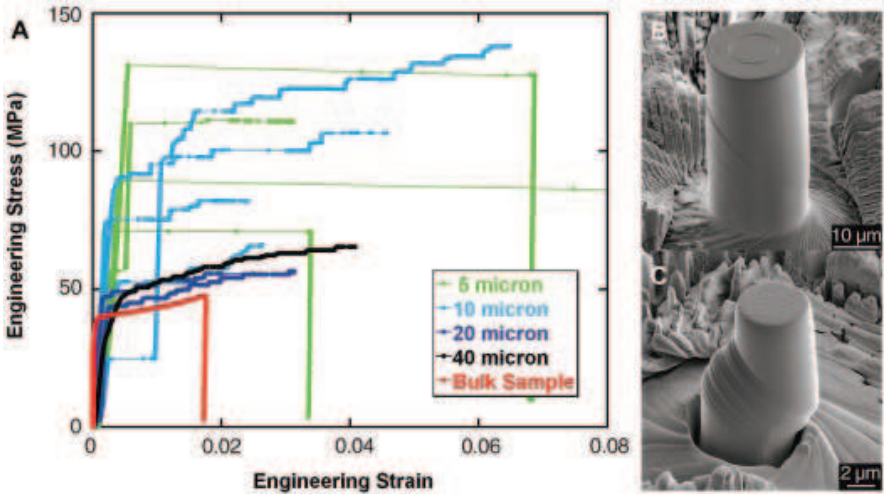

FIGURE 2.11 – Comportement mécanique à température ambiante de micro-pilier en nickel pur (orientation $\langle 134 \rangle$; A : Courbe contrainte-déformation pour des micro-piliers de différentes tailles ; B : Micrographie MEB d'un micro-pilier de 20 μm de diamètre après 4% de déformation ; C : Micrographie MEB d'un micro-pilier de 5 μm de diamètre après 19% de déformation.

2.2 Introduction phénoménologique de la taille des grains et effets de dispersion de tailles des grains

Bien que les approches à champ moyen ne permettent pas de prédire des effets de taille de grain naturellement à partir des lois physiques reliées aux mécanismes de déformation et aux microstructures, l'utilisation de relation phénoménologique de type Hall-Petch au niveau des lois de comportement intra-granulaires permet de mettre en évidence les effets de taille moyenne et de dispersion de taille de grain sur le comportement mécanique. Berbenni et al. [BFB07] ont étudié l'influence de la distribution de taille de grain sur les propriétés mécaniques. Dans un premier temps, la texture cristallographique n'a pas été prise en compte. Les lois de comportement locales élasto-viscoplastiques sont supposées isotropes. Il a été supposé que le seul mécanisme responsable de dépendance à la taille de grain est la contrainte d'écoulement individuelle des grains avec une description isotrope. Il a été trouvé que la dispersion de taille a également un impact sur les propriétés mécaniques macroscopiques et notamment la limite d'élasticité (cf. figure 2.12). Cet impact est plus marqué quand la taille de grain moyenne est faible. Nicaise et al. [NBW+10] ont étudié les effets combinés de la taille de grain et la texture cristallographique dans le cas d'aciers IF. Les lois de comportement locales sont décrites dans le cadre de la plasticité cristalline et la transition d'échelle a été effectuée au moyen d'un modèle auto-cohérent à champs translatés [SBFB02, BFLB04]. En plus de prendre en compte l'orientation cristallographique au travers des tenseurs de Schmid, la taille individuelle des grains à été prise en compte dans les équations constitutives des grains, au travers de la cission critique (au travers de la relation de type Hall-Petch) et du libre parcours moyen des dislocations.

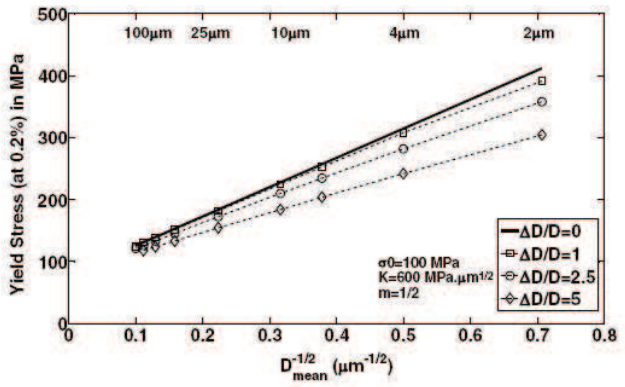

FIGURE 2.12 – Limites d'élasticité macroscopiques simulées en fonction de la dispersion relative de taille de grain $\frac{\Delta D}{D}$ variant de 0 à 5, où D est la taille moyenne de grain [BFB07].

2.2.1 Loi de comportement locale dépendant de la taille de grain

Dans l'hypothèse des petites déformations, les taux de déformation locaux sont composés d'une partie élastique et d'une partie viscoplastique :

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}} = \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{e} + \dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{vp}, \tag{2.47}$$

où le taux de déformation élastique $\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{e}$ est dérivé de la loi de Hooke reliant le taux de contrainte $\dot{\underset{\sim}{\sigma}}$ à $\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{e}$ par :

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{e} = \underset{\approx}{S} : \dot{\underset{\sim}{\sigma}}, \tag{2.48}$$

où $\underset{\approx}{S}$ est le tenseur des complaisances élastiques linéaires (il sera supposé isotrope et défini par le module de cisaillement μ et le coefficient de Poisson ν).
L'expression du taux de déformation viscoplastique s'écrit :

$$\dot{\underset{\sim}{\epsilon}}^{vp} = g(\underset{\sim}{\sigma}) = \underset{\approx}{m}(\underset{\sim}{\sigma}) : \underset{\sim}{\sigma}, \tag{2.49}$$

où $\underset{\approx}{m}(\underset{\sim}{\sigma})$ est le tenseur des complaisances viscoplastiques non-linéaire sécant dépendant des contraintes locales $\underset{\sim}{\sigma}$. Pour chaque grain I, et dans le cas de glissement

multiple, $\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^{vp}$ s'écrit :

$$\underset{\sim}{\dot{\epsilon}}^{vp} = \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^{(s)} \underset{\sim}{R}^{(s)}, \tag{2.50}$$

où :

$$\underset{\sim}{R}^{(s)} = \frac{1}{2}\left(\underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)} + \underline{n}^{(s)} \otimes \underline{m}^{(s)}\right). \tag{2.51}$$

Pour chaque grain I, et pour chaque système de glissement (s), le taux de glissement est donné par la loi puissance suivante [AN85, NNO86, Har91] :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\left|\tau^{(s)}\right|}{\tau_c^{(s)}\left(\rho^{(s)}, \gamma^{(s)}, D^I\right)} \right)^n signe(\tau^{(s)}), \tag{2.52}$$

où l'exposant n est une constante, $\dot{\gamma}_0$ est le taux de glissement de référence constant, et, $\tau_c^{(s)}$ est la cission critique (ou cission de référence) pour chaque système de glissement (s).

Pour chaque système de glissement (s), $\tau_c^{(s)}$ dépend de la densité de dislocations $\rho^{(h)}$ et de la taille de grain individuelle D^I :

$$\tau_c^{(s)}\left(\rho^{(h)}, D^I\right) = \tau_{c_0}^{(s)} + \frac{\kappa}{\sqrt{D^I}} + \alpha\mu b\sqrt{\sum_h a^{(sh)}\rho^{(h)}}, \tag{2.53}$$

où :

- τ_{c_0} est la cission critique du cristal parfait ayant une taille "infinie", qui dépend généralement de la famille de systèmes de glissement, mais, supposée identique sur tous les systèmes de glissement pour cette étude. Elle correspond à la contrainte de Peierls (ou friction de réseau), la teneur en élément chimique d'addition pouvant modifier la valeur de τ_{c_0},
- $\frac{\kappa}{\sqrt{D^I}}$ est une dépendance de la cission de référence à la taille de grain selon une loi de type Hall-Petch,
- α est une constante comprise entre 0,2 et 0,5 qui est généralement de l'ordre de 0,3,
- μ est le module élastique de cisaillement,
- b est le module du vecteur de Burgers,
- $a^{(sh)}$ est la matrice d'anisotropie issue des travaux de Franciosi [Fra84],
- $\rho^{(h)}$ est la densité de dislocation sur le système de glissement (h).

A l'état initial, ces densités seront supposées identiques pour tous les systèmes de glissement, et cette valeur sera notée ρ_0.
La loi d'évolution des densités de dislocations proposée par Kocks [Koc76] est linéaire et sans mécanisme d'annihilation de dipôles de dislocations vis. Celle-ci fut dérivée par Essmann et Mughrabi [EM79] afin de prendre en compte ces annihilations.
Mecking et Kocks [MK81] ont ensuite proposé une loi d'évolution permettant de prendre en compte l'augmentation, puis la saturation des densités de dislocation :

$$\dot{\rho}^{(s)} = \frac{1}{b}\left(\frac{1}{L^{(s)}} - 2y_c\rho^{(s)}\right)\left|\dot{\gamma}^{(s)}\right| \tag{2.54}$$

Le premier terme de cette expression, $\frac{1}{L^{(s)}}$, est le terme de création (via des sources de multiplication comme les sources de Frank-Read) et de stockage de dislocation, et le second terme, $2y_c\rho^{(s)}$, correspond à l'annihilation des dipôles de dislocation d'après Essmann et Mughrabi [EM79], y_c étant la distance critique d'annihilation de ces dipôles.
$L^{(s)}$ représente le libre parcours moyen des dislocations sur le système de glissement (s). Initialement, et pour un matériau bien recristallisé, sa valeur est proche de la taille de grain, puis, quand la déformation plastique augmente, elle tend vers la taille des cellules de dislocation à température ambiante (fin du Stade 2). Ainsi, l'expression de $L^{(s)}$ est supposée comme suit :

$$\frac{1}{L^{(s)}} = \frac{1}{D^I} + \frac{\sqrt{\sum_{i\neq s}\rho^{(i)}}}{K} \tag{2.55}$$

où K est un paramètre matériau concernant le libre parcours moyen des dislocations.
La loi d'évolution des densités de dislocation permet donc de décrire les phénomènes de création puis de saturation des densités (restauration dynamique) et dépend de

la taille de grain individuelle D^I.

En introduisant l'équation 2.52 dans l'équation 2.51, on obtient le taux de déformation viscoplastique :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp} = \sum_s R_{ij}^{(s)} \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\left|\tau^{(s)}\right|}{\tau_c^{(s)}\left(\rho^{(s)}(D^I), \gamma^{(s)}, D^I\right)} \right)^n signe(\tau^{(s)}) \tag{2.56}$$

En se rappelant que l'on a $\tau^{(s)} = R_{kl}^{(s)} \sigma_{kl}$, et en identifiant le tenseur des complaisances viscoplastiques sécants à l'aide de l'expression $\varepsilon_{ij}^{vp} = m_{ijkl}(\underset{\sim}{\sigma})\sigma_{kl}$, on détermine les complaisances viscoplastiques sécantes comme suit :

$$m_{ijkl}^{vp} = \sum_s \dot{\gamma}_0 \frac{\left|\tau^{(s)}\right|^{n-1}}{\left(\tau_c^{(s)}\left(\rho^{(s)}(D^I), \gamma^{(s)}, D^I\right)\right)^n} R_{ij}^{(s)} R_{kl}^{(s)} \tag{2.57}$$

On remarque que les modules viscoplastiques présentent une double dépendance à la taille de grain, celle-ci étant présente au niveau des cissions de référence $\tau_c^{(s)}$, et au niveau des densités de dislocation, par le biais de la loi d'écrouissage définissant $\dot{\rho}^{(s)}$ dans l'équation (2.55) relative à $L^{(s)}$.
Ainsi, la taille de grain aura à la fois un effet sur la limite d'écoulement, mais aussi sur l'écrouissage macroscopique (contrairement à la modélisation isotrope [BFB07]).
L'autre dépendance concerne l'orientation cristallographique, de part le produit dyadique des tenseurs de Schmid $\underset{\sim}{R}^{(s)} \otimes \underset{\sim}{R}^{(s)}$.
Cette dépendance permet à la modélisation d'être plus réaliste car elle prend en compte simultanément les phénomènes physiques lié à l'orientation cristallographique des grains, à la fluctuation des densités de dislocation et aux longueurs internes comme la taille de grain et le libre parcours moyen.

2.2.2 Quelques résultats

Ces théories ont été appliquées au cas d'aciers IF [NBW+10] (structure cristalline cubique centrée). Des mesures EBSD ont été réalisées pour caractériser quantitativement la texture initiale en termes de textures cristallographiques et de distributions de tailles de grains. Les différents paramètres matériaux du modèle ont été identifiés à l'aide d'essais de traction. Ensuite, un volume élémentaire représentatif a été généré à partir de la microstructure réelle correspondant aux corrélations entre la taille des grains et de l'orientation cristallographique.

A titre d'exemple, afin de décorréler les rôles respectifs de la taille de grain et de l'orientation cristallographique, des VER constitués de grains ayant tous la même taille D_0 et la même orientation cristallographique g_0 ont été étudiés. Trois différentes tailles de grain D_0 (1, 10 et 50 μm) et trois différentes orientations cristallographiques g_0, conduisant à neuf VER distincts, sont étudiées.
Pour ces VER supplémentaires, les paramètres matériaux sont inchangés, exception faite pour τ_{c0} qui est arbitrairement fixé à 50 MPa pour ces VER.
Les aciers IF laminés à froid présentent deux fibres principales, les fibres α et γ. Ainsi, les trois orientations cristallographiques utilisées pour ces nouveaux VER correspondent à deux orientations sur la fibre γ (qui prédominent par rapport à la fibre α) : $\varphi_1 = 30^\circ$, $\Phi = 55^\circ$ et $\varphi_2 = 45^\circ$, $\varphi_1 = 60^\circ$, $\Phi = 55^\circ$ et $\varphi_2 = 45^\circ$ (équivalent à l'orientation $\varphi_1 = 0^\circ$, $\Phi = 55^\circ$ et $\varphi_2 = 45^\circ$), et une orientation choisie aléatoirement ($\varphi_1 = 20^\circ$, $\Phi = 20^\circ$ et $\varphi_2 = 20^\circ$).
Les effets de l'orientation cristallographique sont comparés à ceux de la taille de grain pour les réponses macroscopiques en traction présentées sur la figure 2.13.

Il apparaît que l'effet de taille de grain sur la limite d'élasticité est prédominant par rapport à l'effet de l'orientation cristallographique, alors que le taux d'écrouissage est influencé à la fois par la taille de grain et l'orientation cristallographique.
De plus, l'évolution des limites d'élasticité (cf. figure 2.14), déterminées à $E_{11} =$

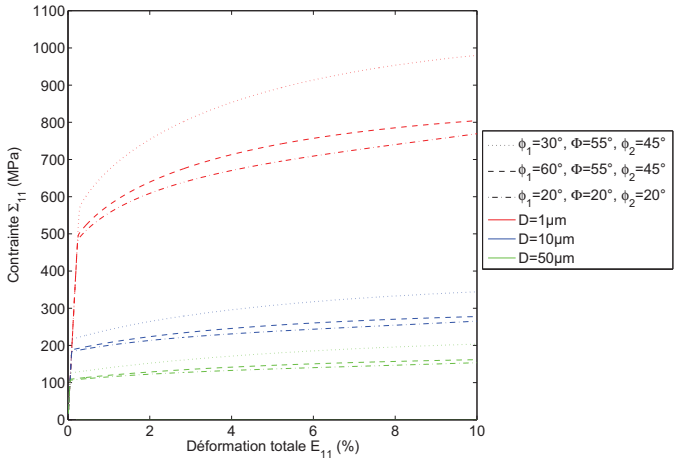

FIGURE 2.13 – Comportement macroscopique simulé en traction pour les 9 agrégats fictifs [Nic09].

$0,2\%$, met en évidence que l'effet d'orientation cristallographique produit une déviation de la loi de Hall-Petch similaire à celle produite par la dispersion de taille [BFB07], ce qui prouve que les deux effets sont couplés.

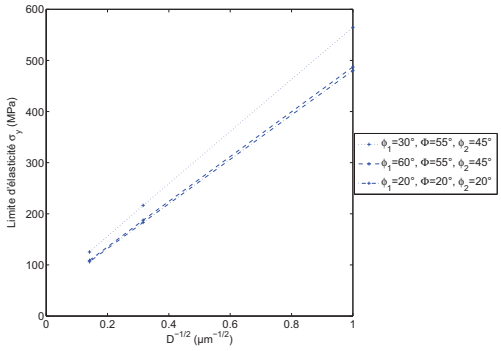

FIGURE 2.14 – Evolution de la limite d'élasticité simulée pour les trois orientations cristallographiques étudiées [Nic09].

La comparaison entre les effets de la texture cristallographique et de la dispersion de tailles de grain montre la prédominance de l'effet de la dispersion de taille de grain sur la contrainte d'écoulement et sur le comportement mécanique local.

2.3 Autres approches actuelles pour traiter les effets de longueurs internes

2.3.1 Approche à Champs Moyens à Longueurs Internes (ACMLI)

Contrairement à l'approche précédente, la description du grain est plus complexe. Il s'agit d'un modèle micromécanique simplifié basé sur une description du grain par un composite biphasé [PNB+09, Nic09].
Le cœur du grain constitue une première "phase" pour laquelle seules les dislocations statistiquement stockées (c'est-à-dire avec un vecteur de Burgers net de zéro) participent à l'écoulement plastique. La couche, où prennent place les gradients de déformation plastique et les dislocations géométriquement nécessaires (en plus des dislocations statistiquement stockées), constitue une seconde "phase" (cf. figure 2.15). L'approche proposée est conceptuellement similaire à celle proposée initialement par Mughrabi [Mug88] pour la description des cellules de dislocation, mais les outils et les applications sont ici différentes.

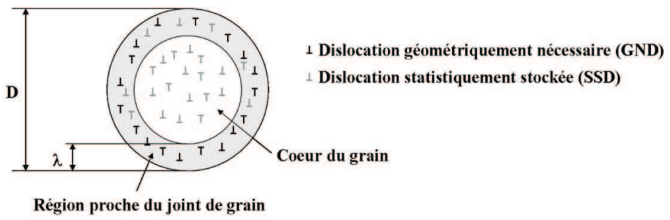

FIGURE 2.15 – Représentation du coeur du grain avec uniquement des SSD et de la couche d'épaisseur λ avec SSD + GND pour un grain de diamètre D [Nic09].

Les descriptions des champs mécaniques dans la couche dépendent des dislocations géométriquement nécessaires (GND) comme introduites par Ashby [Ash70]. Les taux de déformation plastique peuvent être schématisés en supposant un gra-

dient linéaire dans la zone proche du joint de grain (représenté en rouge sur la figure (2.16)) afin de calculer l'évolution des GND dans la couche.

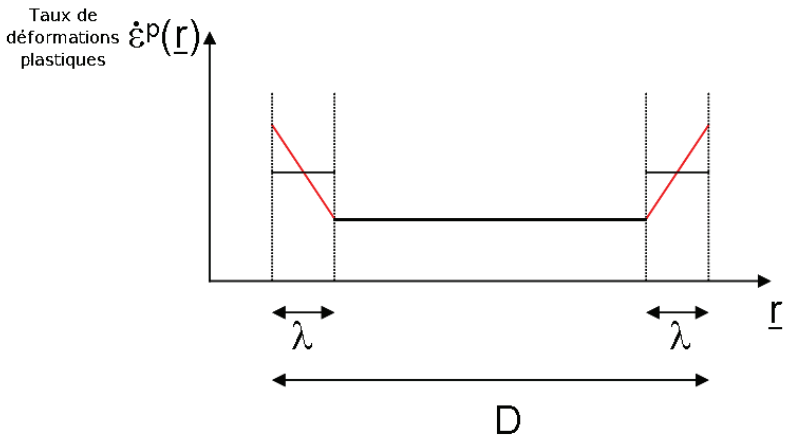

FIGURE 2.16 – Représentation d'un gradient linéaire des taux de déformation plastique dans une couche d'épaisseur λ en rouge (longueur interne induite par le gradient de déformation plastique entre les grains). Ce gradient linéaire permet de définir ρ_g au sens d'Ashby [Ash70] dans la couche. Représentation des taux de déformation plastique uniformes par morceaux sur un grain en noir (approche en champs moyens) [Nic09].

Néanmoins, pour le calcul des contraintes interphases, cette modélisation est simplifiée en supposant des déformations plastiques uniformes par morceaux dans l'approche à champs moyens, c'est-à-dire des taux de déformation uniformes dans le cœur du grain et dans la couche (représentés en noir sur la figure (2.16)).
Cette représentation permet l'utilisation d'un modèle auto-cohérent. Ce problème comme celui-présenté dans la section précédente à été modélisé à l'aide d'un modèle auto-cohérent à champs translatés en élasto-viscoplasticité (cf. annexe A). L'utilisation de ce schéma modifie la topologie du grain. Ainsi, la configuration du cœur de grain enrobé par la couche n'est pas "respectée", et est modifiée en une modélisation biphasée du grain (figure (2.17).

L'utilisation de lois de comportement élasto-viscoplastiques isotropes simplifie

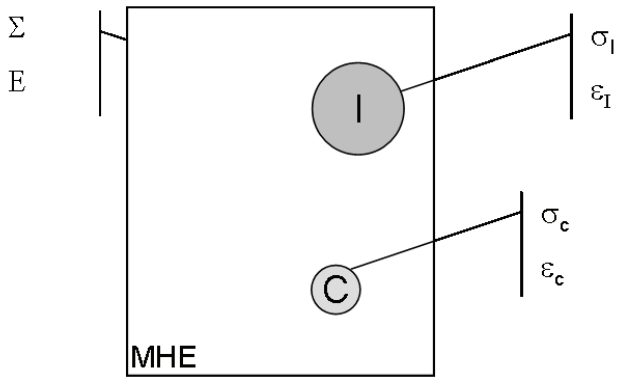

FIGURE 2.17 – Représentation du VER contenant une phase I (coeur des grains) et une phase C (couches de GND dans le milieu homogène équivalent (MHE) [Nic09] dont les propriétés effectives sont déterminées par un modèle auto-cohérent en élasto-viscoplasticité.

le modèle. Il n'est alors pas nécessaire de déterminer les GND sur chaque système de glissement. On utilise alors une viscoplasticité isotrope de type Von Mises pour décrire l'écoulement plastique dans chaque phase.

Ce modèle a été utilisé pour modéliser des effets de taille de grain dans les aciers IF (cf. [PNB+09]). Les paramètres matériaux ont été identifiés à partir de courbes de traction expérimentales réalisées sur des aciers avec plusieurs tailles de grains moyennes.

Malgré les hypothèses restrictives utilisées, le modèle reporte une bonne corrélation en terme de limite d'écoulement et taux d'écrouissage, entre les courbes expérimentales et les simulations. Par exemple, l'évolution du seuil d'écoulement (cf. figure (2.19)) met particulièrement en évidence les capacités du modèle à décrire convenablement l'écrouissage des différents aciers, notamment après 10% de déformation (figure (2.18)), domaine où le taux d'écrouissage devient indépendant

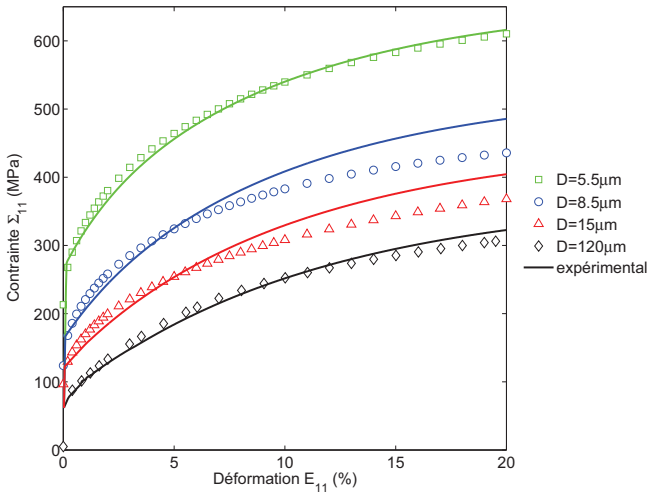

FIGURE 2.18 – Comparaisons entre les essais expérimentaux de traction simple (données fournies par ArcelorMittal) et les simulations effectuées pour une épaisseur de couche λ fixe de 0,15 μm et plusieurs tailles moyennes de grain [PNB+09]

de la taille moyenne des grains.

Pour conclure, dans ce modèle, la description continue du comportement mécanique du matériau est par morceaux en représentant le grain en deux zones distinctes : le cœur et la zone proche du joint de grain (à forte densité de dislocations géométriquement nécessaires, créant de fortes désorientations du réseau cristallin). Les schémas de transition d'échelle tels que le schéma auto-cohérent restent classiques, mais il est possible de capter les effets de taille de grain, sur le comportement mécanique, associés à cette représentation. Ce type d'approche permet d'obtenir des effets de taille de grain naturellement sur les champs mécaniques et les variables internes. Il permet aussi de décrire l'écrouissage du matériau en fonction de la taille moyenne des grains au cours de chargement et aboutit à une approximation réaliste des contraintes locales et des niveaux de densités de dislocation. Ce type d'approche ACMLI a été récemment étendue au cas des particules dures noyées dans une ma-

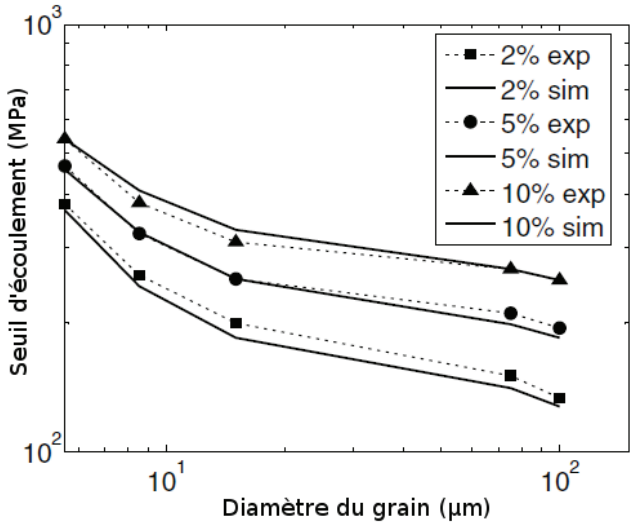

FIGURE 2.19 – Evolution du seuil d'écoulement, au cours du chargement pour des déformations de 2, 5 et 10%, en fonction de la taille de grain [PNB+09]

trice subissant un écoulement plastique par Taupin et al. [TBFB10]. Il est a noté qu'une autre approche à champs moyens intégrant les effets de dislocations géométriquement nécessaires stockées à l'interface particule matrice a été récemment développée par Bouaziz et Bréchet [BB09] dans une extension du modèle de Pilvin [Pil90].

2.3.2 Dynamique dislocations discrètes

Les modèles de dynamique des dislocations discrètes (DDD) sont apparus au début des années 90 (Kubin et al. [Kub92], Fivel et Forest [FF04a]) et font aujourd'hui l'objet de nombreuses études. L'échelle de modélisation de la DDD se trouve typiquement entre celle des modèles de type dynamique moléculaire et celle des modèles de type éléments finis traitants des milieux continus. Dans ces approches, les dislocations se déplacent dans un milieu élastique traité comme un milieu continu et celles-ci sont traitées de manière individuelle.

Le développement d'un modèle de dynamique des dislocations passe par la définition de trois composantes [FF04a] : - la discrétisation des lignes de dislocation, - la cinétique des segments de dislocation, - les conditions aux limites.

Il existe deux manières de discrétiser les lignes de dislocation (cf. figure 2.20). Le plus simple consiste à discrétiser la ligne de dislocation uniquement avec des

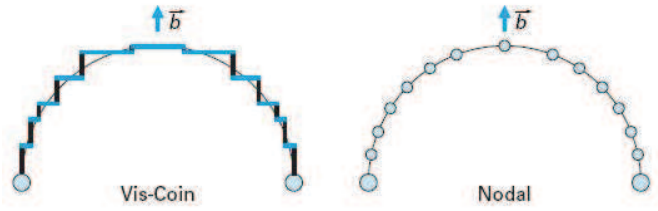

FIGURE 2.20 – Différents modèles de discrétisation des lignes de dislocation [FF04a]

segments de caractère vis ou coin. La seconde méthode, plus complexe, consiste à considérer des noeuds et non des segments. En les connectant, tous les angles possibles entre segments sont donc considérés (code nodal).

Les segments qui constituent les lignes de dislocation sont sources de contraintes internes à longue distance (évoluant en 1/r, avec r la distance entre le point de calcul et le segment considéré). Les champs de contraintes locales sont donc très hétérogènes. Le tenseur des champs de contraintes effectif de chaque segment est la somme du tenseur de contraintes appliquées (conditions aux limites) et du tenseur des contraintes internes. Le calcul du champ nécessite de calculer la contribution propre du segment généralement introduite par le terme de tension de ligne (force de Peach-Koeler).
Lorsque la contrainte effective résolue dépasse la contrainte de friction du réseau, le segment se déplace perpendiculairement à sa direction de ligne grâce à une loi donnant la vitesse du segment en fonction de la contrainte effective résolue.

Les boîtes de simulation peuvent être assimilées à des milieux finis élastiques contenant des dislocations. Les frontières de ces boîtes sont soumises à des conditions aux limites soit en force, soit en déplacement.
Lorsque l'on veut simuler un volume représentatif du cristal, la boîte de simulation n'est plus un volume fini. Des conditions de périodicité sont imposées aux frontières de la boîte de simulation (comme dans le cas des simulations atomiques [FF04a]). Le principe est que les dislocations qui s'échappent sur une face sont réintroduites par la face opposée ; les contraintes sont également périodisées en sommant la contribution de répliques de la boîte de simulation.

Contrairement à l'approche continue classique, la dynamique des dislocations permet de rendre compte de nombreux effets de longueurs internes puisqu'elle intègre naturellement la longueur caractéristique associée au vecteur de Burgers des dislocations, à la source même des effets d'échelle évoqués [FF04b].
Le principal faiblesse de ces méthodes est la taille des boîtes de simulation qui, pour des raisons essentiellement de temps de calcul, reste encore aujourd'hui trop petite.

2.3.3 Mécanique des milieux généralisés

Les méthodes d'homogénéisation classique comme celle présentée dans la section précédente permettent bien de décrire l'influence de la morphologie ou de la texture des constituants (les grains ou les phases) sur le comportement mécanique macroscopique, tandis que les milieux continus généralisés peuvent rendre compte d'effet de taille. Il s'agit d'effet de taille au sens large (effet de taille de constituant ou de structure) [For06].

La source des difficultés concernant les milieux continus classiques réside dans le fait qu'il ne comporte pas de notion de longueurs caractéristiques " physiques " dans les équations de comportement. Les milieux continus généralisés sont des modèles de milieux continus d'ordre supérieur. Ils possèdent dans leur formulation des degrés de liberté cinématiques supplémentaires comme les milieux de Cosserat [EB00].
Un milieu de Cosserat est une collection continue de particules agissant comme des corps rigides. Chaque point matériel est doté d'un degré supplémentaire de translation et de rotation décrivant son déplacement et sa rotation. Un milieu de Cosserat est donc un milieu contenant une cinématique plus riche qu'un milieu continu classique car chaque point matériel va posséder trois degrés de liberté de rotation en plus des trois degrés de liberté de translation d'un milieu continu classique, indépendants de la partie antisymétrique du gradient de déplacement. L'homogénéisation par les milieux de Cosserat apparaît comme une alternative aux approches par modèles discrets lorsque les mécanismes agissant au niveau de la microstructure ont un rôle prépondérant sur le comportement macroscopique.

L'influence des dislocations géométriquement nécessaires (GND) peut être prise en compte par l'utilisation des milieux continus généralisés (cf. figure 2.21). Ceci constitue une méthode efficace pour modéliser des effets de taille dans les cristaux [For98] Les champs mécaniques sont associés aux longueurs internes caractéristiques de la microstructure (taille de grain, taille de cellule ou les gradients de désorientation relative. (cf. chapitre 1). Le modèle de Cosserat prend en compte une longueur caractéristique qui intervient dans la détermination de la contrainte d'écrouissage. L'équilibre n'est pas seulement défini par des contraintes mais aussi par un moment de contraintes dont la partie duale est un gradient de rotation plastique de réseau avec une loi d'évolution (similaire à celle des glissements) et qui fait intervenir une longueur interne caractéristique de la microstructure. Ce type de modèle permet de bien rendre compte des effets de microstructure telle que des effets de taille de grain ou de taille de cellule intra-granulaire [Bar00]. Cependant, ces effets sont obtenus grâce à une démarche phénoménologique (calage de paramètre).

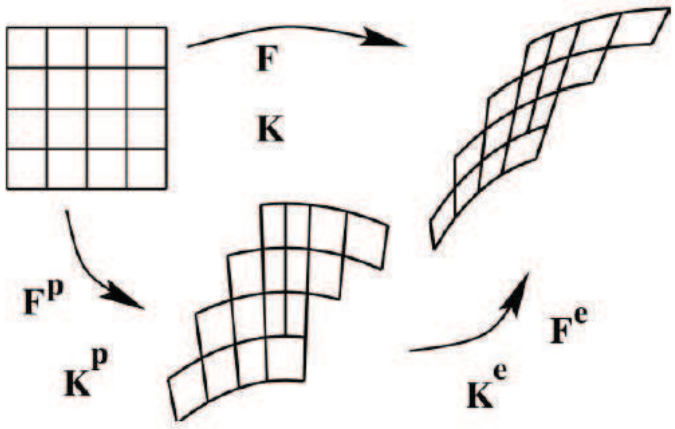

FIGURE 2.21 – Plasticité du monocristal (milieu de Cosserat) : configurations initiale, isocline et courante (F et K sont respectivement les gradients de déformation et de rotation) [For98]

2.4 Conclusions

Plusieurs types de modélisation traitent aujourd'hui des effets de taille en plasticité.

- il y a des méthodes purement discrètes telles que la dynamique des dislocations discrètes. Le problème de ce type de modélisation est que les volumes et les déformations modélisés par ces méthodes restent encore limités, étant donné les temps de calculs importants requis,
- Il y a des méthodes de type phénoménologique telles que les milieux continus généralisés (comme les milieux de Cosserat). Elles sont basées sur l'introduction " arbitraire " d'un gradient de déformation ou de rotation. Ces méthodes ne prennent pas en compte explicitement les mécanismes physiques proprement dits.

Dans le but de déterminer les effets propres des longueurs internes microstructurales et ainsi d'améliorer les méthodes de transition d'échelles actuelles, il s'avère nécessaire de développer une approche intermédiaire qui tient compte des incom-

patibilités du réseau cristallin dues à la présence de distributions de dislocations discrètes, c'est-à-dire un modèle prenant en compte la nature physique des événements discrets intra-granulaires. Cette approche consiste à déterminer le champ de contraintes internes et l'énergie élastique associée à ces incompatibilités de manière statique. Le but est par la suite de développer des modèles polycristallins rapidement transférables et exploitables par l'industrie.

Chapitre 3

Modélisation micromécanique statique discrète des défauts

3.1 Introduction

Dans le but d'obtenir rapidement des résultats concrets avec une description réaliste des mécanismes physiques pour des applications industrielles, les principales études ont été réalisées dans le cadre de la mécanique des milieux continus à l'échelle des grains et des phases. Les phénomènes intra-granulaires tels que ceux présentés dans la section 1.1.2. ont été le plus souvent décrits de manière simplifiée. Malgré leurs intérêts scientifiques et technologiques, certains phénomènes collectifs des défauts ont donc été ignorés. Dans les théories micromécaniques des défauts dites " à champs moyens ", les champs de déformation plastique sont supposés homogènes à l'intérieur des grains (cf. figure 3.1) et sont pris égaux à leur moyenne volumique sur le grain. On parle alors de micro-homogénéisation à l'échelle du grain. Ces approches " à champs moyens " sont incarnées par le problème de l'inclusion plastique d'Eshelby [Esh57] qui est à la base du modèle auto-cohérent [Krö61, BZ79]. Dans ce

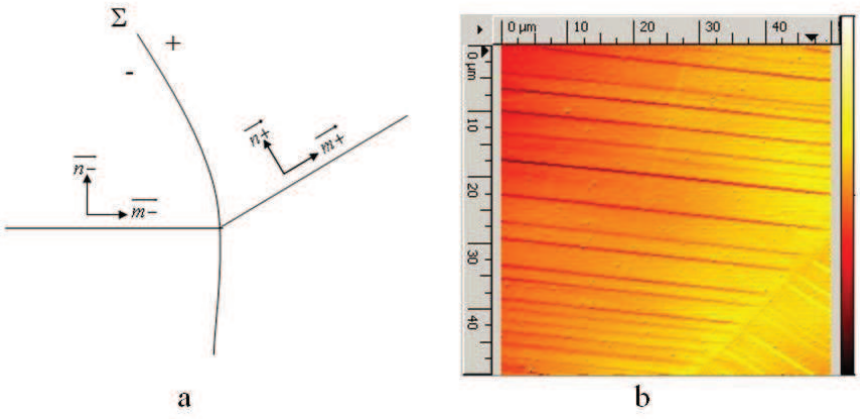

FIGURE 3.1 – a. Modélisation par une approche à champ moyen de la fluctuation du champ plastique à l'interface entre deux grains ; b. Micrographie AFM d'un joint de grain (poly-cristal de laiton après une déformation plastique macroscopique de 1.5%)

chapitre, on introduit tout d'abord les notions de glissement plastique moyen et de " quasi-dislocations "‘ inhérentes aux approches à champs moyens. Ensuite, dans un premier volet, on rappelle les équations fondamentales de la mécanique des milieux continus pour un milieu élastique linéaire avec défauts. On appliquera tout d'abord la théorie élasto-statique au cas de défauts plastiques uniformes dans une inclusion de forme ellipsoidale noyée dans un milieu infini élastique homogène : il s'agit du problème classique d'Eshelby dont les solutions sont brièvement rappelées.

L'amélioration des techniques de caractérisation (EBSD, MET, AFM) permet actuellement une meilleure compréhension des mécanismes plastiques intra-granulaires. Ces techniques permettent de déterminer de manière plus précise les champs de distorsion plastique $\underset{\sim}{\beta}^p$. Dés lors, la modélisation de ces phénomènes apparaît comme essentielle pour améliorer la prédiction des modèles. Contrairement aux approches à champs moyens précédemment introduits, les hétérogénéités plastiques intra-granulaires (cf. figure 3.1b) peuvent être modélisées de manière plus réaliste au travers de dis-

tributions discrètes de boucles de " super-dislocation " contraintes par les joints de grains. La déformation plastique n'est alors plus considérée homogène et uniforme par morceau comme pour les approches à champs moyens. Ceci constitue une avancée forte, notamment par rapport aux modélisations classiques basées sur l'inclusion d'Eshelby, car cela permet de capter des effets de longueurs internes de la microstructure sur le comportement mécanique. On présente tout d'abord la description mathématique des champs plastiques décrivant des distributions discrètes spatiales de boucles de dislocation. Les problèmes de champs sont résolus par la méthode des transformées de Fourier [BBR08] qui est décrite dans ce chapitre. Cette technique a été initialement introduite par Mura [Mur87] dans le cas de matériaux sujets à des déformations libres de contraines (i.e. " eigenstrains "). Dans un premier temps, des situations statiques de glissement simple sont étudiées, où les boucles de dislocation sont contraintes par des joints de grain sphériques. Dans ce chapitre, l'espacement entre les boucles sera supposé constant (distributions discrètes périodiques de boucles de dislocation). Cet espacement sera aussi pris non constant dans le chapitre 4 afin de respecter au mieux les mesures AFM. Contrairement aux modèle d'Eshelby et al. introduit en 1951 [EFN51], cette étude s'intéresse à l'impact d'une distribution de boucles discrètes tapissant un grain sphérique (cf. 3.2(a)) sur les champs élastiques et l'énergie élastique. Le modèle d'Eshelby et al. [EFN51] modélise un empilement de dislocations rectilignes contraintes par un joint de grain plan (cf. figure 3.2(b)) mais ne permet pas de capter les effets sur les champs élastiques dus à la forme et la taille des grains.

Les modélisations présentées dans ce chapitre sont des formulations statiques. Ainsi, les forces d'inertie sont négligées, ce qui exclut les phénomènes dynamiques. Cette formulation ne cherche donc pas à décrire l'évolution des évènements discrets plastiques au cours de la déformation, notamment le transport convectif des dislocations. On suppose également l'absence de force de volume. Dans ces conditions, l'équation d'équilibre des contraintes de Cauchy s'écrit :

$$\sigma_{ij,i} = 0 \text{ avec } \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \tag{3.1}$$

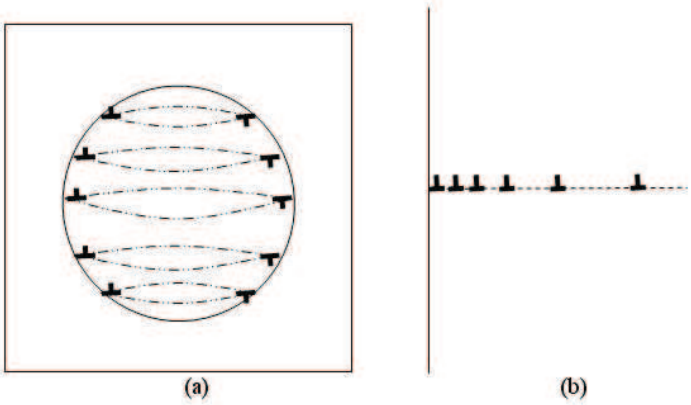

FIGURE 3.2 – (a) Distribution de boucles de dislocation contraintes par un joint de grain sphérique ; (b) Empilement de dislocations rectilignes contraintes par un joint de grain plan introduit par Eshelby et al. [EFN51].

La formulation statique présentée permet l'évaluation des contraintes internes et le calcul des micro-textures liées aux incompatibilités générées par un état de déformation plastique donné.

Dans ce chapitre, on démontre que des contributions nouvelles sur les champs de contraintes internes ainsi que sur l'énergie élastique sont captées par rapport au modèle classique d'Eshelby lorsque la nature discrète du glissement plastique est prise en compte. Cette modélisation discrète des défauts est une nouvelle manière d'introduire des longueurs internes induites par la déformation plastique dans les modèles micro-macro, et de capter ainsi de nouveaux effets non décrits par les approches en champs moyens (cf. Chapitre 2). Même si l'approche reste statique, ceci constitue aussi une voie alternative aux simulations de dynamique des dislocations discrètes [Kub92, Ver98, Sch99, KZ02] qui sont très consommatrices en temps de calcul pour les polycristaux.

3.2 Equations de champs et thermodynamique

3.2.1 Equations de champs

Sur la frontière ∂V de V (cf. figure B.1), on impose un vecteur déplacement $\underline{u}^d$ (condition de Dirichlet) (cf. figure B.1) :

$$u_i^d = \beta_{ji}^0 x_j = (E_{ij} + \Omega_{ij})\, x_j \text{ sur } \partial V, \tag{3.2}$$

où $\underset{\sim}{\beta}^0$, $\underset{\sim}{E}$, $\underset{\sim}{\Omega}$ sont respectivement les distorsions, déformations, rotations imposées sur ∂V.

On rappelle ici les équations de champs :
- l'équation d'équilibre pour le tenseur des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\sigma}$:

$$\sigma_{ij,i} = 0 \text{ avec } \sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \tag{3.3}$$

- la relation de compatibilité pour les distorsions totales $\underset{\sim}{\beta}$ ($\underline{u}$ est le champ de déplacements) :

$$\beta_{ji} = u_{i,j}. \tag{3.4}$$

Les distorsions totales peuvent se décomposer en deux parties :

$$\beta_{ji} = \epsilon_{ij} + \omega_{ij}, \tag{3.5}$$

où $\underset{\sim}{\epsilon}$ et $\underset{\sim}{\omega}$ représentent respectivement les déformations et les rotations totales.
- les distorsions totales, dans l'hypothèse des petites perturbations, s'écrivent comme la somme des distorsions élastiques $\underset{\sim}{\beta}^e$ et des distorsions plastiques $\underset{\sim}{\beta}^p$:

$$\beta_{ji} = \beta_{ji}^e + \beta_{ji}^p. \tag{3.6}$$

- la loi de comportement élastique linéaire ou loi de Hooke (l'élasticité est supposée

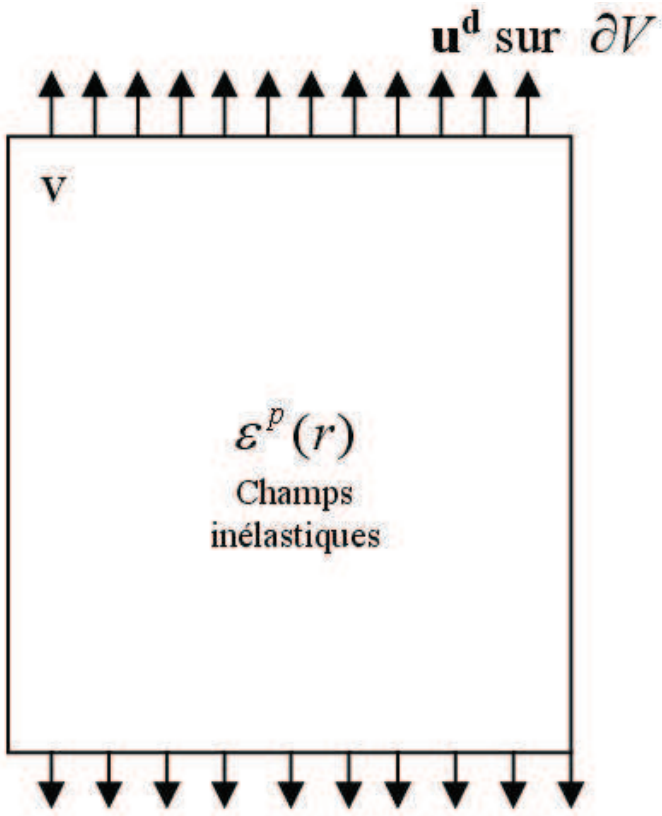

FIGURE 3.3 – Milieu continu infini V élastique homogène de modules $\underset{\approx}{C}$ avec des déformations plastiques (déformations libres) $\underset{\sim}{\epsilon^p}$ inhomogènes et des déplacements imposés $\underline{u}^d$ à la frontière ∂V du volume.

homogène) :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon^e_{kl}, \tag{3.7}$$

où $\underset{\approx}{C}$ représente les modules d'élasticité homogènes, et, $\underset{\sim}{\epsilon}^e$ sont les déformations élastiques.

Compte tenu des propriétés de symétrie du tenseur des modules d'élasticité $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}$, l'équation (3.7) peut aussi s'écrire :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\beta^e_{lk}, \tag{3.8}$$

et d'aprés l'équation (3.6) :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(u_{l,k} - \beta^p_{lk}\right), \tag{3.9}$$

ou encore :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(u_{l,k} - \epsilon^p_{kl}\right). \tag{3.10}$$

Soit compte tenu de l'équation (3.3), on obtient l'équation de Navier :

$$C_{ijkl}\left(u_{l,k} - \epsilon^p_{kl}\right)_{,i} = C_{ijkl}u_{l,ki} - C_{ijkl}\epsilon^p_{kl,i} = 0. \tag{3.11}$$

Ceci constitue un système d'équations aux dérivées partielles à résoudre pour déterminer $\underline{u}$ en tout point. A partir de là, les distorsions totales $\underset{\sim}{\beta}(\underline{x})$ et les contraintes $\underset{\sim}{\sigma}(\underline{x})$ sont calculées. La méthode de résolution basée sur les fonctions de Green $\underset{\sim}{G}$ associées au milieu infini homogène de modules élastiques $\underset{\approx}{C}$ est décrite dans l'Annexe B. Les distorsions totales $\underset{\sim}{\beta}(\underline{x})$ s'écrivent :

$$\beta_{ji}(\underline{x}) = \beta^0_{ji} - \int_V G_{ki,lj}\left(\underline{x} - \underline{x'}\right) C_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x'})dV'. \tag{3.12}$$

Les déformations totales $\underset{\sim}{\epsilon}(\underline{x})$ et les rotations totales $\underset{\sim}{\omega}(\underline{x})$ se déduisent de l'équation précédente :

$$\begin{aligned}
\epsilon_{ij}(\underline{x}) &= E_{ij} + \int_V \Gamma_{ijkl}\left(\underline{x} - \underline{x'}\right) C_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x'})dV', \\
\omega_{ij}(\underline{x}) &= \Omega_{ij} + \int_V {}^A\Gamma_{ijkl}\left(\underline{x} - \underline{x'}\right) C_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x'})dV',
\end{aligned} \tag{3.13}$$

où $\underset{\approx}{\Gamma}$ et $\underset{\approx}{{}^A\Gamma}$ sont les tenseurs de Green modifiés symétriques et antisymétriques de Kröner [Krö89] définis dans l'Annexe B.

3.2.2 Energie libre

L'énergie libre d'Helmholtz ϕ par unité de volume s'écrit :

$$\phi\left(\underset{\sim}{E}, \underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})\right) = \frac{1}{V}\int_V w_{el}(\underline{x})\, dV, \tag{3.14}$$

où $w_{el}(\underline{x}) = \frac{1}{2}\underset{\sim}{\sigma}(\underline{x}) : \underset{\sim}{\epsilon}^e(\underline{x})$ est la densité volumique d'énergie élastique. Il est démontré dans l'Annexe C, que ϕ prend la forme générale suivante :

$$\phi\left(\underset{\sim}{E}, \underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})\right) = \frac{1}{2}\left(\underset{\sim}{E} - \underset{\sim}{E}^p\right) : \underset{\approx}{C} : \left(\underset{\sim}{E} - \underset{\sim}{E}^p\right) - \frac{1}{2V}\int_V \underset{\sim}{\tau}(\underline{x}) : \underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})\, dV, \tag{3.15}$$

où $\underset{\sim}{E}^p = \frac{1}{V}\int_V \underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x}) dV$ est la déformation plastique moyenne sur le volume V. Le dernier terme de ϕ contenant les contraintes internes $\underset{\sim}{\tau}(\underline{x})$ correspond à l'énergie élastique interne par unité de volume que l'on note ϕ_{int}. L'énergie élastique interne $\Phi_{int} = V.\phi_{int}$ peut donc s'écrire :

$$\Phi_{int} = -\frac{1}{2}\int_V \underset{\sim}{\tau}(\underline{x}) : \underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})\, dV. \tag{3.16}$$

Les contraintes internes $\underset{\sim}{\tau}(\underline{x})$ sont alors définies ainsi :

$$\underset{\sim}{\tau}(\underline{x}) = \underset{\sim}{\sigma}(\underline{x}) - \underset{\sim}{\Sigma}, \tag{3.17}$$

où $\underset{\sim}{\Sigma}$ sont les contraintes macroscopiques définies par $\underset{\sim}{\Sigma} = \frac{1}{V}\int_V \underset{\sim}{\sigma}(\underline{x})\, dV$.

3.2.3 Incompatibilités

Les distorsions plastiques $\underset{\sim}{\beta}^p$ sont des distorsions libres de contraintes (" Eigen-distortions " ou " Stress-free distortions ") comme celles introduites par Eshelby [Esh57]. Cela signifie qu'elles ne seraient pas accompagnées de contraintes si elle régnaient dans un élément de volume isolé. Les déformations plastiques $\underset{\sim}{\epsilon}^p$ sont définies par :

$$\epsilon^p_{ij} = \frac{1}{2}\left(\beta^p_{ji} + \beta^p_{ij}\right). \tag{3.18}$$

Ces déformations plastiques sont incompatibles et les déformations élastiques $\underset{\sim}{\epsilon^e}$ sont alors nécessaires pour satisfaire la relation de compatibilité (équation (3.4)) :

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(u_{i,j} + u_{j,i}\right) = \epsilon^e_{ij} + \epsilon^p_{ij}. \tag{3.19}$$

Les rotations plastiques $\underset{\sim}{\omega^p}$ sont définies par :

$$\omega^p_{ij} = \frac{1}{2}\left(\beta^p_{ji} - \beta^p_{ij}\right). \tag{3.20}$$

Au vu de la complexité de l'état disloqué d'un cristal (empilements, cellules, enchevêtrements de dislocations...), l'analyse cinématique adoptée dans le cadre de la plasticité cristalline à champs moyens s'est tout d'abord contentée d'une description grossière, fondée sur la notion de glissement plastique cristallographique moyen, qui recouvre de manière très globale la réalité microstructurale des distributions de dislocations et de leur organisation spatiale. La distorsion plastique $\underset{\sim}{\beta^p}$ est alors constituée d'une variable phénoménologique décrivant en moyenne l'activité plastique dans le grain (appelée " glissement plastique moyen "). Dans un premier temps, on présente brièvement dans la section 3.3 ce type d'approches.
Cependant, on sait que les champs plastiques résultent de mouvements collectifs de dislocations sur des plans de glissement cristallographiques. Les études expérimentales (cf. chapitre 1) montrent que les champs plastiques sont très hétérogènes et discrets. Le glissement est en fait constitué du mouvement d'ensembles de distributions discrètes de dislocations dans des zones appelées bandes de glissement. Dans une seconde partie, on se propose de modéliser, au travers d'une approche micromécanique, les événements discrets de la plasticité modélisés par des distributions discrètes de boucles de dislocation contraintes par les joints de grain supposés de forme sphérique. Les distorsions plastiques $\underset{\sim}{\beta^p}$ sont alors formées d'une somme discrète de discontinuités physiques qui seront décrites dans la section 3.4.

3.3 Approche à champs moyens

3.3.1 Théorie continue des défauts

De nombreux mécanismes physiques peuvent être responsables de la déformation plastique des métaux : la création, le mouvement et l'annihilation de dislocations. A l'échelle du monocristal ou d'un grain de poly-cristal (dont la taille de grain est supérieure au micron, ce qui veut dire que l'échelle associée au grain est très grande par rapport aux longueurs internes associées aux mécanismes physiques de déformation plastique), l'écoulement plastique résulte de mouvements collectifs de dislocations sur des plans de glissement cristallographiques bien définis [Neu83] (généralement les plans atomiques les plus denses). La complexité de l'état disloqué d'un cristal (empilement, cellule, enchevêtrements de dislocations) rend la description de la déformation plastique extrêmement complexe.
Comme souligné précédemment, la résolution des problèmes d'inclusion entraîne des simplifications fortes. Les champs plastiques sont considérés uniformes par morceaux. Par conséquent, l'analyse cinématique adoptée dans le cadre de la plasticité cristalline se contente d'une description grossière fondée sur la notion de glissement plastique moyen d'origine cristallographique. Cette description recouvre de manière globale la réalité microstructurale des distributions de dislocations [BZ00].

