

**UNIVERSITE PARIS 13 - Institut Galilée**

Laboratoire des Sciences des Procédés et Matériaux  
UPR CNRS 3407

N° attribué par la bibliothèque

□□□□□□□□□□

**THESE**

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PARIS XIII**

Spécialité Mécanique option Matériaux

Présentée par

**Noël Alain ZONTSIKA**

**MODELISATION MULTIECHELLE DU COUPLAGE  
ELASTOPLASTICITE-ENDOMMAGEMENT PAR DECOHESION  
EN GRANDES DEFORMATIONS**

Soutenue le 09 octobre 2014 devant le jury :

M. Akrum ABDUL-LATIF	Professeur, Université Paris 8	Directeur de thèse
M. Guy DIRRAS	Professeur, Université Paris 13	Examineur
M. Patrick FRANCIOSI	D. R. CNRS, Université Paris 13	Examineur
M. Djimédo KONDO	Professeur, Université Paris 6	Examineur
M. Salah RAMTANI	Professeur, Université Paris 13	Directeur de thèse
M. Khemais SAANOUNI	Professeur, UT Troyes	Rapporteur
Mme. Siham TOUCHAL	MCF- HDR, UNISTRA	Rapporteur

# Dédicaces

## ***A mon père***

*Je dédie cette thèse à mon père Ngouéri Alphone mort il y a 14 ans. Tu aurais été très ravi de savoir que tes efforts n'ont pas été vains. Mais, Dieu avait voulu les choses ainsi. Tu m'as appris à croire à son propre effort là où l'on se résigne, à écouter le son du cœur pour faire chanter les équations, surtout celles qui valent quelque chose. Tu m'as enseigné le pardon, l'amour, la tolérance, la détermination, l'écoute, le respect, l'humilité.*

## ***A ma maman***

*A toi ma maman aussi, Pauline Matala. Nombreuses mamans abandonnent leurs enfants à la naissance ce qui ne fut ton cas. Tu es une vraie mère. Je me souviens encore du jour où tu m'as dit, j'ai fait un rêve. Et dans ton rêve il était question de moi. Tu t'es toujours battu pour qu'il me manque rien dans la limite de tes efforts. Je n'ai pas assez de vocabulaire te témoigner mon amour. Tu m'as appris qu'il était possible de l'exprimer par les mots du cœur car, ils étaient plus apaisant disais-tu.*

## ***A mes frères, sœurs et oncles***

*Mes frères : Ngouéri Alphonse, MPala Jean, Dékou Mouandza, MBoungou Merlin*

*Mes sœurs : Balembokanda Julienne, Ntsila Marie, Mouila Bernadette, Mantsanga Louise, Moukala Gertrude*

*Mes oncles : MBoungou Serge, Athanasse Mizère.*

# Remerciements

Je remercie très chaleureusement M. Khemais SAANOUNI, Mme Siham TOUCHAL M. Patrick FRANCIOSI et M. Djimédo KONDO, respectivement rapporteurs et examinateurs pour avoir accepté de m'honorer de leur présence dans ce jury de thèse.

Je tiens aussi à remercier très sincèrement mes deux directeurs de thèse, Messieurs Salah RAMTANI et Akrum ABDUL-LATIF pour m'avoir proposé ce sujet de thèse. Ces remerciements tiennent beaucoup aussi à leur assistance autant technique que fonctionnelle, leur disponibilité pendant les moments critiques de cette thèse.

Ce travail de thèse de Doctorat s'est déroulé sur deux sites, le Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux (LSPM, UPR CNRS 3407) situé dans l'enceinte de l'Institut Galilée /Université Paris 13 et le laboratoire LISMMA (EA 2336) associé à SUPMECA. J'adresse mes remerciements aux directeurs respectifs, Messieurs Khaled HASSOUNI et Jean-Yves CHOLEY pour m'avoir accueilli et facilité mon installation durant toutes ces années.

C'est également ici que je voudrais situer le rôle central joué par Monsieur Guy DIRRAS qui m'a soutenu et appuyé ma demande de financement dans le cadre du projet ANR dont il était le porteur. Je remercie aussi ses multiples contributions morales, techniques et, j'en passe.

Je ne peux pas en outre oublier le personnel du Laboratoire LISMMA/SUPMECA pour m'avoir accueilli pendant deux ans dans leurs locaux notamment sur toute la phase d'apprentissage du modèle et de son implémentation numérique. Je félicite le fait d'avoir mis à ma disposition deux postes de travail (ordinateurs) et ouvert une connexion à distance qui m'ont fait progresser de manière notable. Tout ceci était rendu possible grâce à Monsieur Donné RAZAFINDRAMARY que je remercie très sincèrement. Je n'oublie pas aussi chacun d'eux qui de loin ou de près à contribuer pour que cette thèse arrive à son terme.

Je n'oublie pas ici l'ensemble de mes amis de l'université 13 dont les amis de master, de l'enseignement pendant le monitorat et les amis thésards. Je suis très reconnaissant à l'endroit de Guy Daniel DUTEL, pour m'avoir fourni des données expérimentales de son travail de thèse qui m'ont permis de valider en partie mon modèle.

Je voudrais aussi remercier ma famille pour son soutien constant et sans faille, plus particulièrement mon oncle Serge MBOUNGOU et sa femme Francine pour toute la prise en charge quotidienne.

Enfin, je voudrais saluer le courage de tous ceux dont l'histoire et les hommes n'ont pas ouvert les portes du savoir. Ce travail vous est dédié.

# Table des matières

<i>Notations et Abréviations</i> .....	14
<i>Résumé</i> .....	16

## Chapitre I : Introduction

---

<i>I.1 Motivations</i> .....	18
<i>I.2 Objectifs</i> .....	18
<i>I.3 Plan de l'étude</i> .....	21

## Chapitre II : Etude bibliographique

---

<i>II. 1. Microstructures</i> .....	25
<i>II. 1. 1. – Problématique et contexte général des matériaux à grains ultrafins</i> .....	25
<i>II. 1. 2 – Méthodes d'élaboration</i> .....	26
<i>II. 1. 3 – Mécanismes de déformation et d'endommagement</i> .....	28
<i>II. 1. 3. 1 : Mécanismes de déformations</i> .....	28
<i>II. 1. 3. 2 : Mécanismes d'endommagement dans les matériaux UFG/NC</i> ...	32
<i>II. 1. 4. - Amélioration de la ductilité</i> .....	32
<i>II. 1. 5 Microstructure du Nickel bimodal et propriétés mécaniques</i> .....	35
<i>II. 2. 1. Elasticité et Plasticité cristalline</i> .....	39
<i>II. 2. 2. La théorie de la dislocation</i> .....	42

<i>II. 2. 3. – Déformation plastique des monocristaux</i> .....	43
<i>II. 2. 3. 1. – Glissement dans les monocristaux</i> .....	43
<i>II. 2. 4. – Modèles de plasticité du polycristal</i> .....	46
<i>II. 2. 4. 1. – Modèle de Sachs</i> .....	46
<i>II. 2. 4. 2. – Modèle de Taylor</i> .....	47
<i>II. 2. 4. 3. – Modèle auto-cohérent</i> .....	47
<i>II. 3. Quelques modèles micromécaniques auto-cohérents</i> .....	48
<i>II. 3. 1. – Modèle de Berveiller et Zaoui</i> .....	48
<i>II. 3. 2. – Modèle viscoplastique auto-cohérent (VPSC)</i> .....	49

## **Chapitre III : Modélisation micromécanique**

---

<i>III. 1. Cadre général</i> .....	52
<i>III. 2 Notion de petites déformations et équations constitutives du modèle</i> .....	53
<i>III.2. 1 Comportement local</i> .....	60
<i>III. 2. 2 Modèle de comportement élasto-inélastique d'un monocristal.</i> .....	62
<i>III. 2. 3 Homogénéisation</i> .....	67
<i>III. 2. 4 Validité thermodynamique du modèle</i> .....	67
<i>III. 3. Quelques résultats et discussions</i> .....	68
<i>III. 3.1 Résultats bibliographiques</i> .....	69
<i>III. 3.2 Résultats pour l'étude actuelle</i> .....	70
<i>III. 4 Prise en compte des grandes déformations</i> .....	72
<i>III. 5 Mise à jour de la texture cristallographique</i> .....	74

<b>III. 6 Influence de la rotation cristallographique</b> .....	77
<b>III.7 Résultats et discussion</b> .....	78
III.7.1 Caractéristiques de l'essai numérique.....	78
III.7.2 Résultats selon les modèles de Taylor, Sachs et VPSC.....	79
III.7.3 Résultats de notre modèle.....	81
III.7.4 Influence du paramètre de couplage sur la contrainte d'écoulement.....	83
III.7.5 Comparaison simulation numérique - expérience.....	85

## **Chapitre IV : Influence de la microstructure sur la contrainte d'écoulement : l'effet de taille**

---

<b>IV. 1 Variation de la densité des dislocations</b> .....	90
<b>IV. 2 Nouvelles modélisations de l'effet taille de grains.</b> .....	96
IV. 2.1 Modélisation à zones de transitions : modèle 1. ....	96
IV. 2.2 Prise en compte des mécanismes de diffusion thermique : modèle 2. ....	97
<b>IV. 3 Résultats et discussions.</b> .....	99
IV. 3.1 Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille des grains modèle 1.....	100
IV.3.2 Influence de la vitesse de sollicitation et du coefficient de diffusion sur la contrainte d'écoulement.....	101
<b>IV. 3.3 Mise en application du modèle micromécanique</b> .....	104
IV. 3.3.1 Comparaison des réponses mécaniques à la loi de Hall-Petch classique.....	104
IV. 3.3.2 Influence de la taille de grains sur la résistance mécanique.....	106
IV. 3.3.3 Représentation et profile des figures de pôles inverses.....	107

<i>IV. 3.3.4 Influence du coefficient de diffusion thermique dans le processus d'inversion de la contrainte d'écoulement : comparaison avec les résultats de la littérature.....</i>	<i>108</i>
<i>IV. 3.3.5 Effet de la vitesse de chargement sur la contrainte mécanique.....</i>	<i>110</i>
<i>IV. 3.3.6 Contrainte mécanique locale (grains) et variation des angles d'Euler en fonction de la contrainte plastique granulaire.....</i>	<i>111</i>
<i>IV. 3.3.7 Influence de la taille de grains sur le profile des figures pôles inverses.....</i>	<i>114</i>
<i>IV. 3.3.8 Comparaison des contraintes mécaniques en traction et en compression : recherche du phénomène de l'asymétrie traction/compression.....</i>	<i>115</i>

## **Chapitre V : Endommagement par décohésion d'interface**

---

<i>V. 1 Quelques phrases et types d'endommagement des matériaux UFG.....</i>	<i>118</i>
<i>V. 2 Les modèles de Needleman, Lee et Kim.....</i>	<i>120</i>
<i>V. 3 Le nouveau modèle cohésif : ouverture et glissement .....</i>	<i>123</i>
<i>V. 3.1 Cas d'une simple ouverture.....</i>	<i>125</i>
<i>V. 3.2 Cas d'un simple glissement.....</i>	<i>126</i>
<i>V. 4. Résultats et Discussions.....</i>	<i>127</i>
<i>V. 4.1 Etude des différents potentiels et contraintes cohésives.....</i>	<i>127</i>
<i>V. 4.2 Influence de la taille de grains sur l'intensité des forces cohésives.....</i>	<i>130</i>
<i>V. 4.3 Application de l'endommagement au modèle élasto-plastique. ....</i>	<i>130</i>
<i>V. 4.3.1 Comportement endommagé en ouverture : comparaison avec la littérature.....</i>	<i>131</i>

V. 4.3.2 Comportement endommagé en glissement : comparaison avec la littérature.....133

## **Chapitre VI : Conclusions générales et Perspectives**

---

*Conclusions générales et Perspectives* .....137

## **Annexes**

---

*Annexe 1 : Calcul de la matrice de transformation*.....148

# Liste des figures

**Fig. 2. 1 :** (a) Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille des grains dans les matériaux MC, UFG, NC et leurs alliages [Kumar et al., 2003] ; (b) observation de grande résistance mécanique et faible ductilité dans un échantillon de Nickel nanométrique (120 – 600 nm) (Krasilnikov et al., 2005) ; (c-d) observation des bandes de cisaillement dans un échantillon de Fe [Cao et al., 2007] ..... 27

**Fig. 2. 2 :** Illustration de la présence de joints de grains dans : (a,b) Ni-NC élaboré par électrodéposition et (c,d) Cu-NC élaboré par condensation de gaz inerte, Kumar et al., [2003] ..... 28

**Fig. 2. 3 :** Carte de mécanisme de déformation pour les métaux CFC, Cheng et al., [2003].  
.....29

**Fig. 2.4 :** Contrainte d'écoulement du cuivre UFG et NC, Conrad [2003]..... 30

**Fig. 2. 5 :** Coupe d'un joint de grains illustrant les mécanismes d'émission des dislocations partielles, Mishra et al. [2001]..... 31

**Fig. 2. 6 :** Représentation schématique des principaux mécanismes de déformation et d'endommagement expérimentalement observés dans les matériaux NC et UFG [Dirras,2008].....33

**Fig. 2.7 :** Des grains de taille bimodale d'aluminium déformés en traction, [Ma, 2006]..... 33

**Fig. 2.8 :** Microstructure composite, [Ma, 2006]..... 35

**Fig. 2. 9 :** Microstructure de Nickel bimodal (poudres nano + conventionnelle), [Dirras, 2009 ; Bui, 2008]..... 36

**Fig. 2.10 :** Résistance mécanique pour différentes tailles de grains [Dutel, 2013]..... 36

**Fig. 2.11 :** Evolution de l'endommagement [Dutel, 2013]..... 37

**Fig. 2. 12 :** Modèle de fissuration par endommagement, Jia et al.,2012].....38

**Fig. 2.13 :** (a) Courbes contrainte-déformation de traction de l'alliage d'aluminium 2012 élaboré par plusieurs méthodes. (b) Image de la surface de rupture du matériau par traction, Ma [2006]..... 39

**Fig. 2.14 :** Test de torsion par Coulomb, [Bell, 1984]..... 40

<b>Fig. 2.15</b> : Courbe contrainte-déformation d'un monocristal par Taylor et Elam, [Bell, 1984]. .....	41
<b>Fig. 2.16</b> : Rotation du cristal par glissement, [Taylor, 1938].....	42
<b>Fig. 2.17</b> : Illustration d'une dislocation selon Taylor et Elam [1923].....	43
<b>Fig. 2.18</b> : Schéma représentatif de la loi de Schmid.....	44
<b>Fig. 2.19</b> : Nomenclature de systèmes de glissement interagissant avec le système primaire dans un cristal CFC [Hosford, 1993]. Les systèmes sont notés d'après la convention de Schmid et Boas, [1935].....	45
<b>Fig. 3.1</b> L'effet de la taille moyenne des grains sur le comportement mécanique [Bui, 2008] .....	53
<b>Fig. 3.2</b> Directions de glissements $\langle 110 \rangle$ et plans $\{111\}$ pour les structures CFC.....	61
<b>Fig. 3.3</b> Schéma des différentes échelles du modèle.....	68
<b>Fig. 3.4</b> La sensibilité du modèle au paramètre du couplage élasto-plastique $\alpha$ sous traction uniaxiale, [Abdul-Latif et al.,2002].....	69
<b>Fig. 3.5</b> Influence du paramètre de couplage élasto-plastique $\alpha$ sur l'hétérogénéité de la déformation Inélastique granulaire de chaque grain du polycristal, [Abdul-Latif et al.,2002].....	70
<b>Fig. 3.6</b> Influence du paramètre de couplage élasto-plastique $\alpha$ sur l'hétérogénéité de la déformation Inélastique granulaire de chaque grain du polycristal, [Abdul.Latif et al.,2002] .....	70
<b>Fig. 3.7</b> Etude de l'influence de la texture (agrégat) sur la réponse mécanique.....	71
<b>Fig. 3.8</b> Sensibilité du modèle à la vitesse de sollicitation.....	72
<b>Fig. 3.9</b> Diagramme schématique de la cinématique monocristallin, [Wei et al., 2006] .....	73
<b>Fig. 3.10</b> Schéma représentatif des différentes composantes de la rotation cristalline, [Dommelen ,1999 ].....	75
<b>Fig. 3.11</b> Angle d'Euler dans la notation de Bunge.....	76
<b>Fig. 3.12</b> Texture théorique initiale pour 200 grains.....	78