Boucle de dislocation individuelle

Considérons une boucle de dislocation de surface de coupure S et caractérisée par la ligne L (cf. figure 3.4). La convention de signe choisie est la même que celle utilisée par Kröner [Krö58]. La normale à la surface notée $\underline{n}$ et le vecteur ligne $\underline{t}$ tangent à L définissent la boucle de dislocation. Le déplacement est construit par le déplacement de la partie supérieure de la surface S (notée S^+ avec la normale $\underline{n}^+ = \underline{n}$) d'un vecteur de Burgers $\underline{b}$ par rapport à la partie inférieure de la surface S (notée S^- avec

la normale $\underline{n}^- = \underline{n}$), de les recoller ensemble et ensuite de supprimer les contraintes externes appliquées pour créer ce déplacement. L'expression du champ de distorsion

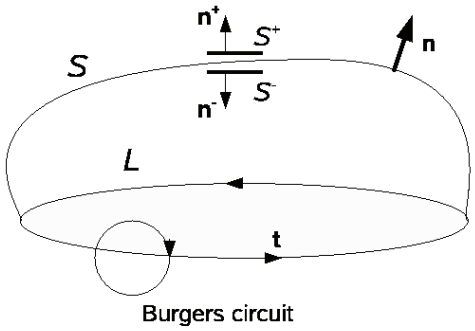

FIGURE 3.4 – Boucle de dislocation de surface de coupure S [Mur87, BBR08].

plastique $\underset{\sim}{\beta}^p(\underline{x})$ induit par la boucle de dislocation L décrite en figure 3.4 s'écrit [Kos79] :

$$\beta^p_{ji}(\underline{x}) = \mathrm{b}_i \mathrm{n}_j \delta(\underline{S}) \tag{3.21}$$

où $\delta(\underline{S})$ est une notation abrégée de la function de Dirac dans la direction $\underline{n}$. Cette fonction est infinie lorsque $\underline{x}$ est sur la surface S et sinon égale à zéro :

$$\delta(\underline{S}) \equiv \int_S \delta(\underline{x} - \underline{x}')\, dS(\underline{x}') \tag{3.22}$$

Le formalisme utilisé pour décrire une dislocation individuelle peut être généralisé à un ensemble de dislocations en introduisant le tenseur densité de dislocation de Nye [Nye53]. On parle alors de théorie continue des dislocations.

Ensemble de dislocations

Considérons un cristal (monocristal ou grain d'un polycristal) possédant N systèmes de glissement définis chacun par la normale unitaire au plan de glissement $\underline{n}^{(s)}$ et à la direction unitaire de glissement $\underline{m}^{(s)}$. Les vecteurs $\underline{m}^{(s)}$ sont colinéaires au vecteur $\underline{b}^{(s)} = b\underline{m}^{(s)}$ où b est de module du vecteur de Burgers des dislocations

susceptible de glisser sur ces systèmes.

L'expression de la distorsion plastique pour une boucle de dislocation individuelle (cf. équation 3.21) peut être étendue à un ensemble de dislocations se trouvant sur différents systèmes de glissement s. Prenons le cas d'un système (s) :

$$\beta^p_{ji}(\underline{x}) = \mathrm{b}_i^{(s)} \mathrm{n}_j^{(s)} \delta(\underline{S}^{(s)}), \tag{3.23}$$

Si plusieurs dislocations de même vecteur de Burgers $\mathbf{b}^{(s)}$ et de même vecteur normal au plan de glissement $\underline{m}^{(s)}$ sont présentes dans un volume V (volume du cristal), alors la valeur moyenne de $\underset{\sim}{\beta}^p$ s'écrira :

$$\beta^p_{ji} = b \mathrm{m}_i^{(s)} \mathrm{n}_j^{(s)} \frac{1}{V} \int_V \delta(\underline{S}^{(s)})\, dV. \tag{3.24}$$

On aboutit à :

$$\beta^{\mathrm{p}}_{ji} = \gamma^{(s)} \mathrm{m}_i^{(s)} \mathrm{n}_j^{(s)}, \tag{3.25}$$

où $\gamma^{(s)}$ est le glissement plastique moyen sur le système de glissement s ainsi défini par :

$$\gamma^{(s)} = \frac{b}{V} \int_V \delta(\underline{S}^{(s)})\, dV. \tag{3.26}$$

En comptabilisant dans le volume toutes les dislocations sur les différents systèmes s, on trouve par superposition :

$$\beta^p_{ji} = \sum_{s=1}^{N} \gamma^{(s)} \mathrm{m}_i^{(s)} \mathrm{n}_j^{(s)} \tag{3.27}$$

La compatibilité de la transformation est assurée uniquement par des déformations élastiques qui engendrent des contraintes internes et par des rotations de réseau qui, dans les poly-cristaux, sont à l'origine de la formation des textures cristallographiques.

L'opération de moyenne effectuée (cf. figure 3.5) pour calculer la déformation plastique d'un ensemble de dislocations considère la déformation plastique comme homogène à l'intérieur d'un volume du cristal. On perd par conséquent beaucoup

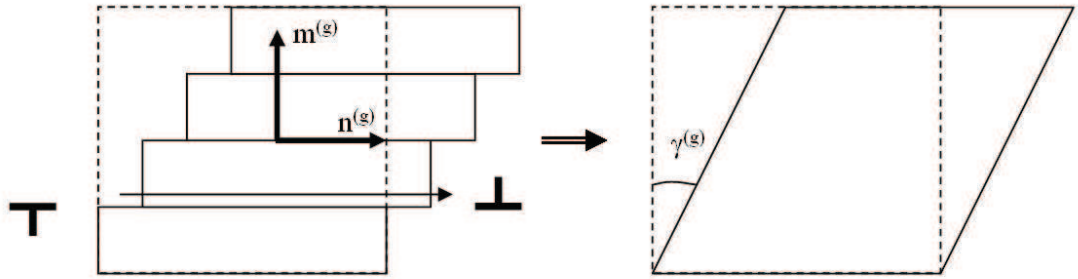

FIGURE 3.5 – Glissement plastique moyen sur un volume de cristal.

d'informations, notamment toutes les contributions dues à la nature discrète des dislocations et notamment les interactions à courte distance entre les défauts.

Quasidislocations

A partir de la théorie continue des dislocations de Kröner [Krö58], on peut associer à tout champ de distorsion plastique $\underset{\sim}{\beta^p}$, un tenseur de densité de dislocations $\underset{\sim}{\alpha}$ défini par :

$$\underset{\sim}{\alpha} = -Rot\underset{\sim}{\beta^p}, \tag{3.28}$$

soit en notation individuelle :

$$\alpha_{ij} = -\in_{ilm} \beta^{\mathrm{p}}_{mj,l}, \tag{3.29}$$

où $\in_{ilm}$ est l'opérateur de Levi-Civita. Au travers de l'équation (3.28), on voit que $\underset{\sim}{\alpha}$ peut être défini quelquesoit le contenu physique ou non des défauts. Kröner [Krö58] introduit alors la notion de quasidislocation puisque $\underset{\sim}{\alpha}$ peut être associé au rotationnel de n'importe quelle distorsion libre (thermique etc.).

On considère par exemple le cas d'un grain isolé noté I soumis à une distorsion plastique uniforme $\underset{\sim}{\beta^{pI}}$. Ce grain est inclus dans une matrice M infinie soumise à une distorsion plastique uniforme $\underset{\sim}{\beta^{pM}}$. On a donc à l'interface grain/matrice un saut de

distorsion plastique noté $[\underset{\sim}{\beta^p}]$:

$$[\underset{\sim}{\beta^p}] = \underset{\sim}{\beta^{pI}} - \underset{\sim}{\beta^{pM}}. \tag{3.30}$$

Ce saut de distorsion engendre une densité de quasi-dislocations superficielles uniformes (distribution singulière) :

$$\alpha_{ij}^S = \in_{ilm} [\beta_{mj}^p] n_l, \tag{3.31}$$

où n_l est le vecteur normal unitaire à la surface du grain et dirigé dans la direction de la matrice.

Dans les approches à champs moyens basées sur le problème de l'inclusion plastique d'Eshelby, $\underset{\sim}{\alpha}(\underline{x})$ est non-nul et uniforme uniquement à l'interface entre le grain et la matrice. Ces densités de quasi-dislocation sont superficielles et ne correspondent donc pas aux dislocations réelles [Krö58, BBR08].

3.3.2 Application : solutions du problème classique d'inclusion d'Eshelby

Le problème de l'inclusion plastique d'Eshelby représente une approche à champs moyens où la plasticité est supposée uniforme par morceaux (cf. figure 3.6). Cette simplification occulte les phénomènes discrets intra-granulaires, tels que les lignes et bandes de glissement.

L'équation intégrale développée dans l'annexe B et dont le résultat en élasticité homogène est reporté dans la section (3.1.1.) concerne le cas d'un milieu infini à hétérogénéités plastiques quelconques $\underset{\sim}{\beta^p}(\underline{x})$. Dans la pratique, on suppose les propriétés uniformes par morceaux. Les problèmes d'inclusions en sont un exemple et sont d'un intérêt très général en mécanique des matériaux [BZ95] car ils peuvent correspondre à des sources élémentaires d'incompatibilité à plusieurs échelles (grain, phase, précipité, domaine de transformation de phase). Ces problèmes d'inclusions

sont à la base des modèles auto-cohérents [Esh57, Krö61, Hil65, Hut76, BZ79]. De plus, si la résolution de l'équation intégrale est généralement complexe, celle des problèmes élémentaires d'inclusions est beaucoup plus simple car elle s'appuie sur la propriété d'uniformité du tenseur d'Eshelby [Esh57] dans une inclusion de forme ellipsoidale.

Par exemple, on reprend les équations (3.13) et on les spécifie au cas d'une dé-

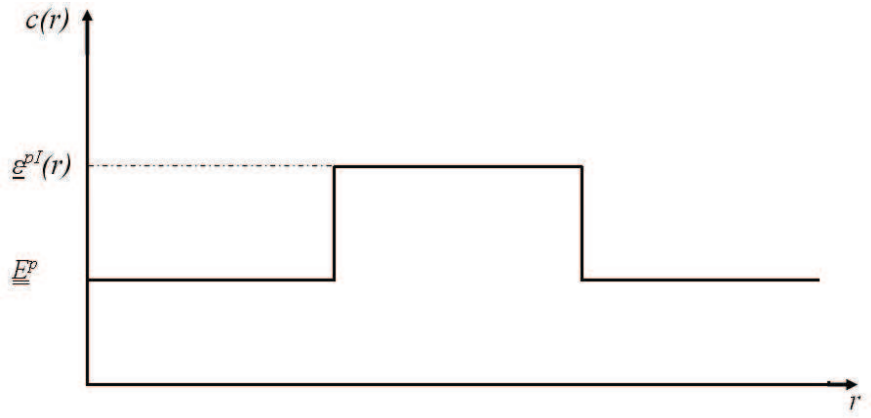

FIGURE 3.6 – Champs plastiques uniformes par morceaux

formation plastique homogène restreinte à l'inclusion V^I notée $\underset{\sim}{\epsilon}^{pI}$. La matrice est supposée infinie élastique ($E^p_{ij} = 0$) de modules homogènes $\underset{\approx}{C}^0$ (cf. figure 3.6). Les intégrales volumiques des équations (3.13) ne portent plus que sur V^I soit :

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}(\underline{x}) &= E_{ij} + \int_{V^I} \Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\epsilon^{pI}_{mn}dV', \\ \omega_{ij}(\underline{x}) &= \Omega_{ij} + \int_{V^I} {}^A\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\epsilon^{pI}_{mn}dV', \end{aligned} \tag{3.32}$$

$\underset{\approx}{\Gamma}$ et $\underset{\approx}{{}^A\Gamma}$ sont associés à $\underset{\approx}{C}^0$.

Soit $\underset{\sim}{\epsilon}^I$ et $\underset{\sim}{\omega}^I$ les champs moyens de $\underset{\sim}{\epsilon}(\underline{x})$ et de $\underset{\sim}{\omega}(\underline{x})$ sur V^I :

$$\begin{aligned}
\epsilon_{ij}^I &= E_{ij} + \frac{1}{V^I} \int_{V^I} \left\{ \int_{V^I} \Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') dV' \right\} dV C_{klmn}^0 \epsilon_{mn}^{pI}, \\
\omega_{ij}^I &= \Omega_{ij} + \frac{1}{V^I} \int_{V^I} \left\{ \int_{V^I} {}^A\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') dV' \right\} dV C_{klmn}^0 \epsilon_{mn}^{pI},
\end{aligned} \tag{3.33}$$

ou de manière formelle :

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{\epsilon}^I &= \underset{\sim}{E} + \underset{\approx}{T}^{II} : \underset{\approx}{C}^0 : \underset{\sim}{\epsilon}^{pI}, \\
\underset{\sim}{\omega}^I &= \underset{\sim}{\Omega} + \underset{\approx}{Q}^{II} : \underset{\approx}{C}^0 : \underset{\sim}{\epsilon}^{pI},
\end{aligned} \tag{3.34}$$

où $T_{ijkl}^{II} = \frac{1}{V^I} \int_{V^I} \left\{ \int_{V^I} \Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') dV' \right\} dV$ et $Q_{ijkl}^{II} = \frac{1}{V^I} \int_{V^I} \left\{ \int_{V^I} {}^A\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') dV' \right\} dV$. Le tenseur $\underset{\approx}{T}^{II} : \underset{\approx}{C}^0$ n'est autre que le tenseur d'Eshelby $\underset{\approx}{S}^{Ei}$ pour les points intérieurs à l'inclusion. Les contraintes $\underset{\sim}{\sigma}^I$ dans l'inclusion sont obtenues en appliquant la loi de Hooke :

$$\underset{\sim}{\sigma}^I = \underset{\sim}{\Sigma} + \underset{\approx}{C}^0 : \left(\underset{\approx}{S}^{Ei} - \underset{\approx}{I} \right) : \underset{\sim}{\epsilon}^{pI}, \tag{3.35}$$

où $\underset{\sim}{\Sigma}$ sont les contraintes macroscopiques, $\underset{\approx}{I}$ est le tenseur unité d'ordre 4 défini en notation indicielle par $I_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$.

Dans le cas particulier d'une inclusion sphérique de rayon R et en supposant une élasticité isotrope dont les modules élastiques $\underset{\approx}{C}^0$ s'écrivent en fonction du module de cisaillement μ et du coefficient de Poisson ν :

$$C_{ijkl}^0 = \frac{2\mu\nu}{1-2\nu} \delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}), \tag{3.36}$$

le tenseur d'Eshelby pour les points intérieurs $\underset{\approx}{S}^{Ei}$ dépend seulement du coefficient de Poisson [Esh57, Mur87]. Son expression indicielle s'écrit :

$$S_{ijkl}^{Ei} = \frac{5\nu - 1}{15(1-\nu)} \delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{4 - 5\nu}{15(1-\nu)} \left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} \right). \tag{3.37}$$

3.3.2.1 Application : grain déformé par glissement simple

En utilisant les résultats présédents, on considère un grain sphérique de rayon R noyé dans une matrice infinie V sans contrainte macroscopique imposée à sa frontière ∂V. Seul un système de glissement est activé dans le grain. Celui-ci est caractérisé par le vecteur unité normal au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$ et par le vecteur unité $\underline{m} = (1, 0, 0)$ parallèle à la direction de glissement. La seule composante non-nulle de $\underset{\sim}{\epsilon}^{pI}$ est alors la composante en cisaillement $\epsilon^p_{13}(\underline{x}) = \epsilon^p_{31}(\underline{x}) = \frac{1}{2}\beta^p_{31}(\underline{x})$ définie par :

$$\epsilon^p_{13}(\underline{x}) = \begin{cases} \epsilon^0_{13} \text{ si } r \leq R \\ 0 \text{ si } r > R, \end{cases} \tag{3.38}$$

où $\epsilon^0_{13} = 1/2\gamma$ et $r = (\underline{x}.\underline{x})^{1/2}$. Dans cette approche à champ moyen, γ constitue un cisaillement plastique uniforme produit par une distribution continue de boucles de glissement. Celles-ci sont uniformément distribuées dans le grain.
Concernant les contraintes internes dans le grain, $\tau^0_{13} = \tau^0_{31}$ sont les seules composantes non-nulles. Elles sont donc uniformes et dépendent de ϵ^0_{13} et des constantes élastiques en appliquant directement les équations (5.12), (3.37) et (3.17) :

$$\tau^0_{13} = -2\mu \frac{7 - 5\nu}{15(1 - \nu)} \epsilon^0_{13}. \tag{3.39}$$

A l'extérieur du grain, les contraintes internes ne sont pas uniformes et peuvent être calculées à l'aide du tenseur d'Eshelby des points extérieurs [Esh59, JS99].

Pour cette application, l'énergie élastique interne $\Phi_{int} = -\frac{1}{2}\int_V \underset{\sim}{\tau}(\underline{x}) : \underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})\, dV = -\frac{V^I}{2}\underset{\sim}{\tau}^I : \underset{\sim}{\epsilon}^{pI}$ s'écrit alors :

$$\Phi^0_{int} = 8\mu\pi R^3 \frac{7 - 5\nu}{45(1 - \nu)} \left(\epsilon^0_{13}\right)^2. \tag{3.40}$$

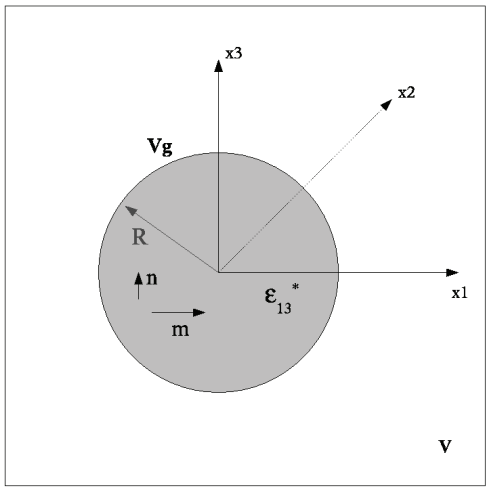

FIGURE 3.7 – Grain sphérique de rayon R avec une déformation plastique homogène ϵ^0_{13}. Le grain est noyé dans une matrice élastique infinie.

3.3.3 Bilan sur les approches à champs moyens

Les approches à champ moyen impliquent une (micro)-homogénéisation qui a été jusqu'ici suffisante pour décrire les contraintes internes inter-granulaires et le comportement effectif des poly-cristaux. Cependant, cette théorie implique l'utilisation de variables internes phénoménologiques (glissement plastique moyen), qui a pour conséquence une incapacité des modèles à prédire les effets des longueurs internes de la microstructure et notamment à rendre compte d'un effet de taille des grains. Or ces longueurs internes déterminent fortement le comportement macroscopique mécanique des solides étudiés (par exemple, des études ont visé dernièrement à introduire une dispersion de tailles de grain afin d'obtenir un durcissement macroscopique qui dépend de cette dispersion et non plus de la taille moyenne de grain seule [BFB07]). Afin de traduire l'influence de ces longueurs internes, il apparaît ainsi nécessaire de proposer de nouvelles formulations basées sur la physique des mécanismes microscopiques et non plus sur des lois phénoménologiques. Comme montré dans la section (1.1.2.), la déformation plastique est extrêmement hétérogène dans les grains avec la

présence de bandes de glissement (où la déformation plastique est de l'ordre de grandeur de quelques pourcents) et la présence de zones non déformées plastiquement entre les bandes. Ces hétérogénéités sont à l'origine des effets de longueurs internes sur les propriétés mécaniques macroscopiques. La prise en compte des structures discrètes intra-granulaires va permettre de prédire des effets de taille de grain sur les champs mécaniques locaux et les propriétés macroscopiques comme ceux décrits dans la section (1.2).

3.4 Approche discrète

3.4.1 Préambule

Au travers d'une nouvelle approche micromécanique, on cherche ici à décrire finement les hétérogénéités intra-granulaires du glissement plastique et les contraintes inttra-granulaire qui en découlent. La distorsion (ou la déformation) plastique intra-granulaire résultant de la présence de dislocations n'est par conséquent plus considéré homogène et uniforme comme dans les approches classiques à champs moyens utilisés couramment en mécanique des milieux continus. On décrit mathématiquement les hétérogénéités plastiques intra-granulaires par des boucles de glissement circulaires en utilisant des fonctions spatiales de Dirac. Le fait de prendre en compte les événements discrets plastiques à l'intérieur des grains constitue une rupture par rapport à la méthodologie précédente de l'inclusion plastique uniforme d'Eshelby. Dans cette première approche, on considère des situations de glissement simple pour différentes tailles de grain, où les bandes de glissement comme celles décrites sur la figure 3.8 peuvent être modélisées par des boucles de super-dislocation contraintes au joint de grain. Les joints de grain seront supposés de forme sphérique. Le module du vecteur de glissement de chaque super-dislocation est un multiple du module du

vecteur de Burgers d'une dislocation parfaite dans le réseau cristallin. De plus, on suppose ici que les boucles sont séparées par une distance constante (distributions périodiques).

Dans le but de résoudre les équations de champ décrites dans le cas d'une défor-

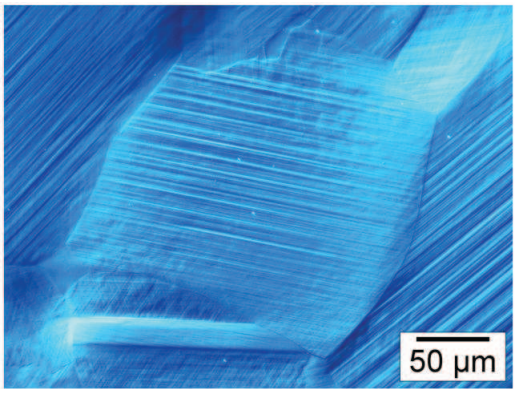

FIGURE 3.8 – Micrographie optique (contraste Normarski) : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de 1%.

mation plastique non-uniforme et discrète dans le volume du grain V_g, on choisit d'utiliser la méthode des transformées de Fourier [Mur87] (cf. Annexe D). Cependant, différentes techniques telles que les méthodes basées sur les fonctions de Green ou les procédures numériques (basées une discrétisation spatiale des champs plastiques de dislocations) pourraient être également adoptées.

La méthodologie pour déterminer les champs mécaniques ainsi que l'énergie élastique est la suivante. La première étape consiste à choisir le champ $\underset{\sim}{\beta}^p(\underline{x})$ le plus réaliste en décrivant les hétérogénéités intra-granulaires du glissement plastique et à calculer sa transformée de Fourier $\widetilde{\underset{\sim}{\beta}^p}(\underline{\xi})$ (cf. Annexe D). Ensuite, pour calculer les champs de déplacement $\underline{u}(\underline{x})$, l'intégrale est résolue dans l'espace de Fourier. On en déduit ensuite, dans l'espace réel, à l'aide des relations de compatibilité la distorsion totale $\underset{\sim}{\beta}(\underline{x})$, la déformation élastique $\underset{\sim}{\epsilon}^e(\underline{x})$, la rotation élastique $\underset{\sim}{\omega}^e(\underline{x})$ ainsi que les

contraintes internes $\underset{\sim}{\tau}(\underline{x})$, à l'aide de la loi de Hooke.
Les contraintes internes sont calculées dans l'espace de Fourier pour obtenir l'énergie élastique interne $\Phi_{int} = V.\phi_{int}$ à partir de l'identité de Parseval. La principale difficulté réside dans le calcul des intégrales de Fourier inverses pour le calcul des champs dans l'espace réel.

3.4.2 Cas d'une boucle de glissement circulaire

On considère le cas d'une boucle de dislocation de rayon a dans le plan $(x_1, x_2, 0)$ telle que représentée sur la figure 3.9. La boucle est caractérisée par son vecteur de

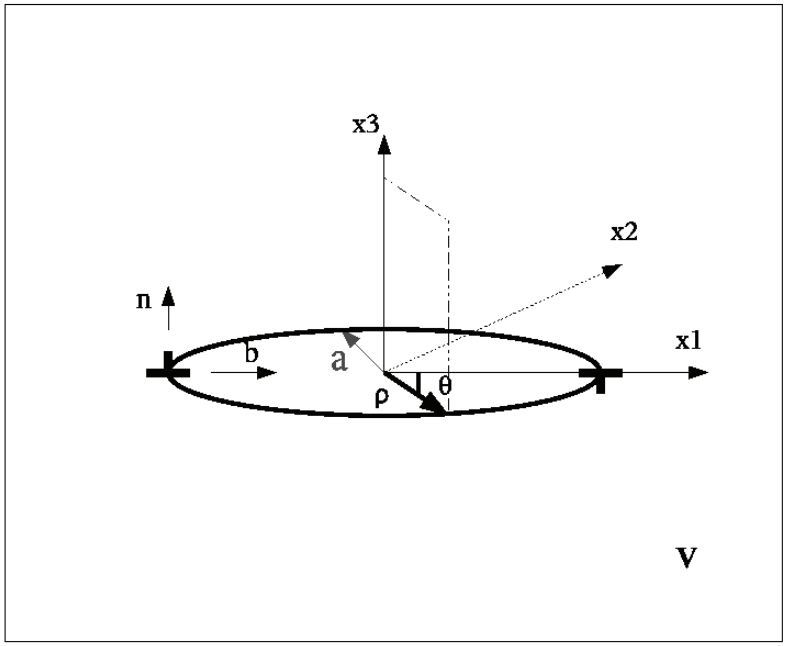

FIGURE 3.9 – Boucle de glissement de rayon a, de normal $\underline{n}$ et de vecteur de Burgers $\underline{b}$ en coordonnées cylindriques et cartésiennes [BBR08]

Burgers $\underline{b} = (b, 0, 0)$ et par la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$. La normale au plan de glissement et la direction de glissement sont définies de telle manière que

la seule composante non nulle de la distorsion plastique est :

$$\beta_{31}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) = bH\left(1-\frac{\rho}{a}\right)\delta(x_3) = b\theta^{1\mathrm{d}}(\underline{x}), \tag{3.41}$$

où ρ et x_3 sont respectivement la coordonnée radiale et l'altitude en coordonnées cylindriques (ρ,θ,x_3) défini par $(x_1=\rho\cos\theta, x_2=\rho\sin\theta, x_3)$. $\theta^{1\mathrm{d}}(\underline{x})$ est la fonction définissant le disque de rayon a formé par la boucle, $\delta(x_3)$ est la fonction de Dirac dans la direction (x_3) et H est la fonction d'Heaviside définie par :

$$H\left(1-\frac{\rho}{a}\right) = \begin{cases} 1 \text{ si } \rho \leq a \\ \\ 0 \text{ si } \rho > a. \end{cases} \tag{3.42}$$

La transformée de Fourier de la distorsion plastique s'écrit :

$$\begin{aligned} \widetilde{\beta_{31}^{\mathrm{p}}}(\underline{\xi}) &= b\widetilde{\theta^{1\mathrm{d}}}(\underline{\xi}) \\ &= b\int_0^a\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\rho\cos(\theta-\phi)}\rho d\rho d\theta \\ &= 2\pi ba\frac{J_1(aq)}{q}, \end{aligned} \tag{3.43}$$

où ξ_1 et ξ_2 sont définis par $\xi_1 = q\cos\phi$, $\xi_2 = q\sin\phi$ avec $q=\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}$, J_1 est la fonction de Bessel du premier genre.

Dans le cas particulier présenté en figure 3.9 où seule la composante $\widetilde{\beta_{31}^{\mathrm{p}}}$ de la distorsion plastique dans l'espace de Fourier est non nulle, le champ de déplacement dans l'espace réel peut s'écrire :

$$u_k(\underline{x}) = \frac{-i}{4\pi^3}\int_{V_\xi}\left(\frac{\delta_{1k}\xi_3+\delta_{3k}\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu}\frac{\xi_1\xi_3\xi_k}{\xi^4}\right)\widetilde{\epsilon_{13}^{\mathrm{p}}}(\underline{\xi})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}}\,dV_\xi, \tag{3.44}$$

Les composantes du déplacement et de la distorsion élastique peuvent être calculées en utilisant les coordonnées cylindriques.

$$dV = \rho d\rho d\theta dx_3,$$

où (ρ,θ,x_3) sont définis ainsi :

$$\begin{aligned} x_1 &= \rho\cos\theta \\ x_2 &= \rho\sin\theta \\ x_3 &= x_3 \\ \rho &= \sqrt{x_1^2+x_2^2}. \end{aligned}$$

Les intégrations sont réalisées en utilisant les coordonnées cylindriques dans l'espace de Fourier :

$$dV_\xi = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 = q d\phi dq d\xi_3,$$

où :

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= q\cos\phi \\
\xi_2 &= q\sin\phi \\
\xi_3 &= \xi_3 \\
q &= \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2} \\
\xi^2 &= \xi_3^2 + q^2.
\end{aligned}$$

Les composantes du déplacement s'écrivent alors :

$$\begin{aligned}
u_\rho &= \frac{b\cos\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{4(1-\nu)}\left(2(1-\nu)J(1,0;0) - \frac{|x_3|}{a}J(1,0;1) + \frac{|x_3|}{\rho}J(1,1;0)\right) \\
u_\theta &= \frac{b\sin\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{4(1-\nu)}\left(-2(1-\nu)J(1,0;0) + \frac{|x_3|}{\rho}J(1,1;0)\right) \\
u_3 &= \frac{b\cos\theta}{4(1-\nu)}\left((1-2\nu)J(1,1;0) + \frac{|x_3|}{a}J(1,1;1)\right).
\end{aligned} \tag{3.45}$$

où $\mathrm{sgn}(x_3) = +1$ pour $x_3 > 0$ et $\mathrm{sgn}(x_3) = -1$ pour $x_3 < 0$. $J(m,n;p)$ sont les integrales de Lipschitz-Hankel [ENS55, SW79] définies par :

$$J(m,n;p) = \int_0^{+\infty} J_m(Q)J_n(\overline{\rho}Q)e^{-\frac{Q|x_3|}{a}}Q^p\, dQ,$$

avec $\overline{\rho} = \rho/a$, $Q = aq$ et $J_m(Q)$ sont les fonctions de Bessel d'ordre m, et où m, n et p sont des entiers. Les détails du calcul des distorsions élastiques $\beta^e_{ji}(\underline{x})$ associées à la présence d'une boucle de dislocation de rayon a sont donnés dans l'Annexe E. Ensuite, l'utilisation des relations cinématiques permet de déterminer aisément les déformations élastiques $\epsilon^e_{ij}(\underline{x})$ et les rotations élastiques $\omega^e_{ij}(\underline{x})$:

$$\epsilon^e_{ij}(\underline{x}) = \frac{1}{2}(\beta^e_{ji}(\underline{x}) + \beta^e_{ij}(\underline{x})) \tag{3.46}$$

$$\omega^e_{ij}(\underline{x}) = \frac{1}{2}(\beta^e_{ji}(\underline{x}) - \beta^e_{ij}(\underline{x})) \tag{3.47}$$

Les contraintes internes $\tau_{ij}(\underline{x})$ résultant de la présence d'une boucle de dislocation de rayon a dans un milieu infini élastique isotrope sont obtenues à partir de la loi de Hooke (cf. Annexe E). Leurs expressions finales s'écrivent dans le repère cartésien :

$$
\begin{aligned}
&\tau_{11}(\underline{x}) = \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \cos\theta \mathrm{sgn}(x_3) \times \\
&\left\{ -\frac{2}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\cos^2\theta J(1,1;2) + \frac{a}{\rho}(3 - 4\cos^2\theta) J(1,2;1) \right) \right\} \\
&\tau_{13}(\underline{x}) = \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \times \\
&\left\{ \frac{\nu - 1 - \nu * \cos^2\theta}{a} J(1,0;1) + \frac{\nu}{\rho} \cos 2\theta J(1,1;0) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\cos^2\theta J(1,0;2) - \frac{a}{\rho} \cos 2\theta J(1,1;1) \right) \right\} \\
&\tau_{12}(\underline{x}) = \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \sin\theta \mathrm{sgn}(x_3) \times \\
&\left\{ -\frac{1-\nu}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\cos^2\theta J(1,1;2) - \frac{a}{\rho}(3 - 4\sin^2\theta) J(1,2;1) \right) \right\} \\
&\tau_{22}(\underline{x}) = \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \cos\theta \mathrm{sgn}(x_3) \times \\
&\left\{ -\frac{2\nu}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\sin^2\theta J(1,1;2) - \frac{a}{\rho}(3 - 4\cos^2\theta) J(1,2;1) \right) \right\} \\
&\tau_{23}(\underline{x}) = \frac{\mu b}{4(1-\nu)} \sin 2\theta \left\{ \frac{\nu}{a} J(1,2;1) - \frac{|x_3|}{a^2} J(1,2;2) \right\} \\
&\tau_{33}(\underline{x}) = -\frac{\mu b}{2(1-\nu)} \cos\theta \frac{x_3}{a^2} J(1,1;2).
\end{aligned}
\tag{3.48}
$$

Ces composantes (équation 3.48) dépendent naturellement du rayon de la boucle a. La composante τ_{13} des contraintes internes engendrées par une boucle de dislocation a été tracée dans des plans parallèles aux boucles de dislocation à différentes altitudes. Pour ces simulations, le vecteur de Burgers est $b = 2.5 \times 10^{-10} m$ et le rayon des boucles est $a = 0.1 \mu m$. La contrainte a été normalisée par rapport à μ.

Les figures 3.10(a) et 3.10(b) représentent les distributions planaires de τ_{13}/μ aux altitudes respectives de $x_3 = 0.1a$ et $x_3 = 0.5a$. En examinant la forme des surfaces de contraintes tracées en 3D, on observe un fort gradient de contrainte dans la zone proche de la ligne de dislocation. Le gradient de contraintes ainsi que l'amplitude des contraintes sont de moins en moins prononcés lorsque l'altitude x_3 par rapport au plan de la boucle ($x_3 = 0$) décroit.

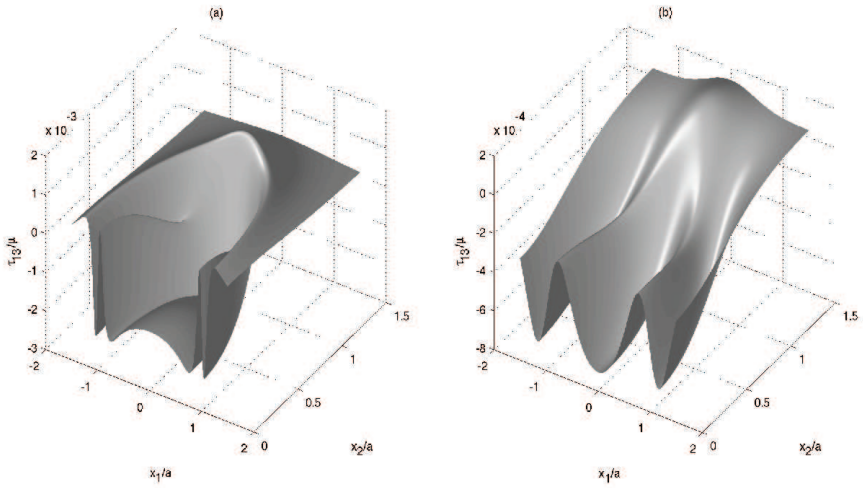

FIGURE 3.10 – Surfaces 3D de la contrainte interne normalisée τ_{13}/μ engendrée par une boucle de dislocation de glissement aux altitudes : (a) $x_3 = 0.1a$ et (b) $x_3 = 0.5a$ [BBR08].

L'énergie élastique interne d'une boucle de dislocation circulaire Φ_{int}^{1d} a été calculée de manière indépendante en utilisant l'identité de Parseval (cf. Annexe E) :

$$\Phi_{int}^{1d} = \frac{\mu b^2}{16\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu} \frac{\xi_1^2 \xi_3^2}{\xi^4} \right) |\widetilde{\theta^{1d}}(\underline{\xi})|^2 \, dV_\xi, \quad (3.49)$$

avec $|\widetilde{\theta^{1d}}(\xi)|^2 = 4\pi^2 a^2 \left(J_1 \left(aq\right)\right)^2 / q^2$ (cf. équation 3.43).

Ici, la principale difficulté provient de l'intégration mathématique, et ceci à cause de la région du coeur de la dislocation où les propriétés d'élasticité linéaire ne sont plus valables (singularité du champ de contraintes au voisinage du coeur). Une manière pratique pour calculer l'énergie d'une boucle de dislocation consiste à calculer la moitié de l'énergie d'intégration entre deux boucles de dislocation séparées par une distance $2r_c$ [HL82]. Cette distance de coupure peut être identifiée comme le *rayon de coeur* de la dislocation. Les calculs de l'intégration mathématique sont donnés dans l'Annexe E.

L'expression finale de l'énergie élastique d'une boucle (aussi appelée énergie propre) contient les intégrales elliptiques du premier ordre $\mathbf{K}(k)$ et du second ordre $\mathbf{E}(k)$

(cf. Annexe E) :

$$\Phi_{int}^{1d} = \frac{\mu b^2}{2} a \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{1}{k} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2} \right) \mathbf{K}(k) - \mathbf{E}(k) \right), \tag{3.50}$$

avec :

$$k^2 = \frac{a^2}{a^2 + r_c^2}. \tag{3.51}$$

L'énergie élastique normalisée $\Phi_{self}/(a\mu b^2)$ d'une boucle de dislocation circulaire a été tracée en fonction du rayon de boucle a (figure 3.11). Dans cette figure, l'énergie élastique normalisée a été calculée en utilisant trois formules différentes : la première provient de l'expression Φ_{int}^{1d} (équation 3.50), la seconde correspond à la formule donnée par Hirth et Lothe [HL82][p. 169], et la dernière provient de l'expression récemment obtenue par Cai et al. [CAWB06]. On peut remarquer que l'expression données par l'équation 3.50) se superpose à celle obtenue par Hirth et Lothe [HL82] pour le même paramètre de rayon de coeur r_c. Ici suivant De Wit [DeW60], r_c a été fixé à $0.5b$ pour prendre en compte la contribution de coeur de dislocation. Les deux formulations corespondent à une représentation singulière (description de Volterra). L'expression donnée par Hirth et Lothe [HL82] est une approximation asymptotique de l'équation 3.50 pour $r_c \ll a$. L'expression non singulière [CAWB06] suppose un coeur de dislocation isotrope en introduisant une fonction de densité du vecteur de Burgers autour de la ligne de dislocation. Dans cette formulation, le paramètre de largeur du coeur est fixé $1.5b$ (valeur typique qui peut être obtenue à l'aide d'un modèle atomique). Une légère différence avec l'expression non singulière due au paramètre de largeur du coeur est observée en figure 3.11. Cette différence disparaît si le paramètre de largeur du coeur de Cai et al. [CAWB06] est ajusté à $1.25b$.

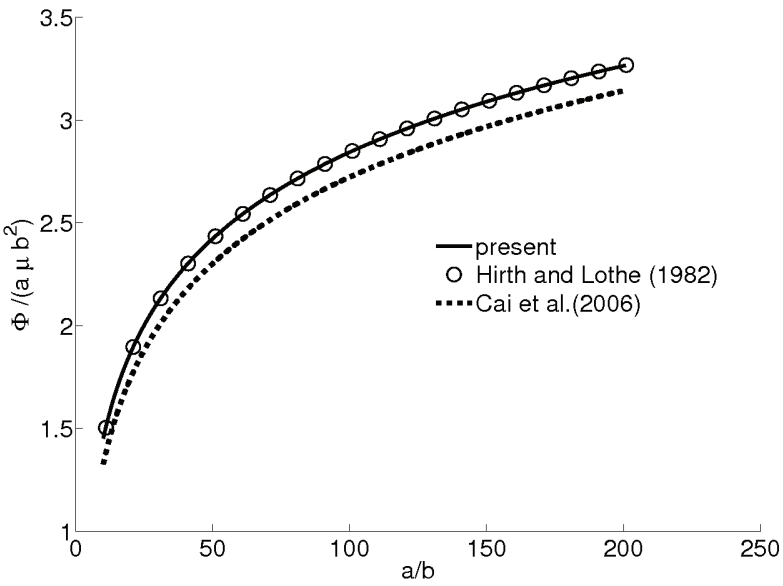

FIGURE 3.11 – Différentes approches pour calculer l'énergie élastique d'une boucle de dislocation : approche dévelopée précédement, formule de Hirth et Lothe [HL82], approche non singulière de Cail et al. [CAWB06]. Cette figure montre la dépendence à la taille de boucle de l'énergie élastique [BBR08].

3.4.3 Cas d'une distribution périodique de boucles de dislocation circulaires

On s'intéresse ici au cas d'une distribution périodiques de boucles de dislocation se trouvant (dans le plan $(x_1, x_2, 0)$) dans un grain de rayon R, telle que celle représentée sur la figure 3.12. Ceci constitue une extension du cas précédemment présenté. Les boucles sont espacées d'une distance constante h. On considère tou-

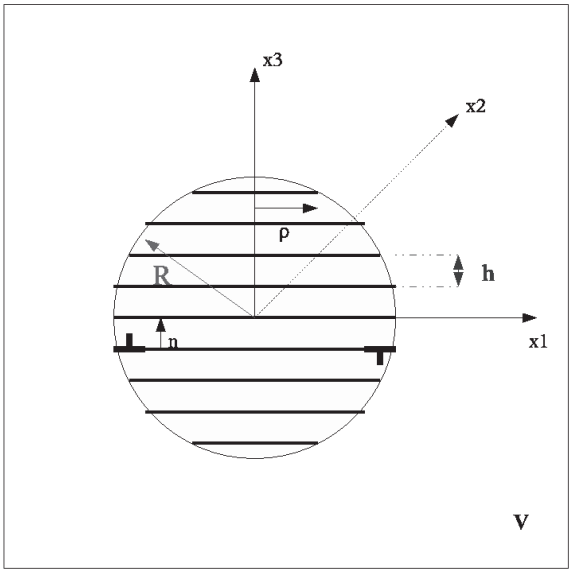

FIGURE 3.12 – Grain sphérique de rayon R contenant une distribution périodique de boucles de dislocation espacées également de h. Le grain se trouve noyé dans une matrice élastique infinie [BBR08].

jours un nombre impair de boucles avec la plus grande située au centre du grain. Toutes les boucles sont contraintes par le joint de grain sphérique que l'on suppose impénétrable par les dislocations. Le vecteur de Burgers $\underline{b}$ défini par $\underline{b} = (b, 0, 0)$ est le même pour toutes les boucles. Les boucles sont coplanaires et par conséquent possèdent le même plan de glissement dont la normale unitaire est $\underline{n} = (0, 0, 1)$. Le mode de glissement est le glissement simple (un seul système de glissement de normale $\underline{n}$). Dans cette configuration, la seule composante non-nulle de la distortion

plastique est alors :

$$\beta_{31}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) = b \sum_{n=-N}^{+N} H\left(1 - \frac{\rho}{a^{(n)}}\right) \delta(x_3 - nh), \tag{3.52}$$

avec $a^{(n)} = \sqrt{R^2 - (nh)^2}$ le rayon des boucles à l'altitude $x_3 = nh$.

Par analogie au cas d'une boucle de dislocation individuelle, la transformée de Fourier de la distorsion plastique s'écrit :

$$\widetilde{\beta_{31}^{\mathrm{p}}}(\underline{\xi}) = b\widetilde{\theta^{\mathrm{d}}}(\underline{\xi}), \tag{3.53}$$

où :

$$\widetilde{\theta^{\mathrm{d}}}(\underline{\xi}) = 2\pi \sum_{n=-N}^{+N} e^{-inh\xi_3} a^{(n)} \frac{J_1\left(a^{(n)}q\right)}{q}. \tag{3.54}$$

Pour calculer les champs de distorsions et de contraintes internes, il suffit de réutiliser les formules utilisées pour le cas d'une boucle individuelle et d'effectuer des sommes discrètes des champs pour les différentes boucles de rayons $a^{(n)}$ aux altitudes $x_3 = nh$.

La distorsion plastique moyenne dans le grain V_g équivalente à cette distribution s'écrit :

$$\begin{aligned} \overline{\beta_{31}^{\mathrm{p}}}^{V_g} &= b\frac{\sum_{n=-N}^{+N} S^{(n)}}{V_g} \\ &= \frac{3}{4}\frac{b}{R} \sum_{n=-N}^{+N} \left(1 - \left(\frac{nh}{R}\right)^2\right), \end{aligned} \tag{3.55}$$

où $S^{(n)}$ est l'aire formée par les boucles de rayon $a^{(n)}$.

L'utilisation de l'identité de Parseval (cf. Annexe E) permet de trouver l'énergie élastique interne associée à la distribution discrète de boucles notée Φ_{int}^{d}.

$$\Phi_{int}^{\mathrm{d}} = \frac{\mu b^2}{16\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu}\frac{\xi_1^2\xi_3^2}{\xi^4}\right) |\widetilde{\theta^{\mathrm{d}}}(\underline{\xi})|^2 \, dV_\xi, \tag{3.56}$$

avec

$$\begin{aligned} |\widetilde{\theta^{\mathrm{d}}}(\underline{\xi})|^2 &= 4\pi^2 \sum_{n=-N}^{+N} a^{(n)^2} \frac{\left(J_1\left(a^{(n)}q\right)\right)^2}{q^2} \\ &+ 8\pi^2 \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{m=n+1}^{+N} \cos\left((m-n)h\xi_3\right) a^{(n)} a^{(m)} \frac{J_1\left(a^{(n)}q\right) J_1\left(a^{(m)}q\right)}{q^2}. \end{aligned} \tag{3.57}$$

Comme on peut le voir dans l'équation 3.57, l'énergie élastique Φ_{int}^{d} contient deux types de contributions. Le premier terme peut être identifié comme la somme de l'énergie propre de chacune des dislocations. Le second terme correspond à la contribution de la somme des énergies d'interaction entre deux boucles mutuelles de la distribution.

On considère deux boucles circulaires de dislocation coaxiale de rayons $a^{(n)}$ et $a^{(m)}$ et séparées par une distance d, on peut écrire :

$$\begin{aligned} |\theta^{2\mathrm{d}}(\underline{\xi})|^2 = 4\pi^2 \Bigg[a^{(n)^2} \frac{\left(J_1\left(a^{(n)}q\right)\right)^2}{q^2} + a^{(m)^2} \frac{\left(J_1\left(a^{(m)}q\right)\right)^2}{q^2} \Bigg] \\ + 8\pi^2 \cos\left(d\xi_3\right) a^{(n)} a^{(m)} \frac{J_1\left(a^{(n)}q\right) J_1\left(a^{(m)}q\right)}{q^2}. \end{aligned} \tag{3.58}$$

Le premier terme de l'expression précédente correspond à l'énergie propre $\Phi_{self}^{(n)ou(m)}$ respectivement des boucles de rayon $a^{(n)ou(m)}$. Pour calculer ce terme, on réutilise l'équation 3.50 (cas d'une boucle individuelle). Le second terme correspond à l'énergie d'interaction entre les deux boucles de dislocation $\Phi_{inter}^{(nm)}$ que l'on écrit :

$$\begin{aligned} \Phi_{inter}^{(nm)} = \frac{\mu b^2 a^{(n)} a^{(m)}}{2\pi} \int_{V_\xi} \left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu} \frac{\xi_1^2 \xi_3^2}{\xi^4} \right) \cos\left(d\xi_3\right) \\ \frac{J_1\left(a^{(n)}q\right) J_1\left(a^{(m)}q\right)}{q^2} \, dV_\xi. \end{aligned} \tag{3.59}$$

L'intégration mathématique de l'équation 3.59 est développée dans l'Annexe E. Son expression finale est :

$$\begin{aligned} \Phi_{inter}^{(nm)} = \mu b^2 \sqrt{a^{(n)} a^{(m)}} \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{1}{k} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \mathbf{K}(k) - \mathbf{E}(k) \right) \\ - \frac{\mu b^2}{4} \frac{1}{\sqrt{a^{(n)} a^{(m)}}} \frac{d^2 k}{1-\nu} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \left(1-k^2\right)^{-1} \mathbf{E}(k) - \mathbf{K}(k) \right), \end{aligned} \tag{3.60}$$

avec :

$$k^2 = \frac{4 a^{(n)} a^{(m)}}{\left(a^{(n)} + a^{(m)}\right)^2 + d^2}. \tag{3.61}$$

L'énergie élastique d'une distribution discrète de dislocations Φ_{int}^{d} est la somme des énergies propres et d'interactions :

$$\Phi_{int}^{\mathrm{d}} = \sum_{n=-N}^{+N} \Phi_{self}^{(n)} + \sum_{n=-N}^{N-1} \sum_{m=n+1}^{+N} \Phi_{inter}^{(nm)}. \tag{3.62}$$

Dans la section suivante, différentes distributions correspondant à différentes valeurs de h sont étudiées et les effets du rayon R de grain sur les champs de contraintes internes et l'énergie élastique sont examinés en détail.

3.4.4 Résultats

3.4.4.1 Contraintes internes

Sur la figure 3.13, les courbes de niveau des contraintes internes ont été tracées dans le plan (x_1,x_2) pour les composantes τ_{13} (contraintes de cisaillement) à l'altitude $x_3 = 0.5R$ pour différentes distributions périodiques de dislocations dans le grain. Pour pouvoir comparer ces résultats à la solution d'Eshleby, τ_{13} a été normalisé par rapport à $\mu\epsilon^0_{13}$ (avec ϵ^0_{13}, la déformation plastique moyenne dans le grain, cf. section 3.3.2.1.). Trois configurations discrètes ont été étudiées dans le plan (x_1,x_2) : 3 boucles de dislocation (figure 3.13a) , 11 boucles de dislocation (figure 3.13b) et 101 boucles de dislocation (figure 3.13c). La solution d'Eshelby a également été tracée sur la figure 3.13d pour être comparée à l'approche discrète. Il est observé que dans le cas d'un grain déformé par 3 boucles de dislocation (déformation très hétérogène), les contraintes internes sont fortement perturbées dans les grains, et spécialement près du joint de grain formant une couche à fort gradient de contraintes internes. Lorsque le nombre de dislocations augmente (c.a.d. lorsque la déformation devient moins hétérogène), une réduction de la taille de la couche est observée. On peut observer que le cas d'un grain déformé plastiquement par 101 boucles (figure 3.13c) est très proche de la solution d'Eshelby. La figure 3.14 montre la variation de $\tau_{13}/(\mu\epsilon^0_{13})$ le long de l'axe (x_3) ($\rho = 0$). Tout comme la figure 3.13, la figure 3.14 montre clairement que l'augmentation du nombre de boucles dans le grain entraîne une réduction des perturbations au niveau de la contrainte τ_{13} dans la couche bordant le joint de grain. La figure 3.14 montre que pour un nombre de boucles

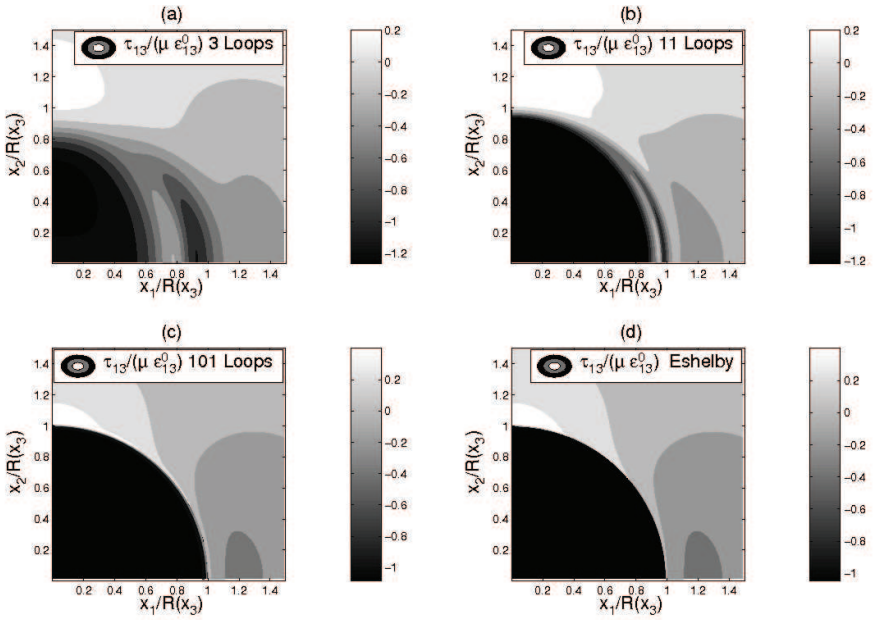

FIGURE 3.13 – Courbes de niveaux de τ_{13} normalisé par rapport à $\mu\epsilon^0_{13}$ à l'altitude $x_3 = 0.5R$ pour différents nombres de boucles. Comparaison avec la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente. Les coordonnées x_1 et x_2 sont normalisés par rapport à $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ [BBR08]

suffisamment élevé (example : 11 boucles), les contraintes internes sont presque uniformes dans la région du centre du grain (*coeur du grain*) et fortement hétérogène dans une couche proche du joint de grain. A titre d' illustration de cette forte hé-

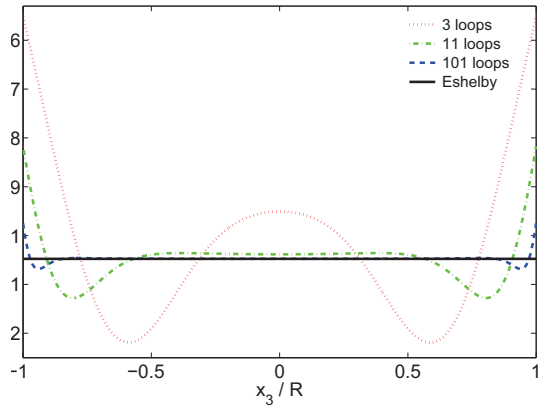

FIGURE 3.14 – Variation de $\tau_{13}/(\mu\epsilon^0_{13})$ le long de l'axe (x_3) $(\rho = 0)$ pour differents nombres de boucle. Comparaison avec la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente [BBR08].

térogénéité, la figure 3.15 représente la densité d'énergie élastique emmagazinée en tout point $w_{el} = \frac{1}{2}\underset{\approx}{\sigma}(\underline{x}) : \underset{\approx}{\epsilon^e}(\underline{x})$ le long de trois directions différentes pour 11 boucles de dislocation. Dans un premier temps, on observe (comme dans les résultats précédents) que le résultat d'Eshelby est retrouvé au centre du grain. Cette figure montre également la complexité des champs de contraintes internes à l'intérieur du grain. L'amplitude maximale et le gradient de contraintes dépendent aussi de la direction. Ceci rend dificile une description statistique de la couche.

Pour suivre l'évolution de cette couche, la densité d'énergie élastique w_{el} a été calculée dans tout le grain. Cette variable est plus pertinente que l'étude de la seule composante τ_{13}, car celle-ci contient toutes les composantes des contraintes internes. Même si la taille de la couche est spatiallement hétérogène, on essaie ici de quantifier son épaisseur en la supposant sous la forme d'une calotte sphérique

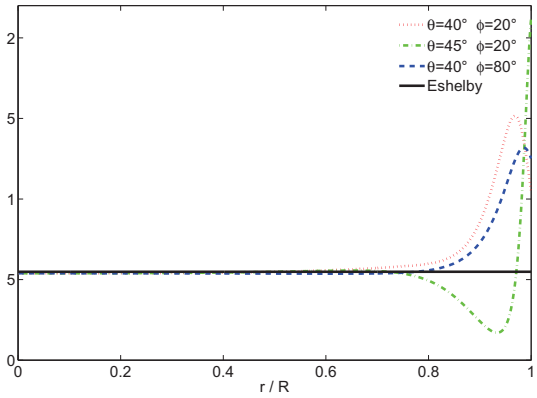

FIGURE 3.15 – Densité volumique d'énergie élastique w_{el} à l'intéreur du grain le long de trois directions différentes (grain comportant 11 boucles ($R/h = 5,5$)). En coordonnées sphériques, r est la coordonnée radiale, $\theta \in (0, 180^o)$, $\phi \in (0, 360^o)$. Comparaison avec la solution d'Eshelby à même déformation plastique moyenne dans le grain [BBR08].

de rayon intérieur r_a et de rayon extérieur $r_a + l$ (l étant son épaisseur supposée constante). La densité d'énergie élastique a ensuite été calculée dans tout le volume du grain suivant toutes les directions. On définit ainsi arbitrairement la couche d'épaisseur constante comme la zone où la densité d'énergie élastique varie de plus de 5% par rapport à la densité d'énergie élastique calculée au centre du grain. Ceci est une étude qualitative, la valeur de 5% est une valeur choisie arbitrairement. L'épaisseur de cette couche l peut être définie par $l = R - r_a$, où r_a est le rayon de la région du coeur du grain non affecté par le champ de contrainte hétérogène (cf. figure 3.16). Dans cette région les contraintes internes sont fortement hétérogènes. La figure 3.16 montre l'évolution r_a et l en fonction du nombre de dislocations dans le grain en utilisant le critère d'uniformité de 5%. La taille de la couche l diminue lorsque le rapport R/h augmente. Autrement dit, plus la déformation plastique est homogène (ou uniformément répartie) à l'intérieur du grain et plus la taille de la couche est petite. Ce résultat qualitatif ne serait pas modifié si le critère précédent était plus ou moins sévère.

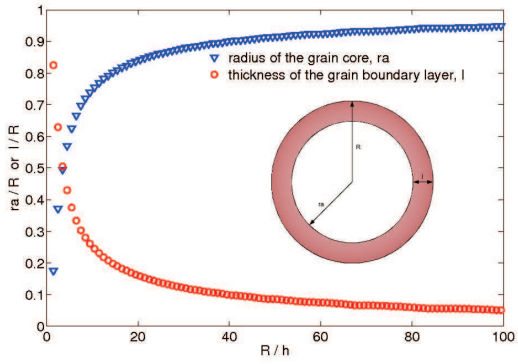

FIGURE 3.16 – Rayon r_a du *coeur du grain* et épaisseur l de la *couche* en fonction du rapport R/h (le critère d'uniformité basé sur w_{el} est de 5%) [BBR08].

3.4.4.2 Energie élastique

A la différence de la solution d'Eshelby, l'énergie élastique, normalisée par rapport à $8\mu\pi R^3(\epsilon^0_{13})^2$, où $\epsilon^0_{13} = \overline{\epsilon^p_{13}}^{Vg}$, est dans le cas de l'approche discrète est dépendante de la taille de grain (cf. figure 3.17). Cet effet provient de l'expression de l'énergie propre des dislocations (cf. équation 3.50) qui contient le terme a (rayon de boucles de dislocation). Ce terme est directement relié à la taille des grains puisque les boucles sont contraintes par le joint de grain. Il est observé pour une distribution périodique de boucles que l'énergie élastique normalisée par rapport au volume décroît lorsque le nombre de boucles dans le grain augmente. L'énergie élastique normalisée converge vers la solution d'Eshelby pour un grand nombre de boucles. Cette convergence dépend de la taille de grain. L'évolution de l'énergie élastique en fonction la taille de grains a été calculée et reportée sur la figure 3.18. Pour des valeurs de déformations plastiques moyennes ϵ^0_{13} constantes (espacement entre boucles h constant, cf. équation 3.55), une loi en $1/R$ est observée, contrairement au cas à la solution d'Eshelby qui est totalement indépendante de la taille du grain. Cette loi peut s'écrire ainsi :

$$\Phi^{(N)} = \alpha\frac{1}{R} + \Phi^{(N)}_{Eshelby}, \tag{3.63}$$

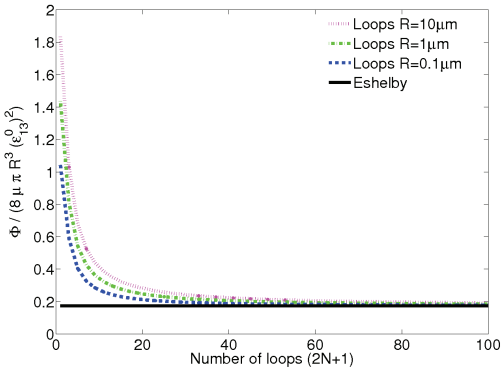

FIGURE 3.17 – Evolution de l'énergie élastique normalisée pour une distribution périodique de boucles de dislocation en fonction du nombre de boucles dans le grain pour différentes tailles de grains. Comparaison à la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente [BBR08]

où $\Phi^{(N)}$ est l'énergie élastique normalisée. Le coefficient α dépend de l'espacement entre boucles h (et par conséquent de la déformation plastique moyenne dans le grain au travers de l'équation (3.55).

Sur la figure 3.18, on observe que α diminue avec h, ce qui veut dire que l'effet de taille de grain est moins prononcé lorsque l'espacement entre boucles h est faible. La figure 3.18 démontre clairement l'erreur faite dans les approches à champs moyens en ne prenant pas en compte la microstructure intra-granulaire discrète de déformation en glissement simple. La figure 3.19 montre l'évolution de l'énergie élastique normalisée en fonction de la déformation plastique moyenne dans un grain de rayon $R = 10\mu m$. Le grain contient au départ une distribution périodique de 21 boucles de dislocation dont le module du vecteur de Burgers est $b = 2.5 \times 10^{-10} m$. Dans le premier cas, on diminue l'espacement entre boucles h (multiplication de boucles). Comme déjà observé sur la figure 3.17, lorsque le nombre de boucles augmente, l'énergie élastique normalisée converge vers le résultat d'Eshelby (cf. figure 3.19) et donc la couche tend à disparaître (cf. figure 3.16). Dans le second cas, on augmente uniformément le module du vecteur de Burgers b par un scalaire k tel que le glissement supporté au cours de la déformation plastique par chaque super-dislocation

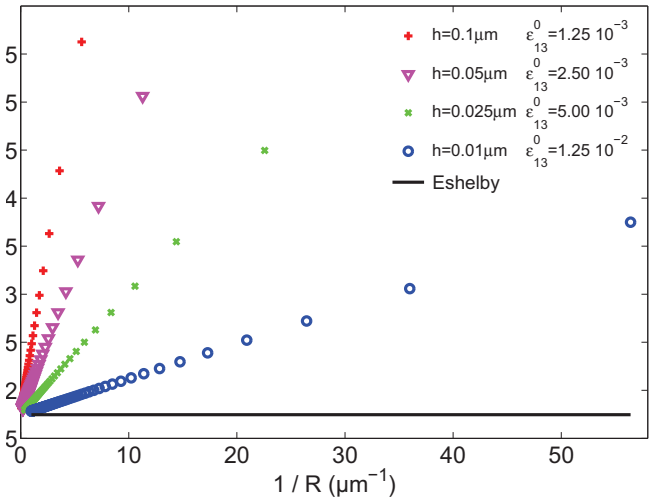

FIGURE 3.18 – Evolution de l'énergie élastique normalisée en fonction de $1/R$ pour des déformations plastiques moyennes constantes dans les grains ϵ^0_{13} (différentes valeurs de h). Comparaison à la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente [BBR08].

devient kb. Le scalaire k est fonction de la géométrie de la configuration de dislocations et est obtenu à l'aide de l'équation (3.55). Dans ce cas, la déformation plastique reste concentrée dans les 21 boucles de glissement initiales (par exemple à l'aide d'un mécanisme de Franck et Read dans chaque super-dislocation). L'énergie élastique normalisée ne converge pas vers le résultat d'Eshelby. La couche reste donc fixe car c'est elle qui est à l'origine physique de la différence avec le résultat d'Eshelby. Le deuxième cas (multiplication de boucles) est certainement plus proche de la réalité physique où la déformation plastique entraîne une multiplication des bandes de glissement. Cependant, comme démontré expérimentalement par Margolin et Stanescu [MS75], l'espacement ne tend pas vers zéro mais vers une valeur finie, ce qui signifie que la réalité physique en glissement simple est une compétition entre ces deux mécanismes avec en plus un espacement entre boucles non constant. Ces résultats montre aussi de manière claire l'erreur qui est faite lorsque la déformation plastique est supposée uniforme (solution d'Eshelby).

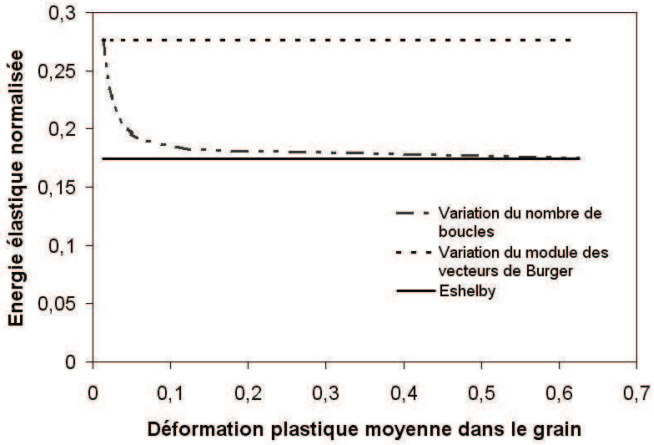

FIGURE 3.19 – Evolution de l'énergie élastique normalisée $\Phi^{(N)}$ en fonction de la déformation plastique moyenne dans les grains. Cas d'une distribution périodique de 21 boucles considérées comme des super-dislocations dont le module du vecteur de Burgers augmente. Cas d'une distribution périodique de boucles de dislocation dont l'espacement h diminue (multiplication de boucles, celles-ci restant périodiques). Comparaison avec la solution classique d'Eshelby ($R = 10\mu m$).

3.4.5 Conclusions

Les hétérogénéités du glissement plastique intra-granulaire ont été modélisées par une distribution discrète de boucles de dislocation contrainte par un joint de grain dans un milieu élastique infini. Les équations de champs et d'énergie ont été résolues grâce à la méthode des transformées de Fourier. Les résultats présentés montrent d'importantes divergences avec les contraintes internes obtenues par la solution d'Eshelby (spécialement dans une couche proche des joints de grain). Lorsque le nombre de boucles augmente, la taille de cette couche diminue et on retrouve le résultat classique d'Eshelby tant sur le plan des contraintes internes que sur le plan de l'énergie élastique calculée sur le volume total.
Ces nouveaux résultats obtenus au travers d'une approche micromécanique sont cohérents avec les nombreuses observations expérimentales reportant différents comportements et différentes structures de dislocation entre la région proche du joint de grain et l'intérieur du grain (cf. chapitre 1). Dans ce travail, il est également montré que l'énergie élastique (normalisée pour être comparée aux résultats d'Eshelby) est fonction de l'inverse de la taille de grain lorsque h est fixé, contrairement à la solution d'Eshelby qui est indépendante de la taille de grain. Dans la section suivante, on présente un premier modèle d'homogénéisation en plasticité diluée qui permet de prendre en compte les contraintes internes intra-granulaires ayant pour origine la plasticité discrète.

3.5 Un premier modèle d'homogénéisation à plasticité discrète

La prise en compte des hétérogénéités plastiques intra-granulaires constitue une rupture par rapport aux approches classiques à champs moyens. Au lieu de considérer

la déformation plastique uniforme à l'intérieur des grains, on a décrit les bandes de glissement au travers de distributions spatiales discrètes de boucles de dislocation. Grâce à une description simple de ces phénomènes intra-granulaires, il a été trouvé que les champs mécaniques dépendent de la taille de grain ainsi que de l'espacement entre boucles de dislocations.
Le calcul d'une " contrainte cinématique " (" backstress " en anglais) moyenne sur le grain permet de définir une nouvelle loi d'interaction pour le comportement du poly-cristal dans le cas d'une plasticité considérée ici dans un premier temps comme diluée. Cette loi dépend explicitement de la taille de grain et de la structure des dislocations au travers d'un espacement moyen entre dislocations.

3.5.1 Contrainte cinématique moyenne dans le grain

On considère une force motrice thermodynamique définie par $T = -\partial\phi/\partial\gamma$ où ϕ est l'énergie libre d'Helmholtz par unité de volume définie par l'équation 3.15, et , γ est le glissement plastique moyen dans le volume V_g du grain (tel que $\epsilon^0_{13} = 1/2\gamma$). A partir de cette force motrice, il est possible de calculer la contrainte cinématique notée τ^* due à une plastification discrète ou moyenne dans le grain comme suit :

$$T = f_g\left(\tau - \tau^*\right), \tag{3.64}$$

où $f_g = V_g/V$ et τ est la contrainte résolue de cisaillement.

Dans le cas de l'approche à champs moyens d'Eshelby, on peut écrire :

$$T = f_g\left(\tau - \mu\frac{7-5\nu}{15(1-\nu)}\gamma\right). \tag{3.65}$$

Ainsi, la contrainte cinématique τ^*_{esh} s'écrit donc :

$$\tau^*_{esh} = \mu\frac{7-5\nu}{15(1-\nu)}\gamma. \tag{3.66}$$

On observe que τ^*_{esh} augmente linéairement avec γ mais indépendamment de la taille de grain R.

On considère maintenant le cas d'une distribution discrète de boucles de dislocation à l'intérieur des grains comme celle décrite dans la section 3.2.2. Les boucles sont considérées comme des super-dislocations périodiques. Le mécanisme de plastification est supposé dû à l'activation de sources de Franck et Read à l'intérieur de chaque super-boucle, de telle manière qu'il n'y ait pas de création de nouvelles super-boucles. Ceci veut dire que l'espacement h entre boucles reste constant durant le processus de plastification. Seul le module du vecteur de Burgers pour chaque boucle évolue. Comme précédemment, la contrainte cinématique τ^* se calcule en utilisant les équations 3.15, 3.50 et 3.62 [BBR08, RBB09] :

$$\tau^* = \tau^*_{esh} + \mu\chi\left(h, R\right)\overline{\gamma}, \tag{3.67}$$

où χ est une fonction dépendant de h et de R [BBR08, RBB09] et $\overline{\gamma}$ est obtenu à l'aide de l'équation 3.55.

3.5.2 Modèle de transition d'échelle dilué

En utilisant les résultats précédemment développés sur la contrainte cinématique moyenne intra-granulaire, il est possible de modéliser l'effet de taille de grain sur le comportement mécanique d'un poly-cristal en supposant le mécanisme de plastification précédent. Un schéma de transition d'échelle simple a été utilisé pour mettre en évidence l'effet des hétérogénéités intra-granulaires sur le comportement mécanique global. L'objectif n'est donc pas ici de développer un schéma d'homogénéisation le plus perfectionné possible.
Pour cette étude, le modèle développé est restreint aux cas des petites déformations. Les grains sont "noyés" dans un milieu homogène équivalent (M.H.E.) purement

élastique (cf. figure 3.20). La texture cristallographique du poly-cristal étudiée est

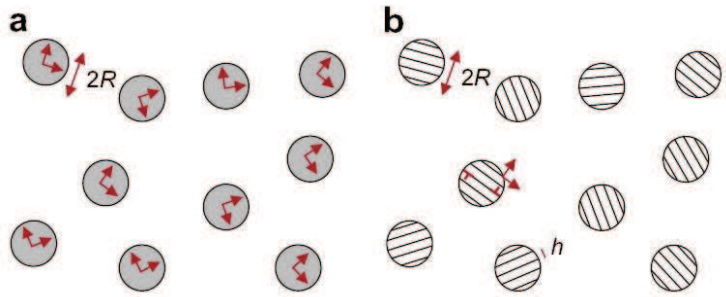

FIGURE 3.20 – (a) Grains sphériques avec une déformation plastique uniforme en concentration diluée dans une matrice purement élastique (M.H.E.) : modèle dilué d'Eshelby, (b) Grains sphériques en concentration diluée avec une distribution de boucles discrètes à l'intérieur des grains dans une matrice purement élastique (M.H.E.). L'espacement entre boucles h est le même dans tous les grains [RBB09].

supposée isotrope. La structure du réseau est du type cubique à face centrée. On suppose qu'un seul système de glissement est actif par grain (correspondant aux systèmes où la contrainte de cisaillement résolue τ^I_{appl} est maximale). Comme dans le modèle d'Eshelby dilué, on suppose l'accommodation des interactions entre grains purement élastique. Ce qui veut dire dans le cas discret que les interactions discrète entre les boucles de grains voisins sont négligées.

3.5.3 Cas du modèle d'Eshelby dilué (approche à champ moyen)

Le cas d'une déformation plastique uniforme dans les grains (modèle d'Eshelby, cf. figure 3.20(a)) est ici considéré à titre de référence. Le principe de ce modèle consiste à considérer un grain particulier I comme inclusion plastique et à étudier les interactions entre ce grain particulier I et l'ensenble de tous les autres constituant une matrice infinie, continue et homogène. En supposant la déformation plastique

ϵ^p homogène dans le grain, Eshelby [Esh57] obtient pour les contraintes $\underline{\sigma^I}$ dans l'inclusion (lorsque celle-ci est supposée sphérique et plastiquement incompressible) :

$$\overline{\underset{\sim}{\sigma}}^I = \underset{\sim}{\Sigma} - 2\mu \frac{(7-5\nu)}{15(1-\nu)} \overline{\underset{\sim}{\epsilon^p}}^I \tag{3.68}$$

Dans ce cas particulier, les champs de contraintes internes sont uniformes dans les grains. On suppose qu'un seul système de glissement est activé par grain (celui qui a le plus fort facteur de Schmid). La contrainte de cisaillement résolue sur le système de glissement activé dans le grain I est [RBB09] :

$$\tau^I_{eff} = \tau^I_{appl} - \tau^I_* = \tau^I_{appl} - \mu \frac{7-5\nu}{15(1-\nu)} \overline{\gamma}^I \tag{3.69}$$

avec $\tau^I_* = \mu \frac{(7-5\nu)}{15(1-\nu)} \gamma^I$ et $\tau^I_{appl} = R^I_{ij} \Sigma_{ij}$ (R^I_{ij} est le tenseur de Schmid pour le système actif du grain I).

3.5.4 Cas du modèle dilué avec des hétérogénéités plastiques intra-granulaires discrètes

Dans cette approche, on considère une distribution de boucles de super-dislocations (de même vecteur de Burgers) dans chaque grain (cf. figure 3.20(b)). La distribution de boucles est supposée périodique. L'espacement entre boucle h reste constant. Le développement de la plasticité est assuré par la création de dislocations dans les plans de glissement initiaux (sources de Franck et Read). En accord avec l'équation 3.67, il est possible de définir comme précédemment une contrainte de cisaillement résolue moyenne pour chaque grain I :

$$\tau^I_{eff} = \tau^I_{appl} - \tau^I_* = \tau^I_{appl} - \mu \left(\frac{7-5\nu}{15(1-\nu)} - \chi(h,R) \right) \overline{\gamma}^I \tag{3.70}$$

où $\chi(h,R)$ est la fonction dépendant de h et de R (cette fonction complexe est explicitée dans [RBB09].

3.5.5 Application à un modèle poly-cristallin indépendant du temps

Le comportement des grains est supposé élasto-plastique. Dans cette formulation indépendante du temps, le glissement devient actif (c.à.d. $\dot{\bar{\gamma}}^I \neq 0$) si le critère de Schmid et la loi de consistance sont respectés :

$$\begin{cases} \tau^I_{eff} = R_{ij}\sigma^I_{ij} = \tau^I_c \\ \dot{\tau}^I_{eff} = \dot{\tau}^I_c \text{ loi de consistance,} \end{cases} \tag{3.71}$$

où τ^I_c est la cission résolue critique. Celle-ci est supposée constante au cours du processus de plastification, ce qui veut dire que la loi de consistance peut se réduire à $\dot{\tau}^I_{eff} = 0$. τ^I_c est supposée la même pour tous les grains I (quelque soit le système de glissement activé).
La loi de consistance peut alors s'écrire :

$$\dot{\bar{\gamma}}^I = \frac{\dot{\tau}^I_{appl}}{\Theta}, \tag{3.72}$$

avec $\Theta = -\mu\left(\frac{7-5\nu}{15(1-\nu)} - \chi(h,R)\right)$. Etant donné que les configurations de dislocations n'évoluent pas, le terme Θ est constant au cours de la déformation. Pour chaque grain, il y a une relation linéaire entre l'incrément de glissement plastique moyen et l'incrément de cission résolue appliquée sur les systèmes de glissement activés. On ne considère donc qu'un durcissement d'origine cinématique dans ce modèle pour le polycristal (pas de durcissement de type isotrope).

3.5.6 Résultats numériques

Un essai de traction dans la direction x_1 du repère global sur un agrégat de 1000 grains d'orientations cristallographiques aléatoires a été modélisé. La texture cristallographique de cet agrégat est donc quasi-isotrope. Les grains sont supposés de structure c.f.c. ayant 12 systèmes de glissement de type $(111)\langle 110\rangle$. A titre

d'illustrations, les modules de Lamé utilisés sont ceux du cuivre ($\mu = 42GPa$ et $\nu = 0.324$). La valeur de τ_c initiale est fixée à 2 MPa et n'évolue pas. La distance entre les boucles de dislocation est supposée la même pour toutes les simulations quelque soit la taille des grains étudiée : h est fixée à 0.1 μm.

La figure 3.21 montre la dépendance à la taille de grain du comportement mécanique

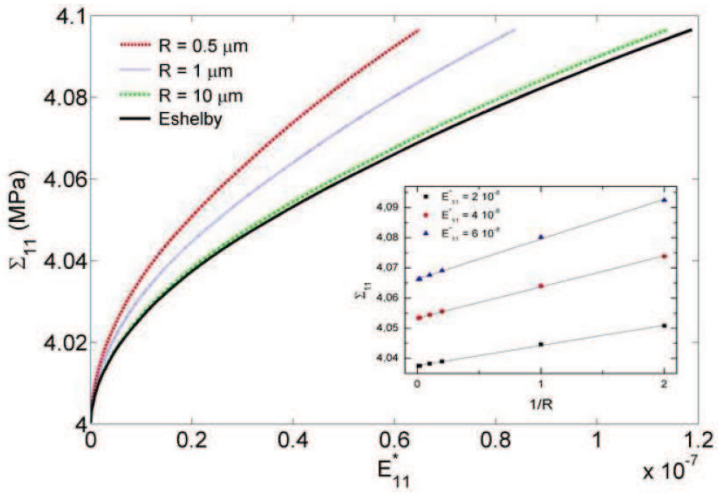

FIGURE 3.21 – Courbe contrainte-déformation simulée avec différentes tailles de grain. h est fixée à 0.1 μm pour tous ces cas. Encadré : contrainte d'écoulement en fonction de $1/R$ [RBB09]

macroscopique global des poly-cristaux en traction simple. Il faut noter que dans le cas d'un modèle dilué comme celui-ci, la déformation plastique macroscopique (E^p_{11}) reste très faible (de l'ordre de 10^{-7}). Contrairement aux approches à champs moyens, l'écrouissage augmente quand la taille de grain diminue (écrouissage macroscopique d'origine purement cinématique). On observe que le comportement du poly-cristal converge vers le résultat d'Eshelby qui est le cas asymptotique quand la taille des grains augmente. L'espacement entre boucles h étant fixé, si la taille de grain augmente, le nombre de boucles augmente graduellement jusqu'à ce que la déformation plastique intra-granulaire devient de plus en plus uniforme ($\chi(h, R) \to 0$).

La figure 3.22 montre les contraintes locales moyennes σ_{11} et les déformations

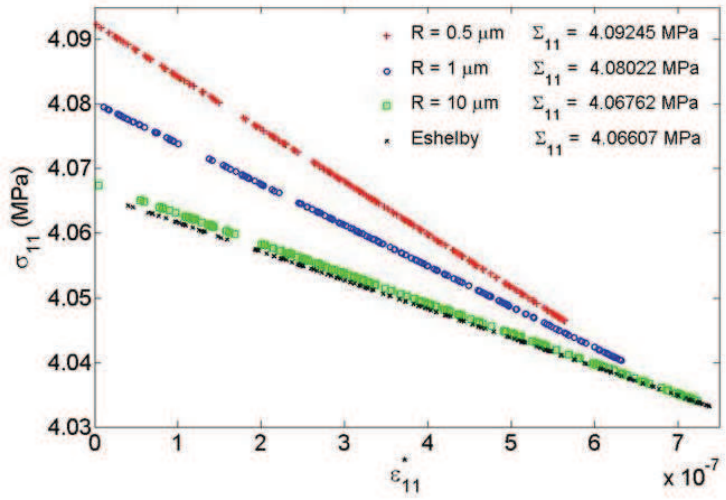

FIGURE 3.22 – Contraintes et déformation plastiques locales moyennes pour $E^p_{11} = 6.10^{-8}$ pour différents grains plastifiés [RBB09].

plastiques locales moyennes ϵ^p_{11} dans différents grains pour une déformation plastique macroscopique donnée. On observe que les poly-cristaux dont la taille de grain est faible ont des contraintes locales plus élevées, entraînant un plus grand nombre de grains plastifiés. Dans les poly-cristaux à petites tailles de grain, de larges fluctuations des contraintes locales par rapport à la contrainte d'écoulement macroscopique Σ_{11} sont observées.

L'énergie élastique globale stockée dans le poly-cristal est définie par :

$$\omega = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{N_g} f^I \left(\sigma^I_{ij} - \Sigma_{ij}\right) S_{ijkl} \left(\sigma^I_{kl} - \Sigma_{kl}\right) \tag{3.73}$$

N_g est le nombre total de grains dans le V.E.R., f^I la fraction volumique du grain I et $\underset{\approx}{S}$ le tenseur des complaisances élastiques. L'énergie stockée est plus importante pour les poly-cristaux à petites tailles de grain ($R = 0.5\mu m$) que ceux à grandes tailles ($R = 10\mu m$) (cf. figure 3.23). Du fait de l'énergie élastique stockée dans les poly-cristaux, de forts effets de taille de grain sont attendus lors des chargements complexes, par exemple sur l'effet Bauschinger. Ces résultats sont en accord avec des mesures expérimentales montrant de fort effet Bauschinger pour des petites tailles de grain [VKK+97]. Berbenni et al [BFB07] ont également montré la contribution

de la dispersion de tailles de grain dans l'agrégat sur l'effet Bauschinger.

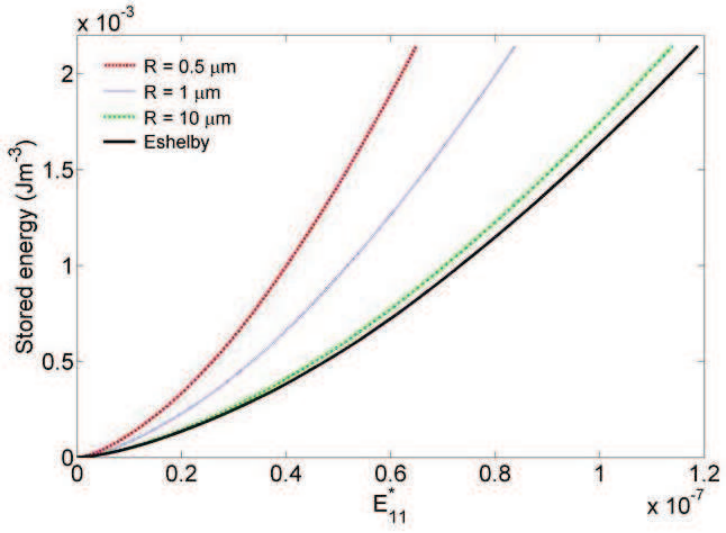

FIGURE 3.23 – Evolution de l'énergie élastique globale stockée avec la déformation plastique macroscopique E^p_{11} dans le sens de traction pour plusieurs tailles de grain R avec $h = 0,1$ [RBB09].

3.5.7 Conclusion

A partir d'un problème inclusion/matrice (chaque grain est supposé noyé dans un milieu homogène équivalent), une loi d'accommodation de nature inter-granulaire pour un poly-cristal dépendante de la taille de grain a été déduite. La particularité ici est que la déformation plastique dans l'inclusion est donnée par une distribution discrète de boucles de dislocation circulaires. Celles-ci sont contraintes par un joint de grain sphérique. Contrairement aux approches conventionnelles à champs moyens qui sont incapables de capter des effets de longueurs internes, un effet de taille de grain sur l'écrouissage initial a été obtenu, sans qu'aucune dépendance à la taille de grain ne soit introduite de manière phénoménologique dans les relations constitutives du grain. La dépendance à la taille de grain est naturellement obtenue au travers de la description des hétérogénéités du glissement plastique intra-granulaire

qui introduisent une contrainte cinématique additionnelle projetée sur les systèmes de glissement. Une des conséquences est que l'énergie élastique globale stockée dans le poly-cristal augmente lorsque la taille moyenne des grains diminue ce qui est conforme à des données expérimentales trouvées dans la littérature. Ce résultat a des conséquences significatives en termes de mise en forme des métaux comme l'effet de taille de grain sur l'effet Bauschinger durant des chargements cyclique.
Ce modèle dépend de la connaissance préalable des distributions spatio-temporelles des hétérogénéités du glissement plastique intra-granulaire. Des études expérimentales statistiques poussées s'avèrent nécessaires pour décrire les phénomènes plastiques intra-granulaires (distributions spatiales des bandes en glissement multiple, etc.) pour continuer à améliorer ce type d'approches.

3.6 Conclusions

Dans cette modélisation, on a pris en considération l'incompatibilité de réseau à l'interface grain/matrice au travers une distribution discrète de boucles circulaires, ce qui se ramène à supposer l'existence d'une densité discrète de dislocations à l'interface sphérique caractérisée par le rapport $\frac{h}{R}$. Une description simple des phénomènes intra-granulaires permet de montrer que les champs mécaniques dépendent de la taille de grain ainsi que de l'espacement entre boucles de dislocations.
Ceci constitue une rupture par rapport à la micromécanique traditionnelle à champ moyen qui ne considère la plasticité intra-cristalline que de manière moyenne, ce qui ne permet pas de prendre en compte les phénomènes physiques à l'échelle du grain (lignes et bandes de glissement). Contrairement aux approches à champ moyen, l'approche discrète permet de rendre compte d'effet de longueurs internes telles que l'effet de taille de grain sur le comportement mécanique. La conséquence directe de la prise en compte des phénomènes plastiques intra-cristallins est l'obtention naturelle d'un effet de taille de grain lorsque l'on fixe h. Le cas de configurations discrètes

de dislocations contraintes par un joint plan permettrait également d'observer une zone proche de l'interface où les champs de contraintes sont fortement perturbés mais le rôle de la courbure du joint serait alors négligé.

A partir d'un problème inclusion/matrice (chaque grain est supposé noyé dans un milieu homogène équivalent), un modèle d'homogénéisation en plasticité diluée a été mis en place. Celui-ci permet la prise en compte les contraintes internes intra-granulaires ayant pour origine la plasticité discrète. Une nouvelle loi d'interaction est définie pour le comportement du poly-cristal dans le cas d'une plasticité considérée ici dans un premier temps comme diluée à partir du calcul d'une " contrainte cinématique " (" backstress " en anglais) moyenne sur le grain,. Cette loi dépend explicitement de la taille de grain et de la structure des dislocations au travers d'un espacement moyen entre dislocations.

Des investigations expérimentales sont bien entendu nécessaires pour quantifier de manière précise les distributions de bandes de glissement à l'intérieur des grains et donc de permettre une meilleur description dans le modèle des phénomènes plastiques intra-granulaires (distribution non-périodique de dislocation par exemple). Ceci est l'objet du chapitre 4 où l'on se limitera à l'étude expérimentale de configurations intra-granulaires proches du glissement simple dans le nickel pur dans les premiers stades de déformation plastique.

Chapitre 4

Etude expérimentale des hétérogénéités plastiques intra-granulaires et validation du modèle par des mesures EBSD

Dans cette étude, les observations expérimentales de la microstructure de déformation formée à la suite de la création, du mouvement de dislocations (glissement cristallographique) sont utilisées pour décrire les hétérogénéités du glissement plastique intra-granulaire dans une nouvelle approche micromécanique (approche développée dans le chapitre précédent). Des mesures EBSD sur des échantillons déformés mettent clairement en évidence que les rotations de réseau cristallographique associées aux phénomènes plastiques intra-granulaires sont hétérogènes. Ceci rejoint les résultats de nature théorique obtenus par le modèle présenté dans le chapitre précédent. En effet, celui-ci montre que les hétérogénéités plastiques intra-granulaires ont pour conséquence que les champs élastiques intra-granulaires (champs de déformation et de rotation élastiques) sont également hétérogènes et sont influencés par

la taille des grains. Dans une première partie, la procédure expérimentale mise en place (préparation de surface, essais mécaniques, caractérisation par optique, EBSD et AFM) est détaillée. Ensuite, la théorie micromécanique ainsi que les hypothèses nécessaires à la modélisation de la microstructure de déformation observée expérimentalement sont développées. Dans la dernière partie, le modèle micromécanique est appliqué à des grains particuliers principalement déformés en glissement simple. A partir des données AFM sur les distributions de bandes de glissement utilisées dans le modèle, les champs de rotation ont été calculés et comparés à des mesures EBSD.

4.1 Méthode expérimentale

4.1.1 Choix des matériaux étudiés

Le but premier de ce travail est de mesurer à des échelles fines (i.e. à l'échelle intra-granulaire dont la résolution est sub-micronique) :
- les longueurs internes intra-granulaires associées à la déformation plastique de métaux poly-cristallins (tailles des grains, espacement interbandes...)
- les champs élastiques associés à la présence de défauts dans le réseau cristallin (i.e. dislocations) et spécialement le champ de rotation élastique qui décrira les rotations de réseau.

Dans ce travail, on a décidé de se limiter à l'étude de la plasticité dans le cas de cristaux à structure cubique à face centrée pour lesquels les mécanisme de déformation plastique sont relativement simple et bien connue, comparé aux structures cubiques centrées ou hexagonales. Dans les métaux à structure cubique à face centrée (c.f.c.) à température ambiante, les directions et les plans de glissement sont parfaitement connus et assez facilement identifiables (les systèmes actifs sont toujours du type $\{111\} - \langle 110 \rangle$). Les lignes de glissement émergeant à la surface de ces métaux sont

rectilignes et donc facilement observables (contrairement aux métaux cubiques centrés).
Le matériau choisi pour cette étude est le nickel pur. Les lignes de glissement apparaissent de manière franche et claire à la surface des échantillons déformés [Zan63, MTB80, Neu83], permettant la mesure des longueurs internes associées à la déformation plastique par AFM (microscope à force atomique).

4.1.2 Présentation du matériau étudié

Dans ce chapitre, les expériences ont été réalisées sur des échantillons de nickel pur (>99,99%). Le matériau utilisé est un nickel commercial obtenu par électrolyse. Ce procédé engendre une microstructure complexe, ainsi que la présence de contraintes internes et également des traces d'hydrogène. Un recuit du matériau initial est donc nécessaire. Un traitement thermique initial (800˚C pendant une heure dans un four sous vide) a donc été effectué permettant de diminuer les contraintes internes et d'évacuer l'hydrogène présent initialement.
Des échantillons de nickel ont ensuite été laminés pour permettre de diminuer la taille des grains et ainsi par différents recuits obtenir des microstructures présentant différentes tailles moyennes de grains. Le taux de réduction du laminage est de 75%. Ceci équivaut à une déformation vraie de 1,4. A partir des tôles obtenues, des éprouvettes de traction ont été découpées à l'aide d'une machine d'électroérosion. La forme des échantillons obtenus est présentée sur la figure 4.1. L'épaisseur des ces échantillons est de 2 mm.

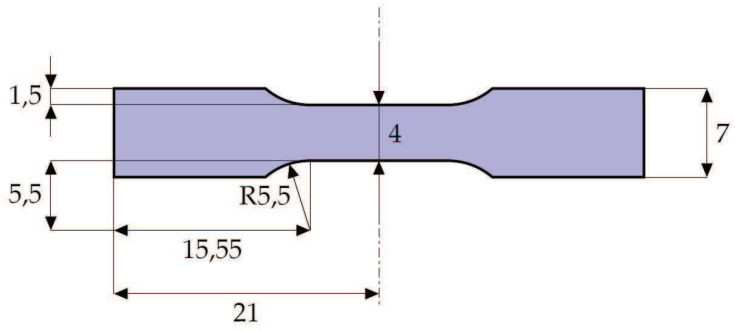

FIGURE 4.1 – Eprouvettes et caractéristiques géométriques en mm.

4.1.3 Traitements thermiques après laminage

Les échantillons laminés ont ensuite été recuits dans un four sous vide. Le vide obtenu est inférieur à 10^{-6} mbar, ceci permet d'éviter la formation d'une couche d'oxyde trop importante à la surface des échantillons. Différentes températures et différentes durées de recuit ont permis d'obtenir différentes microstructures (cf. tableau 4.1) notamment en terme de taille de grain moyenne.

	Température (°C)	Pente de montée en température (°C/min)	Durée du recuit (min)	Taille de grain moyenne obtenue (μm)
Traitement thermique A	650	20	60	40
Traitement thermique B	800	20	60	140

TABLE 4.1 – Différentes tailles de grain obtenues après traitements thermiques (d'après les mesures EBSD).

La procédure mise en place n'entraîne pas la formation de texture cristallographique particulière (cf. figure 4.2).

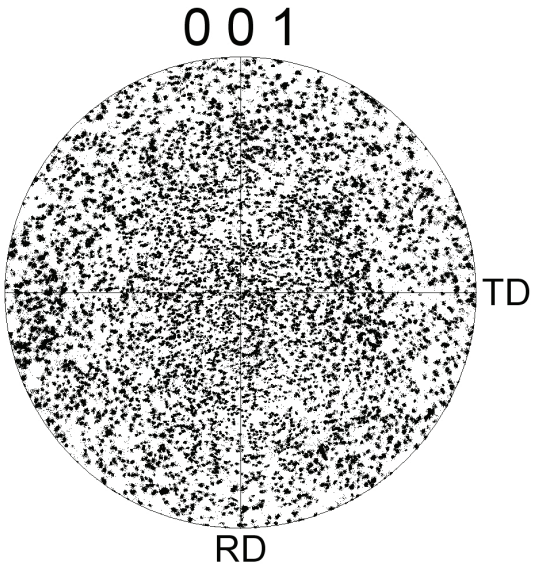

FIGURE 4.2 – Figure de pole <111> d'un échantillon laminé (75%) et recuit 650˚C pendant 1h.

4.1.4 Préparation de la surface des éprouvettes de traction

La préparation de la surface des éprouvettes est une étape essentielle pour une bonne observation des microstructures de déformation. Celle-ci doit absolument être réalisée avec le plus grand soin. Il faut en effet éviter d'introduire à la surface des perturbations d'origine mécanique ou chimique [Jao65].

4.1.4.1 Polissage mécanique

Le polissage mécanique est souvent nécessaire pour travailler avec une surface plane. Cependant, les variations de dimension des éprouvettes dues au polissage peuvent entraîner des localisations anormales du glissement. Cette étape de polissage a toujours précédé l'étape de traitement thermique, permettant ainsi de minimiser la densité de dislocations et de faire disparaître la couche écrouie. En effet, le polissage

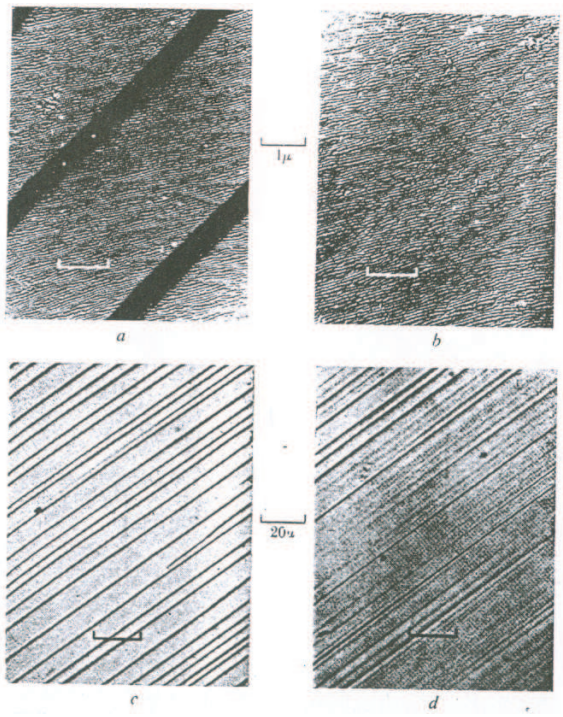

FIGURE 4.3 – Différences d'aspect des lignes de glissement se développant au début de la déformation selon le mode de polissage. Le polissage entraîne de gros glissements (a et c) [BH51].

mécanique introduit dans le réseau de nouvelles dislocations qui peuvent se propager à longues distances. Il ne s'agirait donc pas seulement d'un écrouissage superficiel qu'un polissage électrolytique ultérieur pourrait faire disparaître [Jao65]. Une étude a d'ailleurs montré que les lignes de glissement qui se développent dans les premiers stades de la déformation dépendent fortement du polissage mécanique [BH51] (cf. figure 4.3). Les surfaces des échantillons ont été polies miroir à l'aide de papier abrasif de carbure de silicium jusqu'à une granulométrie de 4000, et ensuite nettoyées à l'eau distillée pour être enfin placées dans une bain soumis aux ultrasons pour éliminer toutes les particules abrasives.

4.1.4.2 Electro-polissage

L'étape d'électro-polissage est nécessaire et très importante dans cette étude, et cela pour plusieurs raisons. L'électro-polissage permet de faire disparaître les couches d'oxyde dues au recuit. Ces couches peuvent, si le module élastique de l'oxyde est supérieur à celui du matériau étudié, bloquer l'émergence des dislocations à la surface empêchant l'observation des lignes de glissement [Bar53]. Par ailleurs, un bon électro-polissage est essentiel pour obtenir un bon taux d'indexation des mesures EBSD en supprimant l'écrouissage résiduel en surface [Gor07][FMCC06]. L'électrolyte utilisé pour le nickel est une solution composée de 53ml d'acide sulfurique H2SO4 et de 1 litre de méthanol [BV08]. L'électro-polissage a été réalisé à l'aide d'une polisseuse électrolytique Lectropol-5 Struers. Les paramètres de polissage sont présentés dans le tableau 4.2.

Matériau	Solution	Potentiel (V)	Température (C°)	Temps (s)	Taux d'écoulement
Nickel	H2SO4/Méthanol	30	15-22	30-60	10

TABLE 4.2 – Solution et paramètres d'électro-polissage utilisés.

Les échantillons sont ensuite rapidement rincés à l'aide d'éthanol pour éviter toute attaque chimique de la surface par la solution électrolytique. L'échantillon est ensuite placé dans un bain aux ultrasons pour éliminer toute trace résiduelle d'acide.

4.1.5 Essais de traction simple

Les essais mécaniques correspondent à des essais de traction uniaxiale réalisés à température ambiante à l'aide d'une machine Instron 8513. La vitesse de déplacement de la traverse est de $0,001 mm.s^{-1}$. Ceci correspond, compte tenu de la géométrie des éprouvettes présentées précédement (cf. figure 4.1), à une vitesse de déformation de $8,3.10^{-5}s^{-1}$ (correspondant à une déformation de nature quasi-statique). La surface des échantillons a ensuite été observée post-mortem après une décharge élastique.

4.1.6 Outils de caractérisation de la microstructure de déformation

4.1.6.1 Microscopie optique : contraste interférentiel (ou contraste Nomarski)

Cette technique de microscopie optique a été développée dans les années 1950. Utilisant un système analyseur/polariseur, elle permet d'accentuer les contrastes dus au relief de la surface d'échantillons observée. Cette technique est donc particulièrement efficace pour l'étude des lignes de glissement dans les métaux. Cette méthode optique permet une très grande résolution verticale ($\approx 10 - 15$Å)[Neu83].

4.1.6.2 Analyses EBSD

L'analyse EBSD ("Electron Back Scattering Diffraction" en anglais) est une méthode d'analyse cristallographique locale reposant sur l'exploitation des diagrammes des électrons rétrodiffusés. Classiquement, c'est dans un microscope électronique à balayage que cette technique est mise en oeuvre. Comparée à la méthode conventionnelle d'analyse cristallographique qu'est la diffraction des rayons X, la technique EBSD par indexation automatique des lignes de Kikuchi dans un MEB a la particularité d'offrir une analyse beaucoup plus locale (qui concerne une fraction de μm), mais elle a aussi le grand intérêt de pouvoir fournir, à partir d'un grand nombre d'informations locales, une information globale et statistique sur plusieurs mm^2 voir cm^2 d'échantillons par balayage du faisceau électronique. La technique EBSD est donc couramment utilisée pour mesurer les textures ainsi que la taille, la forme et la position des grains ou sous-grains (cf. Humphreys pour une revue complète de cette technique [Hum01]). Elle peut également être utilisée pour étudier les rotations de réseau dues aux incompatibilités de la déformation plastique à l'échelle intra-granulaire [RHJ96],[KWT05b]. Les mesures d'orientation du réseau cristallin ont été effectuées par un microscope électronique à balayage de type JEOL JSM-7000F équipé d'un canon à électron à émission de champ ("Field Emission electron Gun" en anglais : FEG). Pour toutes les cartographies présentées, le pas des mesures est de 0,5 μm. Les données ont été traitées à l'aide du logiciel de post-traitement TSL-OIM Analysis 4.6.

4.1.6.3 Microscopie à force atomique (AFM) : observation des bandes de glissement

Au cours de la déformation plastique, l'apparition de marches dues à l'émergence de dislocations collectives est observée. Ces marches sont dues au glissement qui s'active sous la surface. L'analyse de la topographie par microscopie à force atomique

(ou AFM pour "Atomic Force Microscopy" en anglais) de la surface d'échantillon déformé permet d'observer la microstructure de déformation [CJ99, Cou99, FMCC06, SSV08]. Le principe se base sur les interactions entre l'échantillon et une pointe montée sur un micro-levier (poutre appelée "Cantilever" en anglais). La pointe balaie la surface à représenter, et l'on agit sur sa hauteur selon un paramètre de rétroaction. La résolution latérale est de l'ordre de la dizaine de nanomètres, mais la résolution verticale est par contre de l'ordre de 1 Å. Cette technique permet de déterminer la position spatiale ainsi que la hauteur des lignes de glissement. Pour cette étude, nous avons utilisé un microscope à force atomique de type Veeco Dimension 3000. Les mesures ont été réalisées à température ambiante en utilisant le mode contact. Le logiciel libre de post-traitement Gwiddion 2.8 [Gwy] permet ensuite, à partir de données mesurées, de reconstituer une image de la surface en trois dimensions.

4.2 Résultats expérimentaux

4.2.1 Etude de grains déformés en glissement simple

Le but de cette étude est d'observer et de caractériser les microstructures de déformation et de traiter certains champs élastiques comme les rotations de réseau et par la suite les comparer aux champs élastiques théoriques obtenus par le modèle micromécanique présenté au Chapitre 3. Etant donné la complexité des microstructures des poly-cristaux déformés, on a, dans un premier temps, choisi de limiter l'étude aux grains déformés seulement par un système de glissement majoritaire. Les grains étudiés ont tous été repérés à l'aide d'un microscope optique (contraste Nomarski). La figure 4.4 présente l'évolution de la microstructure de déformation d'un grain déformé principalement en glissement simple. Si l'on regarde finement, on s'aperçoit que dès le début de la déformation (figure 4.4 A), plusieurs systèmes

sont activés dans la zone proche des joints de grain même si un système prédomine (cf. figure 4.4).

Ces micrographies ne permettent pas de déterminer si ces systèmes restent activés au cours de la déformation. Pour ce faire, Mader [Mad57] a développé une méthode à partir des lignes de glissement, pour déterminer les systèmes actifs ou non au cours de la déformation. Celle-ci consiste à :
- effectuer l'essai de traction de manière incrémentale,
- à prendre une micrographie,
- à électro-polir de nouveau l'échantillon avant l'incrément de déformation suivant.
Cette technique permet d'effacer les lignes de glissement activées précédemment et de faire apparaître seulement les lignes de glissement activés durant l'incrément de déformation. Cette technique a été utilisée dans plusieurs études [Mad57, Zan63, MTB80]. On utilisera donc cette technique pour un autre grain "orienté en glissement simple".

La figure 4.5 montre l'évolution des systèmes de glissement activés lors de chaque incrément de déformation. Comme précédemment (cf. figure 4.4 A), ce grain à été déformé principalement par un seul système de glissement. Si l'on observe finement ce qu'il se passe dans la zone proche du joint de grain (cf. figure 4.6 A), on s'aperçoit que comme dans le cas de la micrographie en figure 4.4 A, dans la zone proche des joints de grains, plusieurs systèmes de glissement sont activés dés le début de la déformation plastique. Les traces de trois systèmes de glissement (un très marqué (g1), et, deux secondaires (g2) et (g3)) sont alors observées.

Après 1,1% de déformation plastique (cf. figure 4.6 B), seul le système (g1) reste activé, soit le système principalement activé dès le début de la plastification du grain. Les systèmes (g2) et (g3) ne sont plus actifs. Ils ont été bloqués par l'écrouissage latent qui devient rapidement très important. Ces observations rejoignent complè-

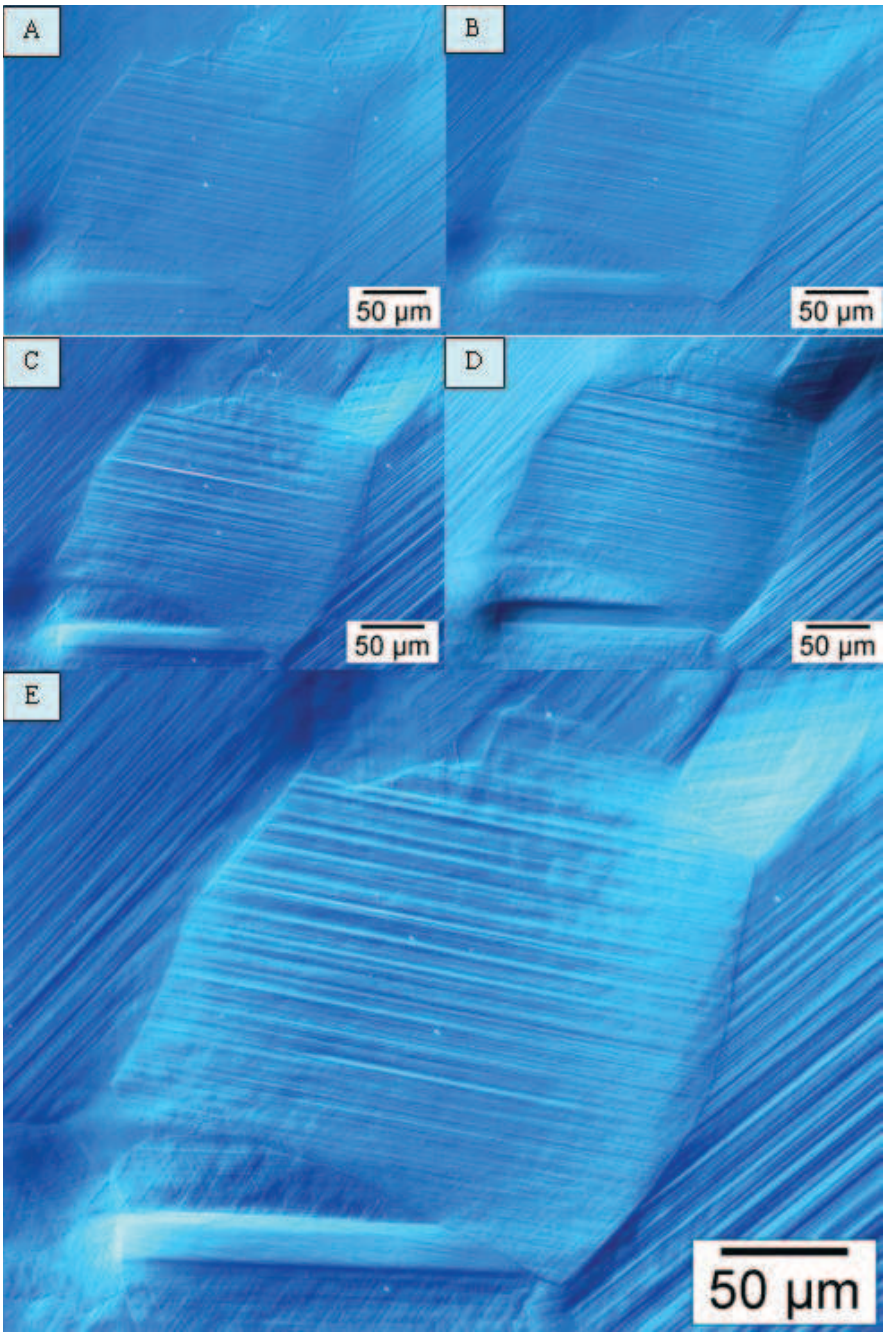

FIGURE 4.4 – Micrographie optique (contraste Normarski) ; Evolution de la microstructure de déformation pour un grain "orienté en glissement simple" et sans polissage intermédiaire après une déformation plastique totale de A : 0,15%, B : 0,45%, C : 0,65%, D : 0,75%, E : 1%.