<b>Fig. 3.13</b> Influence du paramètre de couplage $\alpha$ sur la contrainte mécanique macroscopique en traction. ....	84
<b>Fig. 3.14</b> Influence du paramètre de couplage $\alpha$ sur la contrainte mécanique en compression.....	85
<b>Fig. 3.15</b> Comparaison entre l'expérience et la simulation.....	87
<b>Fig. 4.1</b> : Variation de la densité totale en fonction de la déformation axiale plastique pour différentes taille de grains [De Sansal et al., 2010].....	92
<b>Fig. 4.2</b> : Variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique, $\rho_m = 9.75 \times 10^{13} m^{-2}$ .....	93
<b>Fig. 4.3</b> Variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique pour un matériau UFG ( 10 nm, 500nm).....	94
<b>Fig. 4.4</b> Variation de la densité des dislocations en fonction de la taille des grains pour des matériaux UFG, CFC(Cuivre, l'aluminium et le Nickel).....	95
<b>Fig. 4.5</b> Influence de la vitesse de sollicitation sur la variation de la densité des dislocations dans un matériau UFG, CFC (Nickel).....	95
<b>Fig. 4.6</b> Evolution de la limite élastique du nickel : modélisation 1.....	101
<b>Fig. 4.7</b> Dépendance de la taille de grains sur la contrainte d'écoulement du Cu à 5% de déformation [Kim et al., 2005].....	102
<b>Fig. 4.8</b> Influence du coefficient de diffusion sur la contrainte d'écoulement pour une microstructure.....	103
<b>Fig. 4.9</b> Influence de la vitesse de sollicitations sur la contrainte d'écoulement: (a) $D_{gb} = 3.8303 \cdot 10^{-21} m^2 s^{-1}$ .....	103
(b) $D_{gb} = 1.5583 \cdot 10^{-20} m^2 s^{-1}$ .....	103
<b>Fig. 4.10</b> Etude comparée de la contrainte mécanique des trois modèles pour une taille de grains moyenne de 80 nm.....	106
<b>Fig. 4.11</b> Influence de la taille des grains sur la contrainte mécanique macroscopique: $D_{gb} = 3.8303 \cdot 10^{-21} m^2 s^{-1}$ .....	107
<b>Fig. 4.12</b> Figures de pôles inverses en fonction de la taille de grains.....	107
<b>Fig. 4.13</b> Influence de la taille des grains sur la contrainte mécanique: $D_{gb} = 3.8303 \cdot 10^{-21} m^2 s^{-1}$ .....	108
<b>Fig. 4.14</b> Influence de la taille des grains sur la contrainte mécanique: $D_{gb} = 1.5583 \cdot 10^{-20} m^2 s^{-1}$ .....	109

<b>Fig. 4.15</b> L'influence de la taille de grains sur la résistance mécanique du Nickel NC, [Wei et al., 2006].....	110
<b>Fig. 4.16</b> Influence de la vitesse de sollicitation sur la contrainte mécanique en traction pour une taille de grain de 35 nm .....	110
<b>Fig. 4.17</b> Influence de la vitesse de sollicitation sur la contrainte mécanique en traction pour une taille de grains moyenne de 35 nm, [Wei et al., 2006].....	111
<b>Fig. 4.18</b> Variation des angles d'Euler du grain 80 en fonction de la déformation Plastique .....	112
<b>Fig. 4.19</b> Contrainte mécanique granulaire pour différents grains en traction .....	113
<b>Fig. 4.20</b> Figures de pôles inverses du Halite à température ambiante pour une déformation de : (a) 30% et (b) 15% en traction, [Wei et al., 2005].....	113
<b>Fig. 4.21</b> Prédiction de la résistance mécanique en traction et en compression, [Cheng et al., 2003].....	115
<b>Fig. 4.22</b> Asymétrie traction/Compression du Nickel UFG pour $d = 120$ nm.....	116
<b>Fig. 5.1</b> Mécanismes de la germination, de croissance et de coalescence de la rupture ductile par cavitation, [Wang et al., 1984].....	118
<b>Fig. 5.2</b> (a) Potentiel de séparation normalisé $\phi_n$ en fonction de $\frac{u_n}{\delta_n}$ pour différentes valeurs de $\gamma_n$ .....	122
(b) Séparation normale $T_n$ en fonction de $\frac{u_n}{\delta_n}$ pour différentes valeurs de $\gamma_n$ , [Lee et al., 2002] .....	122
<b>Fig. 5.3</b> Séparation tangentielle ou glissement $T_t$ en fonction de $\frac{u_t}{\delta_t}$ pour différentes valeurs de $\gamma_n$ , [Lee et al., 2002].....	123
<b>Fig. 5.4</b> (a) Potentiels cohésifs en séparation normale en fonction de $\frac{\lambda}{\lambda_c}$ .....	128
(b) Séparations normales en fonction de $\frac{\lambda}{\lambda_c}$ .....	128
<b>Fig. 5.5</b> (a) Influence de la densité des dislocations sur le potentiel de séparation normale.....	129
(b) Influence de la densité des dislocations sur le potentiel de séparation tangentielle. ....	129
<b>Fig. 5.6</b> Influence de la taille des grains sur l'intensité des forces de séparation	

<i>normale</i> .....	129
<b>Fig. 5.7</b> <i>Influence de la densité des dislocations dans le processus d'endommagement par ouverture des joints de grains pour des grains de taille 200 nm</i> .....	130
<b>Fig. 5.8</b> <i>Mécanismes d'endommagement comparés: ouverture et glissement avec la réponse non endommagée.</i> .....	133
<b>Fig. 5.9</b> <i>Réponse mécanique avec endommagement par décohesion, [Needleman,1990].</i> .....	134
<b>Fig. 5.10</b> <i>Endommagement du nickel de taille 20 nm pour différentes vitesses de sollicitations, Wei et al., [2006]</i> .....	134
<b>Fig. 5.11</b> <i>Endommagement du nickel pour différentes vitesses de sollicitations : taille moyenne des grains 20 nm, [Wei et al., 2006]</i> .....	135
<b>Fig. 7.12</b> <i>Typique <math>\sigma</math> vs. <math>\epsilon</math> plots for AR material at RT, 473 K, 573 K with <math>2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}</math> and <math>5 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}</math> Sun et al., [2008]</i> .....	135