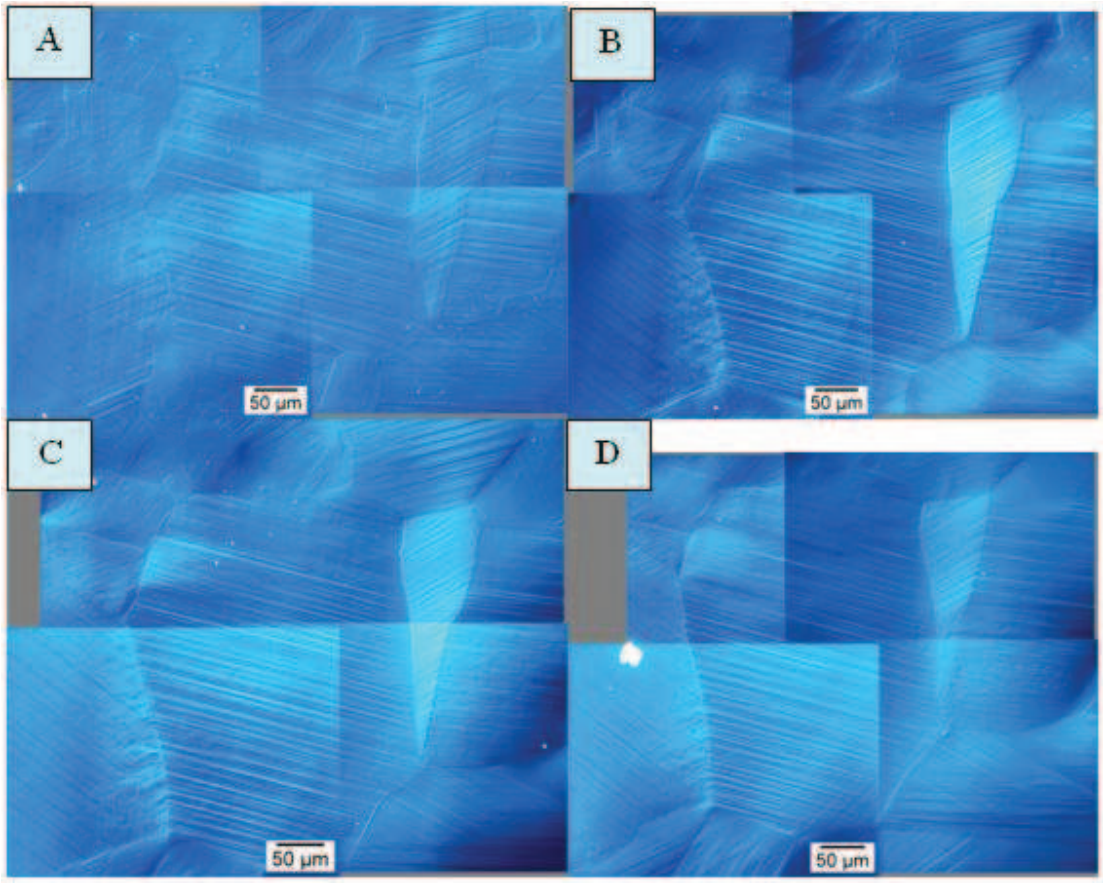

FIGURE 4.5 – Micrographie optique (contraste Normarski) ; Evolution de la microstructure de déformation pour un grain "orienté en glissement simple" après un électro-polissage suivi d'un incrément de déformation et après une déformation plastique totale de A : 0,25%, B : 0,6%, C : 0,9%, D : 1,1%.

tement les résultats obtenus par Zankl dans sa thèse [Zan63].

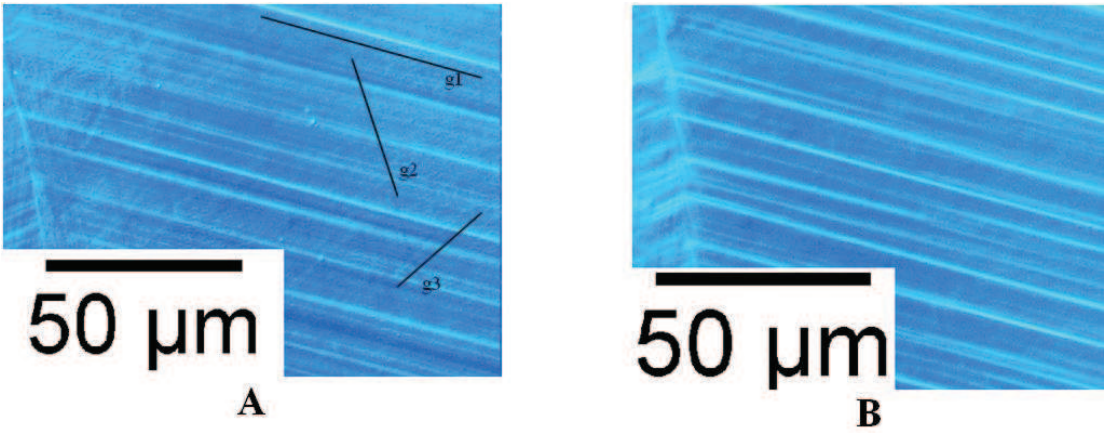

FIGURE 4.6 – Micrographie obtenue après une déformation plastique de A : 0,25%, B : 1,1%.

Pour les comparaisons avec le modèle, on a supposé que les grains choisis sont déformés seulement par un système de glissement. L'expérience précédente permet de justifier cette approximation (cf. figures 4.5 et 4.6).
Cependant, il faut rappeler que les observations de lignes de glissement sont des observations de surface. Les systèmes de glissement activés dans le volume ne sont donc pas connus. Il est donc tout à fait possible que le grain soit dans le volume déformé par un glissement multiple hétérogène, c'est-à-dire que plusieurs systèmes différents soient activés dans le volume du grain sous-jacent (cf. figure 4.7).

4.2.2 Analyse des mesures par microscopie à force atomique

Les études expérimentales de poly-cristaux montrent que la déformation plastique à l'intérieur des grains est fortement hétérogène et intermittent [Zai06]. La conséquence de ces mouvements collectifs de dislocations est l'apparition à la surface de l'échantillon de marches appelées lignes de glissement [Jao65, Zai06]. Les mesures par microscopie à force atomique ou AFM ("Atomic Force Microscopy" en

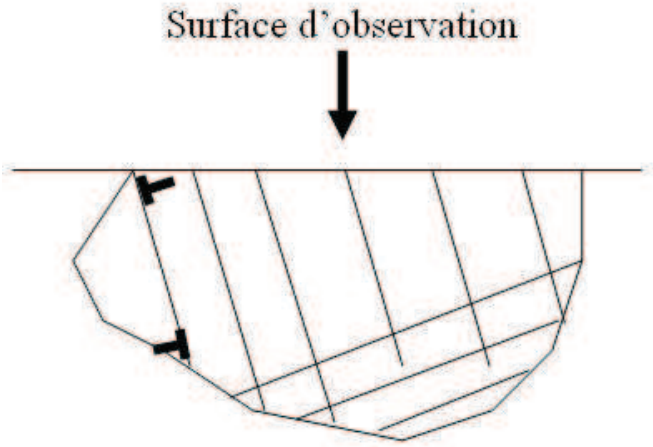

FIGURE 4.7 – Glissement simple observé en surface et possibilité de glissement multiple dans le volume sous-jacent.

anglais) permettent alors de déterminer la position spatiale (cf. figure 4.8(a)) ainsi que la hauteur de ses marches (cf. figure 4.9). Il est par contre difficile de déterminer s'il s'agit de lignes de glissement dues à l'émergence de plusieurs boucles de dislocations sur un plan de glissement ou bien s'il s'agit de bandes de glissement, c'est-à-dire un " cluster " de lignes de glissement comme défini par Neuhauser [Neu83].

Il est donc intéressant d'observer de manière plus précise une de ces marches à l'aide d'un microscope électronique à balayage (ou MEB). En effet, le MEB offre une meilleure résolution latérale. La micrographie MEB sur la figure 4.8(b) est un grossissement de la zone correspondant au pic " g " (cf. figure 4.8 et figure 4.9). Il est clairement observé que les pics mesurés par AFM correspondent à des " clusters " de lignes de glissement c'est-à-dire à des bandes de glissement. La résolution de l'AFM ne permet pas ici de discriminer les marches individuelles dues aux lignes de glissement.

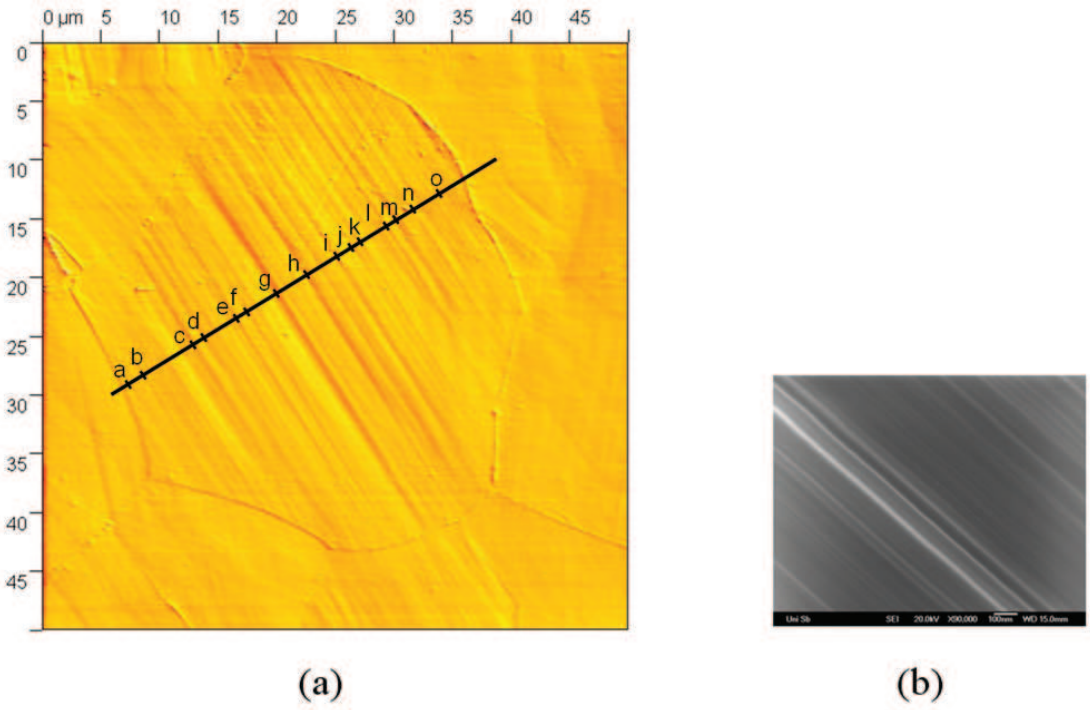

FIGURE 4.8 – (a) Micrographie AFM : microstructure de déformation d'un polycristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de 1,5%. (b) Micrographie MEB donnant des détails sur les lignes de glissement constituant la bande de glissement "g" indexée sur la figure (a).

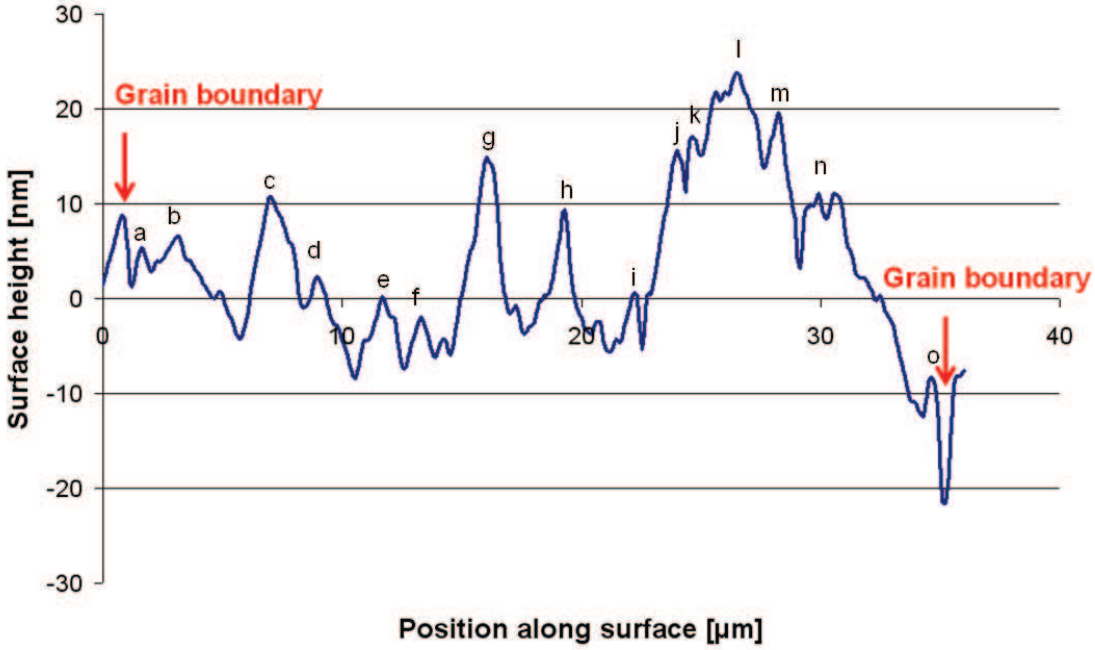

FIGURE 4.9 – Profil AFM des bandes de glissement le long de d'une ligne perpendiculaire aux lignes de glissement actives principales.

4.2.3 Mesure de la distance entre bandes de glissement

Pour la mesure des bandes de glissement, seuls les pics (cf. figure 4.8) supérieurs à 3nm ont été pris en compte pour définir une bande de glissement. Ceci est un critère arbitraire mais réaliste. La taille des ces pics correspond à la différence entre le maximum et le minimum du pic étudié. Les pics inférieurs à 3 nm sont donc considérés comme des bruits de mesure. Les distances entre bandes mesurées par AFM sont des mesures de surface et par conséquent divergent de la réalité et une correction est necessaire pour déterminer ces valeurs. Elles ne correspondent pas aux distances réelles entre les bandes (cf. figure 4.10).

Il est possible de connaître la distance réelle entre bandes, à partir de l'orientation cristallographique du grain mesuré par EBSD. Il suffit de mesurer l'angle entre la trace des lignes de glissement et la direction de traction. A partir de cet angle, on

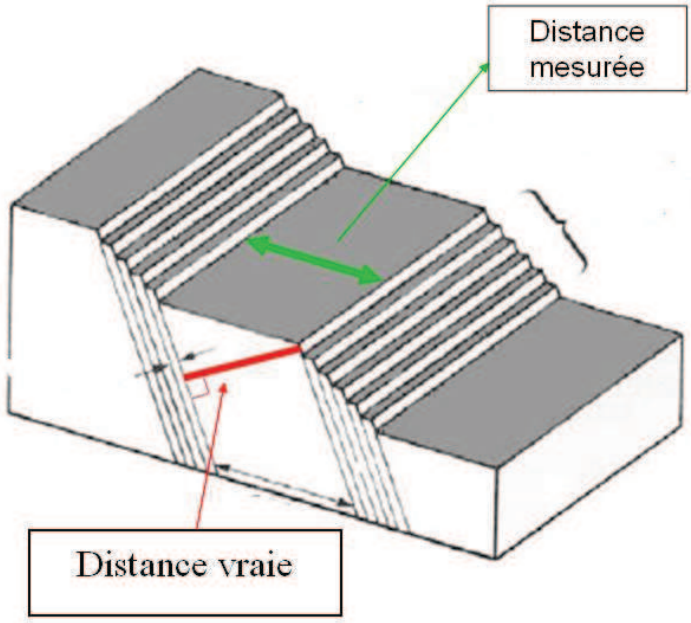

FIGURE 4.10 – Distance "vraie" entre deux bandes du système de glissement principal.

en déduit le système de glissement activé et l'on calcule l'angle entre le plan de glissement activé et le plan d'observation. Il est ensuite aisé de trouver le coefficient permettant le passage de la distance entre bandes mesurées en surface à la distance réelle entre bandes.

4.2.4 Analyse des mesures EBSD

L'analyse des cartographies EBSD des microstructures déformées plastiquement permet d'étudier indirectement les champs élastiques intra-granulaires (associés à la déformation plastique). La technique EBSD permet de mesurer indirectement les champs de rotation de réseau par la méthodologie suivante :
- l'orientation locale du réseau cristallin est mesurée dans des éléments $\Delta x = \Delta y = 0.5\mu m$ à l'intérieur des grains,

- la désorientation intra-granulaire est ensuite calculée dans les grains sélectionnés par rapport à un point de référence choisi au centre des grains sélectionnés. Les formules pour le calcul de la désorientation sont développées dans l'annexe D.

Le principal avantage de cette méthode est une amélioration de la résolution de mesure. En effet, la résolution classique pour la mesure d'une orientation de réseau par la méthode EBSD est seulement de 2° alors que la résolution pour une désorientation par rapport à un point référence est de $0,5^\circ$ [Hum01] (on s'affranchit alors des erreurs systématiques).

La figure 4.11(a) montre la microstructure de déformation d'un échantillon d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$. La figure 4.11(b) montre une cartographie des désorientations intra-granulaires obtenue par EBSD pour la même microstructure. A l'aide du logiciel de post-traitement TSL, on a représenté les désorientations de réseau dans plusieurs grains (pour chaque grain, l'orientation de référence est prise dans le centre du même grain). On peut observer que dans la majorité des cas, les zones proches des joints de grains sont fortement désorientées (zones rouges et jaunes) par rapport au coeur des grains (zone bleue). Cela traduit l'existence d'une hétérogénéité de courbures de réseau à l'intérieur d'un même grain. On peut observer dans la majorité des cas un fort gradient de désorientation de réseau dans une couche près des joints de grain. On peut remarquer que dans la majorité des cas la désorientation maximale au joint de grain est d'environ $1,5^\circ$ après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$. Ceci n'est donc pas négligeable, en effet, ces désorientations sont du même ordre de grandeur que la rotation moyenne des grains dans un poly-cristal [Jao65, BZ79]. Les rotations de réseau ne sont pas uniformes à l'intérieur des grains contrairement aux résultats obtenus avec le modèle d'Eshelby [Esh57] (cf. Chapitre 1).

Comme on peut le voir sur la figure 4.11(a), la plasticité discrète dans les grains peut être complexe. Comme expliqué précédemment, on s'est limité ici à des grains déformés par glissement simple (cf. figures 4.12). Comme on peut l'observer sur les figures 4.12 et 4.14, la rotation du réseau cristallin due aux bandes de glissement est pratiquement uniforme dans le centre des grains (zone bleue). On observe par

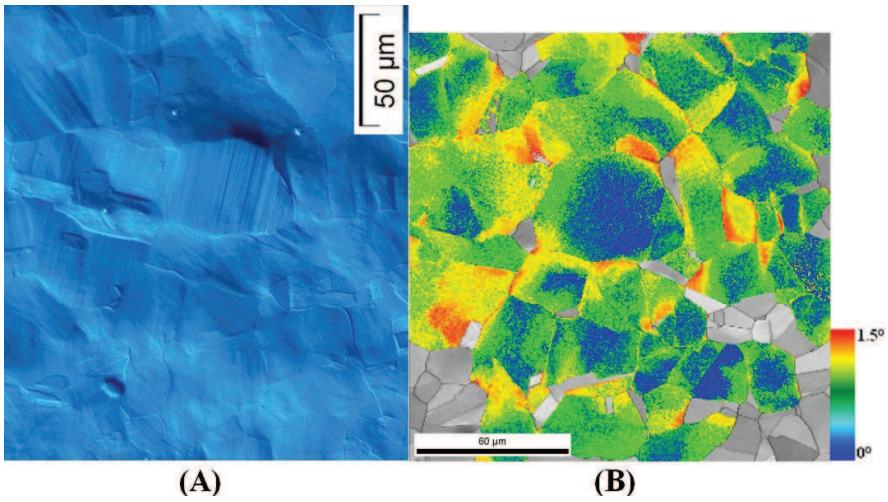

FIGURE 4.11 – (A) Micrographie optique (contraste Normarski) : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$; (B) Image EBSD correspondante en contraste de qualité des lignes de Kikuchi : les désorientations intra-granulaires ont été calculées dans plusieurs grains par rapport aux centres des grains.

contre de fortes hétérogénéités de rotation de réseau dans la zone proche des joints de grains (zone rouge). La zone où les champs sont perturbés est plus importante le long des joints de grains qui bloquent les dislocations des bandes de glissement. En effet, les joints de grains constituent des obstacles au mouvement des dislocations générées durant la déformation.

Dans la zone A (cf. figure 4.12), les bandes de glissement rencontrent un joint de macle. Les joints de macle contrairement aux joints de grains ne sont pas des obstacles infranchissables au mouvement des dislocations d'après Jaoul [Jao65]. On n'observe pas de désorientation le long de ce joint de macle. Cela traduit le fait que les dislocations des bandes de glissement ont traversé le joint de macle et ne sont donc pas bloquées comme le long des joints de grains.

Dans la zone B (figure 4.12), on peut observer que la présence d'un joint triple à une influence sur la taille de la couche de désorientation. C'est une zone où les incompatibilités sont plus fortes correspondant à de larges contraintes internes [Rey88b].

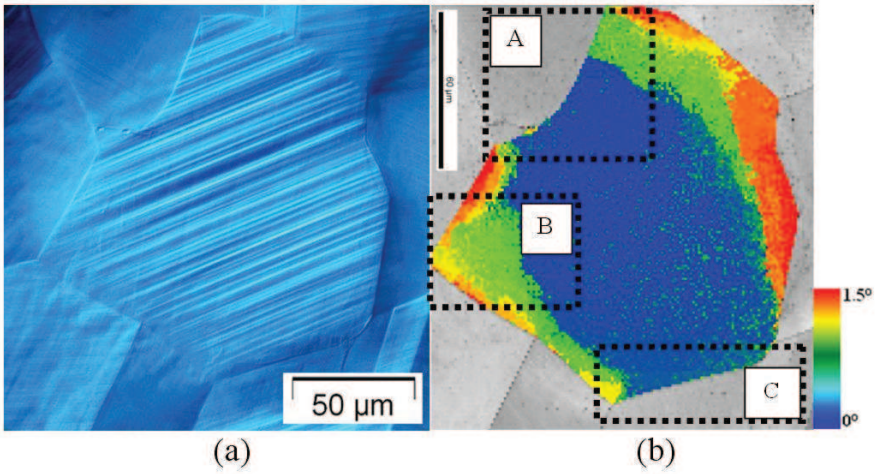

FIGURE 4.12 – Echantillon ayant subi le traitement thermique B (cf. tableau 4.1). (a) Micrographie optique (contraste Normarski) : microstructure de déformation d'un grain "orienté en glissement simple" dans un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$; (b) Image EBSD correspondante en contraste de qualité des lignes de Kikuchi : les désorientations intra-granulaires ont été calculées par rapport aux centres du grain

.

Dans la zone C (cf. figure 4.12), les bandes de glissement sont parallèles au joint de grains, celle-ci ne provoque pas de désorientation le long de celui-ci.
Ces constats expérimentaux permettent de conclure que c'est le stockage de dislocations contraintes aux joints de grain qui sont la principale cause des fortes désorientations observées près des joints de grain dans les premiers stades de déformation plastique.

4.3 Modélisation de la microstructure de déformation

4.3.1 Brève description du modèle micromécanique

Le modèle, dont tous les détails ont été donnés dans le Chapitre 3, considère le cas d'un grain sphérique I de rayon R avec des boucles de dislocation contraintes par le joint de grain. Ce grain se trouve dans une matrice infinie élastique de volume V. Les équations d'équilibre portant sur les contraintes de Cauchy, la relation de compatibilité pour les distorsions total es $\underset{\sim}{\beta}$ (ou pour les déformations totales $\underset{\sim}{\epsilon}$ qui forment la partie symétrique de $\underset{\sim}{\beta}$) et la loi de comportement en élasticité linéaire avec incompatibilités plastiques sont les équations de champs du problème. Dans l'hypothèse des petites déformations, $\underset{\sim}{\beta}$ est la somme des distorsions totales élastiques $\underset{\sim}{\beta}^e$ et des distorsions plastiques $\underset{\sim}{\beta}^p$. Ces équations de champs amènent à résoudre les équations aux dérivées partielles de Navier en tout point (cf. Chapitre 3) :

$$C_{ijkl}u_{l,kj}(\underline{x}) - C_{ijkl}\beta^p_{kl,j}(\underline{x}) = 0 \tag{4.1}$$

où $\underline{u}$ est le champ de déplacement et $\underset{\approx}{C}$ sont les modules élastiques supposés homogènes et isotropes dans le matériau. La résolution de ce problème est donnée en détail dans le Chapitre 3.

Notre étude ici se concentre sur la distribution de boucles de super-dislocations (pas forcement périodique comme dans le Chapitre 3) contrainte par un joint de grain (supposé sphérique et infranchissable pour les dislocations) (cf. figure 4.13). Les longueurs internes (taille de grain et espacements entre bandes de glissement) utilisées dans le modèle sont directement mesurées par microscopie à force atomique.

Dans le but d'évaluer l'influence de la plasticité discrète intra-granulaire, on a dans

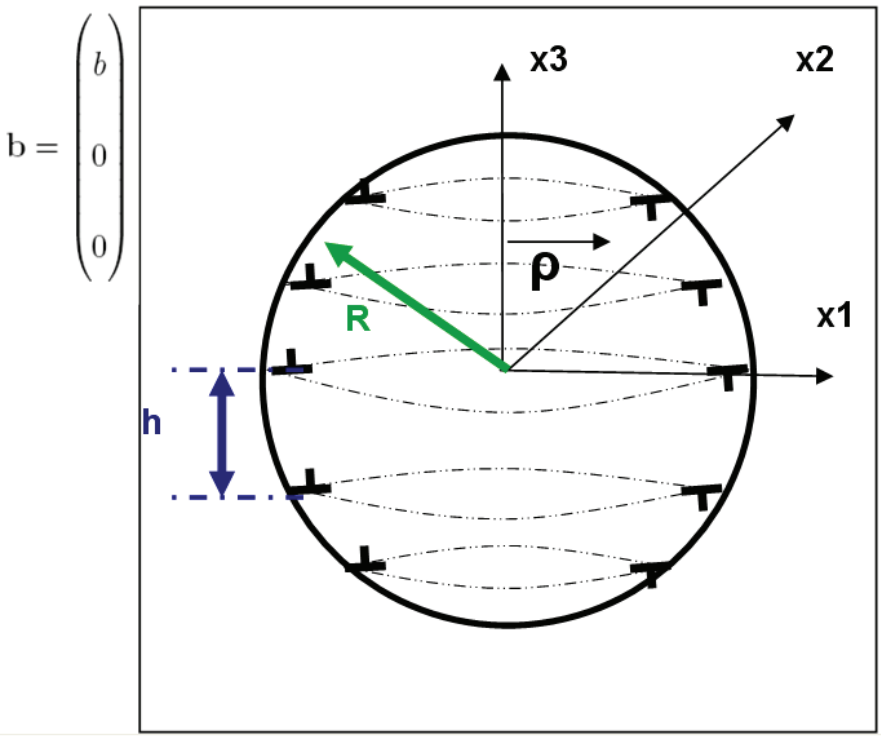

FIGURE 4.13 – Grain sphérique de rayon R avec une distribution discrète de boucles de super-dislocations contrainte par le joint de grain. La distribution de boucle est caractérisée par h (distribution uniforme ou non-uniforme pour h).

un premier temps, décidé d'étudier le cas de grains déformés principalement par glissement simple (cf. figures 4.12 et 4.14). La distribution des boucles de super-dislocations peut être caractérisée à partir de la position spatiale des marches mesurées par AFM. Dans cette modélisation, ces grains particuliers sont dans une matrice élastique infinie représentant de manière simplifiée les grains environnants. Par conséquent, les effets de la plasticité discrète inter-granulaire sont négligés dans

un premier temps dans ce chapitre dans le but de ce concentrer sur la contribution intra-granulaire. Le Chapitre 5 traitera de telles extensions du présent modèle.

4.3.2 Cas d'une distribution discrète non-uniforme

Les boucles de super-dislocations (indicées (n) dans la suite) sont supposées être espacées de manière non-uniforme et ont un super-vecteur de Burgers noté $\underline{B}^{(n)}$. Les distorsions plastiques $\underset{\sim}{\beta}^p(\underline{x})$ peuvent s'exprimer dans le repère local (x_1, x_2, x_3) (cf. figure 4.13) associé au système de glissement actif dont la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$ est telle que la seule composante non-nulle est :

$$\beta^p_{31} = \sum_n B^{(n)}_1 n_3 \delta(S^{(n)}) = \sum_n B^{(n)} H\left(1 - \frac{\rho}{a^{(n)}}\right) \delta\left(x_3\left(\{h^n\}\right)\right), \tag{4.2}$$

où $a^{(n)} = \left(R^2 - x_3\left(\{h^n\}\right)\right)^{0.5}$ est le rayon des boucles à l'altitude $x_3\left(\{h^n\}\right)$ qui est déterminé pour la distribution discrète de bandes de glissement $\{h^n\}$. ρ et x_3 sont, respectivement, la coordonnée radiale et l'altitude dans le système de coordonnées cylindriques (ρ, θ, x_3) (défini par $x_1 = \rho cos(\theta)$ et $x_2 = \rho sin(\theta)$). $\delta\left(x_3\left(\{h^n\}\right)\right)$ est la fonction de Dirac dans la direction (x_3) à l'altitude $x_3\left(\{h^n\}\right)$ de chaque bande. H est la fonction d'Heaviside telle que :

$$H\left(1 - \frac{\rho}{a^{(n)}}\right) = \begin{cases} 1 \; si \; \rho \leq a^{(n)} \\ 0 \; si \; \rho \leq a^{(n)} \end{cases}. \tag{4.3}$$

4.3.3 Cas d'une distribution discrète uniforme

Si on simplifie la distribution de super-dislocations "réelle" par une distribution de boucles périodiques (espacement périodique h correspondant à la distance moyenne entre bandes de glissement), la distorsion plastique s'écrit (cf. Chapitre 3) :

$$\beta^p_{31} = \sum_{n=-N}^{+N} B^{(n)}_1 n_3 \delta(S^{(n)}) = \sum_{n=-N}^{+N} B^{(n)} H\left(1 - \frac{\rho}{a^{(n)}}\right) \delta\left(x_3 - nh\right), \tag{4.4}$$

où $a^{(n)} = (R^2 - nh)^{0.5}$ est le rayon des boucles à l'altitude $x_3 = nh$. $\delta(x_3 - nh)$ est la fonction de Dirac dans la direction (x_3) à l'altitude $x_3 = nh$.

4.3.4 Calcul de la désorientation intra-granulaire

Pour comparer les données expérimentales (mesures EBSD : cf. figures 4.12 et 4.14) à l'approche théorique, il faut calculer en tout point du cristal, la rotation du réseau cristallin résultant de la présence de dislocations.
En supposant que l'évolution de la texture cristallographique est seulement reliée aux rotations élastiques $\underset{\sim}{\omega}^e$ (partie antisymétrique de $\underset{\sim}{\beta}^e$; cf. Chapitre 3), l'évolution des angles d'Euler en tout point du cristal est calculée en utilisant la formule suivante (cf. détails des calculs en annexe D) :

$$\begin{cases} \Delta\varphi_1 = -\omega_{12}^e + \frac{cos(\Phi)}{sin(\Phi)}(\omega_{13}^e cos(\varphi_1) + \omega_{23}^e sin(\varphi_1)) \\ \Delta\Phi = -\omega_{23}^e cos(\varphi_1) + \omega_{13}^e sin(\varphi_1) \\ \Delta\varphi_2 = -\frac{cos(\varphi_1)}{sin(\Phi)}\omega_{13}^e - \frac{sin(\varphi_1)}{sin(\Phi)}\omega_{23}^e \end{cases} \tag{4.5}$$

où $\varphi 1, \phi, \varphi 2$ sont les angles d'Euler (en utilisant les notations introduit par Bunge [Bun82]).
Dans le but de mettre en évidence les hétérogénéités intra-granulaires des rotations de réseau, les désorientations intra-granulaires par rapport à une orientation de référence choisie au centre des grains ont été calculées. Les détails de ces calculs sont développés dans l'annexe D.

4.3.5 Hypothèses du modèle pour les calculs

Pour décrire la microstructure observée sur la figure 4.14 à l'aide du modèle développé dans le Chapitre 3, la mise en place d'hypothèses simplificatrices a été

nécessaire compte tenu de la complexité de l'auto-organisation collective des dislocations à l'intérieur des grains (cf. Chapitre 1).

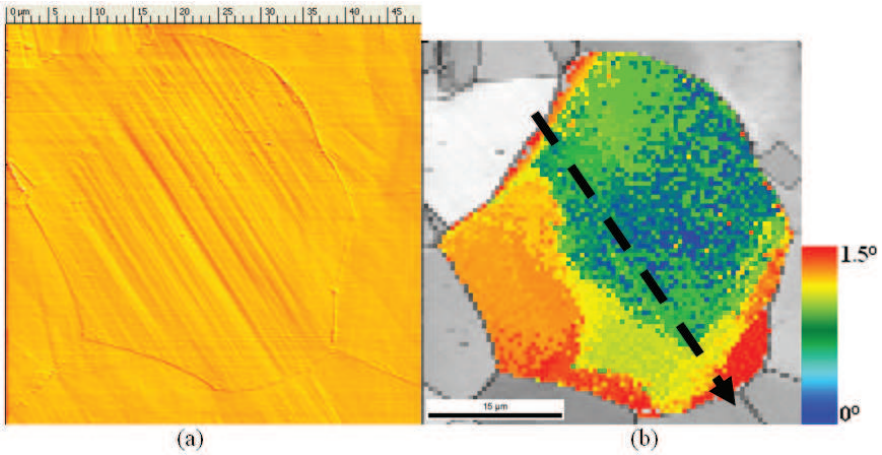

FIGURE 4.14 – Echantillon ayant subi le traitement thermique A (cf. tableau 4.1). (a) Micrographie AFM : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$; (b) Image EBSD correspondante en contraste de qualité des lignes de Kikuchi : les désorientations intra-granulaires ont été calculées par rapport au centre du grain [PBVB10].

Hypothèse (i)

La matrice entourant le grain étudié est supposée élastique pure. C'est-à-dire que la plasticité discrète dans les grains environnants n'est pas prise en compte. On se concentre dans cette étude sur l'impact de la microstructure intra-granulaire sur les désorientations de réseau. Comme on peut l'observer sur les micrographies reportées sur les figures 4.11(a), 4.12(a) et 4.14(a), la caractérisation des distributions de bandes de glissement discrète dans les grains environnants s'avère très complexe. Leur modélisation l'est tout autant.

Hypothèse (ii)

La distribution de bandes de glissement qui a été modélisée, est celle mesurée sur le profil AFM (cf. figures 4.8(a) et 4.9). Chaque bande a donc été modélisée par une boucle de super-dislocation, bien qu'il est expérimentalement observé que la distribution de la plasticité à l'intérieur même d'une bande est bien plus complexe (cf. figure 4.8(b)). Celles-ci sont en effet constituées de nombreuses lignes de glissement ayant des distributions spatiales complexes.
Par comparaison, les mêmes calculs ont été effectués avec une distribution de bande de glissement périodique (comme ceux modélisées par Berbenni et al. [BBR08]). La période de cette distribution correspond à la distance moyenne entre bandes de glissement mesurée par AFM ; $h = 2,16\mu m$).

Hypothèse (iii)

Les bandes de glissement contenant plusieurs lignes de glissement ont été modélisées par des super-dislocations (cf. figure 4.15). Les empilements de dislocations discrètes circulaires (comme étudiés par Li et Lu [LL67]) ne sont donc pas explorés. Ceci nécessiterait un calcul d'équilibre pour connaître les positions exactes des boucles circulaires de dislocations dans l'empilement sur plusieurs plans coplanaires dans le grain. Celui-ci s'avérerait extrêmement compliqué dans le cadre de cette étude. Il faudrait en effet prendre en compte les interactions entre toutes les boucles de chaque empilement dans le grain.

Hypothèse (iv)

Chaque boucle de super-dislocation a le même vecteur de Burgers $\underline{B}$ contenant n dislocations telles que son module est $B = nb$, où b est le module du vecteur de Burgers d'une dislocation parfaite. Bien que les mesures AFM donnent une indication sur la hauteur de marches formées par les bandes de glissement, une utilisation directe des ces résultats pour déterminer l'activité plastique dans chaque bande est trop simpliste et s'avère impossible.

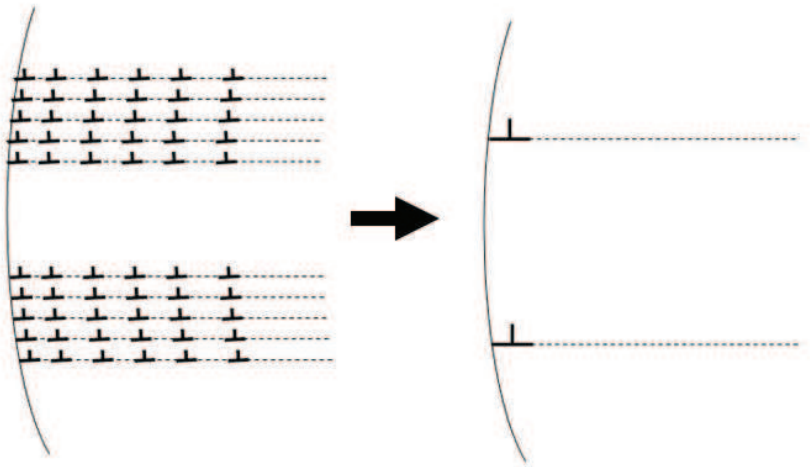

FIGURE 4.15 – Modélisation simplifiée des bandes de glissement par des boucles de super-dislocations.

Hypothèse (v)

B est ajusté à partir de l'estimation de la déformation plastique moyenne dans le grain étudié :

$$\overline{\epsilon_{13}^{p}} = \frac{1}{2}\overline{\gamma} = \sum_{n} B^{(n)} \frac{S^{(n)}}{V} \tag{4.6}$$

$\overline{\epsilon_{13}^{p}}$ est la déformation plastique moyenne, $S^{(n)}$ est la surface de la boucle n, $B^{(n)}$ est le vecteur de Burgers des super-dislocations et V est le volume du grain sphérique. L'estimation de la déformation plastique moyenne dans les grains a été calculée à l'aide d'un modèle auto-cohérent à un site pour un métal c.f.c. en élasto-viscoplasticité (ce modèle est détaillé dans Berbenni et al. [BFLB04]).
Les différents paramètres d'entrée du modèle ont été identifiés à partir d'une courbe de traction uni-axiale (cf. figure 4.16).
La fonction de distribution d'orientation cristallographique utilisée dans le modèle a été mesurée par EBSD (cf. figure 4.17). Pour une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$, le grain particulier étudié (cf. figure 4.14) avec l'orientation cristallographique initiale : $\varphi 1 = 97^{\circ}$, $\phi = 51^{\circ}$, $\varphi 2 = 35^{\circ}$ présente une déformation plastique moyenne de $1,3\%$.

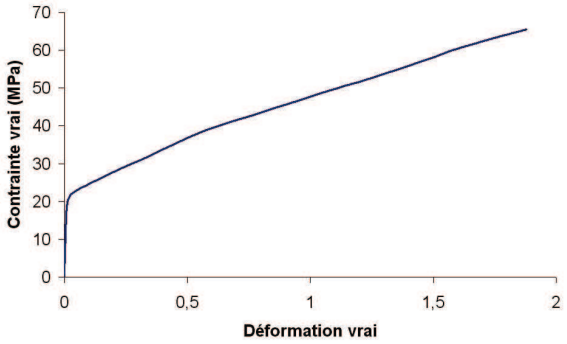

FIGURE 4.16 – Courbe de traction contrainte vraie / déformation vraie réalisée sur un échantillon de nickel effectué sur un échantillon ayant subi le traitement thermique A (cf. tableau 4.1)

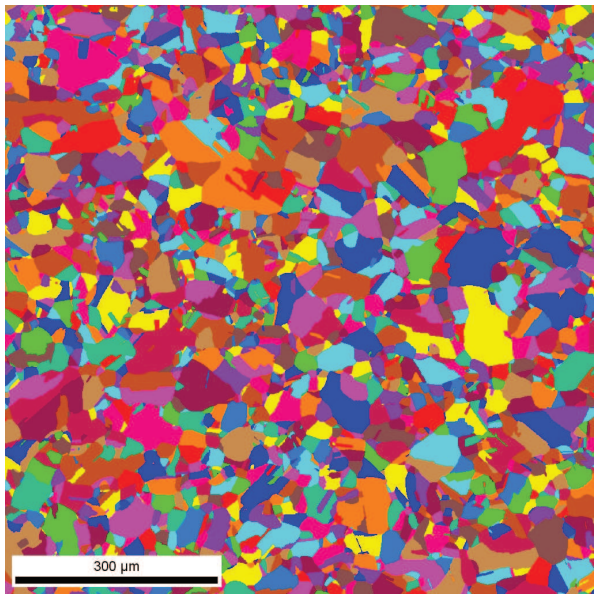

FIGURE 4.17 – Image EBSD sur un échantillon de nickel effectué sur un échantillon ayant subi le traitement thermique A (cf. tableau 4.1) dans le plan de la tôle.

4.4 Confrontation du modèle aux résultats expérimentaux

4.4.1 Désorientations intra-granulaires

Pour confronter les désorientations locales intra-granulaires calculées par le modèle micromécanique aux mesures EBSD, une ligne parallèle aux bandes de glissement a été sélectionnée (cf. figure 4.14). A partir des mesures EBSD, les désorientations par rapport à l'orientation cristallographique centrale ont été calculées le long de cette ligne, comme reporté en figure 4.18. On observe une forte variation entre

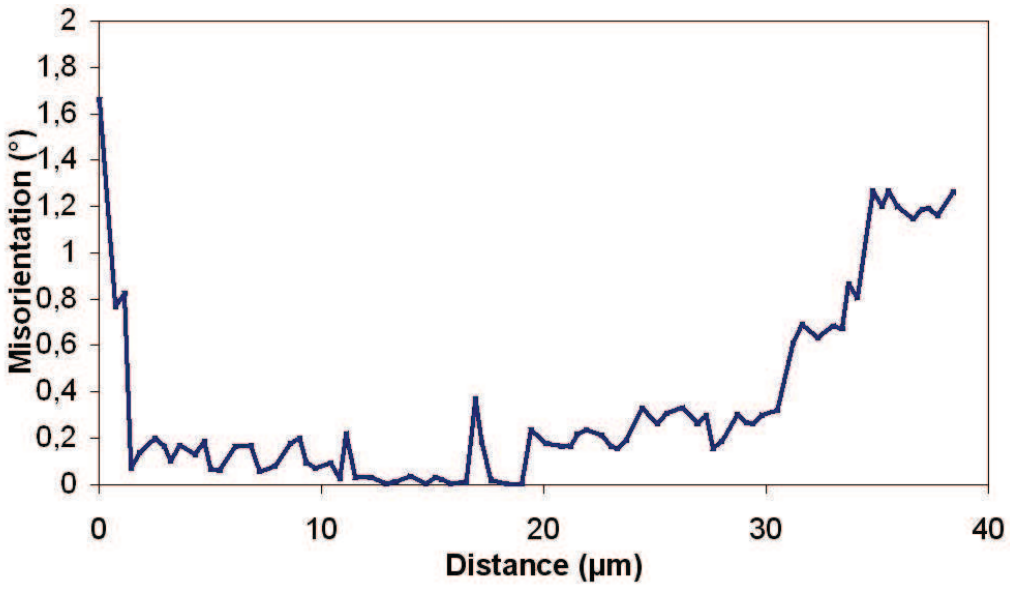

FIGURE 4.18 – Désorientations intra-granulaires (°) mesurée par EBSD, par rapport à une orientation cristallographique de référence choisie au centre du grain, le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (cf. figure 4.14(b)) [PBVB10].

la région proche du joint de grains (désorientation maximale d'environ $1,6^{\circ}$) et le centre du grain étudié (pas de désorientation). Sur la figure 4.19, les désorientations

ont été calculées dans le cas d'une distribution non-uniforme de bandes de glissement dont les positions spatiales ont été mesurées directement par AFM. Malgré les hypothèses simplificatrices utilisées (hypothèses $(i) \rightarrow (v)$ décrites précédemment), les résultats obtenus par le modèle sont en bonne adéquation avec ceux mesurés expérimentalement. En particulier aux joints de grains (coté gauche sur la figure 4.19, la taille de la zone perturbée ainsi que l'ordre de grandeur de la désorientation maximale est en bonne accord avec les valeurs expérimentales. Ceci montre qu'en prenant

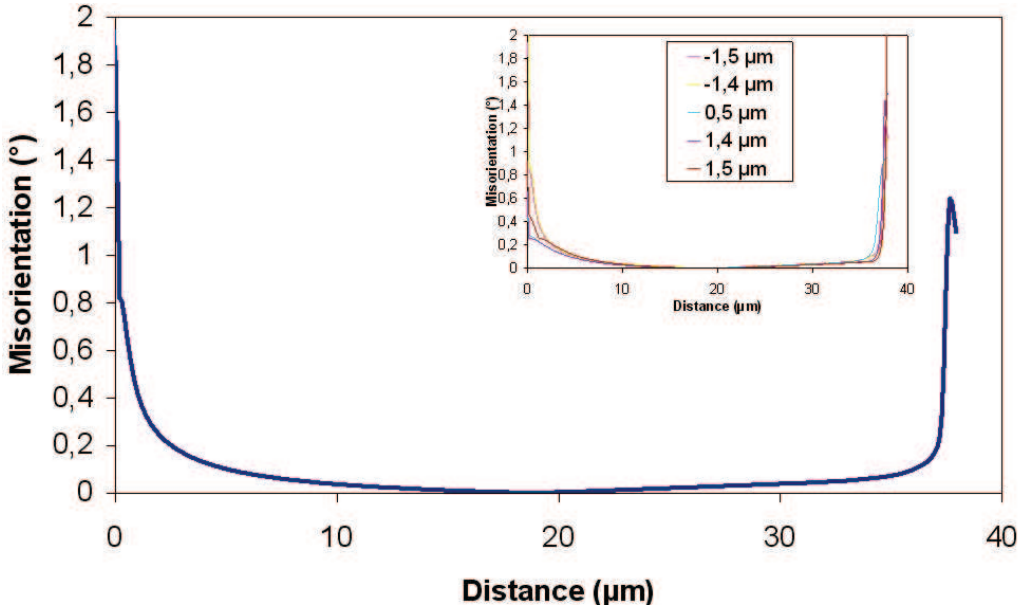

FIGURE 4.19 – Désorientations intra-granulaires calculées dans le cas d'une distribution non-uniforme de boucles de super-dislocations pour une déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$. Les valeurs sont calculées en référence à l'orientation cristallographique du centre du grain, le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (comme représentée sur la figure 4.14(b)) et à une altitude de $1,5\mu m$ par rapport à la boucle centrale (cf. figure 4.13). Encadré : Effet de la distance par rapport à la boucle centrale sur les désorientations théoriques. Le résultat reste qualitativement le même pour la taille de couche mais la valeur maximale de désorientation obtenue au joint est variable. [PBVB10]

en compte la physique des phénomènes intra-granulaires, le modèle est capable de

prédire les hétérogénéités des champs élastiques intra-granulaires (ici les rotations élastiques). Ce résultat illustre une avancée par rapport aux modèles classiques à champs moyens introduits dans le Chapitre 2. Ceux-ci sont incapables de prédire de tels phénomènes. Dans le cas d'une approche à champ moyen, la rotation élastique du grain est uniforme, il n'y a donc pas de désorientation intra-granulaire.

On peut remarquer que les résultats théoriques obtenus dans le cas d'une distribution "réelle" de bandes de glissement obtenue par AFM (figure 4.19) donne des résultats plus proches de l'expérience (figure 4.18) que dans le cas d'une distribution périodique de boucles (figure 4.20), notamment au niveau de la taille de la couche où apparaît de forts gradients de désorientations à mesure que l'on se rapproche du joint de grain. L'utilisation de l'hypothèse d'une distribution périodique donne une couche à gradient de désorientation trop "raide" aux joints de grains par rapport aux résultats expérimentaux.

Les différences observées entre la figure 4.18 et les figures 4.19 et 4.20 sont d'origine à la fois théorique et expérimentale. En effet, les différences observées entre les deux approches sont en partie expliquées par les différentes approximations utilisées dans le modèle. A l'intérieur du grain étudié et en particulier à une distance entre $20\mu m$ et $40\mu m$ (cf. figure 4.18), le gradient de désorientation est beaucoup plus important que celui mesuré expérimentalement. Cette différence peut s'expliquer par le fait que l'on a considéré des boucles de "super-dislocations" à la place de vrais empilements de dislocations (cf. figure 4.15). Dans la réalité, la distribution de vecteur de Burgers est certainement non-uniforme le long de la ligne reportée sur la figure 4.14(b). Les phénomènes de glissement déviés ne sont pas décrits dans le modèle. Par ailleurs, la plasticité discrète dans les grains environnants peut également avoir une influence sur les champs élastiques intra-granulaires et en particulier dans la zone proche du joint de grain. Etant donné le caractère discret de la source plastique modélisée (cf. équation 4.2), les champs élastiques associés varient fortement le long de l'axe x_3 (cf. figure 4.13). Comme montré dans les encadrés des figures 4.19 et 4.20, les désorientations maximales varient entre 0.6° et 2°.

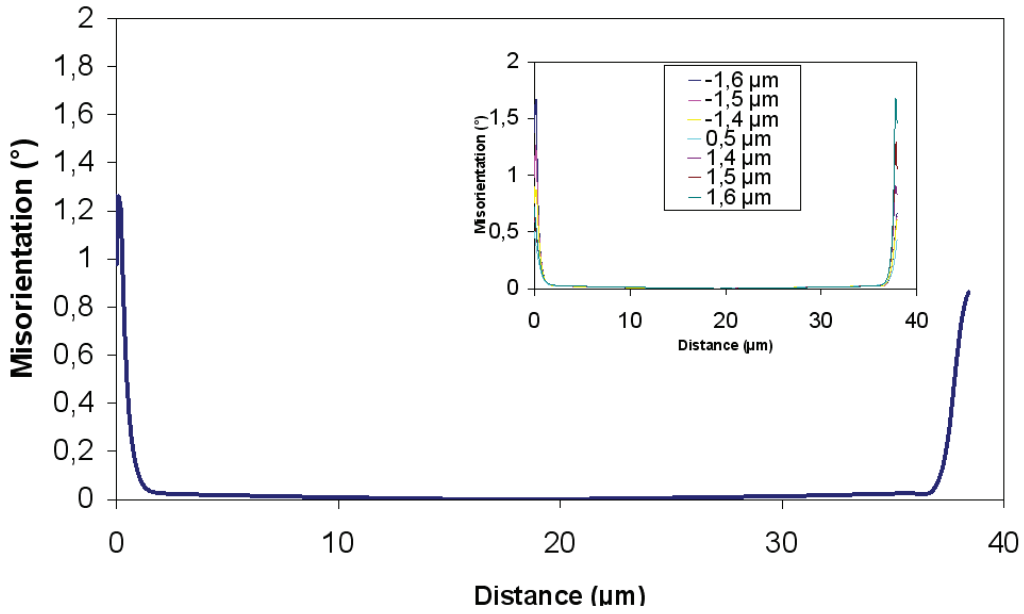

FIGURE 4.20 – Désorientations intra-granulaires théoriques dans le cas d'une distribution périodique ($h = 2.16\mu m$) de boucles de super-dislocations pour une déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$. Les valeurs sont calculées en référence à l'orientation cristallographique du centre du grain, le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (comme représentée sur la figure 4.14(b) et à une altitude de $1,5\mu m$ par rapport à la boucle centrale (cf. figure 4.13). Encadré : Effet de la distance par rapport à la boucle centrale sur les désorientations théoriques [PBVB10].

Les conditions expérimentales peuvent également expliquer les différences observées. Les mesures ont été effectuées à la surface des échantillons, ce qui implique de nombreuses conséquences. Cela offre seulement la possibilité d'avoir une vue en deux dimensions alors qu'il s'agit clairement d'un problème en trois dimensions.
La forme des grains dans le volume est inconnue et n'est donc pas forcement sphérique comme celle idéalisée dans le modèle.
Dans les grains étudiés, la surface ne montre pratiquement qu'un système de glissement activé mais au dessous de cette surface plusieurs systèmes peuvent être activés (cf. figure 4.7).
Les grains étudiés présentent une surface libre. Cela offre donc des degrés de liberté supplémentaires par rapport à l'inclusion dans notre modèle qui est entièrement immergé dans une matrice élastique infinie. La présence d'une surface libre complique le calcul des champs élastiques issus de dislocations circulaires à cause de l'existence de forces images qu'il faut calculer le plus souvent numériquement [WC07].

4.4.2 Estimation des contraintes internes et comparaison à l'approche d' Eshelby

Le calcul des désorientations est un moyen très efficace de comparaison entre la théorie et l'expérience car on s'attend à des conséquences sur les textures de déformation. Cependant, en mécanique et en mise en forme des métaux, l'estimation des contraintes internes est tout aussi importante.
Les contraintes internes ont été calculées en utilisant le même modèle que celui présenté précédemment. Les contraintes de cisaillement normalisées (i.e. ratios entre les composantes σ_{13} et $\sigma_{13}^{Eshelby}$ dans le repère local (x_1, x_2, x_3) (cf. figure 4.13) ont été calculées et sont illustrées sur la figure 4.21. Comme montré par Berbenni et al. [BBR08] et au Chapitre 3, la solution d'Eshelby est retrouvée au centre du grain pour un nombre suffisant de boucles (celles-ci sont supposées périodiquement es-

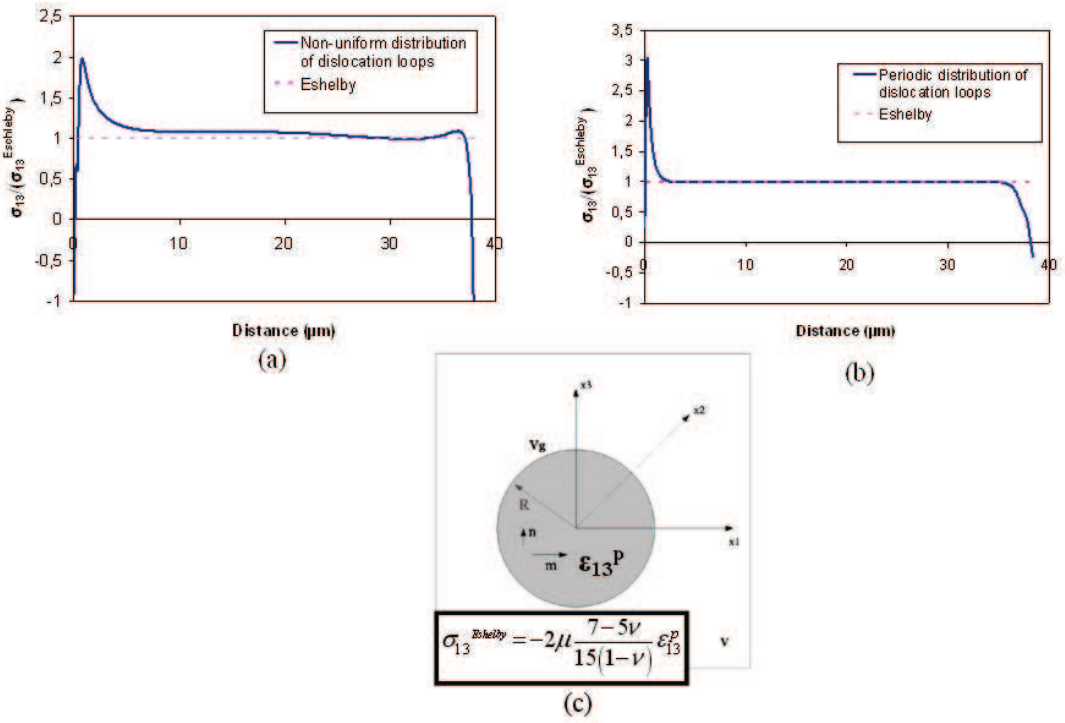

FIGURE 4.21 – Variation de la composante σ_{13} des contraintes internes normalisées par rapport à $\sigma_{13}^{Eshelby}$ dans le repère local (x_1, x_2, x_3) le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (cf. figure 4.14(b)) : (a) distribution non-uniforme de bandes de glissement et comparaison avec la solution d'Eshelby (pour une déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$) ; (b) distribution périodique de bandes de glissement et comparaison avec la solution d'Eshelby (pour une même déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$) ; (c) rappel de la solution d'Eshelby dans le cas d'un grain sphérique déformé en glissement simple. [PBVB10]

pacées dans le Chapitre 3 [BBR08]). Dans les zones proches du joint de grain, un fort gradient de contraintes internes est également observé. Le modèle d'Eshelby ne peut prédire ce gradient. Les différences entre les contraintes internes calculées par le présent modèle et celle d'Eshelby peuvent être importantes, surtout dans la zone proche des joints de grain.

Dans le but de quantifier les effets d'une distribution de bandes de glissement non uniforme mesurée par AFM, la variation du ratio $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}$ le long de l'axe introduit sur la figure 4.14 (dans le repère global) a été suivie par comparaison à la distribution périodique avec un espacement moyen entre bandes de $h = 2,16\mu m$. Dans le cas d'une distribution non-uniforme de bandes de glissement (cf. figure 4.21(a)), la variation de $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}$ est proche du résultat d'Eshelby (cf. figure 4.21(c)) au centre du grain, mais non uniforme comme la solution discrète périodique décrite sur la figure 4.21(b). La zone où les contraintes sont fortement perturbées s'étend sur une distance entre $6\mu m$ et $8\mu m$ à partir du joint de grain avec une valeur maximale $\left|\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}\right| \approx 2$. Le cas d'une distribution périodique de bandes (cf. figure 4.21(b)) montre le même résultat que celui d'Eshelby (valeur uniforme) au centre du grain. La zone perturbée est cependant plus fine (elle s'étend sur une distance de $2\mu m$ et $3\mu m$ à partir du joint de grain). La transition entre les deux zones est beaucoup plus nette avec une valeur maximale $\left|\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}\right| \approx 3$ [PBVB10].

4.5 Conclusions

La caractérisation d'une microstructure de déformation a été utilisée dans une nouvelle approche micromécanique pour décrire précisément les hétérogénéités du glissement plastique intra-granulaire. Les bandes de glissement à l'intérieur des grains déformés ont été modélisées par une distribution de boucles de super-dislocations contrainte par un joint de grain sphérique. Les longueurs internes mesurées par AFM (i.e. la taille de grain ainsi que la distribution de bandes de glissement) ont directe-

ment été utilisées dans le modèle. La description fine de la plasticité intra-granulaire qui est discrète par nature constitue une avancée forte par rapport aux théories de la micromécanique classiques (approches continues des défauts à champs moyens). Les champs élastiques associés à la microstructure de déformation inélastique ont été calculés. Contrairement aux approches à champs moyens basées sur le problème de l'inclusion d'Eshelby, où les champs élastiques sont homogènes à l'intérieur du grain, on a ici pris en compte explicitement les hétérogénéités de la plasticité discrète dans le but de prédire les champs hétérogènes à l'échelle du grain (déformations, rotations, contraintes). Pour valider la pertinence du modèle, des cartographies 2D de la désorientation intra-granulaire ont été effectuées à l'aide d'un MEB équipé d'un système EBSD. Ces mesures ont été comparées à des calculs théoriques pour des distributions non-uniformes et périodiques de bandes de glissement. Les résultats du modèle et ceux expérimentaux montrent de forts gradients de désorientation dans la zone proche des joints de grain. Le cas d'une distribution de bandes de glissement non-uniforme donne de meilleurs résultats que le cas d'une distribution périodique en comparaison avec les résultats expérimentaux [PBVB10].

Chapitre 5

Quelques possibilités d'extensions à des cas plus complexes

Le modèle présenté dans les chapitres 3 et 4 se concentre uniquement sur l'impact des hétérogénéités intra-granulaires pour des taux de déformation plastique très faibles sur les champs élastiques. Pour cela, des simplifications ont été mises en place. On s'est limité à l'étude de grains déformés majoritairement en glissement simple. L'accommodation de la déformation intra-granulaire due aux grains environnants n'est modélisée qu'au travers de l'interaction avec une matrice infinie purement élastique. Les intéractions inter-granulaire de la plasticité ont donc de fait été négligés, pour ne se concentrer que sur les contributions intra-granulaires. Cependant, la flexibilité de ce modèle rend possible, via certaines extentions, l'étude de nombreuses configurations statiques de dislocations (cf. figure 5.1) plus complexe que celle présenté dans les deux chapitres précédents.

Il est par exemple possible d'étudier :

– le cas de grains déformés plastiquement par des distributions discrètes de dislocations sur plusieurs systèmes de glissement (cf. figure 5.1(b)),

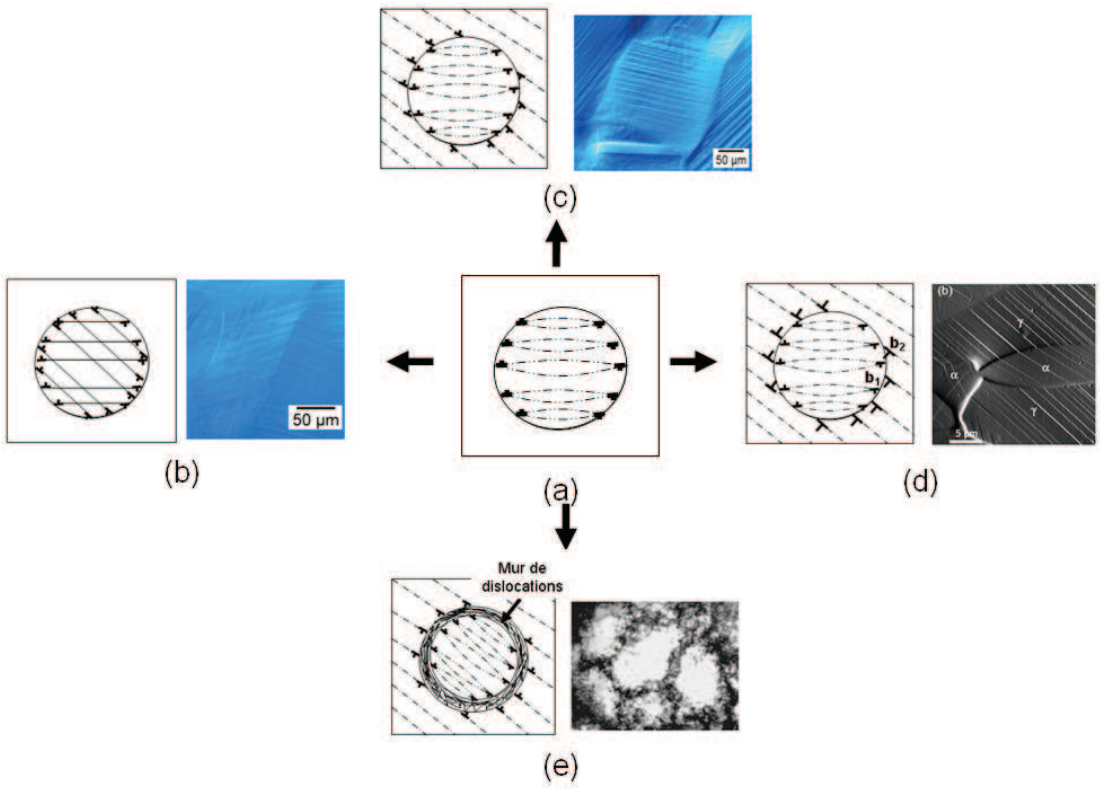

FIGURE 5.1 – Différents cas d'études possibles à partir du modèle de base (a) présenté dans le chapitre 3 : (b) cas d'un glissement double (multiple), (c) cas d'un bi-cristal avec glissement simple (pour application poly-cristalline, (d) cas d'un alliage bi-phasé (micrographie AFM d'un acier duplex (Ferrite α, Austéniteγ) [SSV08]) et (e) cas des cellules de dislocations (micrographie MET [KSL+08] dans un alliage Ni_3Al)

– l'effet de la plasticité discrète inter-granulaire sur les champs élastique (cf. figure 5.1(c)), et sur la couche à fort gradient de désorientation comme observée près du joint de grain dans le chapitre précédent,
– l'effet de la plasticité discrète inter-phase (avec différents types de vecteur de Burgers dans les phase) sur les champs élastiques (cf. figure 5.1(c)),
– le cas des cellules de dislocations (cf. figure 5.1(d)) en incorporant des distributions discrètes de dipôles de dislocations circulaires pour former des parois de dislocations à géométrie sphérique et, leurs conséquences sur les champs élastiques.

Dans ce chapitre, on présente quelques extensions du modèle à des cas plus complexes. Dans un premier temps, on propose une étude démontrant l'intérêt et l'impact des interactions intra-granulaires dans le cas d'une plasticité discrète. Dans un second temps, on étudie les hétérogénéités des champs élastiques dans le cas de cellules de dislocations.

5.1 Plasticité discrète dans une inclusion plastique sphérique noyée dans une matrice plastique

Le problème fondamental dans la détermination du comportement plastique des matériaux poly-cristallins (mono ou polyphasés) concerne l'évaluation des champs mécaniques liés aux incompatibilités de la déformation plastique de grain à grain.
La méthode choisie, dans ces travaux, pour mener à bien cette évaluation consiste à partir d'un grain (l'inclusion) ayant subi une déformation plastique et situé dans une matrice infinie et homogène représentant les autres grains.
Dans le but d'évaluer l'impact des phénomènes discrets sur la contribution inter-granulaire, on propose ici d'étendre l'approche développée dans le chapitre 3 au cas d'une inclusion à plasticité discrète dans une matrice plastique infinie dont la plasticité est discrète. On interprétera cette nouvelle plasticité discrète également à l'aide

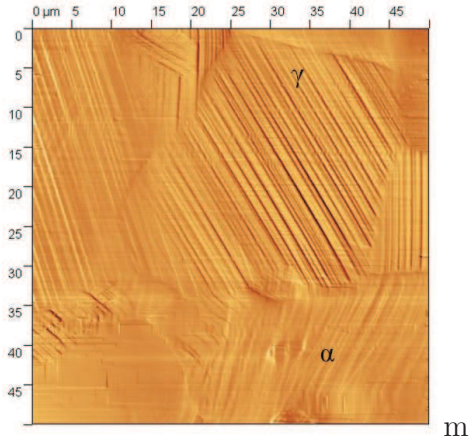

FIGURE 5.2 – Micrographie AFM : microstructure de déformation d'un acier DUPLEX après une déformation plastique macroscopique de 1.5% (α : Ferrite, γ : Austénite)

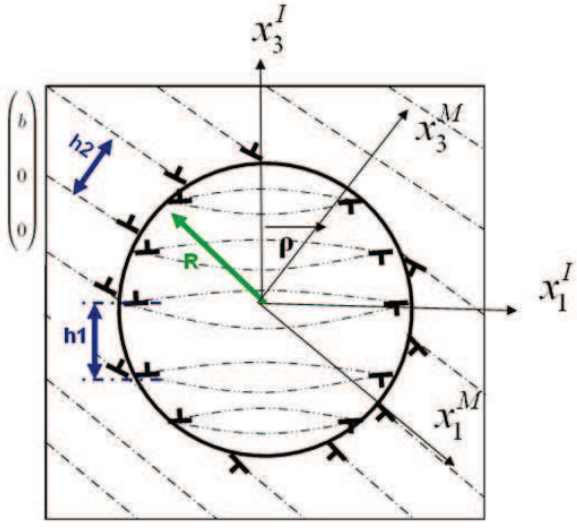

FIGURE 5.3 – Grain sphérique avec un rayon R et deux distributions périodiques de dislocations contraintes par le joint de grains caractérisés par h_1 pour les boucles intra-granulaires et par h_2 pour les boucles dans la matrice.

d'une distribution périodique de dislocation (cf. figure 5.3). En effet, il est expérimentalement observé ([Jao65], cf. chapitre 3) que dans le cas de poly-cristaux que tous les grains plastifient plus ou moins dès le début de la déformation. Il est intéressant d'évaluer l'impact de la plastification des grains environnants sur les champs élastiques intra-granulaires. Les premiers travaux de modélisation sur l'interaction plastique inter-granulaire ont été réalisées par Kröner [Krö61]., qui a étendu le modèle d'Eshelby [Esh57]. au cas du poly-cristal élasto-plastique. On peut montrer que l'extension de Kröner revient à généraliser la solution d'Eshelby au cas où la matrice a subi une déformation plastique homogène égale à la valeur moyenne des déformations plastiques locales. Comme dans le cas du modèle d'Eshelby, ce modèle utilise une approche à champ moyen négligeant les phénomènes discrets de la plasticité. Ce modèle ne permet donc pas la prise en compte de longueurs internes tel que l'espacement entre bande de glissement. Les conditions aux limites pour ce type de modèle sont liées à un glissement plastique moyen (cf figure 3.1).

Dans ce travail, on propose d'étudier le cas d'une inclusion plastique dans une matrice plastique dans le cas d'une plasticité discrète, c'est-à-dire, le cas de plusieurs distributions de dislocations discrètes dans le grain et la matrice.
Cette approche peut permettre l'étude du cas de métaux mono-phasés ou poly-phasés (cf. figure 5.2). L'approche discrète présente l'avantage contrairement à l'approche à champs moyens (modèle d'Eshelby-Kröner [Krö61]) de modéliser plusieurs familles de dislocations. Par exemple, dans le cas d'un acier duplex (cf. figure 5.2), deux types de dislocations (vecteurs de Burgers différents) sont présentes :

- dans l'austénite (structure cubique à faces centrées)
- dans la ferrite (structure cubique centrée)

Dans cette étude, on démontre que la prise en compte des phénomènes discrets permet de démontrer la contribution de la plasticité discrète intra-granulaire sur les champs inter-granulaires.

5.1.1 Modèle d'Eshelby-Kröner : rappel

Les premiers travaux sur les problèmes d'interaction entre grains ont été réalisés par Kröner [Krö61]. Le principe du modèle consiste à considérer un grain particulier (l'inclusion) de volume V^I et à étudier les interactions entre ce grain et l'ensemble de tous les autres constituant une matrice infinie, continue et homogène de module d'élasticité $\underset{\approx}{C}^0$ qui aurait subi uniformément la déformation plastique moyenne $\underset{\sim}{E}^p$. La déformation plastique est supposée homogène dans l'inclusion de volume V^I (cf. figure 5.4). Le milieu est siège d'une déformation libre $\underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})$, telle que :

$$\epsilon^p_{ij}(\underline{x}) = E^p_{ij} + \delta\epsilon^p_{ij}(\underline{x}) \tag{5.1}$$

où dans le cas du problème de la figure 5.4, on a :

$$\delta\epsilon^p_{ij}(\underline{x}) = (\epsilon^{pI}_{ij} - E^p_{ij})\theta^I(\underline{x}) = \Delta\epsilon^{pI}_{ij}\theta^I(\underline{x}) \tag{5.2}$$

avec :

$$\theta^I(\underline{x}) = \begin{cases} 1 \text{ si } r \in V^I \\ 0 \text{ si } r \notin V^I, \end{cases} . \tag{5.3}$$

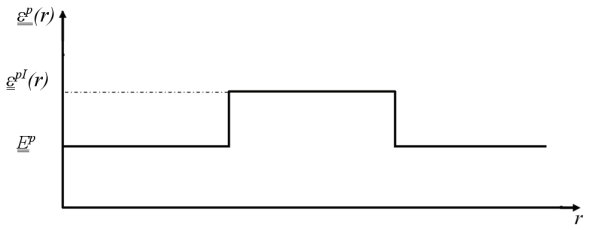

FIGURE 5.4 – Champs de déformation uniformes par morceaux dans l'inclusion I et dans la matrice.

Ce problème est un cas particulier du problème présenté en annexe B en remplaçant $\underset{\sim}{\epsilon}^p(\underline{x})$ par $\underset{\sim}{\delta\epsilon}^p(\underline{x})$. Les déformations totales $\underset{\sim}{\epsilon}(\underline{x})$ s'écrivent alors :

$$\epsilon_{ij}(\underline{x}) = E_{ij} + \int_V \Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\delta\epsilon^p_{mn}(\underline{x}')dV', \tag{5.4}$$

où Γ_{ijkl} est le tenseur de Green modifié associé à $\underset{\sim}{C}^0$ [Krö89] défini par :

$$\Gamma_{ijkl}(\underline{x}-\underline{x'}) = -\frac{1}{2}\left(G_{ik,jl}(\underline{x}-\underline{x'}) + G_{jk,il}(\underline{x}-\underline{x'})\right). \tag{5.5}$$

Les déformations totales peuvent alors s'écrire ainsi :

$$\epsilon_{ij}(\underline{x}) = E_{ij} + \Delta\epsilon^{pI}_{mn} \int\limits_{V^I} \Gamma_{ijkl}(\underline{x}-\underline{x'}) C^0_{klmn} dV' \tag{5.6}$$

$$\epsilon_{ij}(\underline{x}) = E_{ij} + S^E_{ijmn}(\underline{x})\Delta\epsilon^{pI}_{mn} \tag{5.7}$$

où $S^E_{ijmn}(\underline{x}) = C^0_{klmn} \int\limits_{V^I} \Gamma_{ijkl}(\underline{x}-\underline{x'})dV'$ est le tenseur d'Eshelby en tout point. Dans le cas d'une inclusion ellipsoïdale, ce tenseur est uniforme pour tout point $\underline{x}$ de l'inclusion [Esh57] mais non uniforme pour tout point $\underline{x}$ en dehors de l'inclusion [Esh59].

Par analogie, les rotations totales s'écrivent :

$$\omega_{ij}(\underline{x}) = W_{ij} + \Delta\epsilon^{pI}_{mn} A^E_{ijmn}(\underline{x}), \tag{5.8}$$

avec $A^E_{ijmn}(\underline{x}) = C^0_{klmn} \int\limits_{V^I} {}^a\Gamma_{ijkl}(\underline{x}-\underline{x'})dV'$ où ${}^a\Gamma_{ijkl}$ est le tenseur de Green modifié associé à $\underset{\approx}{C}^0$ [Krö89] défini par :

$${}^a\Gamma_{ijkl}(\underline{x}-\underline{x'}) = -\frac{1}{2}\left(G_{ik,jl}(\underline{x}-\underline{x'}) - G_{jk,il}(\underline{x}-\underline{x'})\right) \tag{5.9}$$

Les déformations $\underset{\sim}{\epsilon}^I$, les rotations $\underset{\sim}{\omega}^I$ et les contraintes $\underset{\sim}{\sigma}^I$ (en appliquant la loi de Hooke) sont uniformes dans l'inclusion I de forme ellipsoïdale et données respectivement par :

$$\underset{\sim}{\epsilon}^I = \underset{\sim}{E} + \underset{\approx}{S}^{E^I} : \underset{\sim}{\Delta\epsilon}^{pI}, \tag{5.10}$$

$$\underset{\sim}{\omega}^I = \underset{\sim}{W} + \underset{\approx}{A}^{E^I} : \underset{\sim}{\Delta\epsilon}^{pI}, \tag{5.11}$$

$$\underset{\sim}{\sigma}^I = \underset{\sim}{\Sigma} + \underset{\approx}{C}^0 : \left(\underset{\approx}{S}^{Esh} - \underset{\approx}{I} \right) : \underset{\sim}{\Delta\epsilon}^{pI}, \tag{5.12}$$

avec $\underset{\sim}{\Sigma}$ la contrainte macroscopique, $\underset{\approx}{I}$ (tenseur unité d'ordre 4) est défini en notation indicielle par $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$.

5.1.2 Modèle à plasticité discrète à glissements simples dans grain et matrice

5.1.2.1 Calculs des champs mécaniques

Comme dans le Chapitre 3, on s'est dans un premier temps limité dans cette étude à des configurations de glissement simple dans le grain et dans la matrice. La distorsion plastique décrit les deux distributions différentes de dislocation schématisées en figure 5.3 :

$$\beta_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) = \beta_{ij}^{\mathrm{Ip}}(\underline{x}) + \beta_{ij}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x}) \tag{5.13}$$

où $\beta_{ij}^{\mathrm{Ip}}(\underline{x})$ et $\beta_{ij}^{\mathrm{Ip}}(\underline{x})$ sont respectivement les distorsions plastiques représentant les boucles de dislocations intra-granulaires et les dislocations dans la matrice.
La méthodologie pour calculer les champs de déplacement associés à la présence de deux distributions de dislocations est la suivante :

- Les champs de déplacement associés à la distribution de dislocations intra-granulaires sont calculés (cf. figure 5.5).
- Les champs de déplacement associés à la distribution de dislocations dans la matrice sont calculés (cf. figure 5.6).
- Ces champs étant additifs, le champ de déplacement total est la somme des deux champs précédemment calculés en prenant soin d'effectuer les changements de repère.

a. Champ de déplacements associé à la distribution de boucles de dislocations circulaires intra-granulaires

$\beta_{ij}^{\mathrm{Ip}}(\underline{x})$ peut s'exprimer dans le repère local $\left(x_1^I, x_2^I, x_3^I\right)$ (cf. figure 5.5) associé au système de glissement actif (la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$) de telle manière que la seule composante non-nulle est :

$$\beta_{31}^{\mathrm{Ip}}(\underline{x}) = b_1 \sum_{n=-N_1}^{+N_1} H\left(1 - \frac{\rho^I}{a^{(n)}}\right) \delta(x_3^I - nh_1), \tag{5.14}$$

où $a^{(n)} = \sqrt{R^2 - (nh_1)^2}$ qui est le rayon des boucles à l'altitude $x_3^I = nh_1$. ρ^I et x_3^I sont respectivement la coordonnée radiale et l'altitude dans le système de coordonnées cylindriques $\left(\rho^I, \theta^I, x_3^I\right)$ définis par $\left(x_1^I = \rho^I cos(\theta^I), x_2^I = \rho^I sin(\theta^I), x_3^I\right)$. $\delta(x_3^I - nh_1)$ est la fonction de Dirac dans la direction $\left(x_3^I\right)$ et H est la fonction d'Heaviside défini par :

$$H\left(1 - \frac{\rho}{a}\right) = \begin{cases} 1 \text{ si } \rho \leq a \\ \\ 0 \text{ si } \rho > a. \end{cases} \tag{5.15}$$

Ce problème est le même que celui déjà traité dans le Chapitre 3.

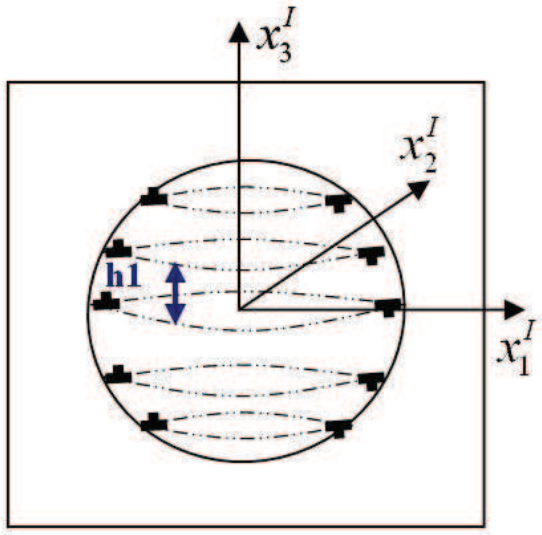

FIGURE 5.5 – Grain sphérique de rayon R avec une distribution périodique de boucles de dislocations intra-granulaires contraintes par le joint de grain et caractérisée par h_1.

b. Champ de déplacement associé à la distribution de dislocation dans la matrice

$\beta_{ij}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x})$ peut s'exprimer dans le repère local $\left(x_1^M, x_2^M, x_3^M\right)$ (cf. figure 5.6) associé au système de glissement actif (la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0,0,1)$) de telle manière que la seule composante non-nulle est :

$$\beta_{31}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x}) = \beta_{31}^{M\infty p}(\underline{x}) + \beta_{31}^{MGp}(\underline{x}) \tag{5.16}$$

$$\begin{aligned}
\beta_{31}^{M\infty p}(\underline{x}) &= b_2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x_3^M - nh_2), \\
\beta_{31}^{MGp}(\underline{x}) &= -b_2 \sum_{n=-N_2}^{+N_2} H\left(1 - \frac{\rho^M}{a^{(n)}}\right) \delta(x_3^M - nh_2)
\end{aligned} \tag{5.17}$$

En utilisant la solution de l'équation de Navier (cf. Chapitre 3) dans le cas particulier présenté en figure 5.6 où seule les composantes $\widetilde{\beta_{31}^{\mathrm{Mp}}}$ de la distorsion plastique sont non-nulles, le champ de déplacement dans l'espace réel peut s'écrire :

$$u_k(\underline{x}) = \frac{-i}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{1k}\xi_3 + \delta_{3k}\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1\xi_3\xi_k}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon_{13}^{\mathrm{p}}}(\underline{\xi}) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi, \tag{5.18}$$

Le champ de déplacements peut se décomposer ainsi :

$$\begin{aligned}
u_k(\underline{x}) &= u_k(\underline{x})^{M\infty p} + u_k^{MGp}(\underline{x}) \\
&= \frac{-i}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{1k}\xi_3 + \delta_{3k}\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1\xi_3\xi_k}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon_{13}^{M\infty p}}(\underline{\xi}) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi \\
&+ \frac{-i}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{1k}\xi_3 + \delta_{3k}\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1\xi_3\xi_k}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon_{13}^{MGp}}(\underline{\xi}) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi,
\end{aligned} \tag{5.19}$$

où $\epsilon_{13}^{M\infty p} = \frac{1}{2}\beta_{31}^{M\infty p}$ et $\epsilon_{13}^{MGp} = \frac{1}{2}\beta_{31}^{MGp}$

En utilisant la relation de compatibilité, les distorsions totales s'écrivent :

$$\beta_{ji}(\underline{x}) = u_{i,j}(\underline{x}) = u_{i,j}^{M\infty p}(\underline{x}) + u_{i,j}^{MGp}(\underline{x}) \tag{5.20}$$

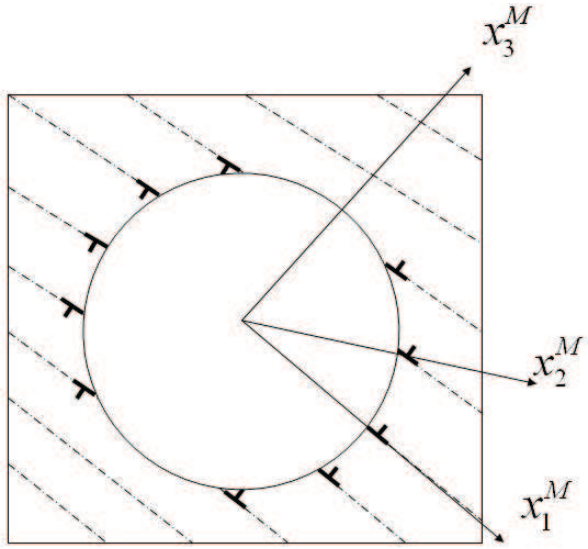

FIGURE 5.6 – Grain sphérique avec un rayon R avec la distribution périodique de dislocations dans la matrice contrainte par le joint de grains caractérisés par h_2

Le premier terme $u_{i,j}^{M\infty p}(\underline{x})$ est nul (cf. Annexe G). La distorsion plastique $\beta_{31}^{M\infty p}(\underline{x})$ dans le cas d'un milieu infini n'engendre pas d'incompatibilité. Les distorsions élastiques supplémentaires pour assurer la compatibilité ne sont donc pas nécessaires. Le second terme $u_{i,j}^{MGp}(\underline{x})$ correspond aux distorsions associées à une distribution de boucles périodiques contraintes par un joint de grain sphérique. La seule différence avec les cas traités dans le Chapitre 3 est le signe des boucles. Le calcul de ce terme est donc identique au signe prés au cas traité dans le Chapitre 3.

c. Remarque :

Des cas particuliers peuvent être déduits du modèle précédent. Tout d'abord, si h_1 tend vers 0 et la valeur de b_2 est de 0 pour chaque boucle (matrice purement élastique) alors le résultat obtenu est le même que la solution classique d'Eshelby [Esh57, BBR08]. L'autre cas intéressant est si h_1 et h_2 tendent vers 0, alors on retrouve la même solution que le problème classique d'Eshelby-Kröner d'une inclusion

plastique dans une matrice plastique [Krö61].

5.1.3 Application : impact des phénomènes inter-granulaires et discrets sur les champs et l'énergie élastiques

5.1.4 Problème traité

Le modèle poly-cristallin de Kröner [Krö61] est une approche à champs moyens, c'est à dire que les imcompatibilités grains à grains se reduisent à une description continue et singulière des densités de dislocations sur la surface du joint de grain. Les interactions à courte distance entre les défauts sous-jacents au caractère discret de la plasticité [RPGK08] ne sont pas pris en compte dans cette description. Dans le but d'évaluer l'impact de la prise en compte des phénomènes discrets sur les champs mécaniques et d'énergie, on a fait le choix particulier arbitraire d'étudier le cas de microstructures de déformation plastique qui n'engendrent pas de contraintes internes dans le cas d'une modélisation de type Eshelby-Kröner.

On considére un milieu infini à élasticité homogène isotrope et on définit dans ce milieu une inclusion limitée par une surface S. On imagine que l'inclusion et la matrice subissent une déformation plastique telle que :

- on a un glissement simple dans la matrice et dans l'inclusion, tel que la matrice est le siège d'une distorsion plastique $\beta^{\mathrm{pM}}_{ji} = \gamma^{(s)M} \mathrm{m}^{(s)M}_i \mathrm{n}^{(s)M}_j$ et l'inclusion est le siège d'une distorsion plastique $\beta^{\mathrm{pI}}_{ji} = \gamma^{(s)I} \mathrm{m}^{(s)I}_i \mathrm{n}^{(s)I}_j$,

- les systèmes de glissement activés sont tels que la normale au glissement dans la matrice est confondue à celle dans l'inclusion et que la direction de glissement dans la matrice est confondue à celle dans l'inclusion, c'est-à-dire que

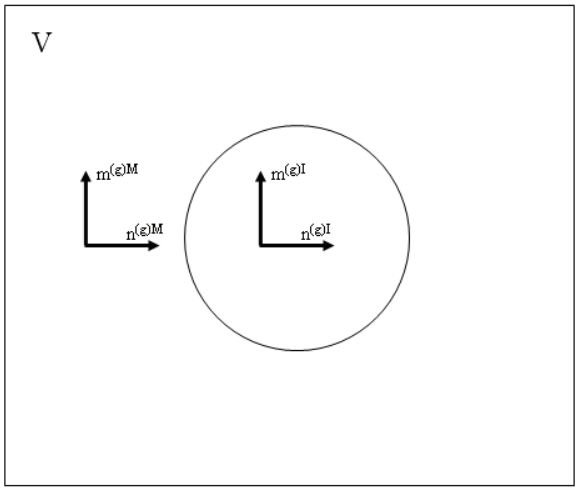

FIGURE 5.7 – Inclusion plastique dans une matrice plastique avec une approche à champs moyens. Cas particulier : même système de glissement activé ($\mathrm{n}_j^{(s)I} = \mathrm{n}_j^{(s)M}$ et $\mathrm{m}_j^{(s)I} = \mathrm{m}_j^{(s)M}$) et même distorsion plastique $\left(\beta_{ji}^{\mathrm{pM}} = \beta_{ji}^{\mathrm{pI}}\right)$ dans l'inclusion et dans la matrice

$$\mathrm{n}_j^{(s)I} = \mathrm{n}_j^{(s)M} \text{ et } \mathrm{m}_j^{(s)I} = \mathrm{m}_j^{(s)M},$$

– les amplitudes du glissement plastique dans la matrice et dans l'inclusion sont aussi égales, c'est-à-dire que $\gamma^{(s)I} = \gamma^{(s)M}$.

Dans le cadre de l'approche à champs moyens de Kröner (cf. figure 5.7), la déformation plastique est homogène dans l'inclusion et dans la matrice et par conséquent, elle ne produit pas d'incompatibilité. Le tenseur de densité de quasi-dislocations correspondant à la microstructure de déformation décrite précédemment s'écrit :

$$\alpha_{hi}^{S} = \in_{hlj} (\beta_{ji}^{\mathrm{pI}} - \underset{\sim}{\beta}^{\mathrm{pM}}{}_{ji}) n_l = 0 \tag{5.21}$$

où n_l est le vecteur normal unitaire à la surface du grain et dirigé dans la direction de la matrice.

D'aprés les équations 5.12 et 5.11, les contraintes internes ainsi que les rotations cristallographiques qui sont des conséquences du saut de distorsions plastiques sont donc inexistantes.

Dans la réalité, la déformation plastique résulte d'évènements collectifs discrets et donc n'est pas homogène. Contrairement à l'approche à champs moyens, si l'on traite ce même problème dans le cadre d'une approche discrète (cf. figure 5.8), la déformation plastique n'est plus homogène, ce qui entraine par conséquent la présence d'incompatibilités plastiques. La densité de dislocations à la frontière entre la matrice et l'inclusion est non-nulle. Dans la suite, parmi les nombreuses configurations discrètes, on choisit deux configurations significatives.

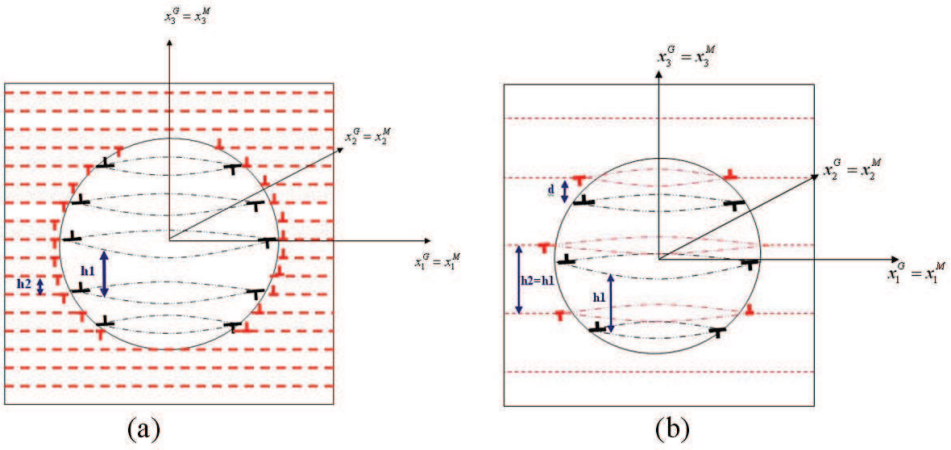

FIGURE 5.8 – Inclusion plastique dans une matrice plastique avec une approche discrète. Cas particulier : même système de glissement activé ($\mathrm{n}_j^{(s)I} = \mathrm{n}_j^{(s)M}$ et $\mathrm{m}_j^{(s)I} = \mathrm{m}_j^{(s)M}$) et même distorsion plastique moyenne $\left(\overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{ji} = \overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{ji}\right)$ dans l'inclusion et dans la matrice : (a) . L'espacement entre boucles ($h_1 < h_2$), les vecteurs de Burgers (différents dans l'inclusion et dans la matrice : $b_1 \neq b_2$) sont calculés pour avoir une déformation moyenne égale dans le grain et dans la matrice et (b) même espacement entre boucles ($h_1 = h_2$), mêmes direction de glissement et normale au plan glissement et même vecteur de Burgers pour les deux distributions ($h_1 = h_2$) mais deux les distributions de boucles sont décalées de d.

5.1.5 Résultats

a. Cas présenté en figure 5.7

Pour le cas présenté en figure 5.8(a), l'espacement entre boucles est différent dans le grain et dans la matrice. Pour maintenir la même déformation plastique moyenne dans le grain et dans la matrice, le module du vecteur de Burgers des dislocations de la matrice est ajusté. Soient $\overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$ et $\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31}$ respectivement les seules composantes non-nulles de la distorsion plastique moyenne dans le matrice et dans le grain, telles que :

$$\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31} \tag{5.22}$$

avec $\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} =\approx \frac{b_1}{h_1}$ et $\overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31} =\approx \frac{b_2}{h_2}$ Avec b_1 et b_2, les modules des vecteurs de Burgers des dislocations respectivement du grain et de la matrice, et h_1 et h_2, l'espacement entre boucles de dislocations respectivement du grain et de la matrice.

On peut observer sur les figures 5.9 et 5.10 que même si la déformation plastique est en moyenne la même dans le grain tout comme dans l'approche à champ moyen (cf. figure 5.7), celle-ci n'est pas compatible contrairement à l'approche à champ moyen. Des déformations élastiques supplémentaires sont nécessaires pour maintenir la continuité. La figure 5.9 montre la variation des contraintes internes normalisés $(\tau_{13}/\left(2\mu\left(1-\beta)\overline{\epsilon^{pI}_{13}}\right)\right)$. On peut observer que, dans le coeur du grain, les contraintes internes sont homogènes et proches des résultats d'Eshelby-Kröner, c'est-à-dire proche de zéro. Par contre, les champs de contraintes internes sont fortement perturbés dans la zone proche du joint de grain.

b. Cas présenté en figure 5.8(b)

En figure 5.8(b), on représente le cas où les boucles de dislocation dans le grain et dans la matrice ont tous le même vecteur de Burgers, les mêmes plans et directions

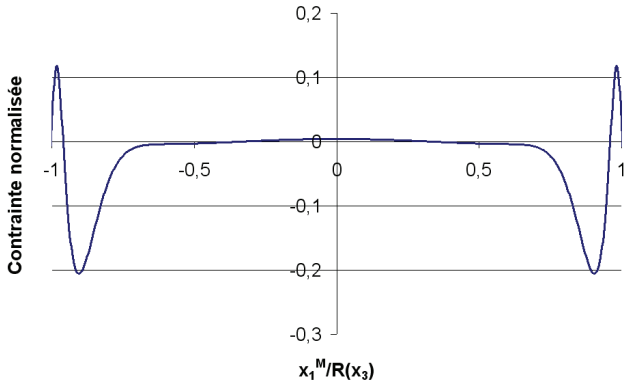

FIGURE 5.9 – Composante 13 des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon^{p}_{13}\right]$ le long de l'axe x_1^M à l'altitude $x_3 = 0,5\mu m$ ($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$) ; Taille du grain : $10\mu m$, Caractéristiques de la distribution de boucles circulaires dans le grain : espacement entre boucles $h_1 = 2,86\mu m$, $b_1 = 2,5 \times 10^{-10}\mu m$, Caractéristiques de la distribution de boucles dans la matrice : $h_2 = 2,22\mu m$, $b_2 = 1,94 \times 10^{-10}\mu m$; (cf. figure 5.8(a))

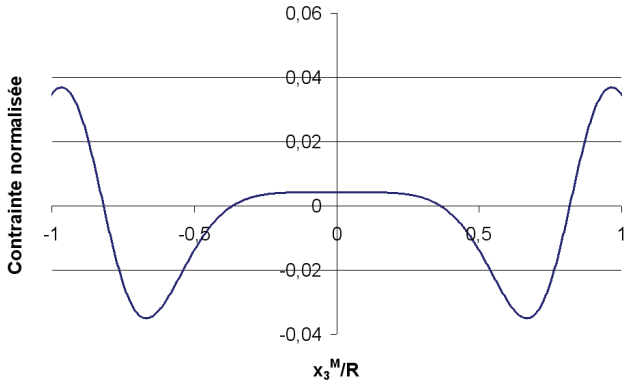

FIGURE 5.10 – Composante 13 des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon^{p}_{13}\right]$ le long de l'axe x_3^M au centre du de l'inclusion.($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$). Taille du grain : $10\mu m$. Caractéristiques de la distribution de boucles circulaires dans le grain : espacement entre boucles $h_1 = 2,86\mu m$, $b_1 = 2,5 \times 10^{-10}\mu m$, Caractéristiques de la distribution de boucles dans la matrice : $h_2 = 2,22\mu m$, $b_2 = 1,94 \times 10^{-10}\mu m$; (cf. figure 5.8(a))

de glissement, le même espacement entre boucles. La distorsion plastique moyenne est donc la même dans le grain et dans la matrice. La seule différence entre les deux distributions de boucles est qu'elles sont décalées d'une valeur d l'une par rapport à l'autre (cf. figure 5.8(b)).

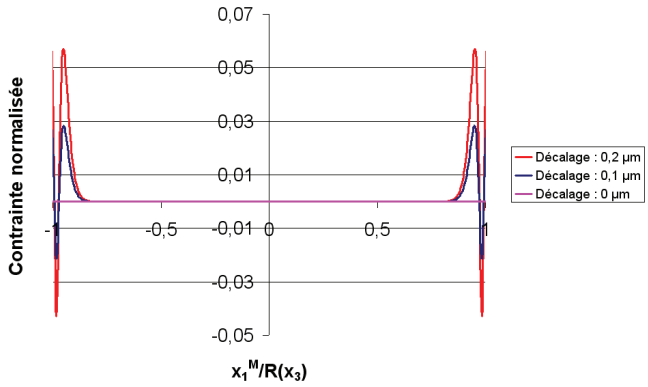

FIGURE 5.11 – Composante τ_{13} des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon^{p}_{13}\right]$ selon l'axe x_1^M à l'altitude $x_3^M = 0,5\mu m$ pour différents paramètres d. Même déformation moyenne dans le grain et la matrice ($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$). Taille du grain : $10\mu m$, espacement entre boucles de dislocation $h_1 = h_2 = h = 0,95\mu m$ et $b_1 = b_2 = 2,5.10^{-10}$. Les coordonnées x1 et x2 sont normalisées par rapport a $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ (cf. figure 5.8(b)).

Sur les figures 5.11 et 5.12, on observe que malgré l'égalité des déformations plastiques moyennes dans le grain et dans la matrice, lorsque l'altitude des boucles est décalée, la déformation plastique n'est alors pas compatible, et par conséquent, cette déformation plastique engendre des contraintes internes à la différence du modèle de Kröner. On remarque que plus le décalage entre les boucles du grain et de l'inclusion est important et plus la valeur du gradient de contraintes internes est important, la zone perturbée restant à peu près identique en taille pour les deux directions étudiées. Il est également vérifié que lorsque l'altitude des boucles est la même(cas $d = 0$), la déformation plastique est alors compatible et comme dans l'approche à champ moyen, les contraintes internes sont nulles.

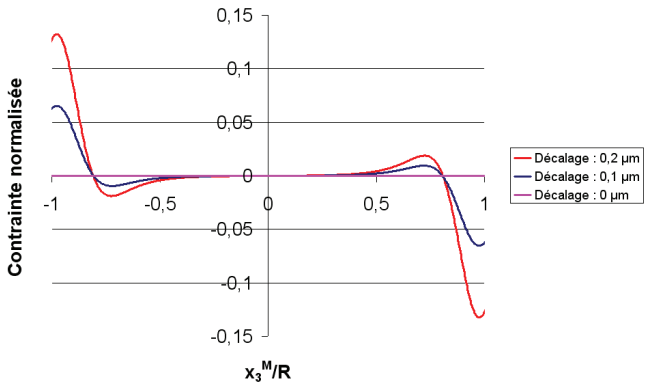

FIGURE 5.12 – Composante τ_{13} des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon^{p}_{13}\right]$ selon l'axe x_3^M au centre de l'inclusion pour différents paramètres d. Même déformation moyenne dans le grain et la matrice ($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$) Taille du grain : $10\mu m$, espacement entre boucles de dislocation $h_1 = h_2 = h = 0,95\mu m$ et $b_1 = b_2 = 2,5.10^{-10}$. Les coordonnées x1 et x2 sont normalisées par rapport a $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ (cf. figure 5.8(b)).

En figure 5.13, l'énergie élastique normalisée par rapport à une terme proportionnel au volume ($\phi/(8\pi R^3)$) (cf. Annexe G) est calculé pour différentes tailles de grain. Le décalage entre les dislocations de l'inclusion et ceux de la matrice entraîne des contraintes internes supplémentaires surtout proche du joint (couche) (cf. figure 5.11), ce qui a des conséquences sur l'énergie élastique (cf. figure 5.13). Comme dans le chapitre 3, on observe que contrairement à l'approche à champs moyens qui est totalement indépendante de la taille des grains, l'approche discrète permet l'observation d'un effet de taille de grain sur l'énergie élastique normalisée par rapport au volume. On observe également que ce décalage a une influence sur la dépendance en taille de grain de l'énergie élastique (en effet, plus d est grand, plus l'énergie élastique est grande).

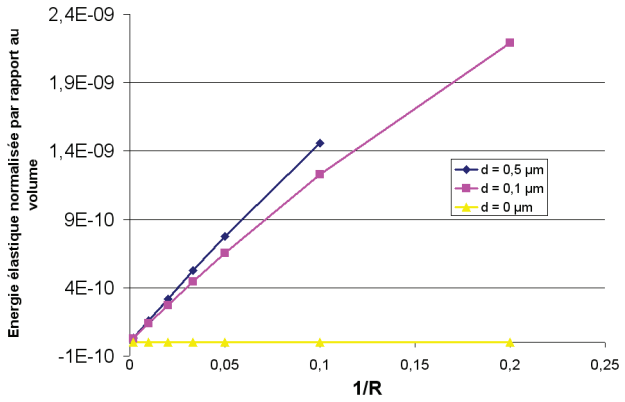

FIGURE 5.13 – Evolution de l'énergie élastique normalisée en fonction de l'inverse du rayon pour différents décalages d des boucles de l'inclusion par rapport aux boucles de la matrice avec $\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$. Les coordonnées x1 et x2 sont normalisées par rapport a $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ (cf. figure 5.8(b)).

5.1.6 Conclusions

Le problème théorique traité précédemment permet clairement de démontrer l'impact des phénomènes discrets inter-granulaires sur les champs élastiques intra-

granulaires. Comme on l'a observé dans le chapitre 1, la déformation plastique n'est pas homogène dans les grains mais elle est issue de phénomènes collectifs et discrets très complexes. On démontre dans cette étude par des exemples très simples (comme dans les chapitres 3 et 4), qu'une représentation plus fine de la plasticité permet de capter des comportements mécaniques locaux importants (contraintes internes, rotations de réseau) qu'il est impossible de modéliser avec une approche à champs moyens. Le modèle discret consiste à modéliser deux distributions discrètes de boucles de dislocations contraintes par un joint de grain sphérique. L'une des distributions de boucles de dislocations se trouve dans le grain, l'autre dans la matrice.

On a ici traité le cas théorique d'une microstructure de déformation ne présentant pas d'incompatibilité si on le traite avec une approche à champs moyens, telle que le modèle poly-cristallin de Kröner [Krö61] (cf. figure 5.7). Le même problème traité avec une approche discrète plus réaliste en glissement simple (cf. figure 5.8) permet alors de capter d'autres contributions dont l'impact sur les champs élastiques et d'énergie s'avèrent non négligeables.

5.2 Cas des cellules de dislocations

Comme détaillé dans la section 1.1.3., lorsque l'on déforme un mono ou un poly-cristal au dessus d'une certaine température critique, on voit se former des structures de dislocations sous forme de cellules à faibles densités de dislocations et des parois à fortes densités (cf. figure 5.14). La présence des cellules de dislocation entraîne (d'après [Lem95]) :

- - des contraintes internes intra-granulaires importantes du fait de fortes incompatibilités intra-granulaires,
- - une modification du libre parcours moyen des dislocations. Les dislocations

se tro

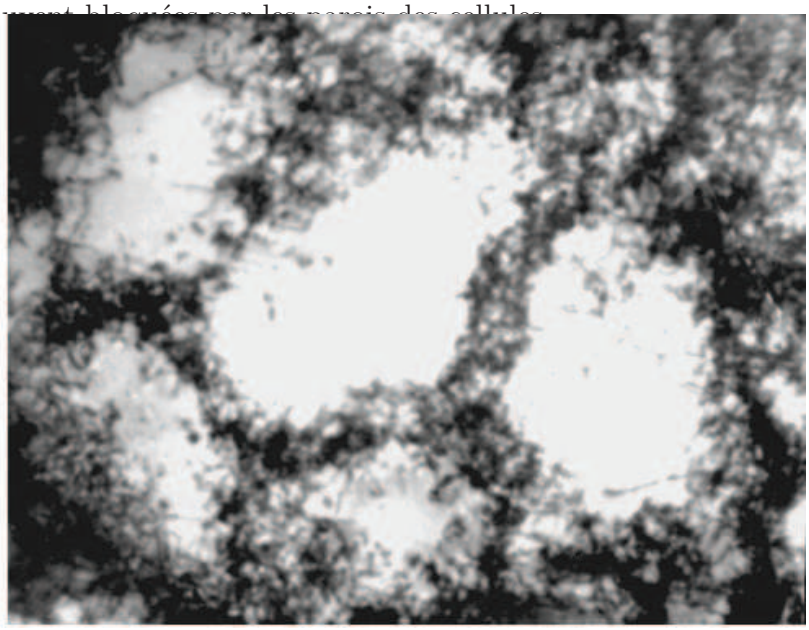

FIGURE 5.14 – Micrographie MET de cellules de dislocation dans un alliage polycristallin de Ni_3Fe [KSL+08].

Une nouvelle technique de caractérisation appelé DAXM (en anglais "Differential-Aperture X-ray structural Microscopy") a récemment été utilisée pour sonder les paramètres de réseau à l'intérieur de cellules de dislocations dans des monocristaux de cuivre déformés en traction et en compression uni-axiale [LLY+06]. Cette technique permet d'obtenir la structure locale et l'orientation cristallographique avec une résolution submicronique spatiale en 3D. La précision angulaire est de $0,01^{\circ}$ et la déformation élastique locale est mesurée avec une précision de $1,0 \times 10^{-4}$ [WLT+04]. Ces mesures ont permis de déterminer des fluctuations des contraintes internes dans les cellules de dislocations. Cette étude met également en évidence de fortes variations des contraintes internes selon les cellules étudiées pour le même échantillon.

Côté modélisation, une extension [SF00] du modèle composite introduit par Mughrabi [Mug82] a été utilisée par Sedlacek et al. [SSW08] pour expliquer les fluctuations des contraintes internes mesurées récemment par Lévine et al. [LLY+06] (cf.

figure 5.15). Bien que dans cette modélisation, les hétérogénéités plastiques soient continues par morceaux, cela reste une approche à champs moyens, alors que notre modèle permet une modélisation discrète des cellules de dislocations.

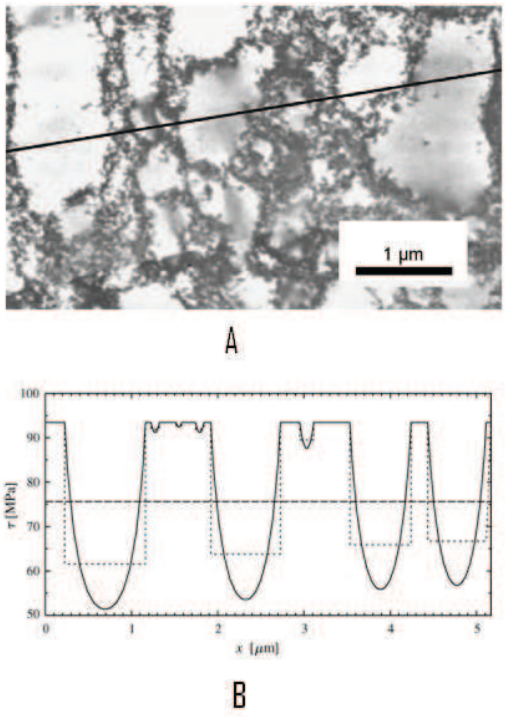

FIGURE 5.15 – (A) Micrographie MET de structure de cellules de dislocation d'un monocristal de cuivre déformé en traction selon la direction [001] ; (B) Distributions de contraintes le long de la ligne représentée sur la micrographie MET calculée à partir du modèle du modèle de Forest et Sedlacek [SF00] (en trait plein). Contrainte moyenne dans les cellules (en pointillés)

Le présent travail a pour objectif de calculer les champs élastiques d'une cellule de dislocations en utilisant les bases du modèle discret présenté dans le Chapitre 3. Contrairement aux modèles courants de transition d'échelle qui suppose la déformation plastique uniforme dans les grains, la présence des cellules de dislocations traduit un mécanisme d'hétérogénéités plastiques supplémentaires : les glissements plastiques, fortement hétérogènes, peuvent être assimilés discontinus, à valeurs faibles dans les parois et importantes à l'intérieur des cellules. L'hétérogé-

néité du champ de déformation plastique associée à la microstructure de dislocations génère un champ de contraintes lui aussi fortement hétérogène. Mughrabi [Mug88] a mesuré la contrainte interne dans les murs de dislocations : il l'estime à trois fois la limite d'écoulement macroscopique. Les approches à champ moyen ne sont pas capables de décrire ces effets.

Schmitt et al. [FS83] ont observé que l'épaisseur des parois diminue avec la déformation plastique et tend vers une valeur limite située aux alentours de $0,1\mu m$. De la même façon, il constate que la taille des cellules diminue avec la déformation plastique. Dans un acier, la taille des cellules de dislocations tend vers une valeur de l'ordre du micromètre d'aprés [Lem95] pour des taille grains d'environ $10\mu m$.