# Liste des tables

<b>Tableau. 2.1</b> <i>Systèmes de glissement d'un matériau CF</i> .....	44
<b>Tableau. 2.2</b> <i>Systèmes de glissements des cristaux CFC : notations de Schmid et Boas</i> .....	45
<b>Tableau. 3.1</b> <i>Paramètres identifiés du modèle pour le Nickel</i> .....	71
<b>Tableau. 3.2</b> <i>Paramètres identifiés du modèle (Nickel) en grandes déformations pour la traction et la compression</i> .....	79
<b>Tableau. 3.3</b> <i>Figures de pôles inverses pour le model de Taylor, Sachs et VPSC à 100 % de déformation [M'Guil, 2006]</i> .....	80
<b>Tableau. 3.4</b> <i>Différentes figures de pôles inverses de notre modèle</i> .....	82
<b>Tableau. 3.5</b> <i>Evolution de la texture en fonction de la déformation macroscopique</i> .....	86
<b>Tableau. 4.1</b> <i>Différents coefficients du modèle de dynamique des dislocations</i> .....	93
<b>Tableau.4.2</b> <i>Paramètres de la première modélisation</i> .....	97
<b>Tableau. 4.3</b> <i>Différents coefficients du Ni, modèle 2 - effet taille grains</i> .....	100
<b>Tableau. 4.4</b> <i>Coefficients identifiés: modèle élastoplastique - effet taille de grains</i> .....	105
<b>Tableau. 5.1</b> <i>Coefficients identifiés : comportement cohésif</i> .....	127
<b>Tableau. 5.2</b> <i>Coefficients identifiés: modèle élastoplastique-effet de taille de grains et endommagement</i> .....	132

# Notations & abréviations

Abréviations	
VER	Volume <b>E</b> lémentaire <b>R</b> épresentatif
CFC	Cubique <b>F</b> ace <b>C</b> entrée
VPSC	<b>V</b> isco <b>P</b> lastic <b>S</b> elf- <b>C</b> onsistent
UFG	<b>U</b> ltra <b>F</b> ined <b>G</b> rains
NC	<b>N</b> ano <b>C</b> rystals
MC	<b>M</b> icro <b>C</b> rystals
HIP	<b>H</b> ot <b>I</b> sostatic <b>P</b> ressing
CIP	<b>C</b> old <b>I</b> sostatic <b>P</b> ressing
SPS	<b>S</b> park <b>P</b> lasma <b>S</b> intering
DRX	<b>D</b> iffraction des <b>R</b> ayons <b>X</b>
MET	<b>M</b> icroscope <b>E</b> lectronique en <b>T</b> ransmission
MEB	<b>M</b> icroscope <b>E</b> lectronique à <b>B</b> alayage
SPD	<b>S</b> evere <b>P</b> lastic <b>D</b> eformation
LSPM	<b>L</b> aboratoire des <b>S</b> ciences des <b>P</b> rocédés et des <b>M</b> atériaux
LISSMA	<b>L</b> aboratoire <b>d'</b> Ingénierie des <b>S</b> ystèmes <b>M</b> écaniques et des <b>M</b> atériaux
MIMIC	<b>M</b> éthodes en Ingénierie de <b>M</b> icrostructures multi-échelle

Notation tensorielle		
$a$	Scalaire	$a$
$\vec{a}$	Tenseur d'ordre 1	$a_i$
$\underline{a}$	Tenseur d'ordre 2	$a_{ij}$
$\underline{\underline{a}}$	Tenseur d'ordre 4	$A_{ijkl}$
$\underline{\delta}$	Tenseur unité d'ordre 2	$\delta_{ij}$
$\underline{\underline{\delta}}$	Tenseur unité d'ordre 4	$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$
$J$	Opérateur projection volumique du tenseur d'ordre 4	$J_{ijkl} = \frac{1}{3}(\delta_{ij}\delta_{kl})$

Opérations tensorielles	
$\cdot$	Produit scalaire
$\otimes$	Produit tensoriel
$\ \bullet\ $	Norme tensorielle
$:$	Produit contracté
$\otimes^s$	Produit tensoriel symétrique
$\text{tr}(\bullet)$	Trace tensorielle

Notation de différentes variables			
$\mu$	Module de cisaillement	$\alpha$	Coefficient de couplage élasto-plastique
$\eta_o$	Coefficient de viscosité	$s$	Système de glissement
$\underline{\underline{S}}$	Tenseur de contrainte déviatorique macroscopique	$\alpha_t$	Constante de Taylor
$\underline{\underline{\dot{S}}}$	Tenseur vitesse de contrainte déviatorique macroscopique calculée	$\rho$	Densité volumique
$\underline{\underline{\dot{S}'}}$	Tenseur vitesse contrainte déviatorique macroscopique imposée	$\rho_s$	Densité des dislocations (stockées)
$\underline{\underline{S}}^g$	Tenseur de contrainte déviatorique granulaire	$\psi$	Energie libre
$\underline{\underline{\dot{S}}}^g$	Tenseur vitesse de contrainte déviatorique granulaire	$\psi^g$	Energie libre granulaire
$\underline{\underline{\dot{E}}}$	Vitesse de déformation macroscopique	$H_{rs}$	Coefficients d'écroissage isotrope
$\underline{\underline{\dot{E}'}}$	Vitesse de déformation macroscopique imposée	$\underline{\underline{\Omega}}$	Rotation cristalline totale
$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^g$	Vitesse de déformation granulaire	$\underline{\underline{\Omega}}^p$	Rotation plastique cristalline
$\underline{\underline{\mathcal{S}}}^s$	Tenseur d'interaction d'ordre 4	$\underline{\underline{\Omega}}^e$	Rotation élastique cristalline
$\underline{\underline{\mathcal{S}}}^{'s}$	Tenseur d'interaction d'ordre 4	$\varphi_1$	Angle d'Euler 1
$\underline{\underline{C}}$	Tenseur d'ordre 4 des modules d'élasticité macroscopique	$\Phi$	Angle d'Euler (3)
$\underline{\underline{A}}$	Tenseur tangent macroscopique	$\varphi_2$	Angle d'Euler 2
$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^g$	Tenseur vitesse de contrainte granulaire	$P$	Matrice de passage
$\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}$	Tenseur vitesse de contrainte macroscopique	$k_a$	Coefficient d'annihilation des dislocations vis
$R_e$	Pourcentage d'erreur	$k_b$	Coefficient d'annihilation des dislocations vis
$\lambda$	Constante de Lamé	$k_f$	Coefficient de stockage de dislocation
$\lambda^g$	Constante de Lamé granulaire	$\beta_o$	Constante de déformation isotherme
$\mu^g$	Constante de Lamé granulaire	$\rho_m$	Densité des dislocations mobiles
$\underline{\underline{\dot{E}}}_e$	Tenseur vitesse de déformation élastique macroscopique	$\eta$	Coefficient d'activation thermique
$\underline{\underline{\dot{E}}}_{in}$	Tenseur vitesse de déformation inélastique macroscopique	$D_{gb}$	Coefficient de diffusion thermique
$k_b$	Constante de Boltzmann	$\sigma_{co}^g$	Contrainte cohésive granulaire
$\gamma$	Glissement	$\gamma_n$	Paramètre cohésif (sans dimension)
$N_g$	Nombre de grains ( $100 < N_g < 400$ )	$N_s$	Nombre de systèmes de glissement ( $N_s=12$ )

# Résumé

Depuis quelques décennies, l'élaboration et l'étude des propriétés physiques et mécaniques des microstructures UFG et NC se sont fortement développées. L'intérêt croissant suscité par ces matériaux provient des comportements nouveaux qu'ils présentent et qui ouvrent des perspectives prometteuses d'applications dans divers domaines des sciences et d'ingénieries. Des secteurs d'activité à forte valeur ajoutée et aux enjeux économiques importants tels que la microélectronique, les télécommunications, l'aéronautique, l'énergie et l'armement s'y intéressent. En mécanique, l'intérêt porté à ces microstructures réside dans la possibilité de produire des matériaux ayant à la fois une résistance mécanique et une ductilité élevées. Cependant, ces microstructures ont montré un faible taux d'érouissage quoiqu'ayant une résistance mécanique élevée. Des mécanismes de déformation nouveaux sont soupçonnés être à l'origine de ce phénomène notamment des mécanismes de déformation aux joints de grains conduisant dans certains cas à une inversion de la loi de Hall-Petch et à un endommagement et/ou rupture précoce. Expérimentalement, des méthodes visant à améliorer le taux d'érouissage tout en garantissant une résistance mécanique élevée existent et sont de plus en plus nombreuses. De même, des outils numériques de simulation ont permis d'explorer certains phénomènes encore inaccessibles par l'expérience. C'est dans cette optique qu'un modèle micromécanique capable de suivre l'évolution de la texture cristallographique, de caractériser l'influence de la microstructure sur la contrainte d'écoulement et l'endommagement, est proposé dans ce travail.