Tataba et al. [TYF78] ont observé par microscopie électronique des lignes de glissement dans chaque cellule d'un monocristal d'aluminium (cf. figure 5.16). Une

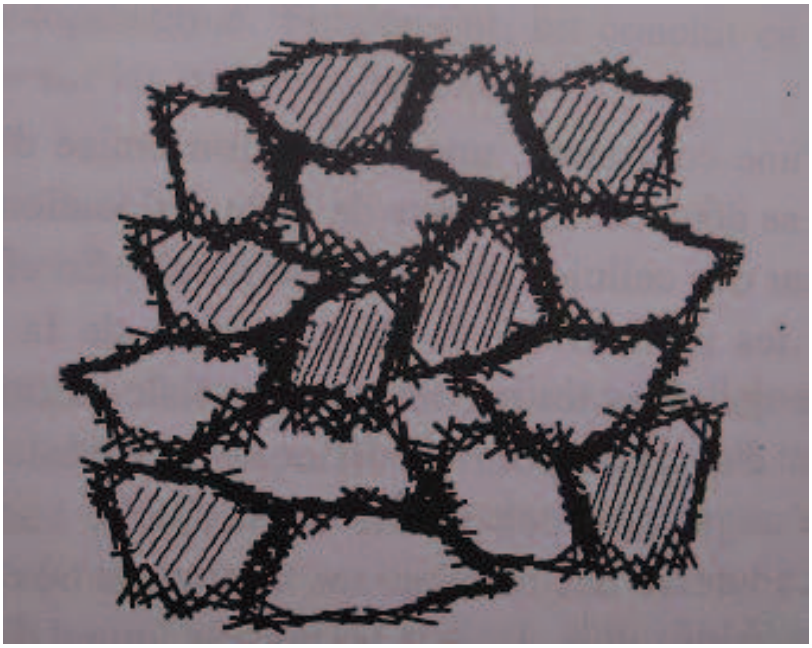

FIGURE 5.16 – Lignes de glissement dans la structure cellulaire [TYF78]

conclusion de Tataba et al. [TYF78] indique que les dislocations mobiles s'arrêtent exactement aux parois des cellules, de sorte que le libre parcours moyen des dislocations mobiles est déterminé par la taille des cellules. Cette conclusion est fondée sur une étude micrographique montrant qu'aucune ligne de glissement ne se propage à une cellule voisine au travers des parois. Les parois de dislocations sont des struc-

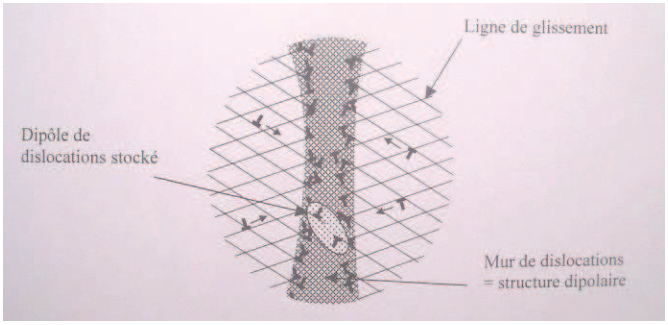

FIGURE 5.17 – Parois des cellules : structure dipolaire de dislocations [Lan00]

tures dipolaires (cf. figure 5.17). le glissement se produisant dans le même sens dans chacune des cellules d'un même grain, les dislocations stockées de part et d'autre des murs sont de signes opposés.

Le modèle de base développé ci-après décrit une seule cellule de dislocations par deux distributions discrète de boucles circulaires de dislocations dans un milieu élastique infini. Ces deux distributions sont contraintes par une paroi infranchisable extérieurement et intérieurement et d'épaisseur constante λ (cf. figure 5.18).

5.2.1 Description du modèle

Comme dans la section précédente, on s'est dans un premier temps limité dans cette étude à des configurations de glissements simples dans la cellule et dans la matrice. La cellule de dislocation modélisée est décrite par deux distributions de dislocations de signe opposées, coplanaires, coaxiales et schématisées sur la figure

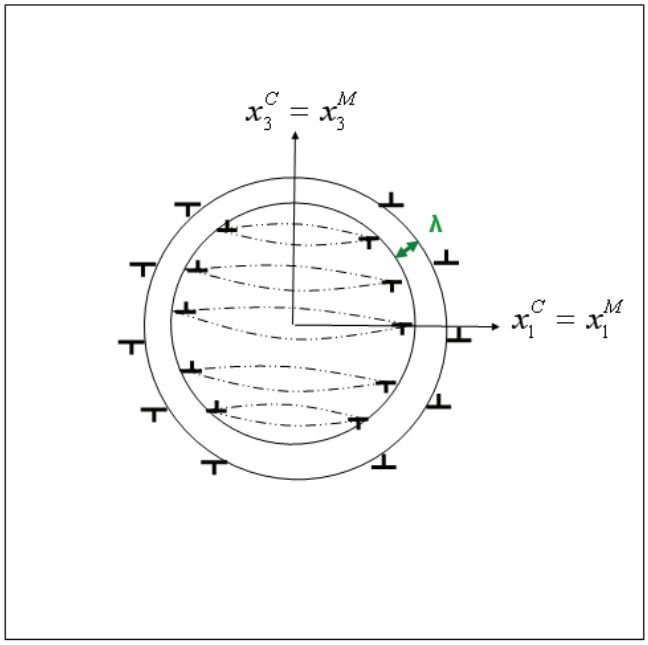

FIGURE 5.18 – Modélisation discrète d'une cellule de dislocation de forme sphérique de rayon R par deux distributions de boucles de dislocations circulaires contraintes par une paroi de cellule d'épaisseur λ dans un milieu élastique infini

5.18. On a :

$$\beta_{ji}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) = \beta_{ji}^{\mathrm{Cp}}(\underline{x}) + \beta_{ji}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x}) \tag{5.23}$$

où $\beta_{ji}^{\mathrm{Cp}}(\underline{x})$ et $\beta_{ji}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x})$, respectivement les distorsions plastiques correspondant aux configurations de dislocations à l'intérieur de la cellule (C) et ceux dans la matrice (M).

Ces deux distributions de dislocation sont contraintes par un mur ou paroi de dislocations qui constitue un obstacle aux dislocations. Contrairement aux joints de grains, qui sont stationnaires par rapport à la matière, les parois de dislocations assimilées aux discontinuités du champ de déformations plastiques sont mobiles. Dans ce travail (comme dans les Chapitres 3 et 4), on se limite ici à l'étude de configurations statiques.

La méthodologie pour calculer les champs de déplacements associés à la présence de deux distributions de dislocations est la même que celle développée dans la section précédente. Ainsi, on présente seulement les expressions des distorsions plastiques dans la cellule et celle provenant de la matrice pour former la paroi de cellule.

a. Méthode pour déterminer la distorsion plastique associée à la distribution de dislocations dans la cellule

Soit $\beta_{ji}^{\mathrm{Cp}}(\underline{x})$ la distorsion plastique représentant les dislocations à l'intérieur de la cellule. $\beta_{ji}^{\mathrm{Cp}}(\underline{x})$ peut s'exprimer dans le repère local $\left(x_1^C, x_2^C, x_3^C\right)$ associé au système de glissement actif (la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$) de tel manière

que la seul composante non-nulle est :

$$\beta_{31}^{\mathrm{Cp}}(\underline{x}) = b_1 \sum_{n=-N_1}^{+N_1} H\left(1 - \frac{\rho^C}{a^{(n)}}\right) \delta(x_3^C - nh_1), \tag{5.24}$$

où $a^{(n)} = \sqrt{R^2 - (nh_1)^2}$ qui est le rayon des boucles à l'altitude (correspondant au rayon intérieur de la cellule de dislocations), $x_3^C = nh_1$. ρ^C et x_3^C sont respectivement la coordonnée radiale et l'altitude dans le système de coordonnées cylindriques $\left(\rho^C, \theta^C, x_3^C\right)$ définies par $\left(x_1^C = \rho^C cos(\theta^C), x_2^C = \rho^C sin(\theta^C), x_3^C\right)$. $\delta(x_3^C - nh_1)$ est la fonction de Dirac dans la direction $\left(x_3^C\right)$ et H est la fonction d'Heaviside défini par :

$$H\left(1 - \frac{\rho}{a}\right) = \begin{cases} 1 \text{ si } \rho \leq a \\ \\ 0 \text{ si } \rho > a. \end{cases} \tag{5.25}$$

b. Méthode pour déterminer la distorsion plastique associée à la distribution de dislocations à l'extérieur de la cellule formant la paroi de taille λ

Soit $\beta_{ij}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x})$ la distorsion plastique représentant les dislocations à l'extérieur de la cellule. $\beta_{ij}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x})$ peut être exprimée dans le repère local $\left(x_1^M, x_2^M, x_3^M\right)$ associée au système de glissement actif (la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$) de telle manière que la seule composante non-nulle est comme précédemment mais en prenant compte de λ :

$$\beta_{31}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x}) = b_2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x_3^M - nh_2) - b_2 \sum_{n=-N_2}^{+N_2} H\left(1 - \frac{\rho^M}{a^{(n)} + \lambda}\right) \delta(x_3^M - nh_2), \tag{5.26}$$

On peut écrire $\beta_{31}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x})$ comme la superposition de deux termes :

$$\beta_{31}^{\mathrm{Mp}}(\underline{x}) = \beta_{31}^{M\infty p}(\underline{x}) + \beta_{31}^{MGp}(\underline{x}) \tag{5.27}$$

où $\beta_{31}^{M\infty p}(\underline{x}) = b_2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x_3^M - nh_2)$ et
$\beta_{31}^{MGp}(\underline{x}) = -b_2 \sum_{n=-N_2}^{+N_2} H\left(1 - \frac{\rho^M}{a^{(n)}+\lambda}\right) \delta(x_3^M - nh_2)$

5.2.2 Résultats

La figure 5.19 montre les variations de la composante σ_{13} des contraintes internes dans le repère local (x_1, x_2, x_3) le long de l'axe x_1^M pour une taille de cellules de $R = 1\mu m$ d'après [Lem95] et pour une épaisseur de paroi $= 0,1\mu m$. En accord avec les mesures de déformations DAXM élastiques sur des cellules de dislocation [LLY+06], on observe clairement que les champs élastiques induits par la présence d'une cellule de dislocation sont fortement perturbés. Cette perturbation est très marquée dans la paroi de cellule et son pourtour. Par contre, les champs sont uniformes dans le coeur de la cellule. Ces calculs ont été effectués pour différentes épaisseurs de parois de cellules. L'épaisseur des parois de cellules a un léger impact sur le niveau de contraintes internes moyens, mais peu d'impact sur le niveau des perturbations en prenant par exemple 21 boucles aussi bien dans la cellule que dans la matrice.

Il serait extrêmement intéressant dans le futur de comparer ses résultats théoriques à des mesures expérimentales du même type que celle mesurée par DAXM [LLY+06] mais il est nécessaire de quantifier le nombre de dislocations dans la cellule pour bien estimer le profil des champs de contraintes par la méthode discrète présentée. Des configurations avec glissement multiple serait également nécessaires pour les cellules (cf. 5.17).

5.3 Conclusions

Dans ce chapitre, on a dans un premier temps étendu le modèle intra-granulaire discret (présenté dans les chapitres 3 et 4) au cas d'hétérogénéités inter-granulaires. Ce modèle discret développé dans ce travail offre une flexibilité par rapport au choix

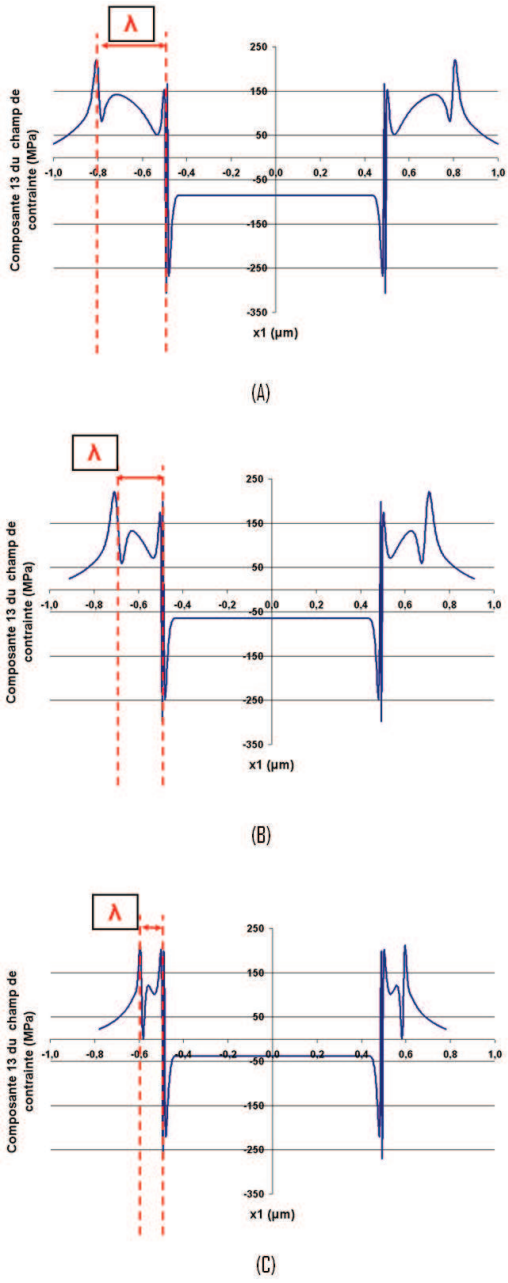

FIGURE 5.19 – Variations de la composante σ_{13} des contraintes internes dans le repère local (x_1, x_2, x_3) le long de l'axe x_1^M ; rayon intérieur de la cellule est de $1\mu m$ (valeur typique dans les aciers, cf. [Lem95]). Les deux distributions de boucles sont périodiques (21 boucles dans la cellule et 21 boucles dans la matrice). Le module du vecteur de Burgers pour les deux distributions est $b_1 = b_2 = 2,5 \times 10^{-10} m$. Profils obtenus pour différentes épaisseurs de parois de cellules : (A) $\lambda = 0,3\mu m$, (B) $\lambda = 0,2\mu m$ et (C) $\lambda = 0,1\mu m$.

des configurations des boucles de dislocations. Cette flexibilité permet de traiter différentes types hétérogénéités plastiques. L'approche qui a été développée est intermédiaire entre la dynamique des dislocations et les approches continues généralisées mais se démarque des méthodes classiques de type champs moyens par morceaux. Le modèle développé prend en compte les incompatibilités du réseau cristallin dues à la présence de distributions de dislocations. Ces distributions permettent de décrire les hétérogénéités intra- et inter-granulaires du glissement plastique. Cette approche consiste à déterminer le champ de contraintes internes et l'énergie élastique associés à ces incompatibilités de manière statique, dans le but :

- - de déterminer les effets propres des longueurs internes microstructurales,
- - de mieux comprendre les phénoménes collectifs de déformations des matériaux polycristallins,
- - d'améliorer les méthodes de transition d'échelles actuelles.

On a étudié le cas théorique d'une microstructure de déformation plastique qui est compatible lorsqu'elle est étudiée au travers d'une approche à champs moyens telle que l'approche de Kröner [Krö61]. Lorsque l'on étudie exactement le même cas avec une approche discrète, la déformation plastique n'est plus compatible et engendre donc des déformations et des rotations élastiques supplémentaires pour maintenir la compatibilité. On démontre encore une fois dans cette partie l'intérêt de prendre en compte la nature discrète de la déformation plastique par rapport à une méthode à champs moyens.
Dans un second temps, on a montré que l'on peut utiliser les mêmes concepts de modélisation pour appréhender des configurations complexes de dislocations, telles que les cellules de dislocations qui se forment à partir du stade 3 de la plasticité (cf. section 1.1.3.).

A l'avenir, il est prévu de décrire encore plus finement les hétérogénéités de microstructures discrètes introduites par la déformation plastique dans le modèle en validant directement l'approche par des résultats expérimentaux comme la démarche entreprie dans le Chapitre 4. Comme entrées du modèle, il est également envisageable de prendre des paramètres quantitatifs extraits par analyse de données expérimentales poussées (clichés microscopiques (MET), profils de surface AFM, etc.).

Conclusion générale

Le travail présenté dans ce manuscrit, en s'appuyant sur une approche expérimentale et une approche théorique, permet de mettre en évidence l'importance de la prise en compte des phénomènes plastiques intra-granulaires dans les modèles micromécaniques sur le comportement mécanique des matériaux poly-cristallins. Une meilleure connaissance de ces phénomènes est aujourd'hui primordiale et incontournable afin d'améliorer la modélisation multi-échelles du comportement mécanique des matériaux cristallins.

La modélisation adoptée dans cette étude marque une rupture par rapport aux méthodes de transition d'échelles traditionnelles de type champs moyens. Jusqu'à présent, la description classique considérait un glissement plastique moyen par grain et par système de glissement actif. On s'est proposé, dans ce travail, de rendre compte du caractère fortement hétérogène et discret qui est intrinsèque au processus de déformation plastique. Cela passe notamment par la prise en compte des longueurs internes microstructurales. La modélisation a donc été directement couplée aux observations expérimentales. La compréhension du comportement des matériaux polycristallins, en lien avec leur microstructure et les mécanismes de déformation, est indispensable aujourd'hui en vue d'optimiser et de concevoir les matériaux de demain.

Ce travail a commencé par une étude bibliographique sur les hétérogénéités plas-

tiques à l'échelle des grains (Chapitre 1). On y liste les différents mécanismes activés lors de la déformation plastique dans le cas de polycristaux métalliques (principalement c.f.c). Il apparait que les phénomènes plastiques intra-granulaires sont intermittents (avalanches de dislocations) et fortement hétérogènes (concentration du glissement dans des bandes de glissement). De nombreuses recherches ont montré que ces hétérogénéités plastiques (auto-organisation de défauts) ont des conséquences importantes sur les champs élastiques locaux et globaux. Cette étude montre clairement le rôle important des hétérogénéités plastiques sur les propriétés mécaniques macroscopiques des poly-cristaux métalliques. En effet, ces hétérogénéités sont la source d'effets de longueurs internes tels que l'effet de la taille de grain sur le comportement mécanique globale des polycristaux. La connaissance de ces mécanismes physiques de la déformation inélastique est donc nécessaire au développement de modèles prédictifs.

Dans une seconde étude bibliographique plus thèorique (Chapitre 2), les différentes méthodes de modélisations micromécaniques permettant de prendre en compte différents types d'hétérogénéités plastiques ont été passées en revue. Les succès et les insuffisances de chaque type de modèle sont présentés. Ce chapitre fait apparaître qu'il est nécessaire de développer une approche intermédiaire qui tient compte des incompatibilités du réseau cristallin dues à la présence de distributions de dislocations discrètes, c'est-à-dire un modèle prenant en compte la nature physique des événements discrets intra-granulaires.

C'est dans cet esprit que l'on a développé un modèle micromécanique (Chapitre 3) prenant en considération les incompatibilités de réseau aux interfaces grain/matrice au travers d'une distribution discrète de boucles circulaires de dislocations. Cette approche se démarque de celle de l'inclusion d'Eshelby pour laquelle les imcompatibilités plastiques de réseau se réduisent à une distribution de dislocation surfacique singulière aux interfaces grains/matrice. A l'aide d'une description relative-

ment simple des phénomènes discrets intra-granulaires, on montre que les champs élastiques à l'intérieur des grains sont fortement hétérogènes, notamment dans les zones proches des interfaces grain/matrice. Les conséquences qui découlent de ces hétérogénéités intra-granulaires sont nombreuses et constituent une rupture par rapport à la micromécanique traditionnelle. Contrairement aux approches classiques à champs moyens (type Eshelby), cette approche discrète permet de rendre compte d'effets de longueurs internes sur le comportement mécanique global. A partir du problème de base inclusion/matrice (chaque grain est supposé noyé dans un milieu homogène équivalent), un modèle d'homogénéisation en plasticité diluée a été mis en place. Une nouvelle loi d'interaction a été définie pour le comportement du poly-cristal dans le cas d'une plasticité considérée ici dans un premier temps comme diluée à partir du calcul d'une " contrainte cinématique " moyenne sur le grain. Cette loi dépend explicitement de la taille de grains et de la structure discrète des dislocations au travers d'un espacement moyen entre dislocations.

Dans le but de quantifier de manière précise les hétérogénéités plastiques intra-granulaires (i.e. les distributions de bandes de glissement à l'intérieur des grains), des investigations expérimentales ont été nécessaires. Ces caractérisations ont permis une meilleure description dans le modèle des phénomènes plastiques (distributions non-périodiques de dislocations par exemples). Ceci a fait l'objet du Chapitre 4 dans lequel on s'est limité à l'étude expérimentale de configurations intra-granulaires proches du glissement simple dans le nickel pur dans les premiers stades de déformation plastique (quelques pourcent de déformation en traction). Les longueurs internes mesurées par AFM (i.e. la taille de grains ainsi que l'espacement entre bandes de glissement) ont directement été utilisées dans le modèle présenté dans le Chapitre 3. Les champs élastiques associés à la microstructure de déformation inélastique ont ainsi été calculés. Pour valider la pertinence du modèle, des cartographies 2D des désorientations intra-granulaires ont été effectuées à l'aide d'un MEB équipé d'un système EBSD. Ces mesures ont été comparées à des calculs théoriques pour des distributions non-uniformes et périodiques de bandes de glissement. Les résultats thèorique et expérimentaux montrent de forts gradients de désorientations dans la

zone proche des joints de grain. Le cas d'une distribution de bandes de glissement non-uniforme donne de meilleurs résultats que le cas d'une distribution périodique en comparaison avec les résultats expérimentaux.

Le modèle présenté dans les Chapitres 3 et 4 se concentre uniquement sur l'impact des hétérogénéités intra-granulaires sur les champs élastiques. Cependant, ce modèle discret offre une flexibilité par rapport au choix des configurations des boucles de dislocations. Dans le Chapitre 5, on montre qu'il est possible de modéliser des cas d'hétérogénéités plastiques plus complexes, comme par exemple, le cas des hétérogénéités intra- et inter-granulaires du glissement plastique ou le cas de cellules de dislocations. Des illustrations ont été données et montrent que des effets supplementaires sont présents notament par rapport à l'approche d'Eshelby-Kröner.

Dans le but de continuer de déterminer les effets propres des longueurs internes microstructurales et ainsi d'améliorer les méthodes de transition d'échelles actuelles, un important travail expérimental de caractérisation s'avère nécessaire. Celui-ci doit, dans l'esprit de ce qui a été réalisé dans le Chapitre 4, être couplé aux modélisations micromécaniques discrètes. On espère pouvoir rendre compte de manière physique d'un effet de longueurs internes et améliorer ainsi les lois de comportement présentes dans les codes de calculs.

Bibliographie

[Aca07] OIM Academy. In *EBSD Lectures : Introduction to OIM analisys*. 2007.

[ACDP62] R.W. Armstrong, I. Codd, R.M. Douthwaite, and N.J Petch. Plastic deformation of polycrystalline aggregates. *Philos. Mag.*, 7 :45, 1962.

[AN85] A. Asaro and A. Needleman. Overview no. 42 texture development and strain hardening in rate dependent polycristals. *Acta Metallurgica*, 33 :923–953, 1985.

[AS70] M. Abramowitz and I A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions (9th ed.)*. Dover Publications Inc., New York, 1970.

[Asa83] R.J. Asaro. Crystal plasticity. *ASME J. Appl. Mech.*, 50 :921–934, 1983.

[Ash70] M.F. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philosophical Magazine*, 21 :399–424, 1970.

[Bar53] C.S. Barret. An abnormal after-effect in metals. *Acta Metallurgica*, 1 :1, 1953.

[Bar00] F. Barbe. *Etude numérique de la plasticité dagrégats polycristallins*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2000.

[BB09] O. Bouaziz and Y. Br{'echet. Physical relationship between mean field micromechanical approach and orowan looping in particle strengthened materials. *Scripta Materialia*, 60 :366–368, 2009.

[BBFL88] M. Berveiller, N. Bouaouine, N. Fakri, and P. Lipinski. On the variation of the wire texture with stacking fault energy in fcc metals and alloys. *Textures and Microstructures*, 9 :351–379, 1988.

[BBH85] C.Y.J. Barlow, B. Bay, and N. Hansen. A comparative inverstigation of surface relief structure and dislocation microstructure in cold-rolled aluminium. *Philosophical Magazine A*, 51 :253–275, 1985.

[BBR08] S. Berbenni, M. Berveiller, and T. Richeton. Intra-granular plastic slip heterogeneities : Discrete vs. mean field approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 45 :4147–4172, 2008.

[BCB04] R. Brenner, O. Castelnau, and L. Badea. Mechanical field fluctuation in polycrystals estimated by homogenization techniques. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 460 :3589–3612, 2004.

[Ber80] M. Berveiller. Thèse d'etat : Contribution à l'étude du comportement plastique et des textures de déformation des polycristaux métallique. *Sciences et techniques de l'armement, 54*, 1980.

[Ber02] S. Berbenni. *Elastoviscoplasticité des aciers polycristallins : Modélisation micromécanique et physique : Applications au comportement dynamique et à leffet Bake-Hardening.* PhD thesis, ENSAM, France, 2002.

[BFB07] S. Berbenni, V. Favier, and M. Berveiller. Impact of the grain size distribution on the behaviour of heterogeneous materials. *International Journal of Plasticity*, 23 :114–142, 2007.

[BFG+09] B. Beausir, C. Fressengeas, N.P. Gurao, L.S. Toth, and S. Suwas. Spacial correlation in grain misorientation distribution. *Acta Materialia ; In press*, 2009.

[BFLB04] S. Berbenni, V. Favier, X. Lemoine, and M. Berveiller. Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels

having different microstructures. *Materials Science and Engineering*, A 372 :128–136, 2004.

[BH51] A.F. Brown and R.W.K. Honeycombe. Micro-slip in metal crystals. *Philosophical Magazine*, 1 :1146, 1951.

[BN59] D.G. Brandon and J. Nutting. The metallography of deformed iron. *Acta Metallurgica*, 7 :101–110, 1959.

[Bou05] O. Bouaziz. Relations microstructures-comportement des aciers et couplage avec les évolutions métallurgiques. *Habilitation à diriger des recherches*, 2005.

[Bun82] H.J. Bunge. *Mathematische Methoden Texturanalyse*. Berlin : Academic-Verlag, 1982.

[BV08] A. Barnoush and H. Vehoff. In situ electrochemical nanoindentation : A technique for local examination of hydrogen embrittlement. *Corros. Sci.*, 1(50) :259–267, 2008.

[BZ79] M. Berveiller and A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26 :325–344, 1979.

[BZ80] M. Berveiller and A. Zaoui. Methode self-consistentes en mecanique des solides heterogene. *Comportement rhéologiques et structure des matériaux*, 15 :175–199, 1980.

[BZ95] M. Berveiller and A. Zaoui. Modélisation du comportement mécanique des solides microhétérogènes. *in introduction à la mécanique des polymères, C.G'Sell et J.M. Haudin, INPL*, 13 :225–249, 1995.

[BZ00] M. Berveiller and A. Zaoui. Modélisation de la déformation plastique des polycristaux. *Techniques de l'Ingénieur*, M48 :1–12, 2000.

[CAWB06] W. Cai, A. Arsenlis, C R. Weinberger, and V V. Bulatov. A non-singular theory of dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :561–587, 2006.

[CF07] C.E. Carlton and P.J. Ferreira. What is behind the inverse hallpetch effect in nanocrystalline materials ? *Acta Materialia*, 55 :37493756, 2007.

[Cha09] Y. Chastel. Mécanisme physique de la déformation (cours en ligne), 2009. En ligne, http://mms2.ensmp.fr/.

[CJ99] C. Coupeau and Grilhe J. Quantitative analysis of surface effects of plastic deformation. *Materials Science and Engineering*, A271 :242–250, 1999.

[Cou99] C. Coupeau. Slip line analysis in ni3al by atomic force microscopy. *Scripta Materialia*, 41(9) :945–950, 1999.

[Das58] W.C. Dash. Generation of prismatic dislocation loops in silicon crystals. *Physical Review Letter*, 11 :400 – 402, 1958.

[DB98] A. Deschamps and Y. Brechet. Influence of predeformation and ageing of an alznmg alloyii. modeling of precipitation kinetics and yield stress. *Acta. Mat.*, 47 :293–305, 1998.

[DeW60] R. DeWit. The continuum theory of stationary dislocations. *Solid State Physics*, 10 :269–292, 1960.

[EB00] A. El Bied. *Etude expérimentale et modélisation du comportement des roches granulaires : écrouissage, radoucissement et rupture en mode localisé*. PhD thesis, CERMES, ENPC, 2000.

[Ebe06] A. Eberhardt. Mécanique physique. In *Mécanique physique*. Cours du Master recherche MMSP de l'Université Paul-Verlaine de Metz, 2006.

[EBPS05] H.D. Espinosa, S. Berbenni, M. Panico, and K.W. Schwarz. An interpretation of size scale plasticity in geometrically confined systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*, 102(47) :16933–16938, 2005.

[EC65] A.T. English and G.Y. Chin. On the variation of the wire texture with stacking fault energy in fcc metals and alloys. *Acta. Metall.*, 13 :1013–1016, 1965.

[EFN51] J.D. Eshelby, F.C. Franck, and R.F.N. Nabarro. *Phil.Mag*, 42 :351, 1951.

[EM79] U. Essmann and H. Mughrabi. Annihilation of dislocations during tensile tests and cyclic deformation and limit of dislocations densities. *Philosophical Magazine*, 40 :731756, 1979.

[ENS55] G. Eason, B. Noble, and I.N. Sneddon. On certain integrals of lipschitz-hankel type involving products of bessel functions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A. Mathematical and Physical Sciences*, 247(935) :529–551, 1955.

[ER04] P. Erieau and C. Rey. Modelling of deformation and rotation bands during large plane strain compression. *Int J Plasticity*, 20 :1763, 2004.

[ERW68] U. Essmann, M. Rapp, and M. Wilkens. Die versetzungsanordnung in plastisch verformten kupfervielkristallen. *Acta Metallurgica*, 16 :1275–1287, 1968.

[Esh57] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceedings of the Royal Society London*, A241 :376, 1957.

[Esh59] J.D. Eshelby. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. *Proceedings of the Royal Society London A*, 252 :561–569, 1959.

[FB07] P. Franciosi and S. Berbenni. Heterogeneous crystal and poly-crystal plasticity modelling from a transformation field analysis within a regularized schmid law. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55 :2265–2299, 2007.

[FF04a] M. Fivel and S. Forest. Plasticité cristalline et transition d'échelle :cas du monocristal. *Techniques de l'Ingénieur*, M4016, 2004.

[FF04b] M. Fivel and S. Forest. Plasticité cristalline et transition d'échelle :cas du polycristal. *Techniques de l'Ingénieur*, M4017, 2004.

[FHP52] J.C. Fischer, E.W. Hart, and R.H. Pry. Theory of slip-band formation. *Physical review*, 87 :958, 1952.

[FMCC06] S. Fréchard, F. Martin, C. Clément, and J. Cousty. Afm and ebsd combined studies of plastic deformation in a duplex stainless steel. *Materials Science and Engineering A*, 418 :312–319, 2006.

[For98] S. Forest. Modeling slip, kink and shear banding in classical and generalized single crystal plasticity. *Acta Mater.*, 46 :3265, 1998.

[For06] S. Forest. *Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes*. Presses de l'Ecole des Mines, 2006.

[FR50] F.C. Franck and W.T. Read. Multiplication processes for slow moving dislocation. *Physical Review*, 79, 1950.

[Fra84] P. Franciosi. *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi-statique*. PhD thesis, Université de Paris-Nord, France, 1984.

[Fra85] P. Franciosi. The concepts of latent hardening and strain hardening. *Acta. Metall.*, 33 :1601–1612, 1985.

[FS83] J.V. Fernandez and J.H. Schmitt. Dislocation microscructures in steel during deep drawing. *Phil. Mag.*, A48 :841–870, 1983.

[GON05] J.R. Greer, W.C. Oliver, and W.D. Nix. Size dependence of mechanical properties of gold at the micron scale in the absence of strain. *Acta Materiala*, 53 :18211830, 2005.

[Gor07] D. Goran. *Hétérogénéité de la déformation plastique des monocristaux de nickel déformés à froid par ECAE.* PhD thesis, Université Paul-Verlaine de Metz, 2007.

[GR65] I S. Gradshteyn and I M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products.* Academic Press Inc., New York, 1965.

[Gwy] Gwyddion. En ligne, http://gwyddion.net/.

[Haa96] P. Haasen. *Physical metallurgy.* ed. R.W. Cahn, North Holland, Amsterdam, 1996.

[Hal51] E.O. Hall. The deformation and ageing of mild steel. *Proceedings of the Physical Society London*, B64 :747–753, 1951.

[Han85] N. Hansen. Polycristalline strengthening. *Metallurgical transactionsA*, 16A :2167, 1985.

[Han04] N. Hansen. Hallpetch relation and boundary strengthening. *Scripta Materialia*, 51 :801–806, 2004.

[Har91] S.V. Harren. The finite deformation of rate-dependent polycrystals -i. a self-consistent framework. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 39 :345–360, 1991.

[Hen07] M. Henning. *Größeneffekte auf die mechanischen Eigenschaften - Experiment und Simulation.* PhD thesis, Universität des Saarlandes, Allemagne, 2007.

[Hil63] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : some theoretical principles. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 11 :357–372, 1963.

[Hil65] R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 :89, 1965.

[HL82] J P. Hirth and J. Lothe. *Theory of dislocations*. Wiley, New York, 1982.

[HR72] R. Hill and J.R. Rice. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 20 :401–413, 1972.

[Hum01] F. J. Humphreys. Review grain and subgrain characterisation by electron backscatter diffraction. *Journal of Materials Science*, 36 :3833–3854, 2001.

[Hut76] J.W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 :89, 1976.

[HV05] M. Henning and H. Vehoff. Local mechanical behavior and slip band formation within grains of thin sheets. *Acta materialia*, 53 :12851292, 2005.

[INN83] T. Iwakuma and S. Nemat-Nasser. Finite elastic deformation of polycrystalline metals and composites. *Earthquake Research Laboratory*, 83 :3–51, 1983.

[Jao65] B. Jaoul. *Etude de la plasticité et application aux métaux*. Dunod, 1965.

[JH90] D. Jensen and N. Hansen. Flow stress anisotropy in aluminium. *Acta Metallurgica*, 38 :1369–1380, 1990.

[JI01] C. Janot and B. Ilschner. *Matériaux émergents*. Presses polytechniques et universitaires romandes, 2001.

[JS99] J.W. Ju and L.Z. Sun. A novel formulation for the exterior point eshelby's tensor of an ellipsoidal inclusion. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 66 :570–574, 1999.

[Koc76] U.F. Kocks. Laws for work-hardening and low-temperature creep. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 98 :7685, 1976.

[Kos79] A M. Kosevich. Crystal dislocations and the theory of elasticity (chap. 1). In *Dislocations in Solids (vol 1)*, pages 33–141. F.R.N. Nabarro, Amsterdam, North-Holland, 1979.

[Krö58] E. Kröner. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen.* Springer Verlag, Berlin, 1958.

[Krö61] E. Kröner. Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta Metallurgica*, 9 :155–161, 1961.

[Krö81] E. Kröner. Continuum theory of defects. In *Physics of defects*, pages 215–315. R. Balian and al. (Eds.), Les Houches, Session 35, North Holland, New York, 1981.

[Krö86] E. Kröner. Variational treatment of the elastic constants of disordered materials. In *Modelling small deformations of polycrystals.* Gittus, E., Zarka, E. (eds.), Elsevier Applied Science, London, New York, 1986.

[Krö89] E. Kröner. *Modified Green Functions in the theory of heterogeneous and/or anisotropic linearly elastic media.* ed. G.J. Weng, M. Taya, M. Abe, Springer Verlag, Berlin Germany, 1989.

[KSL+08] N.A. Koneva, V.A. Starenchenko, D.V. Lychagin, L.I. Trishkina, N.A. Popova, and E.V. Kozlov. Formation of dislocation cell substructure in face-centred cubic metallic solid solutions. *Materials Science and Engineering A*, 483 :179–183, 2008.

[Kub92] Canova G. Condat M. Devincre B. Pontikis V. Bréchet Y. Kubin, L.P. Dislocation microstructures and plastic flow : a 3d simulation. *Solid State Phenomena*, 6 :455–472, 1992.

[Kun81] I.A. Kunin. An algebra of tensor operators and its applications to elasticity. *International Journal of Engineering Sciences*, 19 :1551–1561, 1981.

[Kun83] I.A. Kunin. *Elastic Media with Microstructure II : Three Dimensionnal Models*. Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New- York, Tokyo, 1983.

[KW02] D. Kuhlmann-Wilsdorf. *Metall. Mater. Trans. A*, 33 :2519, 2002.

[KWT05a] M. Kamaya, A.J. Wilkinson, and J.M. Titchmarsh. Measurement of plastic strain of polycrystalline material by electron backscatter diffraction. *Nuclear Engineering and Design*, 235 :713–725, 2005.

[KWT05b] M. Kamaya, A.J. Wilkinson, and J.M. Titchmarsh. Measurement of plastic strain of polycrystalline material by electron backscatter diffraction. *Nuclear Engineering and Design*, 235 :713–725, 2005.

[KZ02] T A. Khraishi and H M. Zbib. Dislocation dynamics simulations of the interaction between a short rigid fiber and a glide circular dislocation pile-up. *Computational Materials Science*, 24 :310–322, 2002.

[Lan00] L. Langlois. *Evolutions propres de la microstructure de dislocations et conséquences sur le comportement élastoplastique des métaux*. PhD thesis, Université Paul-Verlaine de Metz, 2000.

[LBCR08] R.A. Lebensohn, R. Brenner, O. Castelnau, and A.D. Rollett. Orientation image-based micromechanical modelling of subgrain texture evolution in polycristalinne copper. *Acta Materialia*, 56 :3914–3926, 2008.

[LBRM95] P. Lipinski, M. Berveiller, E. Reubrez, and J. Morreale. Transition theories of elastic-plasticc deformation of metallic polycristals. *Archive of Aplied Mechanics*, 95 :291–311, 1995.

[Leb01] R.A. Lebensohn. N-site modelling of a 3d viscoplastic polycrystal using fast fourier transform. *Acta Materialia*, 49 :2723–2737, 2001.

[Lem95] X. Lemoine. *Analyse micromécanique de la formation des cellules de dislocations et conséquences sur le comportement des aciers*. PhD thesis, Université Paul-Verlaine de Metz, 1995.

[LL67] J.C.M. Li and G.C.T. Liu. Circular dislocation pile-ups : I. strength of ultra-fine polycrystalline aggregates. *Philosophical Magazine*, 1 :1059–1063, 1967.

[Llo94] DJ. Lloyd. Particle reinforced aluminum and magnesium matrix composites. *Int Mat Rev*, 39 :123, 1994.

[LLY+06] L.E. Levine, B.C. Larson, W. Yang, M.E. Kassner, J. Tischler, M.A. Delos-Reyes, R.J. Fields, and W. Liu. X-ray microbeam measurements of individual cell elastic strains in deformed single crystal copper. *Nature Materials*, 5 :619–622, 2006.

[Lor05] J.P. Lorrain. *Critère de ductilité basé sur la perte d'ellipticité du module tangent élastoplastique déduit d'un modèle auto-cohérent*. PhD thesis, ENSAM, France, 2005.

[Lou05] P. Lours. Mécanique physique. In *Cours de sciences des matériaux*. école des Mines d'Albi, 2005.

[Mad57] S. Mader. Elektronenmikroskopische untersuchung der gleitlinienbildung auf kupfereinkristallen. *Zeitschrift für Physik*, 149 :73–102, 1957.

[Man73] J. Mandel. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *International Journal of Solids and Structures*, 9 :725–740, 1973.

[MK81] H. Meckings and U.F. Kocks. Kinetics of flow and strainhardening. *Acta Metallurgica*, 29 :1865–1875, 1981.

[MK89] T. Mutschele and R. Kirchheim. Hydrogen as a probe for the average thickness of a grain boundary. *Scripta Metallurgica*, 21 :11011104, 1989.

[ML79] H. Margolin and R.B. Longo. Slip band spacing in alpha titanium. *Scripta Metallurgica*, 13 :561–564, 1979.

[MS75] H. Margolin and M.S. Stanescu. Polycrystalline strengthening. *Acta Metallurgica*, 23 :1411–1418, 1975.

[MS03] H. Moulinec and P. Suquet. Comparison of FFT-based methods for computing the responce of composites with highly contrasted mechanical responses. *Physica B Condensed Matter*, 338 :58–60, 2003.

[MTB80] W.A. McInteer, A.W. Thompson, and I.M. Bernstein. The effect of hydrogen on the slip character of nickel. *Acta Metallurgica*, 28 :887–884, 1980.

[Mug82] H. Mughrabi. Continuum models of distrecte systems. *North-Holland*, pages 241–257, 1982.

[Mug88] H. Mugrabi. Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotically and cyclically deformed metal crystals. *Phys. Appl.*, 23 :367–379, 1988.

[Mur87] T. Mura. *Micromechanics of defects in solids*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1987.

[NBT01] E.V. Nesterova, B. Bacroix, and C. Teodosiu. Microstructure and texture evolution under strain-path changes in low-carbon interstitial-free steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32A :2527–2538, 2001.

[NBW+10] N. Nicaise, S. Berbenni, F. Wagner, M. Berveiller, and X. Lemoine. Coupled effects of grain size distributions and crystallographic textures on the plastic behaviour of if steels. *International Journal of Plasticity*, In Press, 2010.

[NC96] C.W. Nan and D.R. Clarke. The influence of particle size and particle fracture on the elastic/plastic deformation of metal matrix composites. *Acta. Mat.*, 44 :3801–3811, 1996.

[Neu83] H. Neuhäuser. *Slip-line formation and collective dislocation motion.* 6. ed. F. R.N. Nabarro, Holland Publishing Company, 1983.

[Nic09] N. Nicaise. *Effet de longueur interne sur les proprietes effectives des polycristaux métalliques : Applications aux acier.* PhD thesis, Université Paul-Verlaine de Metz, 2009.

[NNO86] S. Nemat-Nasser and M. Obata. Rate-dependent finite elastoplastic deformation of polycrystals. *Proceeding of Royal Society London A*, 497 :343–375, 1986.

[NW91] T.G. Nieh and J. Wadsworth. Hallpetch relation in nanocrystalline solid. *Scripta Metallurgica*, 25 :955, 1991.

[Nye53] J.F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1 :153–162, 1953.

[OO07] N. Ohno and D. Okumura. Higher-order stress and grain size effects due to self-energy of geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55 :18791898, 2007.

[ORS00] M. Ortiz, E.A. Repetto, and L. Stainier. A theory of sub-grain dislocation structures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :2077–2114, 2000.

[Paq98] A. Paquin. *Modélisation micromécanique du comportement élastoviscoplastique des matériaux hétérogènes.* PhD thesis, Université de Metz, France, 1998.

[PBVB10] C. Perrin, S. Berbenni, H. Vehoff, and M. Berveiller. Role of discrete intra-granular slip on lattice rotations in polycrystalline ni : Experimental and micromechanical studies. *Acta Materialia*, 58 :4639–4649, 2010.

[Pet53] N.J. Petch. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of Iron and Steel Institute*, 174 :25–28, 1953.

[Pil90] P. Pilvin. *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux*. PhD thesis, Université Paris VI, France, 1990.

[PNB+09] J.M. Pipard, N. Nicaise, S. Berbenni, O. Bouazziz, and M. Berveiller. A new mean field micromechanical approach to capture grain size effects. *Computational Materials Science*, 45 :604–610, 2009.

[PPL75] D. Pollnow, R. Penelle, and P. Lacombe. Relation entre les propriétés plastiques et la microstructure de monocristaux de fer déformés par traction à la température ambiante. *Mém. Scien. Revue Métallurgie*, pages 491–503, 1975.

[RBB09] T. Richeton, S. Berbenni, and M. Berveiller. Grain-size dependent accomodation due to intragranular distribution of dislocation loops. *Acta Materialia*, 57 :1347–1356, 2009.

[Rey88a] C. Rey. Effect of grain boundaries on the mechanical behavior of grains in polycrystals. *Revue Phys ; Appl.*, 23 :491–500, 1988.

[Rey88b] C. Rey. Effects of grain boundaries on the mechanical behaviour of grains in polycrystals. *Revue de Physique Appliquée*, 23 :491–500, 1988.

[RHJ96] V Randle, N. Hansens, and D.J. Jensen. The deformation behaviour of grain boundary regions in polycrystalline aluminium. *Philosophical Magazine A*, 73(2) :265–282, 1996.

[Ric06] T. Richeton. *Dynamique et complexité de la déformation plastique : étude par émission acoustique*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2006.

[RPGK08] A. Roy, R.H.J. Peerlings, M.G.D. Geers, and Y. Kasyanyuk. Continuum modeling of dislocation interactions : why discreteness matters ? *Materials Science Engineering A*, 486 :653–661, 2008.

[Sac28] G. Sachs. Zur ableitung einer flie. *Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure*, 72 :734–736, 1928.

[SBFB02] H. Sabar, M. Berveiller, V. Favier, and S. Berbenni. A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 39 :3257–3276, 2002.

[Sch99] K W. Schwarz. Simulation of dislocations on the mesoscopic scale i. methods and examples. *Journal of Applied Physics*, 85(1) :108–119, 1999.

[SF00] R. Sedlacek and S. Forest. Non-local plasticity at microscale : A dislocation-based and a cosserat model. *Phys. Stat. Sol.*, 221 :583, 2000.

[SFIC09] M.N. Shiekhelsouk, V. Favier, K. Inal, and M. Cherkaoui. Modelling the behaviour of polycrystalline austenitic steel with twinning-induced plasticity effect. *International Journal of Plasticity*, 25 :105–133, 2009.

[SH72] M.R. Staker and D.R. Holt. The dislocation cell size and dislocation density in copper deformed at temperatures between 25 and 700˚c. *Acta Metallurgica*, 20 :569579, 1972.

[SM03] B.M. Schroeter and D.L. McDowell. Measurement of deformation fields in polycrystalline ofhc copper. *Int J Plasticity*, 19 :1355–76, 2003.

[SP08] S. Scheriau and R. Pipan. Influence of grain size on orientation changes during plastic deformation. *Materials Science and Engineering A*, 493 :48–52, 2008.

[SR95] SR. Skjervold and N Ryum. Characterization of local texture ina moderately deformed polycrystalinne a1si-alloy. *Acta Metallurgica*, 43 :3159–317, 1995.

[SSV08] I. Serre, D. Salazar, and J.-B. Vogt. Atomic force microscopy investigation of surface relief in individual phases of deformed duplex stainless steel. *Materials Science and Engineering A*, 492 :428–433, 2008.

[SSW08] R. Sedlacek, C. Schwarz, and E. Werner. Modeling of size-dependent internal stresses in dislcoation cell structures. *Mat. Sci Eng.*, 474 :323–327, 2008.

[SW79] N J. Salamon and G G. Walter. Limits of lipschitz-hankel integrals. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 24(3) :237–254, 1979.

[Tay38] G.I. Taylor. Plastic strain in metals. *J.Inst. Metals*, 61 :307–324, 1938.

[Tay08] G.I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. *Materials Science and Engineering A*, 483 :179–183, 2008.

[TBF73] A.W. Thompson, M.I. Baskes, and W.F. Flanagan. The dependence of polycristal work hardening on grain size. *Acta Metallurgica*, 21 :1017–1027, 1973.

[TBFB10] V. Taupin, S. Berbenni, C. Fressengeas, and O. Bouaziz. On particle size effects : an internal length mean field approch using fields dislocation mechanics. *Proceeding ECCM 2010, Palais des Congrés, France, 16-21 mai 2010*, In Press, 2010.

[TYF78] T. Tabata, S. Yamanaka, and H. Fujita. In situ deformation on the [111] aluminium single crystals observed by high voltage electron microscopy. *Acta. Metall.*, 26 :405–411, 1978.

[UDFN04] M.D. Uchic, D.M. Dimiduk, J.N. Florando, and W.D. Nix. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity. *Science*, 305 :986–989, 2004.

[UMAT94] Y. Uetani, Y.and Nakagawa, K. Matsuda, H. Andada, and S. Tada. Slip behavior at the early stage of plastic deformation in a polycristalline cu-30 mass%zn alloy. *J. Soc. Mat.Sci. Japan*, 43 :1297–1303, 1994.

[Ver98] Fivel M. Groma I. Verdier, M. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in f.c.c. metals : principles and applications. *Modelling and Simulation in Materials Science Engineering*, pages 755–770, 1998.

[VKK+97] A. Vinogradov, Y. Kaneko, K. Kitagawa, S. Hashimoto, V. Stolyarov, and R. Valiev. Cyclic response of ultrafine-grained copper at constant plastic strain amplitude. *Scripta Materialia*, 36 :1345–1351, 1997.

[VL06] C.A. Volkert and E.T. Lilleodden. Size effects in the deformation of sub-micron au columns. *Philos. Mag.*, 86 :55675579, 2006.

[WC07] C.R. Weinberger and W. Cai. Computing image stress in an elastic cylinder. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55 :2027–2054, 2007.

[Wen81] G.J. Weng. Self-consistent determination of time-dependent behavior of metals. *Journal of Applied Mechanics*, 48 :41–46, 1981.

[Wen83] G.J. Weng. A micromechanical theory of grain-size dependence in metal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 31 :193–203, 1983.

[WLT+04] Y. Weng, B.C. Larson, J.Z. Tischler, G.E. Ice, J.D. Budai, and W. Liu. Differential-aperture x-ray structural microscopy : a submicron-resolution three-dimensional probe of local microstructure and strain. *Micron*, 35 :431–439, 2004.

[WT05] J.A. Wert and C.T. Thorning. Grain subdivision in polycrystalline copper subject to tensile deformation. *Materials Science and Technology*, 21 :1401–1406, 2005.

[Yam28] K. Yamaguchi. The slip-bands produced when crystals of aluminum are stretched. *Sci. Papers Institute of Physics. Chem. Research*, 8 :289, 1928.

[Yan06] B. Yang. *Grain size effects on the mechanical behaviour of polycristalline Nickel from micro to nanoscale.* PhD thesis, Universität des Saarlandes, Allemagne, 2006.

[YVH+08] B. Yang, H. Vehoff, A. Hohenwarter, M. Hafok, and R. Pippan. Strain effects on the coarsening and softening of electrodeposited nanocrystalline ni subjected to high pressure torsion. *Scripta materialia*, 58 :790–793, 2008.

[Zai06] M. Zaiser. Scale invariance in plastic flow of crystalline solids. *Advances in Physics*, 54 :185–245, 2006.

[Zan63] G. Zankl. Magnetische und elektronenmikroskoposche untersuchungen zum plastischen verhalten von vielkristallinem nickel. *Zeitschrift für Naturforschung*, 18(a) :795–809, 1963.

[Zao02] A. Zaoui. Continuum micromechanics. *Journal of Engineering Mechanics*, 128 :808–816, 2002.

Annexe A

Modélisation auto-cohérente du comportement élasto-viscoplastique de matériaux hétérogène (Procédure auto-cohérente à champ translaté)

A.1 Comportement élasto-viscoplastique et équations de champs du problème

Un matériau hétérogène à comportement élasto-viscoplastique est considéré. Les hypothèses suivantes sont utilisées :

– les chargements sont supposés quasi statiques, donc sans effet d'inertie,

– le matériau n'est soumis à aucune force de volume,
– seul le cas des petites déformations est envisagé, (même si les techniques présentées peuvent être étendues aux cas des transformations finies).

Les équations décrivant le comportement élasto-viscoplastique en tout point $\underline{r}$ du VER sont les suivantes :

– la loi de comportement élasto-viscoplastique décrite par une décomposition du taux de déformation en une partie élastique $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e$ et une partie viscoplastique $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}$ suivant un schéma de Maxwell comme le montre la figure (A.1), et comme le traduit l'équation :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}(\underline{x}) = \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e(\underline{x}) + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) \tag{A.1}$$

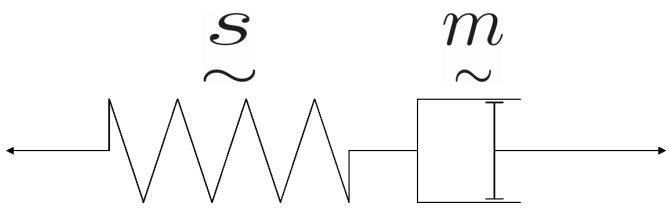

FIGURE A.1 – Modèle série de Maxwell

– la loi d'évolution des déformations élastiques, correspondant à la loi de Hooke :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e(\underline{x}) = \underset{\approx}{s}(\underline{x}) : \dot{\underset{\sim}{\sigma}}(\underline{x}, t) \tag{A.2}$$

où $\underset{\approx}{s}$ est le tenseur des complaisances élastiques. Nous avons également $\underset{\approx}{s} = \underset{\approx}{c}^{-1}$, où $\underset{\approx}{c}$ représente le tenseur des modules élastiques.

– la loi d'évolution des déformations viscoplastiques est la suivante :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \underset{\approx}{m}(\underset{\sim}{\sigma}, \underset{\sim}{\varepsilon}^{vp}, \underline{x}, ...) : \underset{\sim}{\sigma}(\underline{x}, t) \tag{A.3}$$

où $\underset{\approx}{m}$ est le tenseur des compliances viscoplastiques, non linéaires en $\underset{\sim}{\sigma}$. Nous avons également $\underset{\approx}{m} = \underset{\approx}{b}^{-1}$, où $\underset{\approx}{b}$ représente le tenseur des modules viscoplastiques.

En prenant en compte les équations (A.1) à (A.3) la loi de comportement s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}(\underline{x}) &= \underset{\approx}{s}(\underline{x}) : \dot{\underset{\sim}{\sigma}}(\underline{x}) + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) \\ avec \quad & \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \underset{\approx}{m}(\underline{x}) : \underset{\sim}{\sigma}(\underline{x}) \end{aligned} \tag{A.4}$$

Les équations du problème sont les suivantes :

– la condition d'équilibre pour le champ de contrainte vérifiée à tout instant t :

$$div(\underset{\sim}{\sigma}(\underline{x}, t)) = 0 \tag{A.5}$$

– la condition d'équilibre pour un champ de taux de contrainte inconnu à chaque instant t :

$$div(\dot{\underset{\sim}{\sigma}}(\underline{x}, t)) = 0 \tag{A.6}$$

– la condition de compatibilité cinématique du champ des taux de déformation :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}(\underline{x}) = \nabla^s \dot{\underline{u}}(\underline{x}) \tag{A.7}$$

où ∇^s dénote l'opérateur gradient symétrisé.

– les conditions aux limites en vitesse imposée uniforme à la frontière du VER :

$$\dot{\underline{u}}^d = \dot{\underset{\sim}{E}} \cdot \underline{x} \; sur \; \partial V \tag{A.8}$$

La résolution du problème consiste à déterminer des champs de taux de contrainte $\dot{\underset{\sim}{\sigma}}$ et de taux de déformation $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}$ satisfaisants à l'ensemble des équations de champs mécaniques du problème énoncé. Le comportement global d'un VER pourra alors être défini en appliquant une méthode d'homogénéisation de type auto-cohérent.

Dans notre schéma d'intégration, les champs de contrainte $\underset{\sim}{\sigma}$ et de déformation viscoplastique $\underset{\sim}{\varepsilon}^{vp}$ seront considérés comme les variables internes contenant l'histoire

du matériau.

La démarche est incrémentale et non héréditaire. Elle permet une estimation du comportement effectif du matériau directement dans l'espace réel sans nécessiter le recours aux transformées de Laplace-Carson inverses.

A.2 Opérateurs de projection et équation intégrale

A.2.1 Variations au premier ordre des propriétés élastiques et viscoplastiques

Nous considèrons les modules élastiques $\underset{\approx}{c}$ et viscoplastiques $\underset{\approx}{m}$ fluctuant autour de modules élastiques $\underset{\approx}{C}$ et viscoplastiques $\underset{\approx}{M}$ homogènes tels que :

$$\begin{cases} \underset{\approx}{c}(\underline{x}) = \underset{\approx}{C} + \delta\underset{\approx}{c}(\underline{x}) \\ \underset{\approx}{m}(\underline{x}) = \underset{\approx}{M} + \delta\underset{\approx}{m}(\underline{x}) \end{cases} \tag{A.9}$$

De même, les complaisances élastiques $\underset{\approx}{s}$ et viscoplastiques $\underset{\approx}{b}$ fluctuent autour de complaisances élastiques $\underset{\approx}{S}$ et viscoplastiques $\underset{\approx}{B}$ homogènes telles que :

$$\begin{cases} \underset{\approx}{s}(\underline{x}) = \underset{\approx}{c}^{-1}(\underline{x}) = \underset{\approx}{S} + \delta\underset{\approx}{s}(\underline{x}) \\ \underset{\approx}{b}(\underline{x}) = \underset{\approx}{m}^{-1}(\underline{x}) = \underset{\approx}{B} + \delta\underset{\approx}{b}(\underline{x}) \end{cases} \tag{A.10}$$

A.2.2 Opérateur de projection et propriétés remarquables

Les champs de contrainte et des taux de contrainte sont alors statiquement admissibles (équations (A.5) et (A.6)). Les équations (A.7) et (A.8) imposent des conditions de compatibilité cinématique sur les taux de déformation. Ainsi, l'utilisation de l'opérateur de projection $\underset{\approx}{\Pi}^C(\underline{x})$ défini par Kunin [Kun81][Kun83] est dictée par ses propriétés intéressantes. Ces opérateurs, associés aux milieux élastiques (exposant C) ou viscoplastique (exposant B), sont définis par les relations :

$$\begin{cases} \underset{\approx}{\Pi}^C(\underline{x}-\underline{x}') = \underset{\approx}{\Gamma}^C(\underline{x}-\underline{x}') : \underset{\approx}{C} \\ \underset{\approx}{\Pi}^B(\underline{x}-\underline{x}') = \underset{\approx}{\Gamma}^B(\underline{x}-\underline{x}') : \underset{\approx}{B} \end{cases} \tag{A.11}$$

Dans ces dernières relations, $\underset{\approx}{\Gamma}^C$ et $\underset{\approx}{\Gamma}^B$ sont les tenseurs de Green modifiés définis par Kröner [Krö86][Krö89] et associés aux modules élastiques $\underset{\approx}{C}$ et viscoplastiques $\underset{\approx}{B}$ respectivement. Ces tenseurs sont définis à partir du tenseur de Green par :

$$\Gamma^*_{ijkl} = -\frac{1}{2}\left(G^*_{ik,jl} + G^*_{jk,il}\right) \tag{A.12}$$

où $*$ correspond à C ou à B.

Les tenseurs $\underset{\approx}{\Gamma}^{C\ ou\ B}$ se décomposent en une partie locale $\underset{\approx l}{\Gamma}^{C\ ou\ B}$ et une partie non locale $\underset{\approx nl}{\Gamma}^{C\ ou\ B}$ (variant en $\frac{1}{\|\underline{x}-\underline{x}'\|^3}$) telles que :

$$\underset{\approx}{\Gamma}^{C\ ou\ B}(\underline{x}-\underline{x}') = \underset{\approx l}{\Gamma}^{C\ ou\ B}\delta(\underline{x}-\underline{x}') + \underset{\approx nl}{\Gamma}^{C\ ou\ B}(\underline{x}-\underline{x}') \tag{A.13}$$

En utilisant les conditions d'équilibre (équations (A.5) et (A.6))), les propriétés remarquables suivantes peuvent être démontrées en se plaçant dans l'espace de

Fourier [Paq98][Ber02] :

$$\begin{cases} div(\underset{\sim}{\dot{\sigma}}(\underline{x},t)) = 0 \Leftrightarrow \underset{\approx}{\Pi}^{C} \star \underset{\approx}{S} : \underset{\sim}{\dot{\sigma}} = 0 \\ div(\underset{\sim}{\sigma}(\underline{x},t)) = 0 \Leftrightarrow \underset{\approx}{\Pi}^{B} \star \underset{\approx}{M} : \underset{\sim}{\sigma} = 0 \end{cases} \tag{A.14}$$

où $\star$ correspond au produit de convolution.

En utilisant les équations de compatibilité (A.7) et (A.8), la propriété remarquable suivante peut également être démontrée en se plaçant dans l'espace de Fourier [Ber02] :

$$\underset{\approx}{\Pi}^{C} \star \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} = \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} - \underset{\sim}{\dot{E}} \tag{A.15}$$

A.2.3 Equation intégrale

L'équation intégrale du problème peut alors être définie à partir de la loi de comportement en tout point.

En faisant intervenir l'opérateur de projection $\underset{\approx}{\Pi}^{C}$ de part et d'autre de l'expression (A.4), la décomposition du tenseur des complaisances élastiques donnée par l'équation (A.10), puis les propriétés (A.14) et (A.15), nous obtenons aisément l'équation intégrale :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} = \underset{\sim}{\dot{E}} + \underset{\approx}{\Pi}^{C} \star (\delta \underset{\approx}{s} : \underset{\sim}{\dot{\sigma}} + \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}) \tag{A.16}$$

Cette équation décrit donc exactement le problème en tout point $\underline{x}$ du VER. Les taux de déformation $\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}$ au point $\underline{x}$ dépendent à la fois des taux de déformation

macroscopiques imposés, mais aussi des taux de déformation viscoplastique (dépendants de l'état de contrainte) au point $\underline{x}'$.
La résolution de cette équation intégrale, dans le cas de la méthole auto-cohérente, n'est pas simple et demande l'utilisation de la technique mise en oeuvre par Sabar et al. [SBFB02] et Berbenni et al. [BFLB04][Ber02]. Il s'agit de la méthode des champs translatés dans le cadre d'une approche incrémentale à variable interne.

A.2.4 Procédure auto-cohérente : application de la technique des champs translatés

Nous supposons tout d'abord que les taux de déformation viscoplastique sont indépendants des propriétés élastiques du milieu élasto-viscoplastique hétérogène. Ainsi, le tenseur des modules élastiques $\underset{\approx}{C}$ peut être choisi comme étant la solution auto-cohérente en élasticité linéaire pure.
Nous prendrons la solution $\underset{\approx}{C} = \underset{\approx}{C}^{eff}$ directement au niveau de l'équation intégrale :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} = \underset{\sim}{\dot{E}} + \underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}} \star (\delta \underset{\approx}{s}^{eff} : \underset{\approx}{c} : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{e} + \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}) \tag{A.17}$$

L'opérateur de projection étant associé au milieu élastique de référence, sa nouvelle expression est :

$$\underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}}(\underline{x} - \underline{x}') = \underset{\approx}{\Gamma}^{C^{eff}}(\underline{x} - \underline{x}') : \underset{\approx}{C}^{eff} \tag{A.18}$$

Le tenseur des modules d'élasticité effectifs du milieu homogène purement élas-

tique est défini de manière classique par la formule :

$$\underset{\approx}{C}^{eff} = \overline{\underset{\approx}{c} : \underset{\approx}{A}^{C^{eff}}} : \overline{\underset{\approx}{A}^{C^{eff}}}^{-1} \tag{A.19}$$

Dans cette formule, le tenseur $\underset{\approx}{A}^{C^{eff}}$ correspond au tenseur de localisation du problème purement élastique défini par :

$$\underset{\approx}{A}^{C^{eff}} = \left(\underset{\approx}{I} + \underset{\approx}{\Gamma}_l^{C^{eff}} : \delta\underset{\approx}{c}^{eff}\right)^{-1} \tag{A.20}$$

avec $\delta\underset{\approx}{c}^{eff}(\underline{x}) = \underset{\approx}{c}(\underline{x}) - \underset{\approx}{C}^{eff}$, suivant l'équation (A.9).
Le tenseur de localisation $\underset{\approx}{A}^{C^{eff}}$ vérifie la propriété suivante :

$$\overline{\underset{\approx}{A}^{C^{eff}}} = \underset{\approx}{I} \tag{A.21}$$

Cette étape constitue un début de l'application des techniques d'homogénéisation comme la procédure auto-cohérente. Elle n'est pas suffisante pour résoudre l'équation intégrale (A.16). Cette insuffisance est liée à la présence dans cette équation du produit de convolution spatial et à l'absence de terme de fluctuation au niveau du champ $\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}$ dans cette convolution.
A l'instar de Sabar et al. [SBFB02] et Berbenni et al. [BFLB04], la technique des champs translatés est appliquée pour résoudre et simplifier cette équation par une condition d'auto-cohérence.
Cette technique consiste à décomposer (ou encore translater) le champ $\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x})$ en un champ cinématiquement admissible $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}(\underline{x})$ à priori connu, et non nécessairement uniforme comme cela est le cas dans l'approche de Kröner-Weng [Krö61] [Wen81], et une fluctuation $\delta\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x})$.

Cette décomposition se traduit par l'écriture variationnelle suivante :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) = \underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}(\underline{x}) + \delta\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}(\underline{x}) \tag{A.22}$$

La figure (A.2) permet de comparer les techniques de décomposition des champs entre la méthode utilisée dans les modèles de type Kröner-Weng et celle de type champ translaté.

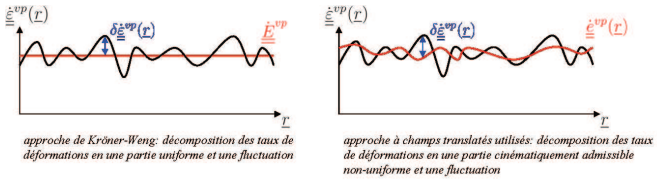

FIGURE A.2 – Comparaison de l'approche de Kröner-Weng [Krö61, Wen81] à celle à champs translatés [Ber02][SBFB02][BFLB04], au niveau de la description du champ local de déformation viscoplastique $\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp}$

Le fait que le terme $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}(\underline{x})$ soit choisi comme cinématiquement admissible permettra d'utiliser les propriétés de l'opérateur de projection $\underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}}(\underline{x} - \underline{x}')$.
Auparavant, le champ $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}(\underline{x})$ doit être choisi astucieusement. Un choix naturel de $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}(\underline{x})$ est la solution du problème d'un milieu hétérogène, de même microstructure, purement viscoplastique soumis à un chargement inconnu $\underset{\sim}{\dot{X}}$.
Ainsi, la condition de compatibilité cinématique est assurée.
Nous pouvons alors définir le champ $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}(\underline{x})$ par la solution auto-cohérente de l'équation intégrale d'un problème auxiliaire viscoplastique pur :

$$\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp} = \underset{\sim}{\dot{X}} + \underset{\approx}{\Pi}^{B} \star \left(\delta\underset{\approx}{b} : \underset{\approx}{m} : \underset{\sim}{\dot{e}}^{vp} \right) \tag{A.23}$$

La solution à cette équation intégrale est la suivante :

$$\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp} = \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{X}} \tag{A.24}$$

Dans cette équation, le tenseur $\underset{\approx}{A}^{B^{eff}}$ correspond au tenseur de localisation du problème purement viscoplastique pur défini par :

$$\underset{\approx}{A}^{B^{eff}} = \left(\underset{\approx}{I} + \underset{\approx_l}{\Gamma}^{B^{eff}} : \delta \underset{\approx}{b}^{eff} \right)^{-1} \tag{A.25}$$

Dans cette équation, $\underset{\approx_l}{\Gamma}^{B^{eff}}$ correspond à la partie locale du tenseur de Green modifié associé au milieu effectif purement viscoplastique de modules homogènes $\underset{\approx}{B}^{eff}$.
$\delta \underset{\approx}{b}^{eff}(\underline{x})$ correspond aux fluctuations des modules viscoplastiques $\underset{\approx}{b}(\underline{x})$ autour de ces modules effectifs.
Nous avons ainsi :

$$\underset{\approx}{b}(\underline{x}) = \underset{\approx}{B}^{eff} + \delta \underset{\approx}{b}^{eff}(\underline{x}) \tag{A.26}$$

Les modules viscoplastiques effectifs sont obtenus par une opération de moyenne :

$$\underset{\approx}{B}^{eff} = \overline{\underset{\approx}{b} : \underset{\approx}{A}^{B^{eff}}} \tag{A.27}$$

Le tenseur de localisation du problème purement viscoplastique $\underset{\approx}{A}^{B^{eff}}$ vérifie la

propriété suivante :

$$\overline{\underset{\approx}{A}^{B^{eff}}} = \underset{\approx}{I} \tag{A.28}$$

Le champ $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}$, défini par l'équation (A.24), étant cinématiquement admissible, la relation suivante est vérifiée (d'après la propriété (A.15)) :

$$\underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}} \star \underset{\sim}{\dot{e}}^{vp} = \underset{\sim}{\dot{e}}^{vp} - \underset{\sim}{\dot{X}} \tag{A.29}$$

En remplaçant l'expression de $\underset{\sim}{\dot{e}}^{vp}$ (A.24) dans l'équation (A.29), l'équation (A.29) devient :

$$\underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}} \star \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{X}} = \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{X}} - \underset{\sim}{\dot{X}} \tag{A.30}$$

L'équation intégrale (équation (A.17)) peut alors être réécrite sous la forme suivante :

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} = \underset{\sim}{\dot{E}} + \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{X}} - \underset{\sim}{\dot{X}} + \underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}} \star \left(\delta \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} + \delta \underset{\approx}{s}^{eff} : \underset{\approx}{c} : \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{e} \right) \tag{A.31}$$

En décomposant le tenseur de projection $\underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}}$ en une partie locale et une partie non locale [Krö89] :

$$\underset{\approx}{\Pi}^{C^{eff}}(\underline{x} - \underline{x}') = \underset{\approx_l}{\Pi}^{C^{eff}} \delta(\underline{x} - \underline{x}') + \underset{\approx_{nl}}{\Pi}^{C^{eff}}(\underline{x} - \underline{x}') \tag{A.32}$$

Puis, en appliquant le principe du schéma auto-cohérent, où les contributions non locales, variant en $\frac{1}{||\underline{x}-\underline{r}'||^3}$, sont négligées, nous déduisons de l'équation intégrale (A.31) que le tenseur $\underset{\sim}{\dot{X}}$ doit être choisi de telle sorte que :

$$\overline{\delta \underset{\approx}{s}^{eff} : \underset{\approx}{c} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{e} + \delta \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}} = 0 \tag{A.33}$$

Par identification, à l'aide de l'équation (A.33), le tenseur

$$\underset{\sim}{\dot{X}} = \underset{\sim}{\dot{E}} - \underset{\approx}{S}^{eff} : \underset{\sim}{\dot{\Sigma}} \tag{A.34}$$

Or, compte tenu de la loi de comportement macroscopique $\underset{\sim}{\dot{E}} = \underset{\approx}{S}^{eff} : \underset{\sim}{\dot{\Sigma}} + \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp^{eff}}$, l'expression du tenseur $\underset{\sim}{\dot{X}}$ s'identifie comme suit en utilisant le lemme de Hill-Mandel [Hil63][Man73] :

$$\underset{\sim}{\dot{X}} = \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp^{eff}} = \overline{{}^{t}\underset{\approx}{B}^{C^{eff}} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}} \tag{A.35}$$

où $\underset{\approx}{B}^{C^{eff}} = \underset{\approx}{c} : \underset{\approx}{A}^{C^{eff}} : \underset{\approx}{S}^{eff}$ est le tenseur de concentration de contrainte obtenu dans le cas du problème purement élastique.
Nous obtenons alors l'équation de localisation en taux de déformation suivante qui contient toute la complexité des interactions mécaniques de nature élasto-viscoplastique :

$$\begin{aligned} \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}} \;=\; & \underset{\approx}{A}^{C^{eff}} : (\underset{\sim}{\dot{E}} - \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp^{eff}}) + \underset{\approx}{A}^{C^{eff}} : \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp^{eff}} + \\ & \underset{\approx}{A}^{C^{eff}} : \underset{\approx}{\Gamma}_{l}^{C^{eff}} : \left(\underset{\approx}{c} : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp} - \underset{\approx}{C}^{eff} : \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp^{eff}} \right) \end{aligned} \tag{A.36}$$

La loi de comportement élasto-viscoplastique locale s'écrivant :

$$\underset{\sim}{\dot{\sigma}} = \underset{\approx}{c} : \left(\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} - \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} \right) \tag{A.37}$$

Nous pouvons en déduire la loi d'interaction en taux de contrainte en combinant les équations (A.36) et (A.37) :

$$\underset{\sim}{\dot{\sigma}} = \underset{\approx}{c} : \underset{\approx}{A}^{C^{eff}} : \underset{\approx}{S}^{eff} : \underset{\sim}{\dot{\Sigma}} - \underset{\approx}{c} : \underset{\approx}{A}^{C^{eff}} : \left(\underset{\approx}{I} - \underset{\approx}{S}^{Esh} \right) : \left(\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^{vp} - \underset{\approx}{A}^{B^{eff}} : \underset{\sim}{\dot{E}}^{vp^{eff}} \right) \tag{A.38}$$

Dans cette équation, le tenseur noté $\underset{\approx}{S}^{Esh}$ correspond au tenseur d'Eshelby élastique [Esh57], son expression est la suivante :

$$\underset{\approx}{S}^{Esh} = \underset{\approx l}{\Gamma}^{C^{eff}} : \underset{\approx}{C}^{eff} \tag{A.39}$$

Annexe B

Méthode des fonctions de Green pour un milieu infini élastique homogène et incompatible

Pour un milieu à élasticité homogène $\underset{\approx}{C}^0$, l'équation de Navier introduite dans le Chapitre 3 s'écrit en notation indicielle :

$$C^0_{ijkl} u_{i,jl}(\underline{x}) - f^*_k = 0 \tag{B.1}$$

avec $f^*_j(\underline{x}) = -C^0_{ijkl}\epsilon^*_{ij,l}$ est une force fictive volumique.

On rappelle les conditions aux limites. Sur la frontière ∂V de V (cf. figure B.1, on impose un vecteur déplacement $\underline{u^d}$ (condition de Dirichlet) (cf. figure B.1) :

$$u^d_m = (E_{mn} + W_{mn})\, \underline{x}_n \text{ sur } \partial V \tag{B.2}$$

où $\underset{\sim}{E}$ et $\underset{\sim}{W}$ sont respectivement les déformations et les rotations homogènes imposées sur ∂V.

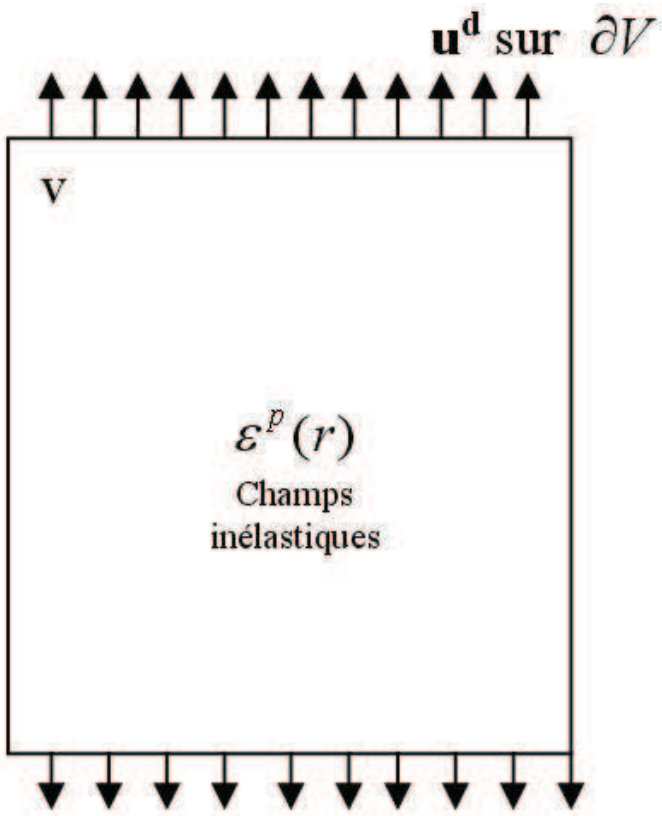

FIGURE B.1 – Milieu continu V avec déformation libre $\underset{\sim}{\epsilon^p}$et une avec un déplacements imposés $\mathbf{u^d}$ à la surface ∂V du volume

La résolution du système d'équations aux dérivées partielles (B.1) dont les inconnues sont les déplacements $\underline{u}(\underline{x})$ tenant compte des conditions de frontière à l'infini en déplacement, fait appel au tenseur de Green du milieu de référence de modules élastiques $\underset{\sim}{C}^0$. Ce tenseur de Green $\underset{\sim}{G}(\underline{x}-\underline{x'})$ décrivant le déplacement au point $\underline{x}$ dans la direction i sous l'effet d'une force unité $f_i = \delta_{ij}\delta(\underline{x}-\underline{x'})$ appliqué au point $\underline{x'}$ dans la direction j, est défini par :

$$C^0_{ijkl}G_{km,lj}(\underline{x}-\underline{x'}) - \delta_{im}\delta(\underline{x}-\underline{x'}) = 0 \tag{B.3}$$

Où δ_{im} est le tenseur de Krönecker et $\delta(\underline{x}-\underline{x'})$ est la distribution de Dirac au sens des distribution dont les propriétés permettent d'écrire :

$$u_i(\underline{x}) = \int_V \delta_{im}\delta(\underline{x}-\underline{x'})u_m(\underline{x'})dV' \tag{B.4}$$

En substituant l'équation (B.3) dans (B.4), on écrit :

$$u_i(\underline{x}) = -\int_V C^0_{mjkl}G_{ki,jl}(\underline{x}-\underline{x'})u_m(\underline{x'})dV' \tag{B.5}$$

Utilisant les propriétés suivantes :

$$G_{ij,k}(\underline{x}-\underline{x'}) = -G_{ij,k'}(\underline{x}-\underline{x'}) \tag{B.6}$$

et

$$G_{ij,kl}(\underline{x}-\underline{x'}) = G_{ij,k'l'}(\underline{x}-\underline{x'}) \tag{B.7}$$

l'équation (B.5) devient :

$$u_i(\underline{x}) = -\int C^0_{mjkl}G_{ki,j'l'}(\underline{x}-\underline{x'})u_m(\underline{x'})dV' \tag{B.8}$$

En utilisant deux fois consécutivement le théorème d'intégration par parties et les conditions à l'infini ($u_i = u_i^d$) sur ∂V, cette dernière relation (B.8) s'écrit :

$$u_i(\underline{x}) = u_i^d - \int_V C^0_{mjkl}G_{ki}(\underline{x}-\underline{x'})u_{m,j'l'}(\underline{x'})dV' \tag{B.9}$$

A partir de la relation (B.1), on obtient alors :

$$u_i(\underline{x}) = u_i^d - \int_V G_{ki}(\underline{x}-\underline{x'})C^0_{klmn}\epsilon^p_{mn,l'}(\underline{x'})dV' \tag{B.10}$$

Celle-ci se transforme par intégration par partie en :

$$u_i(\underline{x}) = u_i^d + \int_V G_{ki,l'}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x}')dV' \tag{B.11}$$

On déduit de l'équation B.11 immédiatement le gradient de déplacement :

$$\beta_{ji}(\underline{x}) = u_{i,j}(\underline{x}) = u^d_{i,j} - \int_V G_{ki,lj}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x}')dV' \tag{B.12}$$

Par symétrisation, la déformation totale $\epsilon_{ij}(\underline{x})$ s'écrit avec les conditions aux limites (équation B.2) :

$$\epsilon_{ij}(\underline{x}) = E_{ij} + \int_V \Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x}')dV' \tag{B.13}$$

où Γ_{ijkl} est le tenseur de Green modifié associé à $\underset{\approx}{C}^0$ [Krö89] défini par :

$$\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') = -\frac{1}{2}\left(G_{ik,jl}(\underline{x} - \underline{x}') + G_{jk,il}(\underline{x} - \underline{x}')\right) \tag{B.14}$$

La rotation totale $\omega_{ij}(\underline{x})$ s'écrit avec les conditions aux limites (B.2) :

$$\omega_{ij}(\underline{x}) = W_{ij} + \int_V {}^a\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}')C^0_{klmn}\epsilon^p_{mn}(\underline{x}')dV' \tag{B.15}$$

où ${}^a\Gamma_{ijkl}$ est le tenseur de Green modifié associé à $\underset{\approx}{C}^0$ [Krö89] défini par :

$${}^a\Gamma_{ijkl}(\underline{x} - \underline{x}') = -\frac{1}{2}\left(G_{ik,jl}(\underline{x} - \underline{x}') - G_{jk,il}(\underline{x} - \underline{x}')\right) \tag{B.16}$$

Annexe C

Dérivation de l'énergie libre d'Helmholtz pour un solide avec une déformation libre

L'énergie libre d'Helmholtz par unité de volume dépend de ma déformation macroscopique imposée E_{ij} ainsi que de la déformation plastique $\epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}$ dans le volume V. Celle-ci s'écrit :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}(\underline{x})\right) = \frac{1}{V}\int\limits_{V} \frac{1}{2}\sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon^{\mathrm{e}}_{ij}(\underline{x})\, dV, \tag{C.1}$$

En introduisant la déformation plastique, on peut écrire :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}(\underline{x})\right) = \frac{1}{V}\int\limits_{V} \frac{1}{2}\sigma_{ij}(\underline{x})\left(u_{i,j}(\underline{x}) - \epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}(\underline{x})\right) dV. \tag{C.2}$$

On effectue une intégration par partie, ensuite on applique l'équation d'équilibre ainsi que le théorème de la divergence, l'équation devient alors :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}(\underline{x})\right) = \frac{1}{2V}\int\limits_{\partial V} \sigma_{ij}(\underline{x})u_i(\underline{x})n_j\, dS - \frac{1}{2V}\int\limits_{V} \sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}(\underline{x})\, dV, \tag{C.3}$$

Où n_j est le vecteur unité normal à la surface ∂V. Sur ∂V, un champ de déplacement linéaire $u_i^{\mathrm{d}} = E_{ij}x_j$ est imposé :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})\right) = \frac{1}{2V}\int_{\partial V} \sigma_{ij}(\underline{x}) E_{ik} x_k n_j \, dS - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV. \tag{C.4}$$

Appliquant une seconde fois le théorème de la divergence et en utilisant l'équation d'équilibre, l'équation se simplifie ainsi :

$$\begin{aligned}\phi\left(E_{ij}, \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})\right) &= \frac{1}{2V}E_{ik}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x})\delta_{kj} \, dV - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV \\ &= \frac{1}{2V}E_{ik}\int_V \sigma_{ik}(\underline{x}) \, dV - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV.\end{aligned} \tag{C.5}$$

La contrainte macroscopique Σ_{ij} est définie par $\Sigma_{ij} = \frac{1}{V}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x}) \, dV$, l'équation devient :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})\right) = \frac{1}{2}E_{ij}\Sigma_{ij} - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV. \tag{C.6}$$

La loi de comportement macroscopique (élasticité suppose homogène et linéaire) s'écrit $\Sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(E_{kl} - E_{kl}^{\mathrm{p}}\right.$ avec le module élastique C_{ijkl} et la deformation plastique moyenne $E_{ij}^{\mathrm{p}} = \frac{1}{V}\int_V \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})dV$. En introduisant la loi de comportement dans l'équation C.6, on obtient :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})\right) = \frac{1}{2}E_{ij}C_{ijkl}\left(E_{kl} - E_{kl}^{\mathrm{p}}\right) - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV. \tag{C.7}$$

On introduit enfin les contraintes internes $\tau_{ij}(\underline{x})$ (duesaux source plastique) à partir de la decomposition du tenseur des contraintes local $\sigma_{ij}(\underline{x}) = \Sigma_{ij} + \tau_{ij}(\underline{x})$:

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})\right) = \frac{1}{2}E_{ij}C_{ijkl}\left(E_{kl} - E_{kl}^{\mathrm{p}}\right) - \frac{1}{2V}\Sigma_{ij}\int_V \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV - \frac{1}{2V}\int_V \tau_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV, \tag{C.8}$$

Enfin, l'utilisation de la loi de comportement macroscopique, nous permet d'écrire l'expression finale de l'énergie libre d'Helmholtz par unité de volume ϕ :

$$\phi\left(E_{ij}, \epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x})\right) = \frac{1}{2}\left(E_{ij} - E_{ij}^{\mathrm{p}}\right)C_{ijkl}\left(E_{kl} - E_{kl}^{\mathrm{p}}\right) - \frac{1}{2V}\int_V \tau_{ij}(\underline{x})\epsilon_{ij}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) \, dV. \tag{C.9}$$

Annexe D

Méthode des transformées de Fourier pour un milieu infini élastique homogène et incompatible

D.1 Solution générale en déplacements

La résolution d'équations aux dérivés partielles telles que l'équation de Navier introduite au Chapitre 1 peut être résolue par la méthode des transformés de Fourier. Les principaux intérêts de cette méthode résident dans la simplicité algébrique des équations aux dérivées partielles dans l'espace de Fourier, ainsi que dans l'utilisation du théorème de Parseval pour les calculs de l'énergie élastique. La principale difficulté réside dans le passage de l'espace de Fourier à l'espace réel par la transformée de Fourier inverse.

L'équation fondamentale à résoudre pour des distorsions plastiques données est :

$$\begin{aligned} &C_{ijkl}u_{l,kj} - C_{ijkl}\beta^{p}_{kl,j} = 0 \\ &u^{d}_{i} = 0 \text{ sur } \partial V. \end{aligned} \tag{D.1}$$

Les déplacements **u** sont résolus dans l'espace de Fourier, puis nous utilisons le théorème de Fourier inverse pour les déterminer dans l'espace réel. Soit $\underline{\xi}$ le vecteur de Fourier d'amplitude $\xi = \sqrt{\underline{\xi}\cdot\underline{\xi}}$ et dont les composantes sont ξ_i en coordonnées cartésiennes. Soit $\widetilde{u_k}(\underline{\xi})$ et $\widetilde{\beta^{p}_{lk}}(\underline{\xi})$, les transformées de Fourier, respectivement, du vecteur de déplacement et du tenseur de distorsion plastique :

$$\begin{aligned} \widetilde{u_k}(\underline{\xi}) &= \int_V u_k(\underline{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}}\,dV, \\ \widetilde{\beta^{p}_{lk}}(\underline{\xi}) &= \int_V \beta^{p}_{lk}(\underline{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}}\,dV, \end{aligned} \tag{D.2}$$

où $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$.

Les transformées de Fourier inverses sont définies ainsi :

$$\begin{aligned} u_k(\underline{x}) &= \frac{1}{8\pi^3}\int_{V_\xi} \widetilde{u_k}(\underline{\xi})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}}\,dV_\xi, \\ \beta^{p}_{lk}(\underline{x}) &= \frac{1}{8\pi^3}\int_{V_\xi} \widetilde{\beta^{p}_{lk}}(\underline{\xi})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}}\,dV_\xi. \end{aligned} \tag{D.3}$$

L'équation de Navier D.1 est transformée dans l'espace de Fourier :

$$C_{ijkl}\xi_l\xi_j\widetilde{u_k}(\underline{\xi}) = -\mathrm{i}C_{ijkl}\xi_j\widetilde{\beta^{p}_{lk}}(\underline{\xi}). \tag{D.4}$$

Le champ de déplacement dans l'espace de Fourier peut alors s'écrire :

$$\widetilde{u_k}(\underline{\xi}) = \left(C_{ijkl}\xi_l\xi_j\right)^{-1}\left(-\mathrm{i}C_{ijmn}\xi_j\widetilde{\beta^{p}_{nm}}(\underline{\xi})\right). \tag{D.5}$$

L'équation précédente s'écrit de manière plus compacte :

$$\widetilde{u_k}(\underline{\xi}) = \widetilde{K_{ik}}(\underline{\xi})^{-1}\widetilde{X_i}(\underline{\xi}), \tag{D.6}$$

où $\widetilde{X_i}(\underline{\xi}) = -\mathrm{i}C_{ijmn}\xi_j\widetilde{\beta^p_{nm}}(\underline{\xi}) = -\mathrm{i}C_{ijmn}\xi_j\widetilde{\epsilon^p_{nm}}(\underline{\xi})$ et $\widetilde{K_{ik}}(\underline{\xi}) = (C_{ijkl}\xi_l\xi_j) = \frac{\widetilde{N_{ij}}(\underline{\xi})}{\widetilde{D}(\underline{\xi})}$. $\widetilde{N_{ij}}(\underline{\xi})$ est la matrice transposée des cofacteurs de $\widetilde{K_{ij}}(\underline{\xi})$, et, $\widetilde{D}(\underline{\xi})$ est le déterminant de la matrice $\widetilde{K_{ij}}(\underline{\xi})$.

L'équation D.6 s'écrit donc :

$$\widetilde{u_k}(\underline{\xi}) = \frac{\widetilde{N_{ij}}(\underline{\xi})}{\widetilde{D}(\underline{\xi})}\widetilde{X}_i(\underline{\xi}) \tag{D.7}$$

$\widetilde{K_{ik}}(\underline{\xi})^{-1}$ correspond en fait à la transformée de Fourier du tenseur de Green noté $\widetilde{G_{ik}}(\underline{\underline{\xi}})$ [Mur87].

La solution générale du problème en déplacements s'écrit alors :

$$u_k(\underline{x}) = \frac{-\mathrm{i}}{8\pi^3}\int_{V_\xi}\xi_j C_{ijmn}\widetilde{G_{ik}}(\underline{\xi})\widetilde{\beta^p_{nm}}(\underline{\xi})\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}}\,dV_\xi, \tag{D.8}$$

D.2 Solution en déplacements en élasticité isotrope et plasticité incompressible

Dans ce problème, l'élasticité est supposée isotrope et définie par le module de cisaillement μ et par le rapport de Poisson ν. Les modules d'élasticité s'écrivent alors :

$$C_{ijmn} = \mu\left(\delta_{im}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jm}\right) + \lambda\delta_{ij}\delta_{mn}. \tag{D.9}$$

Ainsi, $\widetilde{X_i}(\underline{\xi})$ est donné par :

$$\widetilde{X_i}(\underline{\xi}) = -\mathrm{i}2\mu\xi_j\left(\widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}}(\underline{\underline{\xi}}) + \frac{\nu}{1-2\nu}\delta_{ij}\widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}}_{kk}}(\underline{\xi})\right). \tag{D.10}$$

Les expressions de $\widetilde{D}(\underline{\xi})$ et $\widetilde{N_{ij}}(\underline{\xi})$ deviennent en élasticité isotrope :

$$\widetilde{D}(\underline{\xi}) = \mu^2 \left(\lambda + 2\mu\right) \xi^6, \tag{D.11}$$

et,

$$\widetilde{N_{ij}}(\underline{\xi}) = \mu\xi^2 \left(\left(\lambda + 2\mu\right) \delta_{ij}\xi^2 - \left(\lambda + \mu\right) \xi_i\xi_j \right). \tag{D.12}$$

Ainsi, $\widetilde{G_{ij}}(\underline{\xi})$ devient :

$$\widetilde{G_{ij}}(\underline{\xi}) = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\delta_{ij}}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i\xi_j}{\xi^4} \right). \tag{D.13}$$

Dans le cas d'une plasticité incompressible ($\epsilon^{\mathrm{p}}_{kk} = 0$), ce qui est le cas pour une déformation plastique par glissements suivant des plans du réseau cristallographique, $\widetilde{X_i}(\underline{\xi})$ devient :

$$\widetilde{X_i}(\underline{\xi}) = -\mathrm{i}2\mu\xi_j \left(\widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}}(\underline{\xi}) \right). \tag{D.14}$$

En utilisant les équations D.9, D.13 et D.14 dans D.8, le vecteur déplacement dans l'espace réel, solution de l'équation D.1 dans le cas d'une élasticité isotrope et d'une plasticité incompressible s'écrit :

$$u_k(\underline{x}) = \frac{-\mathrm{i}}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{ik}\xi_j}{\xi^2} - \frac{1}{2\left(1-\nu\right)} \frac{\xi_i\xi_k\xi_j}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon^{p}_{ij}}(\underline{\xi}) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi. \tag{D.15}$$

Ainsi, les distorsions totales sont :

$$\beta_{lk}(\underline{x}) = \frac{1}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{ik}\xi_j\xi_l}{\xi^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}}_{ij}}(\underline{\xi}) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\underline{x}} \, dV_\xi. \tag{D.16}$$

Les contraintes internes (équation 3.17), s'obtiennent à partir de la loi de Hooke :

$$\tau_{kl}(\underline{x}) = 2\mu \left(\epsilon_{kl}(\underline{x}) - \epsilon^{\mathrm{p}}_{kl}(\underline{x}) + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{kl}\epsilon_{qq}(\underline{x}) \right). \tag{D.17}$$

D.3 Energie élastique interne

En appliquant le théoréme de Parseval à l'énergie élastique interne l'équation ϕ_{int} (contenant les contraintes internes $\tau_{ij}(\underline{x})$), on obtient :

$$\Phi_{int} = -\frac{1}{2}\int_V \tau_{kl}(\underline{x})\epsilon^{\mathrm{p}}_{kl}(\underline{x})\,dV = -\frac{1}{8\pi^3}\frac{1}{2}\int_{V_\xi} \widetilde{\tau_{kl}}(\underline{\xi})\widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}\star}_{kl}}(\xi)\,dV_\xi, \tag{D.18}$$

où $\widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}\star}_{kl}}(\underline{\xi})$ sont les complexes conjugués de $\widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}}_{kl}}(\underline{\xi})$. $\widetilde{\tau_{kl}}(\underline{\xi})$ sont les transformées de Fourier de $\tau_{kl}(\underline{x})$:

$$\widetilde{\tau_{kl}}(\underline{\xi}) = 2\mu\left(\widetilde{\epsilon_{kl}}(\underline{\xi}) - \widetilde{\epsilon^{\mathrm{p}}_{kl}}(\underline{\xi}) + \frac{\nu}{1-2\nu}\delta_{kl}\widetilde{\epsilon_{qq}}(\underline{\xi})\right), \tag{D.19}$$

avec $\widetilde{\epsilon_{kl}}(\underline{\xi}) = \frac{1}{2}\mathrm{i}\left(\xi_l\widetilde{G_{ik}}(\underline{\xi}) + \xi_k\widetilde{G_{il}}(\underline{\xi})\right)\widetilde{X_i}(\underline{\xi})$.

Annexe E

Champs élastiques de boucles de dislocation de glissement circulaire

E.1 Distorsion et contrainte associé à une boucle de glissement circulaire

Les composantes du champ de déplacement écrit en coordonnées cylindriques (cf. Chapitre 3) s'écrivent :

$$\begin{aligned} u_\rho &= \frac{b\cos\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{4(1-\nu)}\left(2(1-\nu)J(1,0;0) - \frac{|x_3|}{a}J(1,0;1) + \frac{|x_3|}{\rho}J(1,1;0)\right) \\ u_\theta &= \frac{b\sin\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{4(1-\nu)}\left(-2(1-\nu)J(1,0;0) + \frac{|x_3|}{\rho}J(1,1;0)\right) \\ u_3 &= \frac{b\cos\theta}{4(1-\nu)}\left((1-2\nu)J(1,1;0) + \frac{|x_3|}{a}J(1,1;1)\right). \end{aligned} \tag{E.1}$$

La distorsion totale $\beta_{ji}(\underline{x})$ dérive du champs de déplacement $u_i(\underline{x})$ (relation de compatibilité) et est composé d'une partie élastique $\beta^e_{ji}(\underline{x})$ et d'une partie plastique $\beta^p_{ji}(\underline{x})$. Les composantes des champs de distorsion associé à la présence d'une boucle

de dislocation de rayon a peuvent s'écrire en coordonnées cylindriques :

$$\left(\underline{\underline{\beta}}\right)_{cyl} = \begin{bmatrix} u_{\rho,\rho} & \frac{1}{\rho}\left(u_{\rho,\theta} - u_\theta\right) & u_{\rho,z} \\ u_{\theta,\rho} & \frac{1}{\rho}\left(u_{\theta,\theta} - u_\rho\right) & u_{\rho,z} \\ u_{z,\rho} & \frac{1}{\rho}\left(u_{z,\theta}\right) & u_{z,z} \end{bmatrix} \tag{E.2}$$

En utilisant les formules de récurrence suivante (résultantes des formules de récurrence de Bessel [AS70]) :

$$\frac{\partial}{\partial\rho}J(m,n;p) = \frac{1}{a}J(m,n-1;p+1) - \frac{n}{\rho}J(m,n;p)$$
$$\frac{\partial}{\partial x_3}J(m,n;p) = -\frac{1}{a}\mathrm{sgn}(x_3)J(m,n;p+1),$$

La distorsion pour une boucle de dislocation de rayon a peut facilement être dérivée :

$$\begin{aligned}
\beta_{\rho\rho} &= u_{\rho,\rho} = \frac{bcos(\theta)sgn(z)}{4(1-\nu)}\left(\frac{-2}{a}(1-\nu)J(1,1;1) + \frac{|z|}{a^2}J(1,1;2) - \frac{|z|}{\rho a}J(1,2;1)\right) \\
\beta_{\rho\theta} &= \frac{1}{\rho}\left(u_{\rho,\theta} - u_\theta\right) = \frac{bsin(\theta)sgn(z)}{4(1-\nu)}\left(\frac{|z|}{\rho a}J(1,0;1) - \frac{2\,|z|}{\rho^2}J(1,1;0)\right) \\
\beta_{\rho z} &= u_{\rho,z} = \frac{bcos(\theta)}{4(1-\nu)}\left(\frac{1}{a}(2\nu-3)J(1,0;1) + \frac{|z|}{a^2}J(1,0;2) - \frac{|z|}{\rho a}J(1,1;1) + \frac{1}{\rho}J(1,1;0)\right) \\
\beta_{\theta\rho} &= u_{\theta,\rho} = \frac{bsin(\theta)sgn(z)}{4(1-\nu)}\left(\frac{2}{a}(1-\nu)J(1,1;1) - \frac{z}{\rho a}J(1,2;1)\right) \\
\beta_{\theta\theta} &= \frac{1}{\rho}\left(u_{\theta,\theta} - u_\rho\right) = \frac{bcos(\theta)sgn(z)}{4(1-\nu)}\left(\frac{|z|}{\rho a}J(1,2;1)\right) \\
\beta_{\theta z} &= u_{\theta,z} = \frac{bsin(\theta)}{4(1-\nu)}\left(\frac{2}{a}(1-\nu)J(1,0;1) - \frac{|z|}{\rho a}J(1,1;1) + \frac{1}{\rho}J(1,1;0)\right) \\
\beta_{z\rho} &= u_{z,\rho} = \frac{bsin(\theta)}{4(1-\nu)}\left(\frac{1}{a}(1-2\nu)J(1,0;1) - (1-2\nu)\frac{1}{\rho}J(1,1;0) + \frac{|z|}{a^2}J(1,0;2) + \frac{|z|}{\rho a}J(1,1;1)\right) \\
\beta_{z\theta} &= \frac{1}{\rho}(u_{z,\theta}) = -\frac{bsin(\theta)}{4(1-\nu)}\left(\frac{1}{\rho}(1-2\nu)J(1,1;0) + \frac{|z|}{\rho a}J(1,1;1)\right) \\
\beta_{zz} &= u_{z,z} = \frac{bcos(\theta)}{4(1-\nu)}\left(\frac{2\nu}{a}(1-2\nu)sgn(z)J(1,1;1) + \frac{z}{a^2}J(1,1;2)\right)
\end{aligned} \tag{E.3}$$

Les champs de distorsions peuvent s'exprimer en coordonnées cartésiennes en utilisant les relations suivantes :

$$\begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} cos\theta & -sin\theta & 0 \\ sin\theta & cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{\rho\rho} & \beta_{\rho\theta} & \beta_{\rho z} \\ \beta_{\theta\rho} & \beta_{\theta\theta} & \beta_{\theta z} \\ \beta_{z\rho} & \beta_{z\theta} & \beta_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} cos\theta & -sin\theta & 0 \\ sin\theta & cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \tag{E.4}$$

Les champs de distorsion ont été numériquement calculés en utilisant les intégrales elliptiques complètes du premier ordre $\mathbf{K}(k)$ et du second ordre $\mathbf{E}(k)$[GR65, AS70] :

$$\mathbf{E}(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(1 - k^2 \sin^2 \psi\right)^{1/2} d\psi$$
$$\mathbf{K}(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(1 - k^2 \sin^2 \psi\right)^{-1/2} d\psi.$$

Suivant [ENS55] et [SW79], les relations entre les integrales de Lipschitz-Hankel et $\mathbf{K}(k)$ et $\mathbf{E}(k)$ sont :

$$J(1,1;0) = \frac{2}{\pi k \overline{\rho}^{1/2}} \left\{ \left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \mathbf{K}(k) - \mathbf{E}(k) \right\}$$
$$J(1,1;1) = \frac{k|x_3|/a}{2\pi \overline{\rho}^{3/2}} \left(\frac{1 - k^2/2}{k'^2} \mathbf{E}(k) - \mathbf{K}(k) \right)$$
$$J(1,0;1) = \frac{k}{2\pi \overline{\rho}^{1/2}} \left\{ \frac{k^2 \left(1 - \overline{\rho}^2 - (x_3/a)^2\right)}{4k'^2 \overline{\rho}} \mathbf{E}(k) + \mathbf{K}(k) \right\}$$
$$J(1,0;2) = \frac{k^3|x_3|/a}{8\pi k'^2 \overline{\rho}^{3/2}} \times$$
$$\left\{ \left(\frac{k^4 \left(1 - (\overline{\rho}^2 + (x_3/a)^2)^2\right)}{4k'^2 \overline{\rho}^2} + 3 \right) \mathbf{E}(k) - \frac{k^2 \left(1 - \overline{\rho}^2 - (x_3/a)^2\right)}{4\overline{\rho}} \mathbf{K}(k) \right\}$$
$$J(1,1;2) = \frac{k}{2\pi \overline{\rho}^{3/2}} \times$$
$$\left\{ \frac{k^2}{4k'^2 \overline{\rho}} \left(\frac{k^4 (x_3/a)^2}{k'^2} - (1 + \overline{\rho}^2) \right) \mathbf{E}(k) + \left(1 - \frac{k^2 (x_3/a)^2 (2 - k^2)}{8k'^2 \overline{\rho}} \right) \mathbf{K}(k) \right\}$$

avec :

$$k^2 = \frac{4\rho a}{(a+\rho)^2 + x_3^2} \text{ and } k'^2 = 1 - k^2.$$

Pour trouver les valeurs de $J(1,2;1)$ et de $J(1,2;2)$, les relations de récurrence sont appliqué [ENS55] :

$$J(1,2;1) = \frac{2}{\overline{\rho}} J(1,1;0) - J(1,0;1)$$
$$J(1,2;2) = \frac{2}{\overline{\rho}} J(1,1;1) - J(1,0;2).$$

Le champ des contraintes internes associé à une boucle de dislocation de glissement circulaire de rayon a peut être calculé en utilisant la loi de Hooke en élasticité

linéaire (ici en coordonnés cylindriques) :

$$
\begin{aligned}
\tau_{\rho\rho} &= \frac{\mu b \cos\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{2(1-\nu)} \left(-\frac{2}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} J(1,1;2) - \frac{|x_3|}{\rho a} J(1,2;1) \right) \\
\tau_{\rho 3} &= \frac{\mu b \cos\theta}{2(1-\nu)} \left(-\frac{1}{a} J(1,0;1) + \frac{|x_3|}{a^2} J(1,0;2) - \frac{|x_3|}{\rho a} J(1,1;1) + \frac{\nu}{\rho} J(1,1;0) \right) \\
\tau_{\rho\theta} &= \frac{\mu b \sin\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{2(1-\nu)} \left(-\frac{|x_3|}{\rho a} J(1,2;1) + \frac{1-\nu}{a} J(1,1;1) \right) \\
\tau_{\theta\theta} &= \frac{\mu b \cos\theta \mathrm{sgn}(x_3)}{2(1-\nu)} \left(\frac{|x_3|}{\rho a} J(1,2;1) - \frac{2\nu}{a} J(1,1;1) \right) \\
\tau_{\theta 3} &= \frac{\mu b \sin\theta}{2(1-\nu)} \left(\frac{1-\nu}{a} J(1,0;1) + \frac{\nu}{\rho} J(1,1;0) - \frac{|x_3|}{\rho a} J(1,1;1) \right) \\
\tau_{33} &= -\frac{\mu b \cos\theta}{2(1-\nu)} \frac{x_3}{a^2} J(1,1;2).
\end{aligned}
\tag{E.5}
$$

Ensuite, le champ des contraintes internes peut facilement être exprimé en coordonné cartésienne :

$$
\begin{aligned}
\tau_{11}(\mathbf{x}) &= \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \cos\theta \mathrm{sgn}(x_3) \times \\
&\left\{ -\frac{2}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\cos^2\theta J(1,1;2) + \frac{a}{\rho}(3 - 4\cos^2\theta) J(1,2;1) \right) \right\} \\
\tau_{13}(\mathbf{x}) &= \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \times \\
&\left\{ \frac{\nu - 1 - \nu * \cos^2\theta}{a} J(1,0;1) + \frac{\nu}{\rho} \cos 2\theta J(1,1;0) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\cos^2\theta J(1,0;2) - \frac{a}{\rho} \cos 2\theta J(1,1;1) \right) \right\} \\
\tau_{12}(\mathbf{x}) &= \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \sin\theta \mathrm{sgn}(x_3) \times \\
&\left\{ -\frac{1-\nu}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\cos^2\theta J(1,1;2) - \frac{a}{\rho}(3 - 4\sin^2\theta) J(1,2;1) \right) \right\} \\
\tau_{22}(\mathbf{x}) &= \frac{\mu b}{2(1-\nu)} \cos\theta \mathrm{sgn}(x_3) \times \\
&\left\{ -\frac{2\nu}{a} J(1,1;1) + \frac{|x_3|}{a^2} \left(\sin^2\theta J(1,1;2) - \frac{a}{\rho}(3 - 4\cos^2\theta) J(1,2;1) \right) \right\} \\
\tau_{23}(\mathbf{x}) &= \frac{\mu b}{4(1-\nu)} \sin 2\theta \left\{ \frac{\nu}{a} J(1,2;1) - \frac{|x_3|}{a^2} J(1,2;2) \right\} \\
\tau_{33}(\mathbf{x}) &= -\frac{\mu b}{2(1-\nu)} \cos\theta \frac{x_3}{a^2} J(1,1;2).
\end{aligned}
\tag{E.6}
$$

E.1.1 Energie élastique interne

L'énergie d'interaction entre 2 boucle de dislocation séparées d'une distance d et de rayons $a^{(n)}$ et $a^{(m)}$ $\Phi_{inter}^{(nm)}$ s'écrit (cf. paragraphe 3.3.1.) :

$$\begin{aligned}\Phi_{inter}^{(nm)} = \frac{\mu b^2 a^{(n)} a^{(m)}}{2\pi} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu} \frac{\xi_1^2 \xi_3^2}{\xi^4} \right) \cos\left(d\xi_3\right) \\ \frac{J_1\left(a^{(n)} q\right) J_1\left(a^{(m)} q\right)}{q^2} \, dV_\xi.\end{aligned} \tag{E.7}$$

L'intégration mathématique est réalisée dans le système de coordonnée cylindrique de l'espace de Fourier :

$$\begin{aligned}\Phi_{inter}^{(nm)} = \frac{\mu b^2 a^{(n)} a^{(m)}}{2\pi} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \left(\frac{\sin^2\phi}{\xi_3^2 + q^2} + \frac{2}{1-\nu} \frac{\xi_3^2 \cos^2\phi}{\left(\xi_3^2 + q^2\right)^2} \right) \\ \cos\left(d\xi_3\right) J_1\left(a^{(n)} q\right) J_1\left(a^{(m)} q\right) q \, d\phi \, d\xi_3 \, dq.\end{aligned} \tag{E.8}$$

On intègre tout d'abords par rapport à ϕ en utilisant :

$$\int_0^{2\pi} \cos^2\phi \, d\phi = \int_0^{2\pi} \sin^2\phi \, d\phi = \pi,$$

Et ensuite par rapport à ξ_3 en utilisant :

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos\left(d\xi_3\right)}{\xi_3^2 + q^2} \, d\xi_3 = \pi \frac{e^{-dq}}{q}, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi_3^2 \cos\left(d\xi_3\right)}{\left(\xi_3^2 + q^2\right)^2} \, d\xi_3 = \frac{\pi}{2} \left(\frac{e^{-dq}}{q} - d e^{-dq} \right),\end{aligned}$$

L'énergie d'interaction $\Phi_{inter}^{(nm)}$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\Phi_{inter}^{(nm)} = \mu b^2 a^{(n)} a^{(m)} \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{\pi}{2} \int_0^{+\infty} J_1\left(a^{(n)} q\right) J_1\left(a^{(m)} q\right) e^{-dq} \, dq \\ - \frac{\mu b^2 a^{(n)} a^{(m)}}{1-\nu} \frac{\pi}{2} d \int_0^{+\infty} J_1\left(a^{(n)} q\right) J_1\left(a^{(m)} q\right) e^{-dq} q \, dq.\end{aligned} \tag{E.9}$$

En suivant [ENS55], les dernières intégrales peuvent s'exprimer à l'aide des intégrales elliptique complète de premier ordre $\mathbf{K}(k)$ et de second ordre $\mathbf{E}(k)$:

$$\begin{aligned}\int_0^{+\infty} J_1\left(a^{(n)} q\right) J_1\left(a^{(m)} q\right) e^{-dq} \, dq = \frac{2}{\pi k \sqrt{a^{(n)} a^{(m)}}} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \mathbf{K}(k) - \mathbf{E}(k) \right), \\ \int_0^{+\infty} J_1\left(a^{(n)} q\right) J_1\left(a^{(m)} q\right) e^{-dq} q \, dq = \frac{kd}{2\pi \left(a^{(n)} a^{(m)}\right)^{3/2}} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \left(1 - k^2\right)^{-1} \mathbf{E}(k) - \mathbf{K}(k) \right),\end{aligned}$$

où :

$$k^2 = \frac{4a^{(n)}a^{(m)}}{\left(a^{(n)} + a^{(m)}\right)^2 + d^2}.$$

L'expression finale de l'énergie d'interaction $\Phi_{inter}^{(nm)}$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\Phi_{inter}^{(nm)} = \mu b^2 \sqrt{a^{(n)}a^{(m)}} \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{1}{k} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \mathbf{K}(k) - \mathbf{E}(k) \right) \\ - \frac{\mu b^2}{4} \frac{1}{\sqrt{a^{(n)}a^{(m)}}} \frac{d^2 k}{1-\nu} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \left(1-k^2\right)^{-1} \mathbf{E}(k) - \mathbf{K}(k) \right).\end{aligned} \tag{E.10}$$

L'énergie propre d'une dislocation individuelle de rayon a est calculée comme étant égale à la moitié de l'énergie d'interaction entre deux boucle de dislocation identique séparé par une distance $2r_c$. Selon [DeW60], une bonne approximation de l'énergie propre du coeur de la dislocation est trouvé pour une distance de séparation $r_c = 0.5b$. A partir de l'équation E.1.1, l'énergie propre d'une boucle de dislocation Φ_{self} est approximée par :

$$\Phi_{self} = \frac{\mu b^2}{2} a \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{1}{k} \left(\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) \mathbf{K}(k) - \mathbf{E}(k) \right), \tag{E.11}$$

où :

$$k^2 = \frac{a^2}{a^2 + r_c^2}. \tag{E.12}$$

Annexe F

Evolution des textures cristallographiques et désorientations

F.1 Loi d'évolution des angles d'Euler

F.1.1 Définition des angles d'Euler

L'orientation d'un réseau peut être définie dans l'espace réel grâce à un triplet d'angles d'Euler. Ces trois angles sont notés $\varphi 1, \phi, \varphi 2$ (notation de Bunge). Pour définir la position du repère du cristal par rapport au repère de l'échantillon, il est nécessaire d'effectuer trois rotations à partir du repère décrit par les directions normales (DN), de laminage (DL) et transverse (DT) :

- $g(\varphi 1)$: une rotation d'angle autour de la normale DN qui crée le repère 1.