*Mots clés: Modélisation micromécanique, Homogénéisation, Endommagement, Plasticité cristalline, Décohésion, Grandes déformations, Grains ultrafins et nanocristallins.*

# Abstract

Since decades, the study of mechanical and physical properties of UFG and NC microstructures has considerably increased as well as processing techniques. The growing interest in these materials comes from new behaviors encountered with wide range of applications perspectives in many scientific and technologic engineering fields, with high added value and important economic issues such as microelectronics, telecommunications, aeronautics, energy and army. In mechanics, the growing interest resides in both the possibility of processing microstructures with high mechanical strength and high ductility. However, these last microstructures have shown a very low strain hardening capacity although they were observed to have a high mechanical strength. New deformation mechanisms are suspected to induce these behaviors namely grain size deformation mechanisms which cause Hall-Petch strain profile inversion and/or early damage. Nowadays, there are many techniques to process UFG and NC microstructures with both high mechanical strength and improved strain hardening capacities. Similarly, simulation numerical tools have helped to understand some phenomenon still not accessible via experiments. Boring in mind this last aspect, a micromechanics modeling was proposed in this work to characterize microstructure influence on yield stress and damage and to study the crystalline texture evolution.

*Keywords: Micromechanics modeling, Homogenization, Damage, Crystals plasticity, Debonding, Large deformations, Ultrafined grains, Nanocrystals.*

# Chapitre I : Introduction

---

**I.1 Motivations** .....18  
**I.2 Objectifs** .....18  
**I.3 Plan de l'étude** .....21

## **I.1 -- Motivations**

Les récentes études en sciences des matériaux polycristallins UFG (Ultra Fine Grains) et NC (Nano Crystalline) montrent que leurs déformations semblent résulter de la compétition entre deux mécanismes : les mécanismes liés à l'activité des dislocations et les mécanismes liés aux phénomènes d'endommagement aux joints de grains [Ainfantis, 2009]. Différents trajets de sollicitations à différentes vitesses de déformation pour une gamme de températures permettent de caractériser le comportement d'un matériau et la mise en évidence de la contribution relative de chacun de ces mécanismes en fonction des conditions expérimentales. Afin d'élucider les mécanismes en jeu, souvent ces tests sont accompagnés d'observations post-mortem en microscopie électronique à balayage (MEB) ou en transmission (MET) et en diffraction des rayons X (DRX). Les résultats obtenus expérimentalement sur les propriétés de ces matériaux permettent de développer des modèles numériques pouvant servir à décrire et à prédire le comportement macroscopique de ces derniers (allure des courbes, niveaux de contrainte, type de rupture). Ils peuvent jouer aussi le rôle de paramètres d'entrées aux calculs numériques.

## **I.2 Objectifs**

Dans notre cas, un modèle micromécanique a été développé afin de caractériser le comportement élasto-plastique de ces matériaux et d'en prédire l'endommagement. Ce modèle a été initialement développé en petites déformations puis modifié de telle sorte qu'il soit capable de prendre en compte l'aspect grandes déformations (évolution de la texture cristallographique). Compte tenu des observations physiques mettant en lumière deux écrouissages dans ces matériaux à savoir l'écrouissage isotrope et l'écrouissage cinématique, les comportements élastique et visco-plastique ont constitué le principal enjeu du développement de ce modèle qui a pour but surtout de reproduire l'allure des courbes de déformation sous sollicitation uniaxiale (traction, compression) puis d'étudier l'influence de différents paramètres du modèle sur le comportement mécanique. La connaissance de l'état du champ de contrainte ou de déformation a donné lieu à plusieurs modèles numériques caractéristiques du comportement plastique ou viscoplastique. Dans notre étude, le comportement élastique a été pris en compte, de même nous considérons la déformation plastique incompressible. L'objectif de la théorie de plasticité polycristalline est de trouver les relations entre la contrainte (ou déformation) macroscopique et la contrainte (ou déformation)

microscopique. La première étude signalée dans ce domaine avait été réalisée par Sachs [1928] puis par Taylor [1938]. Sachs avait présumé que la contrainte locale (granulaire) est toujours égale à la contrainte macroscopique. Dans ce cas, la condition d'équilibre au travers des joints de grains est ainsi satisfaite, puisque ce modèle néglige la variation des déformations d'un grain à l'autre, ainsi, la condition de compatibilité entre grains est violée. D'après Taylor, tous les grains ont le même état de déformation dans un polycristal, autrement dit, les grains doivent s'accommoder de la même déformation plastique qui est égale à la déformation plastique macroscopique. Lin [1957] a modifié le modèle de Taylor en supposant l'uniformité de la déformation totale. Par conséquent, il a autorisé une fluctuation de la déformation plastique. Contrairement au modèle de Sachs, dans le modèle de Taylor, la condition de compatibilité est respectée et pas celle de l'équilibre au travers des joints de grains. Afin de satisfaire ces deux conditions en même temps et de décrire l'hétérogénéité intergranulaire en petites déformations, Kröner [1961] a proposé un modèle autocohérent à partir de la solution d'Eshelby [1975] du problème de l'inclusion uniformément plastifiée dans une matrice élastique isotrope infinie uniformément chargée à l'infini. Ce modèle a été étendu par Budianski et Wu [1962]. Ce dernier est basé sur la solution d'une inclusion sphérique (grain) noyée dans une matrice (agrégat) élastique isotrope. Ce modèle néglige les interactions plastiques entre les grains et leur matrice. Il est important de noter que le schéma auto-cohérent a été le cadre de base d'intérêt positivement évolutif, dans le domaine de la modélisation du polycristal. Certains auteurs ont proposé des modèles plus adaptés dans cette approche [Abdul-Latif et al., 1998, 2002; Abdul-Latif, 2004, Abdul-Latif et Radi, 2010 ; Berbenni et al., 2004; Berbenni et al., 2007; Berbenni et al., 2008; Berveiller & Zaoui, 1979; Cailletaud, 1987; Cailletaud and Sai, 2008; Evrard et al., 2008; Hutchinson, 1970; Iwakuma & Nemat-Nasser, 1984; Kouddane et al., 1993; Lebensohn et Tomé, 1993; Lebensohn et al., 2007 ; Lipinski et al., 1990, 1992; Mercier et Molinari, 2009 ; Molinari et al., 1987 ; Molinari et al., 1997; Nemat-Nasser, 1984; Nemat-Nasser & Obata, 1986; Nicaise, 2009 ; Pilvin, 1990; Rougier et al., 1994; Schmitt et al., 1997 ; Weng, 1982] car, ces derniers tiennent compte des hétérogénéités de la contrainte locale. On peut donc accéder au comportement global du matériau en faisant de l'homogénéisation c'est-à-dire en faisant un calcul moyen basé sur la réponse mécanique de chaque monocristal. Dans ce travail de thèse, c'est cette dernière approche qui a été retenue à cause du caractère polycristallin des matériaux à étudier.

Expérimentalement, les procédés d'élaboration HIP ou SPS ou encore l'électrodéposition donnent des matériaux avec une texture initiale aléatoire. A noter que le

procédé SPD (Severe Plastic Deformation) peut induire une texture initiale, ainsi qu'une forte densité des dislocations. Afin d'inclure dans le modèle une contrainte caractéristique du comportement mécanique aux joints de grains, s'agissant principalement des mécanismes d'endommagement, ce joint de grains a été assimilé à une interface cohésive [Rice et al, 1992] d'épaisseur relativement petite, donc négligeable. Nous avons considéré ensuite qu'hormis le caractère cohésif, la forme géométrique du joint de grains ainsi que son épaisseur n'ont pas d'effet fondamental sur le comportement mécanique (ceci n'est pas toutefois vrai dans la pratique). La déformation plastique est supposée homogène aux joints de grains. Cette dernière hypothèse est néanmoins discutable, car plusieurs facteurs expérimentaux la contredisent. Elle tient plus à un besoin de conformité théorique qu'à une réalité physique. En outre, l'influence de la taille de grains sur la réponse macroscopique a été introduite afin de prendre en compte des nombreuses observations expérimentales liées à celle-ci [Meyers, 2006 ; Saada et Dirras, 2009]. L'endommagement des matériaux UFG et NC reste un phénomène complexe et difficile à modéliser en raison du nombre élevé des mécanismes impliqués. Il a été introduit dans ce travail en tenant compte des seuls mécanismes expérimentalement identifiés comme mécanismes responsables de la décohésion (ouverture, glissement).