- $g(\phi)$: une rotation d'angle ϕ autour de la nouvelle direction de laminage du repère 1 DL_1 qui crée le repère 2

- $g(\varphi 2)$: une rotation d'angle $\varphi 2$ autour de la direction normale du repère 2 DL_2 Ces trois opérations sont représentées par figure F.1. Le repère du cristal est représenté

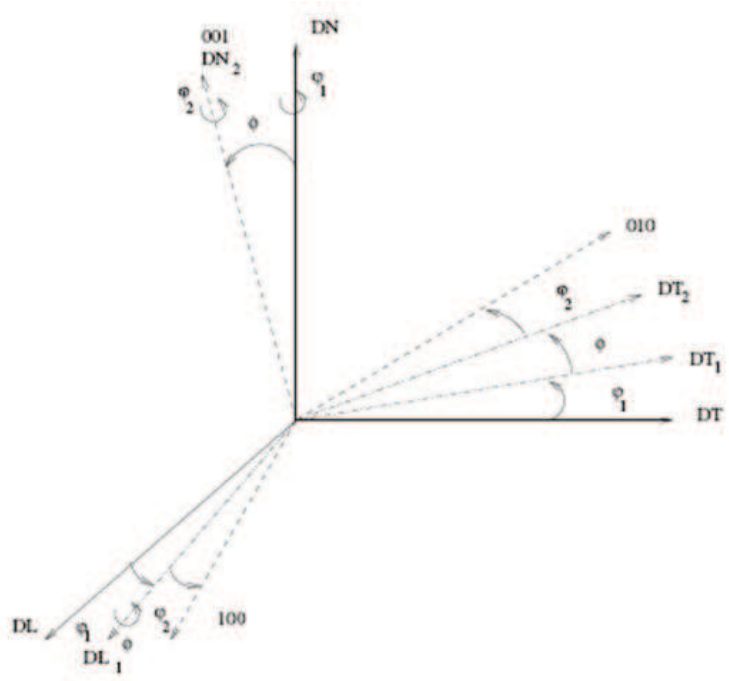

FIGURE F.1 – Définition des angles d'Euler [Lor05]

grâce aux directions [001], [010] et [100]. La relation matricielle permettant de passer du repère microscopique au repère macroscopique est :

$$\{C\} = g(\varphi 1)g(\phi)g(\varphi 2)\{S\} = g(\varphi 1, \phi, \varphi 2)\{S\} \tag{F.1}$$

$\{C\}$ désigne le système de coordonnées du cristal $\{S\}$ désigne le système de coordonnées de l'échantillon Dans laquelle $g(\varphi 1, \phi, \varphi 2)$ a pour expression :

$$g(\varphi 1, \phi, \varphi 2) = \begin{bmatrix} \cos\varphi 1 \cos\varphi 2 - \sin\varphi 1 \sin\varphi 2 \cos\phi & \cos\varphi 2 \sin\varphi 1 + \sin\varphi 2 \cos\varphi 1 \cos\phi & \sin\varphi 2 \sin\phi \\ -\cos\varphi 1 \sin\varphi 2 - \sin\varphi 1 \cos\varphi 2 \cos\phi & -\sin\varphi 1 \sin\varphi 2 + \cos\varphi 1 \cos\varphi 2 \cos\phi & \cos\varphi 2 \sin\phi \\ \sin\varphi 1 \sin\phi & -\cos\varphi 1 \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

Inversement pour passer du repère macroscopique au repère microscopique, on

appliquera la relation :

$$\{S\} = g(\varphi 1, \phi, \varphi 2)^{-1} \{C\} \tag{F.2}$$

F.1.2 Evolution des angles d'Euler aux cours de la déformation

La rotation du cristal est supposée être uniquement due à la partie élastique du taux de rotation imposé ω^e [INN83, NBT01]. La loi d'évolution d'un vecteur s peut ainsi s'écrire [INN83] :

$$\{dS\} = [\omega^e] \{S\} \tag{F.2}$$

Prenons un vecteur $\{S\}$ tel que : $\{S\} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, en coordonnées sphériques, on a

$\{S\} = \begin{bmatrix} \sin\varphi 1 \sin\phi \\ -\cos\varphi 1 \sin\phi \\ \cos\phi \end{bmatrix}$,

et donc $\{dS\} = \begin{bmatrix} d\varphi 1 \cos\varphi 1 \sin\phi + d\phi \sin\varphi 1 \cos\phi \\ d\varphi 1 \sin\varphi 1 \sin\phi - d\phi \cos\varphi 1 \cos\phi \\ -d\phi \sin\phi \end{bmatrix}$

$$\{dS\} = [\omega^e] \{S\} \text{ avec } \omega^e = \begin{bmatrix} 0 & \omega^e_{12} & \omega^e_{13} \\ -\omega^e_{12} & 0 & \omega^e_{23} \\ -\omega^e_{13} & -\omega^e_{23} & 0 \end{bmatrix} \tag{F.2}$$

Par identification, on a donc :

$$\begin{cases} \Delta\varphi_1 = -\omega_{12}^e + \frac{cos(\Phi)}{sin(\Phi)}(\omega_{13}^e cos(\varphi_1) + \omega_{23}^e sin(\varphi_1)) \\ \Delta\Phi = -\omega_{23}^e cos(\varphi_1) + \omega_{13}^e sin(\varphi_1) \\ \Delta\varphi_2 = -\frac{cos(\varphi_1)}{sin(\Phi)}\omega_{13}^e - \frac{sin(\varphi_1)}{sin(\Phi)}\omega_{23}^e \end{cases} \tag{F.3}$$

F.2 Description d'une désorientation

F.2.1 Matrice de désorientation

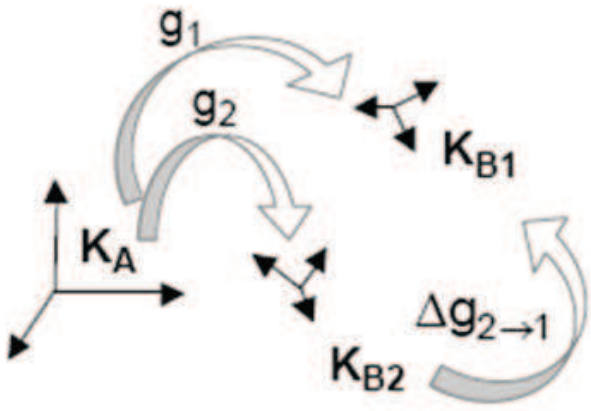

FIGURE F.2 – Repère global K_A, repère K_{B1} et repère K_{B2}

Si l'on considère deux cristaux $B1$ et $B2$, dont les matrices d'orientation par rapport au repère globale sont connues et notées respectivement : $M(g_1)$ et $M(g_2)$, la matrice de désorientation $M(\Delta g_{2\rightarrow 1})$ est obtenue ainsi :

$$\vec{h_{K_{B2}}} = M(\Delta g_{2\rightarrow 1})\vec{h_{K_{B1}}} \tag{F.4}$$

$$\begin{cases} \vec{h_{K_A}} = M(g_1)\vec{h_{K_{B1}}} \\ \vec{h_{K_A}} = M(g_2)\vec{h_{K_{B2}}} \end{cases} \Rightarrow \vec{h_{K_{B2}}} = M(g_2)^{-1}M(g_1)\vec{h_{K_{B1}}} \tag{F.5}$$

et donc :

$$M(\Delta g_{2\to 1}) = M(g_2)^{-1}M(g_1) \tag{F.6}$$

Etant donné les symétries existant dans les matériaux à structure cubique, il existe pour chaque matrice de rotation plusieurs matrices de rotation symétriquement équivalentes :

$$M_i^{eq}(g) = L_i M(g) \tag{F.7}$$

Pour les matrices de désorientation, la relation est la suivante [Aca07] :

$$\begin{aligned} M_{ij}^{eq}(\Delta g_{2\to 1}) &= L_i M(g_1)\left(L_j M(g_2)\right)^{-1} \\ M_{ij}^{eq}(\Delta g_{2\to 1}) &= L_i M(g_1)\left(L_j^{-1} M(g_2)^{-1}\right) \\ M_{ij}^{eq}(\Delta g_{2\to 1}) &= L_i M(\Delta g_{2\to 1}) L_k \end{aligned} \tag{F.8}$$

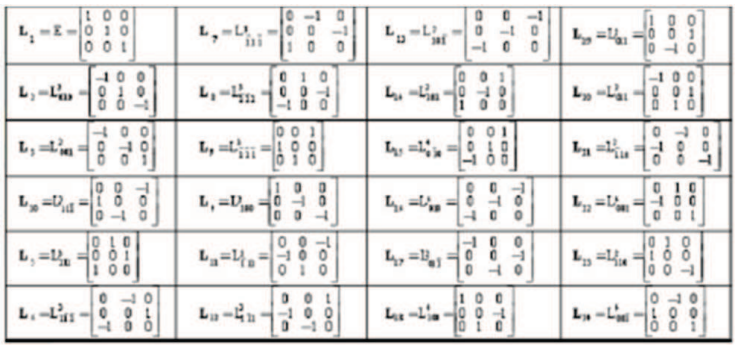

FIGURE F.3 – Matrice de symétrie du cristal [Aca07]

F.2.2 Couple axe/angle

Il existe toujours une rotation (d'un angle θ autour d'un axe r) qui permet d'amener deux repères en coïncidence. Compte tenu de la symétrie cristalline, il

s'agit en réalité d'un ensemble de rotations $\{r, \theta\}$ équivalentes. Parmi celle-ci, on choisit conventionnellement celles correspondant au plus petit angle de rotation. r est une direction commune aux deux cristaux. $\{r, \theta\}$ sont déterminés à partir de la matrice d'orientation $M(g)$.

$$\theta = min(\theta_i) = min\left(arccos\left(\frac{1}{2}\left(tr\left(M(g)L_i\right) - 1\right)\right)\right) \tag{F.9}$$

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} r_x/N \\ r_y/N \\ r_z/N \end{pmatrix} \text{ avec } \begin{cases} r_x = M_{23} - M_{32} \\ r_y = M_{31} - M_{13} \\ r_z = M_{12} - M_{21} \\ N = \sqrt{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2} \end{cases} \tag{F.10}$$

Cette notation est celle utilisé pour le calcul de désorientation dans les logiciels EBSD, par exemple. L'angle de désorientation entre deux cristaux $B1$ et $B2$, dont les matrices d'orientation par rapport au repère globale sont connues et notées respectivement : $M(g_1)$ et $M(g_2)$, sera calculé ainsi :

$$\theta = min(\theta_{ik}) = min\left(arccos\left(\frac{1}{2}\left(tr\left(L_i M(\Delta g_{2\to 1}) L_k\right) - 1\right)\right)\right) \tag{F.11}$$

Annexe G

Plasticité discrète dans la matrice

G.1 Champ de déplacement associé à une fonction de Dirac

Nous nous proposons ici de résoudre le calcul du champ de déplacement associé à la distorsion plastique β^p_{ji} dans un milieu infini élastique. β^p_{ji} est exprimé dans un repère local (x_1, x_2, x_3) associé au système de glissement actif (la normale au plan de glissement $\underline{n} = (0, 0, 1)$) de tel manière que la seul composante non-nulle soit $\beta^p_{31} = b\delta(x_3)$.

La résolution de l'équation de Navier (voir chapitre III) se fait par la méthode des transformés de Fourier et nous permet d'obtenir l'expression du champ de déplacement en tout point :

$$u_k(\underline{x}) = \frac{-i}{4\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\delta_{1k}\xi_3 + \delta_{3k}\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1\xi_3\xi_k}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon^{\mathrm{P}}_{13}}(\xi) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi \qquad \text{(G.1)}$$

avec $\epsilon_{13}^p = \frac{1}{2}\beta_{31}^p$

$$\begin{cases} u_1 = \frac{-i}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\xi_3}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1^2 \xi_3}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon_{13}^p} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi \\ u_2 = \frac{i}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1 \xi_2 \xi_3}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon_{13}^p} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi \\ u_3 = \frac{-i}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1 \xi_3^2}{\xi^4} \right) \widetilde{\epsilon_{13}^p} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV_\xi \end{cases} \tag{G.2}$$

$$\beta_{31}^p = b\delta(x_3) \tag{G.3}$$

$$\widetilde{\beta_{31}^p}(\underline{\xi}) = \int\limits_V \beta_{31}^p(\underline{x}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi\cdot\underline{x}} \, dV = \int\limits_V b\delta(x_3) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\underline{\xi}\cdot\underline{x}} \, dV.$$

$$\widetilde{\beta_{31}^p}(\underline{\xi}) = b \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \delta(x_3)(\underline{x}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\xi_1 x_1 + \xi_2 x_2 + \xi_3 x_3)} \, dV.$$

$$\widetilde{\beta_{31}^p}(\underline{\xi}) = b \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi_1 x_1} \, dx_1 \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi_2 x_2} \, dx_2 \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \delta(x_3) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi_3 x_3} \, dx_3.$$

$$\widetilde{\beta_{31}^p}(\underline{\xi}) = b \cdot \delta(\xi_1)\delta(\xi_2)$$

$$\widetilde{\epsilon_{13}^p}(\underline{\xi}) = \frac{1}{2} b\delta(\xi_1)\delta(\xi_2)$$

(G.4)

Les composantes du champ de déplacement s'écrivent alors :

$$\begin{cases} u_1 = \frac{-i}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\xi_3}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1^2 \xi_3}{\xi^4} \right) \frac{1}{2} b \delta(\xi_1) \delta(\xi_2) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\xi \underline{x}} \, dV_\xi \\ u_2 = \frac{i}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1 \xi_2 \xi_3}{\xi^4} \right) \frac{1}{2} b \delta(\xi_1) \delta(\xi_2) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\xi \underline{x}} \, dV_\xi \\ u_3 = \frac{-i}{4\pi^3} \int\limits_{V_\xi} \left(\frac{\xi_1}{\xi^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{\xi_1 \xi_3^2}{\xi^4} \right) \frac{1}{2} b \cdot \delta(\xi_1) \cdot \delta(\xi_2) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\xi \cdot \underline{x}} \, dV_\xi \end{cases} \tag{G.5}$$

$$\begin{cases} u_1 = \frac{-ib}{8\pi^3} \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \frac{\xi_3}{\left(\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2\right)} \delta(\xi_1) \delta(\xi_2) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\xi \cdot \underline{x}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\xi_1 x_1 + \xi_2 x_2 + \xi_3 x_3)} \, d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{cases} \tag{G.6}$$

$$\begin{cases} u_1 = \frac{-ib}{8\pi^3} \left(4\pi^2\right) \int\limits_{-\infty}^{-\infty} \frac{\xi_3}{\left(\xi_3^2\right)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\xi_3 x_3)} \, d\xi_3 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{cases} \tag{G.7}$$

$$\begin{cases} u_1 = \frac{-ib}{2\pi} i\pi sign(x_3) \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{cases} \tag{G.8}$$

$$\begin{cases} u_1 = \frac{b}{2} sign(x_3) \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{cases} \tag{G.9}$$

A l'aide de la relation de compatibilité, la distorsion totale $\beta_{ji}(\underline{x})$ s'écrit :

$$\beta_{ji}(\underline{x}) = u_{i,j}(\underline{x}) = 0 \tag{G.10}$$

On vient de démontrer que dans le cas d'un milieu infini, la distorsion plastique $\beta^p_{31} = b\delta(x_3)$ est une distorsion compatible, c'est-à-dire qu'elle n'engendre pas d'incompatibilité et donc ne nécessite pas de distorsion élastique supplémentaire pour maintenir la compatibilité. Il en va donc de même pour la distorsion plastique suivante $\beta^{M\infty p}_{31}(\underline{x}) = b_2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x_3^M - nh_2)$

G.2 Calcul de l'énergie élastique dans le cas de deux distributions de boucles

Nous traitons ici le cas particulier de deux distributions périodiques de boucle discrète de dislocations coplanaires et coaxiales de signe inverse comme schématisé en figure 5.8. La première distribution de boucles, de signe positive, se trouve le grain. Elle est notée + et est composée de $2N_1 + 1$ dislocations. La seconde distribution de boucles, de signe négatif, se trouve dans la matrice. Elle est notée − et est composée de $2N_2 + 1$ dislocations. Ces deux distributions sont contraintes par un joint de grains sphérique. L'énergie élastique par unité de volume ϕ_{int} associée à des incompatibilités plastiques s'écrit :

$$\Phi_{int} = -\frac{1}{2}\int_V \tau_{kl}(\underline{x})\epsilon^{\mathrm{p}}_{kl}(\underline{x})\, dV \tag{G.11}$$

L'utilisation de l'identité de Parseval (cf. Annexe D) permet de trouver l'énergie élastique interne dans le cas où seule la composante β^p_{31} de la distorsion plastique est non-nulle :

$$\Phi^{\mathrm{d}}_{int} = \frac{\mu}{8\pi^3}\int_{V_\xi}\left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu}\frac{\xi_1^2\xi_3^2}{\xi^4}\right)|\widetilde{\epsilon^p_{13}}(\underline{\xi})|^2\, dV_\xi, \tag{G.12}$$

L'énergie élastique de ces deux distributions discrètes de dislocations ϕ_{int} est obtenue en sommant les énergies propres et d'interaction entre chaque dislocation :

$$\Phi^{\mathrm{d}}_{int} = \sum_{n=-N_1}^{+N_1} \Phi^{+(n)}_{self} + \sum_{n=-N_1}^{N_1-1} \sum_{m=n+1}^{+N_1} \Phi^{++(nm)}_{inter} + \sum_{n=-N_2}^{+N_2} \Phi^{-(n)}_{self} + \sum_{n=-N_2}^{N_2-1} \sum_{m=n+1}^{+N_2} \Phi^{--(nm)}_{inter} + \sum_{n=-N_1}^{N_1} \sum_{m=-N_2}^{+N_2} \Phi^{+-(nm)}_{inter} \tag{G.13}$$

G.2.1 Energie associée à deux boucles de dislocation coplanaire de même signe

On étudie ici le cas de deux boucles de même signe, parallèles et coaxiales, de vecteur de burger respectif b1 et b2 et séparées d'une distance d. Le repère de calcul est choisi de telle manière à ce que la seule composante non nulle de la distorsion plastique soit :

$$\beta^{\mathrm{p}}_{31}(\underline{x}) = b_1 H\left(1 - \frac{\rho}{R_1}\right)\delta(x_3) + b_2 H\left(1 - \frac{\rho}{R_2}\right)\delta(x_3) \tag{G.14}$$

La transformé de Fourier s'écrit : $\beta^{\mathrm{p}}_{31}(\underline{x}) = b_1\theta_1(\underline{x}) + b_2\theta_2(\underline{x})$où ρ et x_3 sont respectivement la coordonnée radiale et l'altitude en coordonnées cylindriques (ρ, θ, x_3) défini par $(x_1 = \rho\cos\theta, x_2 = \rho\sin\theta, x_3)$. $\theta_1(\underline{x})$ et $\theta_1(\underline{x})$ sont les fonctions définissant respectivement les disques de rayon R_1 et R_2 formé par les boucles, $\delta(x_3)$ est la fonction de Dirac dans la direction (x_3) et H est la fonction d'Heaviside définie par :

$$H\left(1 - \frac{\rho}{a}\right) = \begin{cases} 1 \text{ si } \rho \leq a \\ \\ 0 \text{ si } \rho > a. \end{cases} \tag{G.15}$$

L'énergie élastique s'écrit alors :

$$\Phi^{\mathrm{d}}_{int} = \frac{\mu}{8\pi^3} \int_{V_\xi} \left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu}\frac{\xi_1^2\xi_3^2}{\xi^4}\right) |\widetilde{\epsilon^p_{13}}(\underline{\xi})|^2 \, dV_\xi, \tag{G.16}$$

avec

$$|\widetilde{\epsilon^p_{13}}(\underline{\xi})|^2 = |b_1\pi R_1\frac{J_1(R_1q)}{q} + b_2\pi R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q} - ib_2\pi R_2 sin(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}|^2 \tag{G.17}$$

$$|\widetilde{\epsilon^p_{13}}(\underline{\xi})|^2 = \left(b_1\pi R_1\frac{J_1(R_1q)}{q} + b_2\pi R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}\right)^2 + \left(b_2\pi R_2 sin(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}\right)^2 \tag{G.18}$$

$$\begin{aligned}|\widetilde{\epsilon^p_{13}}(\underline{\xi})|^2 &= \left(b_1\pi R_1\frac{J_1(R_1q)}{q}\right)^2 + \left(b_2\pi R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}\right)^2 \\ &+ 2b_1b_2\pi^2 R_1R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_1q)\,J_1(R_2q)}{q^2}\end{aligned} \tag{G.19}$$

Comme on peut le voir dans l'équation G.19, l'énergie élastique Φ^{d}_{int} contient deux types de contributions. Le premier terme peut être identifié comme la somme de l'énergie propre de chacune des dislocations. Le second terme correspond à la contribution de la somme des énergies d'interaction entre deux boucles mutuelles de la distribution :

$$\Phi_{int} = \Phi^{(+)}_{self} + \Phi^{(+)}_{self} + \Phi^{(+-)}_{inter} \tag{G.20}$$

G.2.2 Energie associée à deux boucles de dislocation coplanaire de signe contraire

On étudie ici le cas de deux boucles de signe contraire, parallèles et coaxiales, de vecteur de burger respectif b1 et b2 et séparées d'une distance d. Le repère de calcul est choisi de telle manière à ce que la seule composante non nulle de la distorsion plastique soit :

$$\beta^{\mathrm{p}}_{31}(\underline{x}) = b_1H\left(1-\frac{\rho}{R_1}\right)\delta(x_3) - b_2H\left(1-\frac{\rho}{R_2}\right)\delta(x_3) \tag{G.21}$$

La transformé de Fourier s'écrit : $\beta_{31}^{\mathrm{p}}(\underline{x}) = b_1\theta_1(\underline{x}) - b_2\theta_2(\underline{x})$

L'énergie élastique s'écrit alors :

$$\Phi_{int}^{\mathrm{d}} = \frac{\mu}{8\pi^3}\int\limits_{V_\xi}\left(\frac{\xi_2^2}{\xi^2} + \frac{2}{1-\nu}\frac{\xi_1^2\xi_3^2}{\xi^4}\right)|\widetilde{\epsilon_{13}^p}(\underline{\xi})|^2\, dV_\xi, \tag{G.22}$$

avec

$$|\widetilde{\epsilon_{13}^p}(\underline{\xi})|^2 = |b_1\pi R_1\frac{J_1(R_1q)}{q} - b_2\pi R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q} + ib_2\pi R_2 sin(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}|^2 \tag{G.23}$$

$$|\widetilde{\epsilon_{13}^p}(\underline{\xi})|^2 = \left(b_1\pi R_1\frac{J_1(R_1q)}{q} - b_2\pi R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}\right)^2 + \left(b_2\pi R_2 sin(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}\right)^2 \tag{G.24}$$

$$\begin{aligned}|\widetilde{\epsilon_{13}^p}(\underline{\xi})|^2 &= \left(b_1\pi R_1\frac{J_1(R_1q)}{q}\right)^2 + \left(b_2\pi R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_2q)}{q}\right)^2 \\ &- 2b_1b_2\pi^2 R_1R_2 cos(d\xi_3)\frac{J_1(R_1q)\,J_1(R_2q)}{q^2}\end{aligned} \tag{G.25}$$

Comme on peut le voir dans l'équation G.25, l'énergie élastique Φ_{int}^{d} contient deux types de contributions. Le premier terme peut être identifié comme la somme de l'énergie propre de chacune des dislocations. Le second terme correspond à la contribution de la somme des énergies d'interaction entre deux boucles mutuelles de la distribution :

$$\Phi_{int} = \Phi_{self}^{(+)} + \Phi_{self}^{(+)} - \Phi_{inter}^{(+-)} \tag{G.26}$$

Liste des tableaux

1.1 Espacements entre bandes de glissement dans des poly-cristaux d'aluminium [BBH85] 23

4.1 Différentes tailles de grain obtenues après traitements thermiques (d'après les mesures EBSD). 134

4.2 Solution et paramètres d'électro-polissage utilisés. 137

Table des figures

1 Sphärisches Korn (Radius R) mit einer diskreten Super-Versetzungsverteilung. Das Korn ist in einer unendlichen Matrix eingebettet [BBR08] xxvi

2 (a) Licht Mikrographie : Nickelvielkristalle nach einer plastischen Verformung von $1,5\%$ (b) EBSD Messung der intra-kristalline Fehlorientierungen im Vergleich zu einem Punkt in der Mitte nach einer plastischen Verformung von $1,5\%$ xxviii

3 Geometrie der Zugproben (mm) xxix

4 (a) AFM-Abbildung : Mikrostruktur nach einer makroskopischen Verformung von $1,5\%$ (b) REM-Abbildung des Gleitbandes "g" (Abb. 5) [PBVB10] xxx

5 AFM-Profil der Gleitbänder xxxi

6 (a) AFM-Abbildung : Mikrostruktur nach einer makroskopischen Verformung von $1,5\%$; (b) OIM-Abbildung("Image quality" Kontrast) : Die Fehlorientierungen wurden im Vergleich zu einem Punkt in der Mitte berechnet. [PBVB10] xxxii

7 Die Veränderungen der Fehlorientierungen im Vergleich zu der Gitterorientierung des Zentrums des Kornes, gemessen an einer Linie parallel zu den Gleitlinien (Abb. 6(b)). [PBVB10] xxxiv

8 Für den Fall aus Abbildung 6 berechnte Veränderungen der Fehlorientierung im Vergleich zu der Gitterorientierung des Zentrums des Korns an einer Linie parallel zu den Gleitlinien (Abb. 6(b)) für eine durchschnittliche plastische Verformung im Korn von $1,3\%$ [PBVB10] xxxv

9 Veränderung von $\sigma_{13}/\sigma_{13}^{Eshelby}$ in den lokalen Koordinaten (x_1, x_2, x_3)) an einer Linie parallel zu den Gleitlinien (Abb. 6(b)) : (a) Diskreter Ansatz mit einem Vergleich mit der Eshelby-Lösung (gleiche Grösse der durchschnittlichen plastischen Verformung im Korn von $1,3\%$) (nicht-periodische Gleitbänderverteilungen) (b) Diskreter Ansatz mit einem Vergleich mit der Eshelby-Lösung (gleiche Grösse der durchschnittlichen plastischen Verformung im Korn von $1,3\%$) (periodische Gleitbänderverteilungen) (c) Eshelby-Lösung für ein sphärisches Korn. [PBVB10] xxxvii

10 AFM-Abbildung : Mikrostruktur nach einer makroskopischen Verformung von $1,5\%$ (Duplex-Stahl : α : Ferrit, γ : Austenit) xxxviii

11 Verschiedene Anwendungen des Modelles : (a) vorher vorgestellter Fall (Abb. 1), (b) Vielfachgleiten, (c) sphärischer Bi-Kristall (Polykristallanwendung), (d) sphärischen Bi-Kristall (hier zum Beispiel ein Duplex-Stahl : Ferrit α, Austenit γ) [SSV08]) und (e) Versetzungenszellstrukturen [KSL+08] in einer Ni_3Al Legierung xxxix

1.1 Différents types de défaut ponctuel dans les cristaux : (a) lacune, (b) atome étranger interstitiel, (b') auto-interstitiel et (c) atome étranger en substitution. 8

1.2 Mouvement global d'un tapis par passage d'un pli : schématisation du passage d'une dislocation dans un volume monocristallin [Cha09] . 10

1.3 Dislocation coin (circuit de Burgers) 10

1.4 Dislocation vis (circuit de Burgers) 11

1.5 Dislocation mixte 11

1.6 Déplacement d'une dislocation coin dans un cristal 11

1.7 Glissement d'une partie d'un cristal dû au passage d'une dislocation coin 12

1.8 Schéma d'une source de Franck-Read à deux points d'ancrage 12

1.9 Source de Franck-Read dans un échantillon de silicium [Das58] 13

1.10 Empilement de plan compact {111} dans la structure CFC [Lou05] . 14
1.11 Défaut d'empilement intrinsèque de la structure CFC : Schéma et micrographie électronique d'un défaut [Lou05] 14
1.12 Exemple de distributions de lignes de glissement à la surface d'un monocristal de cuivre (a : Distribution homogène de lignes de glissement, b : Distribution hétérogène de lignes de glissement : Bandes de glissement) [Neu83] 17
1.13 Lignes de glissement dans un poly-cristal d'aluminium raffiné déformé de 10% avec un grossissement de 150 [Jao65] 18
1.14 Lignes de glissement dans un grain d'un poly-cristal de nickel déformé en traction pure (ϵ=0,3% ; grossissement : 5000) [Zan63] 19
1.15 Micrographies optiques de bandes de glissement sur un poly-cristal de laiton à différents taux de déformation [UMAT94] 20
1.16 Clichés sur acier DC04 réalisés au Microscope Electronique à Balayage d'éprouvettes de traction polies en surface et déformées (zones de déformation homogènes) : a. traction lente (vitesse de déformation de $0.008s^{-1}$), b. traction dynamique (vitesse de déformation de $105s^{-1}$) [Ber02] 21
1.17 Evolution de l'espacement entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de Titane-β) (S_{av}, S_B, et S_{gb} sont respectivement l'espacement moyen entre bandes de glissement sur tout le grain, l'espacement moyen au centre des grains, et l'espacement moyen dans la région proche des joints de grain) [MS75] 22
1.18 Micrographie obtenue par MEB (Réplique C-Pt) : bandes de glissement à la surface d'un poly-cristal de nickel déformé à taux de 5% [MTB80] 24
1.19 Espacements entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de nickel pur chargé et non chargé en hydrogène [MTB80] 24
1.20 Espacements "intérieurs" entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de nickel pur chargé et non chargé en hydrogène [MTB80] . . 25

1.21 Evolution de l'espacement entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de Titane-β (évolution de l'espacement entre bandes de glissement dans des poly-cristaux de Titane-α (S_{av}, S_i et S_{gb} sont respectivement l'espacement moyen entre bandes de glissement : sur tout le grain, au centre des grains, et dans la région proche des joints de grain) [ML79] 26
1.22 Bandes de glissement après une déformation plastique : cas (a) glissement simple, cas (b) glissement multiple "homogène" et cas (c) glissement multiple "hétérogène" 27
1.23 Les différents stades de formation de la microstructure de dislocations visibles sur les courbes contrainte-déformation de monocristaux de fer [Lan00] 28
1.24 Subdivision des gros grains en zones à morphologie de cellules de dislocations uniforme séparées par des murs denses de dislocations [Lan00] 29
1.25 Représentation stéréographique des changements d'orientation intervenus dans un même grain d'un poly-cristal de cuivre au cours d'un essai de traction simple [Ber80] 31
1.26 Représentation de la désorientation intra-granulaire le long d'une ligne tracée en pointillés, dans la direction transverse, sur un grain pour une déformation de l'éprouvette de 14,4%. (a) Désorientation par rapport à l'orientation cristallographique du centre du grain, (b) Gradient de désorientation [KWT05a] 33
1.27 Compilation de mesures de contraintes d'écoulement en fonction de la taille des grains pour divers systèmes métalliques [JI01] 35
1.28 Dépendance à la taille de grain de la limite d'élasticité pour des tailles de grain micro- et nanométriques 36
1.29 Effet de taille des cellules de dislocation sur la limite d'élasticité pour le cuivre, le fer et l'aluminium [OO07] 37

2.1 Déformations et rotations du monocristal en élastoplasticité en transformations finies [Ber02]. 41
2.2 Représentation du schéma auto-cohérent à un site [Nic09] 47
2.3 Décomposition par morceaux guidée par les hétérogénéités granulaires (c'est-à-dire les hétérogénéités intra-granulaires initiales et induites par la déformation plastique sont ici négligées) 49
2.4 Evolution de la texture (figure de pôle (200) lors d'une opération de rétreint [BZ00] 53
2.5 Evolution de la surface de plasticité lors d'un chargement complexe dans le plan DL-DT [BZ00] 54
2.6 Courbe contrainte-déformation macroscopique pour une traction uniaxiale (Σ_{11}) et valeurs microscopiques des grains du polycristal pour deux niveaux (10% et 30%) de la déformation plastique E^p [LBRM95] 55
2.7 Orientation géométrique d'une éprouvette en vue d'essais de traction pour caractériser les coefficients de Lankford 56
2.8 Evolution du coefficient de Lankford calculé pour des essais de traction dans le sens du laminage DL, dans la direction transverse DT et à 45° [BZ00] 56
2.9 Représentation schématique des possibilités de simuler et d'observer le comportement plastique d'un volume de matière de taille donnée pendant un temps physique [FF04a] 58
2.10 Empilements de dislocations aux joints de grains [Yan06]. 60
2.11 Comportement mécanique à température ambiante de micro-pilier en nickel pur (orientation ⟨134⟩ ; A : Courbe contrainte-déformation pour des micro-piliers de différentes tailles ; B : Micrographie MEB d'un micro-pilier de 20 μm de diamètre après 4% de déformation ; C : Micrographie MEB d'un micro-pilier de 5 μm de diamètre après 19% de déformation. 62

2.12 Limites d'élasticité macroscopiques simulées en fonction de la dispersion relative de taille de grain $\frac{\Delta D}{D}$ variant de 0 à 5, où D est la taille moyenne de grain [BFB07]. 64
2.13 Comportement macroscopique simulé en traction pour les 9 agrégats fictifs [Nic09]. 69
2.14 Evolution de la limite d'élasticité simulée pour les trois orientations cristallographiques étudiées [Nic09]. 69
2.15 Représentation du coeur du grain avec uniquement des SSD et de la couche d'épaisseur λ avec SSD + GND pour un grain de diamètre D [Nic09]. 70
2.16 Représentation d'un gradient linéaire des taux de déformation plastique dans une couche d'épaisseur λ en rouge (longueur interne induite par le gradient de déformation plastique entre les grains). Ce gradient linéaire permet de définir ρ_g au sens d'Ashby [Ash70] dans la couche. Représentation des taux de déformation plastique uniformes par morceaux sur un grain en noir (approche en champs moyens) [Nic09]. . . 71
2.17 Représentation du VER contenant une phase I (coeur des grains) et une phase C (couches de GND dans le milieu homogène équivalent (MHE) [Nic09] dont les propriétés effectives sont déterminées par un modèle auto-cohérent en élasto-viscoplasticité. 72
2.18 Comparaisons entre les essais expérimentaux de traction simple (données fournies par ArcelorMittal) et les simulations effectuées pour une épaisseur de couche λ fixe de 0,15 μm et plusieurs tailles moyennes de grain [PNB+09] 73
2.19 Evolution du seuil d'écoulement, au cours du chargement pour des déformations de 2, 5 et 10%, en fonction de la taille de grain [PNB+09] 74
2.20 Différents modèles de discrétisation des lignes de dislocation [FF04a] . 75
2.21 Plasticité du monocristal (milieu de Cosserat) : configurations initiale, isocline et courante (F et K sont respectivement les gradients de déformation et de rotation) [For98] 78

3.1 a. Modélisation par une approche à champ moyen de la fluctuation du champ plastique à l'interface entre deux grains ; b. Micrographie AFM d'un joint de grain (poly-cristal de laiton après une déformation plastique macroscopique de 1.5%) 82
3.2 (a) Distribution de boucles de dislocation contraintes par un joint de grain sphérique ; (b) Empilement de dislocations rectilignes contraintes par un joint de grain plan introduit par Eshelby et al. [EFN51]. . . . 84
3.3 Milieu continu infini V élastique homogène de modules $units\underset{\approx}{C}$ avec des déformations plastiques (déformations libres) $units\underset{\sim}{\epsilon}^p$ inhomogènes et des déplacements imposés $\underline{u}^d$ à la frontière ∂V du volume. . 86
3.4 Boucle de dislocation de surface de coupure S [Mur87, BBR08]. . . . 91
3.5 Glissement plastique moyen sur un volume de cristal. 93
3.6 Champs plastiques uniformes par morceaux 95
3.7 Grain sphérique de rayon R avec une déformation plastique homogène ϵ^0_{13}. Le grain est noyé dans une matrice élastique infinie. 98
3.8 Micrographie optique (contraste Normarski) : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de 1%. 100
3.9 Boucle de glissement de rayon a, de normal $\underline{n}etdevecteurde Burgers\underline{b}encoordonnéescylindriques$
3.10 Surfaces 3D de la contrainte interne normalisée τ_{13}/μ engendrée par une boucle de dislocation de glissement aux altitudes : (a) $x_3 = 0.1a$ et (b) $x_3 = 0.5a$ [BBR08]. 105
3.11 Différentes approches pour calculer l'énergie élastique d'une boucle de dislocation : approche dévelopée précédement, formule de Hirth et Lothe [HL82], approche non singulière de Cail et al. [CAWB06]. Cette figure montre la dépendence à la taille de boucle de l'énergie élastique [BBR08]. 107
3.12 Grain sphérique de rayon R contenant une distribution périodique de boucles de dislocation espacées également de h. Le grain se trouve noyé dans une matrice élastique infinie [BBR08]. 108

3.13 Courbes de niveaux de τ_{13} normalisé par rapport à $\mu\epsilon^0_{13}$ à l'altidude $x_3 = 0.5R$ pour différents nombres de boucles. Comparaison avec la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente. Les coordonnées x_1 et x_2 sont normalisés par rapport à $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ [BBR08] 112
3.14 Variation de $\tau_{13}/(\mu\epsilon^0_{13})$ le long de l'axe (x_3) $(\rho = 0)$ pour differents nombres de boucle. Comparaison avec la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente [BBR08]. . . 113
3.15 Densité volumique d'énergie élastique w_{el} à l'intéreur du grain le long de trois directions différentes (grain comportant 11 boucles $(R/h = 5, 5)$). En coordonnées sphériques, r est la coordonnée radiale, $\theta \in (0, 180^o)$, $\phi \in (0, 360^o)$. Comparaison avec la solution d'Eshelby à même déformation plastique moyenne dans le grain [BBR08]. 114
3.16 Rayon r_a du *coeur du grain* et épaisseur l de la *couche* en fonction du rapport R/h (le critère d'uniformité basé sur w_{el} est de 5%) [BBR08]. 115
3.17 Evolution de l'énergie élastique normalisée pour une distribution périodique de boucles de dislocation en fonction du nombre de boucles dans le grain pour différentes tailles de grains. Comparaison à la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente [BBR08] 116
3.18 Evolution de l'énergie élastique normalisée en fonction de $1/R$ pour des déformations plastiques moyennes constantes dans les grains ϵ^0_{13} (différentes valeurs de h). Comparaison à la solution d'Eshelby pour une déformation plastique moyenne dans le grain équivalente [BBR08].117

3.19 Evolution de l'énergie élastique normalisée $\Phi^{(N)}$ en fonction de la déformation plastique moyenne dans les grains. Cas d'une distribution périodique de 21 boucles considérées comme des super-dislocations dont le module du vecteur de Burgers augmente. Cas d'une distribution périodique de boucles de dislocation dont l'espacement h diminue (multiplication de boucles, celles-ci restant périodiques). Comparaison avec la solution classique d'Eshelby ($R = 10\mu m$). 118

3.20 (a) Grains sphériques avec une déformation plastique uniforme en concentration diluée dans une matrice purement élastique (M.H.E.) : modèle dilué d'Eshelby, (b) Grains sphériques en concentration diluée avec une distribution de boucles discrètes à l'intérieur des grains dans une matrice purement élastique (M.H.E.). L'espacement entre boucles h est le même dans tous les grains [RBB09]. 122

3.21 Courbe contrainte-déformation simulée avec différentes tailles de grain. h est fixée à 0.1 μm pour tous ces cas. Encadré : contrainte d'écoulement en fonction de $1/R$ [RBB09] 125

3.22 Contraintes et déformation plastiques locales moyennes pour $E^p_{11} = 6.10^{-8}$ pour différents grains plastifiés [RBB09]. 126

3.23 Evolution de l'énergie élastique globale stockée avec la déformation plastique macroscopique E^p_{11} dans le sens de traction pour plusieurs tailles de grain R avec $h = 0,1$ [RBB09]. 127

4.1 Eprouvettes et caractéristiques géométriques en mm. 134

4.2 Figure de pole <111> d'un échantillon laminé (75%) et recuit 650°C pendant 1h. 135

4.3 Différences d'aspect des lignes de glissement se développant au début de la déformation selon le mode de polissage. Le polissage entraîne de gros glissements (a et c) [BH51]. 136

4.4 Micrographie optique (contraste Normarski) ; Evolution de la microstructure de déformation pour un grain "orienté en glissement simple" et sans polissage intermédiaire après une déformation plastique totale de A : 0,15%, B : 0,45%, C : 0,65%, D : 0,75%, E : 1%. 142
4.5 Micrographie optique (contraste Normarski) ; Evolution de la microstructure de déformation pour un grain "orienté en glissement simple" après un électro-polissage suivi d'un incrément de déformation et après une déformation plastique totale de A : 0,25%, B : 0,6%, C : 0,9%, D : 1,1%. 143
4.6 Micrographie obtenue après une déformation plastique de A : 0,25%, B : 1,1%. 144
4.7 Glissement simple observé en surface et possibilité de glissement multiple dans le volume sous-jacent. 145
4.8 (a) Micrographie AFM : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de 1,5%. (b) Micrographie MEB donnant des détails sur les lignes de glissement constituant la bande de glissement "g" indexée sur la figure (a). 146
4.9 Profil AFM des bandes de glissement le long de d'une ligne perpendiculaire aux lignes de glissement actives principales. 147
4.10 Distance "vraie" entre deux bandes du système de glissement principal. 148
4.11 (A) Micrographie optique (contraste Normarski) : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$; (B) Image EBSD correspondante en contraste de qualité des lignes de Kikuchi : les désorientations intragranulaires ont été calculées dans plusieurs grains par rapport aux centres des grains. 150

4.12 Echantillon ayant subi le traitement thermique B (cf. tableau 4.1). (a) Micrographie optique (contraste Normarski) : microstructure de déformation d'un grain "orienté en glissement simple" dans un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$; (b) Image EBSD correspondante en contraste de qualité des lignes de Kikuchi : les désorientations intra-granulaires ont été calculées par rapport aux centres du grain 151
4.13 Grain sphérique de rayon R avec une distribution discrète de boucles de super-dislocations contrainte par le joint de grain. La distribution de boucle est caractérisée par h (distribution uniforme ou non-uniforme pour h). 153
4.14 Echantillon ayant subi le traitement thermique A (cf. tableau 4.1). (a) Micrographie AFM : microstructure de déformation d'un poly-cristal de nickel après une déformation plastique macroscopique de $1,5\%$; (b) Image EBSD correspondante en contraste de qualité des lignes de Kikuchi : les désorientations intra-granulaires ont été calculées par rapport au centre du grain [PBVB10]. 156
4.15 Modélisation simplifiée des bandes de glissement par des boucles de super-dislocations. 158
4.16 Courbe de traction contrainte vraie / déformation vraie réalisée sur un échantillon de nickel effectué sur un échantillon ayant subi le traitement thermique A (cf. tableau 4.1) 159
4.17 Image EBSD sur un échantillon de nickel effectué sur un échantillon ayant subi le traitement thermique A (cf. tableau 4.1) dans le plan de la tôle. 159
4.18 Désorientations intra-granulaires ($^\circ$) mesurée par EBSD, par rapport à une orientation cristallographique de référence choisie au centre du grain, le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (cf. figure 4.14(b)) [PBVB10]. 160

4.19 Désorientations intra-granulaires calculées dans le cas d'une distribution non-uniforme de boucles de super-dislocations pour une déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$. Les valeurs sont calculées en référence à l'orientation cristallographique du centre du grain, le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (comme représentée sur la figure 4.14(b)) et à une altitude de $1,5\mu m$ par rapport à la boucle centrale (cf. figure 4.13). Encadré : Effet de la distance par rapport à la boucle centrale sur les désorientations théoriques. Le résultat reste qualitativement le même pour la taille de couche mais la valeur maximale de désorientation obtenue au joint est variable. [PBVB10] 161

4.20 Désorientations intra-granulaires théoriques dans le cas d'une distribution périodique ($h = 2.16\mu m$) de boucles de super-dislocations pour une déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$. Les valeurs sont calculées en référence à l'orientation cristallographique du centre du grain, le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (comme représentée sur la figure 4.14(b) et à une altitude de $1,5\mu m$ par rapport à la boucle centrale (cf. figure 4.13). Encadré : Effet de la distance par rapport à la boucle centrale sur les désorientations théoriques [PBVB10]. 163

4.21 Variation de la composante σ_{13} des contraintes internes normalisées par rapport à $\sigma_{13}^{Eshelby}$ dans le repère local (x_1, x_2, x_3) le long d'une ligne parallèle aux lignes de glissement dans le plan d'observation (cf. figure 4.14(b)) : (a) distribution non-uniforme de bandes de glissement et comparaison avec la solution d'Eshelby (pour une déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$) ; (b) distribution périodique de bandes de glissement et comparaison avec la solution d'Eshelby (pour une même déformation plastique moyenne dans le grain de $1,3\%$) ; (c) rappel de la solution d'Eshelby dans le cas d'un grain sphérique déformé en glissement simple. [PBVB10] 165

5.1 Différents cas d'études possibles à partir du modèle de base (a) présenté dans le chapitre 3 : (b) cas d'un glissement double (multiple), (c) cas d'un bi-cristal avec glissement simple (pour application polycristalline, (d) cas d'un alliage bi-phasé (micrographie AFM d'un acier duplex (Ferrite α, Austéniteγ) [SSV08]) et (e) cas des cellules de dislocations (micrographie MET [KSL+08] dans un alliage Ni_3Al) 169

5.2 Micrographie AFM : microstructure de déformation d'un acier DUPLEX après une déformation plastique macroscopique de 1.5% (α : Ferrite, γ : Austénite) 171

5.3 Grain sphérique avec un rayon R et deux distributions périodiques de dislocations contraintes par le joint de grains caractérisés par h_1 pour les boucles intra-granulaires et par h_2 pour les boucles dans la matrice. 171

5.4 Champs de déformation uniformes par morceaux dans l'inclusion I et dans la matrice. 173

5.5 Grain sphérique de rayon R avec une distribution périodique de boucles de dislocations intra-granulaires contraintes par le joint de grain et caractérisée par h_1. 176

5.6 Grain sphérique avec un rayon R avec la distribution périodique de dislocations dans la matrice contrainte par le joint de grains caractérisés par h_2 178

5.7 Inclusion plastique dans une matrice plastique avec une approche à champs moyens. Cas particulier : même système de glissement activé ($\mathrm{n}_j^{(s)I} = \mathrm{n}_j^{(s)M}$ et $\mathrm{m}_j^{(s)I} = \mathrm{m}_j^{(s)M}$) et même distorsion plastique $\left(\beta_{ji}^{\mathrm{pM}} = \beta_{ji}^{\mathrm{pI}}\right)$ dans l'inclusion et dans la matrice 180

5.8 Inclusion plastique dans une matrice plastique avec une approche discrète. Cas particulier : même système de glissement activé ($\mathrm{n}_j^{(s)I} = \mathrm{n}_j^{(s)M}$ et $\mathrm{m}_j^{(s)I} = \mathrm{m}_j^{(s)M}$) et même distorsion plastique moyenne $\left(\overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{ji} = \overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{ji}\right)$ dans l'inclusion et dans la matrice : (a) . L'espacement entre boucles ($h_1 < h_2$), les vecteurs de Burgers (différents dans l'inclusion et dans la matrice : $b_1 \neq b_2$) sont calculés pour avoir une déformation moyenne égale dans le grain et dans la matrice et (b) même espacement entre boucles ($h_1 = h_2$), mêmes direction de glissement et normale au plan glissement et même vecteur de Burgers pour les deux distributions ($h_1 = h_2$) mais deux les distributions de boucles sont décalées de d. . 181

5.9 Composante 13 des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon_{13}^{p}\right]$ le long de l'axe x_1^M à l'altitude $x_3 = 0,5\mu m$ ($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$) ; Taille du grain : $10\mu m$, Caractéristiques de la distribution de boucles circulaires dans le grain : espacement entre boucles $h_1 = 2,86\mu m$, $b_1 = 2,5 \times 10^{-10}\mu m$, Caractéristiques de la distribution de boucles dans la matrice : $h_2 = 2,22\mu m$, $b_2 = 1,94 \times 10^{-10}\mu m$; (cf. figure 5.8(a)) 183

5.10 Composante 13 des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon_{13}^{p}\right]$ le long de l'axe x_3^M au centre du de l'inclusion.($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$). Taille du grain : $10\mu m$. Caractéristiques de la distribution de boucles circulaires dans le grain : espacement entre boucles $h_1 = 2,86\mu m$, $b_1 = 2,5 \times 10^{-10}\mu m$, Caractéristiques de la distribution de boucles dans la matrice : $h_2 = 2,22\mu m$, $b_2 = 1,94 \times 10^{-10}\mu m$; (cf. figure 5.8(a)) 183

5.11 Composante τ_{13} des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon^{p}_{13}\right]$ selon l'axe x_1^M à l'altitude $x_3^M = 0,5\mu m$ pour différents paramètres d. Même déformation moyenne dans le grain et la matrice ($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$). Taille du grain : $10\mu m$, espacement entre boucles de dislocation $h_1 = h_2 = h = 0,95\mu m$ et $b_1 = b_2 = 2,5.10^{-10}$. Les coordonnées x1 et x2 sont normalisées par rapport a $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ (cf. figure 5.8(b)). 184

5.12 Composante τ_{13} des contraintes internes normalisées par rapport au résultat du modèle d'Eshelby (cf. Chapitre 3) $\tau_{13}/\left[2\mu\left(1-\beta\right)\epsilon^{p}_{13}\right]$ selon l'axe x_3^M au centre de l'inclusion pour différents paramètres d. Même déformation moyenne dans le grain et la matrice ($\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$) Taille du grain : $10\mu m$, espacement entre boucles de dislocation $h_1 = h_2 = h = 0,95\mu m$ et $b_1 = b_2 = 2,5.10^{-10}$. Les coordonnées x1 et x2 sont normalisées par rapport a $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ (cf. figure 5.8(b)). 185

5.13 Evolution de l'énergie élastique normalisée en fonction de l'inverse du rayon pour différents décalages d des boucles de l'inclusion par rapport aux boucles de la matrice avec $\overline{\beta^{\mathrm{pI}}}_{31} = \overline{\beta^{\mathrm{pM}}}_{31}$. Les coordonnées x1 et x2 sont normalisées par rapport a $R(x_3) = \sqrt{R^2 + x_3^2}$ (cf. figure 5.8(b)). 186

5.14 Micrographie MET de cellules de dislocation dans un alliage polycristallin de Ni_3Fe [KSL+08]. 188

5.15 (A) Micrographie MET de structure de cellules de dislocation d'un monocristal de cuivre déformé en traction selon la direction [001] ; (B) Distributions de contraintes le long de la ligne représentée sur la micrographie MET calculée à partir du modèle du modèle de Forest et Sedlacek [SF00] (en trait plein). Contrainte moyenne dans les cellules (en pointillés) 189

5.16 Lignes de glissement dans la structure cellulaire [TYF78] 190

5.17 Parois des cellules : structure dipolaire de dislocations [Lan00] 191
5.18 Modélisation discrète d'une cellule de dislocation de forme sphérique de rayon R par deux distributions de boucles de dislocations circulaires contraintes par une paroi de cellule d'épaisseur λ dans un milieu élastique infini 192
5.19 Variations de la composante σ_{13} des contraintes internes dans le repère local (x_1, x_2, x_3) le long de l'axe x_1^M ; rayon intérieur de la cellule est de $1\mu m$ (valeur typique dans les aciers, cf. [Lem95]). Les deux distributions de boucles sont périodiques (21 boucles dans la cellule et 21 boucles dans la matrice). Le module du vecteur de Burgers pour les deux distributions est $b_1 = b_2 = 2,5 \times 10^{-10} m$. Profils obtenus pour différentes épaisseurs de parois de cellules : (A) $\lambda = 0,3\mu m$, (B) $\lambda = 0,2\mu m$ et (C) $\lambda = 0,1\mu m$. 196

A.1 Modèle série de Maxwell 223
A.2 Comparaison de l'approche de Kröner-Weng [Krö61, Wen81] à celle à champs translatés [Ber02][SBFB02][BFLB04], au niveau de la description du champ local de déformation viscoplastique $units \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{vp}$ 230

B.1 Milieu continu V avec déformation libre $units \underset{\sim}{\epsilon}^{p}$et une avec un déplacements imposés $\mathbf{u^d}$ à la surface ∂V du volume 237

F.1 Définition des angles d'Euler [Lor05] 255
F.2 Repère global K_A, repère K_{B1} et repère K_{B2} 257
F.3 Matrice de symétrie du cristal [Aca07] 258