Ce travail de thèse s'est effectué dans le cadre du volet modélisation d'un projet de l'Agence Nationale pour la Recherche sous le numéro ANR-09-BLAN-0010, « MIMIC ». Le projet est piloté par le Pr Guy DIRRAS (LSPM, Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux, université Paris 13), le consortium est constitué outre du LSPM, de deux autres partenaires : le CEMES à Toulouse et LISMMA (Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes Mécaniques et des Matériaux, Supméca).

L'essentiel du travail théorique et numérique s'est déroulé au sein du laboratoire LISMMA via son unité de recherche (L3M) localisée à l'IUT de Tremblay en France. Rappelons que le LSPM dispose des outils d'élaboration, d'analyse et de caractérisation des matériaux concernés dans cette étude. Les équipements dédiés à l'étude des microstructures dont dispose le LSPM seront rappelés au chapitre relatif aux microstructures élaborées dans le cadre du projet MIMIC. La partie numérique représentant l'essentiel de ce travail de thèse a été développé à la fois au LSPM sous la direction du Pr Ramtani et à l'IUT de Tremblay en France sous la direction du Pr Abdul-Latif qui dispose des outils de calculs appropriés.

### I.3 – Plan de l'étude

La suite du travail sera organisée en six Chapitres. Le Chapitre II est consacré à l'étude des matériaux polycristallins (cfc de préférence). On y abordera la problématique de la taille des grains dans les matériaux UFG et NC, les techniques d'élaboration y compris leurs avantages et leurs inconvénients, les propriétés mécaniques, les mécanismes de déformation et d'endommagement. Dans les années 60, Hall [1952] et Petch [1954] avaient établi le lien direct entre résistance mécanique et taille des grains dans les aciers. Ils démontraient dans leurs travaux que la résistance mécanique d'un acier doux augmentait inversement à la taille des grains. L'équation traduisant ce phénomène s'écrit :

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{K}{\sqrt{d}} \quad (1.1)$$

$\sigma_y$  est la contrainte d'écoulement du polycristal,  $\sigma_0$  la contrainte de frottement ou contrainte du monocristal,  $K$  la constante de Hall-Petch et  $d$  la taille moyenne des grains.

Cependant, une violation de cette loi a depuis été reportée, lorsqu'on s'intéresse à des tailles de grains de plus en plus faibles [Kumar et al., 2003]. Le modèle de Hall-Petch s'avère ainsi insuffisant pour reproduire des comportements pour des tailles moyennes de grains en dessous d'une dizaine de nanomètres. En effet, en dessous de cette taille moyenne de grains, le comportement mécanique semble être dominé par le comportement des joints de grains en forte proportion : nucléation et émission des dislocations partielles aux joints des grains, maclage mécanique, endommagement inter granulaire, diffusion atomique. Certains de ces phénomènes peuvent ainsi conduire à l'inversion de la loi de Hall-Petch.

Nous rappellerons quelques fondamentaux sur l'élasticité et la plasticité cristalline. Nous citerons quelques modèles de plasticité cristalline [Sachs, 1928 ; Taylor, 1938] et des modèles micromécaniques incluant entre autres la plasticité, la viscoplasticité. Ces derniers étant les principaux comportements mécaniques observés dans les matériaux UFG et NC en dehors de tout endommagement.

Le Chapitre III abordera la question des grandes déformations et les aspects liés au modèle micromécanique. Un aperçu plus ou moins détaillé des différentes approches existant dans la littérature sera proposé afin de donner plus de visibilité sur la démarche choisie pour prendre en compte l'évolution de la texture cristallographique [Molinari et al., 1987 ; L. Anand et al.,

1955]. Une description sur les procédures adoptées pour introduire le concept de grandes déformations sera proposée et discutée par la suite.

L'étude des microstructures demande soit prise en compte quel que soit le développement, l'influence de la taille des grains sur la contrainte d'écoulement. La loi de Hall-Petch initialement introduite dans les aciers n'est plus représentative d'un matériau UFG à cause des nouveaux mécanismes qui apparaissent. Plusieurs travaux de la littérature ont déjà tenté d'y apporter des réponses [Kim et al., 2004 ; Malygin, 2007]. Un bref rappel sur ces deux derniers travaux sera présenté tout en évoquant aussi les deux modèles proposés dans le cadre des travaux de cette thèse sur l'influence de la taille sur la réponse mécanique d'un matériau UFG et/ou (NC). La dynamique des dislocations permettra de préciser en amont le rôle de l'activité des dislocations dans le processus de déformation plastique des matériaux UFG (NC). On étudiera entre autres la variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique et sa variation en fonction de la microstructure. Cette dernière étude sera faite dans le chapitre IV

L'endommagement des matériaux UFG et/ou (NC) reste un phénomène complexe en termes à la fois des phénomènes physiques associés et des difficultés à en localiser les points de nucléation. Des expériences menées par Cao [Cao et al., 2007] montrent qu'il est surtout dû à la présence des microfissures dans le matériau. Ces microfissures seraient donc des points de nucléation de l'endommagement lors des glissements cristallins induits par la rotation des grains et conduisant soit à l'ouverture des joints de grains, soit au phénomène de cisaillement devenant ainsi des mécanismes dominants. Dans ce chapitre V, nous parlerons du problème de l'endommagement de façon générale puis, des modèles cohésifs parmi lesquels les modèles de Needleman [1990]. En outre, un nouveau modèle d'endommagement est proposé après un certain nombre d'hypothèses motivées par la nécessité d'inclure dans l'étude les aspects liés aux structures élaborées dont entre autres, la taille des grains et l'activité des dislocations. Enfin, le chapitre VI relatif aux discussions générales et perspectives est consacré aux différentes problématiques (techniques d'élaboration des matériaux UFG et NC, mécanismes de déformation et d'endommagement ; problèmes liés au choix du modèle micromécanique ; processus d'identification numérique, développements numériques,..) liées au choix du modèle micromécanique, à l'influence des microstructures sur le comportement mécanique et au rôle non négligeable de certains paramètres du modèle. On y précisera aussi les perspectives et les points saillants au niveau desquels il faudra les envisager et, éventuellement les limites au-delà desquelles le modèle est censé ne plus être efficace.

Un bilan des différentes problématiques abordées dans ce travail sera fait et, à chaque fois, l'on évaluera le degré de réponses apportées, s'agissant principalement des missions au niveau desquelles ce travail était circonscrit notamment la question de la modélisation multiéchelle du comportement élasto-viscoplastique des matériaux UFG (NC) en grandes déformations et de son couplage aux processus d'endommagement par décohésion.

# Chapitre II : Etude bibliographique

---

<b>II. 1. Microstructures</b> .....	25
II. 1. 1. – <i>Problématique et contexte général des matériaux à grains ultrafins</i> .....	25
II. 1. 2 – <i>Méthodes d’élaboration</i> .....	26
II. 1. 3 – <i>Mécanismes de déformation et d’endommagement</i> .....	28
II. 1. 3. 1 : <i>Mécanismes de déformations</i> .....	28
II. 1. 3. 2 : <i>Mécanismes d’endommagement dans les matériaux UFG/NC</i> .....	32
II. 1. 4 - <i>Amélioration de la ductilité</i> .....	32
<b>II. 2. Elasticité et Plasticité cristalline</b> .....	39
II. 2. 1 <i>La théorie de la dislocation</i> .....	42
II. 2. 2 – <i>Déformation plastique des monocristaux</i> .....	43
II. 2. 2. 1. – <i>Glissement dans les monocristaux</i> .....	43
II. 2. 3 – <i>Modèles de plasticité du polycristal</i> .....	46
II. 2. 3. 1 – <i>Modèle de Sachs</i> .....	46
II. 2. 3. 2 – <i>Modèle de Taylor</i> .....	47
II. 2. 3. 3 – <i>Modèle auto-cohérent</i> .....	47
<b>II. 3. Quelques modèles micromécaniques auto-cohérents</b> .....	48
II. 3. 1. – <i>Modèle de Berveiller et Zaoui</i> .....	48
II. 3. 2. – <i>Modèle viscoplastique auto-cohérent (VPSC)</i> .....	49

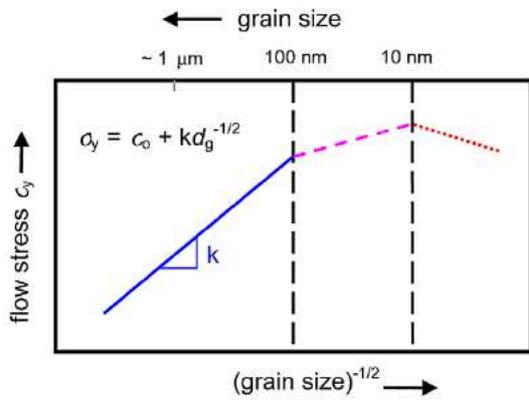
## **II. 1. Microstructures**

### **II. 1. 1. Problématique et contexte général des matériaux à grains ultrafins**

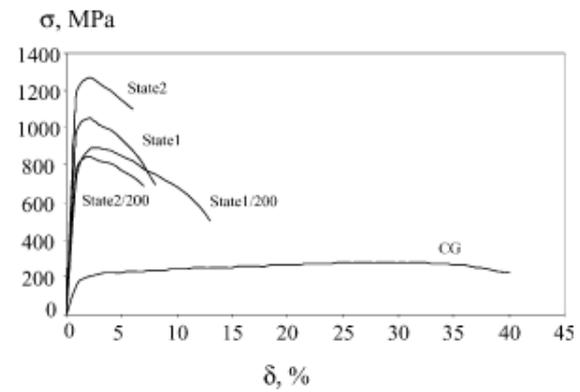
Depuis les premiers travaux de Gleiter [1983], les matériaux à grains ultrafins (UFG) et les matériaux nanocristallins (NC) doivent leur renommée à leur gamme de propriétés très variées couvrant presque l'ensemble des domaines des sciences appliquées. En mécanique, cette renommée est surtout liée aux propriétés de plus en plus nombreuses, susceptibles des grandes applications scientifiques et technologiques innovantes dans les domaines de la construction mécanique aussi bien civile que militaire, en énergie, en aéronautique, dans les sciences de l'espace [Krasilnikov et al., 2005], en optique et magnétisme [Hamzaoui et al., 2003], ... Ces matériaux peuvent être rangés en deux groupes suivant leur taille de grains. Mais, cette classification est légèrement variable suivant les auteurs. En effet, ils seront dits UFG si leur taille des grains est comprise entre 100 et 1000 nanomètres [Kumar et al., 2003] ou entre 250 et 1000 nanomètres [Meyers et al., 2006]. Ils seront dits nanocristallins dans les limites inférieures à celles-ci. D'autres auteurs ont également suggéré que le domaine UFG pouvait s'étendre jusqu'à 10nm dans sa borne inférieure [Conrad, 2003 ; Cheng, 2003]. En plus d'excellentes propriétés physico-chimiques, du point de vue des propriétés mécaniques, objectif de cette étude, plusieurs raisons justifient notre intérêt à considérer l'aspect taille de grains. En effet, d'après les travaux de Hall [1951] et Petch [1955], la limite élastique des matériaux polycristallins augmente avec la diminution de la taille des grains. Cependant, il est généralement observé que cette augmentation de la contrainte d'écoulement s'accompagne d'une absence de ductilité « utile » d'autant plus importante que la taille des grains est faible [Cheng et al, 2003]. Les matériaux UFG sont en outre caractérisés par un faible taux d'écrouissage, une forte résistance en fatigue [Ercan et al., 2010], une inversion de la loi de Hall-Petch à certaines valeurs de taille de grains notamment en dessous de 10 nm, une grande sensibilité à la porosité, une asymétrie traction/compression, la localisation des bandes de cisaillement [Cao et al., 2007], augmentation de la sensibilité à la vitesse de déformation due à la diminution du volume d'activation dans les matériaux cfc par exemple [Wang et al., 2006 ; Champion et al. 2013], une forte densité des dislocations et une fraction volumique élevée des joints des grains notamment pour les tailles de grains en dessous de 10 nm (Fig. 2. 1).

## II. 1. 2 – Méthodes d’élaboration.

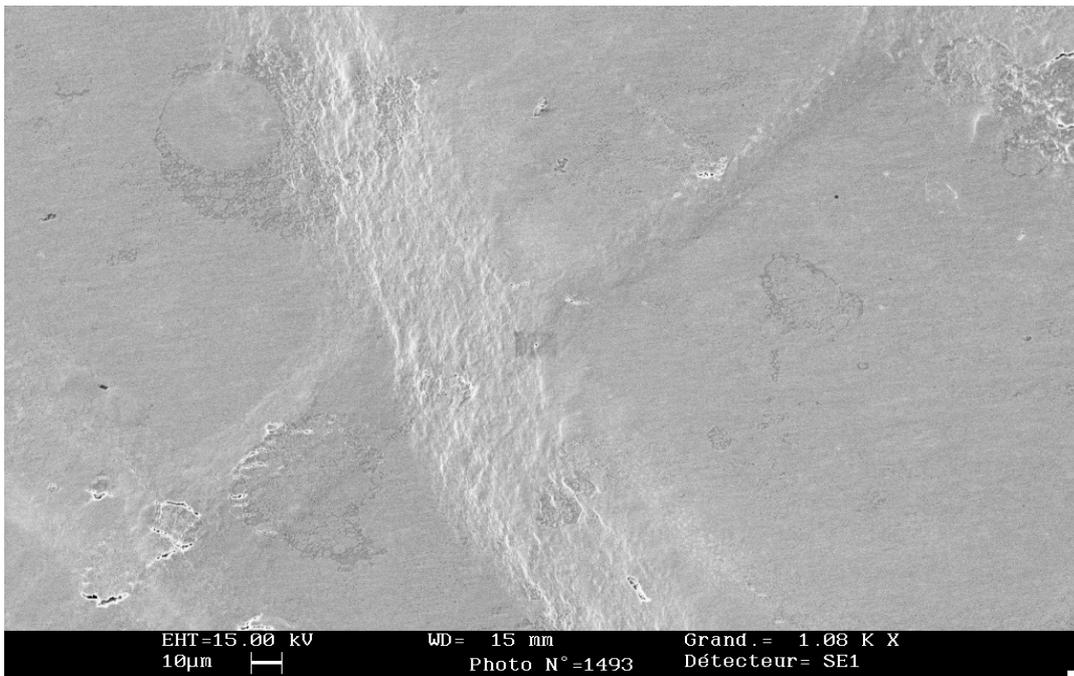
Autant, les propriétés de ces matériaux sont nombreuses, autant plusieurs techniques permettent aujourd’hui de les élaborer. Cette élaboration se fait suivant les approches « bottom up » et « top down ». Ces dernières peuvent être rangées en quatre groupes [Kumar et al., 2003] : la mécano-synthèse (ou ball-milling en anglais) et la compaction [Koch, 1997 ; Zhou et al., 2003; Lee and al., 2004 ; Guang et al., 2009], la déformation plastique sévère [Valiev et al., 2000], la consolidation et condensation des particules en phase gazeuse [Gleiter et al., 1989] et l’électrodéposition [Erb et al., 1995].



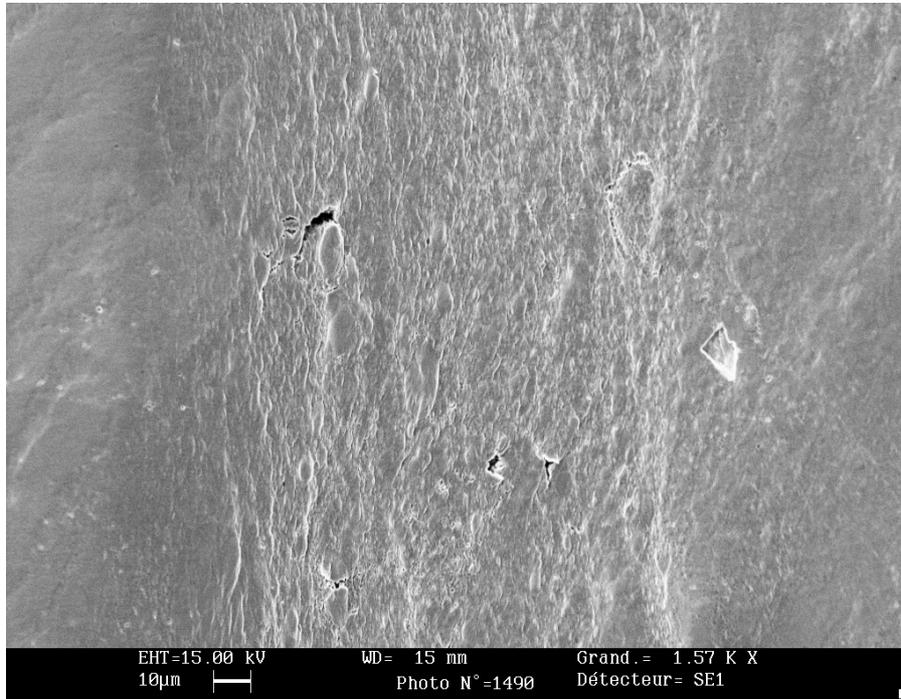
(a)



(b)



(c)

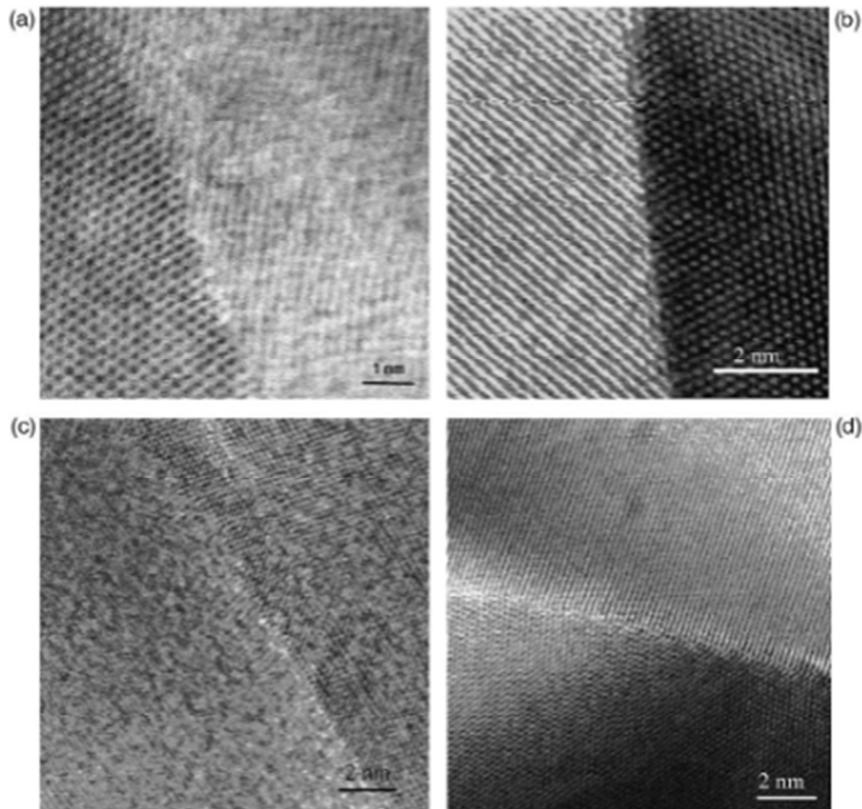


(d)

**Fig. 2. 1 :** (a) Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille des grains dans les matériaux MC, UFG, NC et leurs alliages [Kumar et al., 2003] ; (b) observation de grande résistance mécanique et faible ductilité dans un échantillon de Nickel nanométrique (120 – 600 nm) (Krasilnikov et al., 2005) ; (c-d) observation des bandes de cisaillement dans un échantillon de Fe [Cao et al., 2007]

Comme notre étude porte essentiellement sur la modélisation du comportement mécanique, nous ne décrivons pas en détail les procédés d'élaboration. Nous rappelons brièvement la mécano-synthèse. La métallurgie des poudres est le procédé d'élaboration principal utilisé dans le cadre du projet ANR-MIMIC. La mécano-synthèse et particulièrement le cryomilling est utilisée pour l'élaboration d'une quantité raisonnable des matériaux (UFG). La condensation à gaz inerte permet d'élaborer des matériaux (NC) tels que le cuivre (Cu) le nickel (Ni) et le plomb (Pb) dont, la taille des grains est dans la gamme de 5-50 nm, l'électrodéposition qui est une méthode chimique permettant l'élaboration des matériaux MC et NC denses, résistants (Fig. 2.2). Certaines méthodes d'élaboration peuvent

induire au sein du matériau des nano fissures pouvant influencer significativement ses propriétés mécaniques [Würschum et al., 1995; Torre et al., 2003].



**Fig. 2. 2 : Illustration de la présence de joints de grains dans : (a,b) Ni-NC élaboré par électrodéposition et (c,d) Cu-NC élaboré par condensation de gaz inerte, Kumar et al., [2003]**

Ces nano fissures et bien d'autres défauts d'élaboration peuvent rendre difficile une compréhension mécanique de leur comportement à cause de leurs effets nécessairement couplés tels que la nucléation précoce de la rupture. Plusieurs auteurs se sont intéressés à les étudier à partir des mécanismes de déformation aux joints de grains. Par rapport aux matériaux micro cristallins (MC) et les alliages, les matériaux (NC) contiennent une forte fraction volumique des joints. Ces joints de grains sont supposés jouer un rôle important dans les mécanismes de déformation sous-jacents. En effet, ils peuvent jouer le rôle de sources et/ou puits des dislocations. En outre, ils peuvent être des sites de mécanismes de glissement, entraînant au passage des phénomènes d'adoucissement [Swygenhoven et al., 2002].

## **II. 1. 3 Mécanismes de déformation et d'endommagement**

### **II. 1. 3. 1 Mécanismes de déformation**

Plusieurs mécanismes intra et extra granulaires peuvent expliquer les différents modes de déformation rencontrés dans les structures métalliques UFG et NC. L'accumulation des dislocations aux joints des grains est l'un des phénomènes les plus connus parce qu'il est responsable du durcissement décrit par la loi de Hall-Petch. Cependant, d'autres mécanismes additifs à ce dernier phénomène peuvent expliquer l'adoucissement de la contrainte d'écoulement lorsque la transition d'échelle de grains se fait à des ordres de plus en plus petites (5 – 15 nm). Dans la partie qui suit, on va tenter d'énumérer quelques mécanismes des déformations observés dans les matériaux UFG et NC. Pour décrire les mécanismes des déformations des matériaux UFG (Nano y compris), il faut commencer par délimiter les échelles de grandeurs de taille des grains. Car, ces mécanismes varient en fonction des échelles de la microstructure. La Fig. 2.3 permet de résumer les caractéristiques microstructurales de la déformation des matériaux UFG.

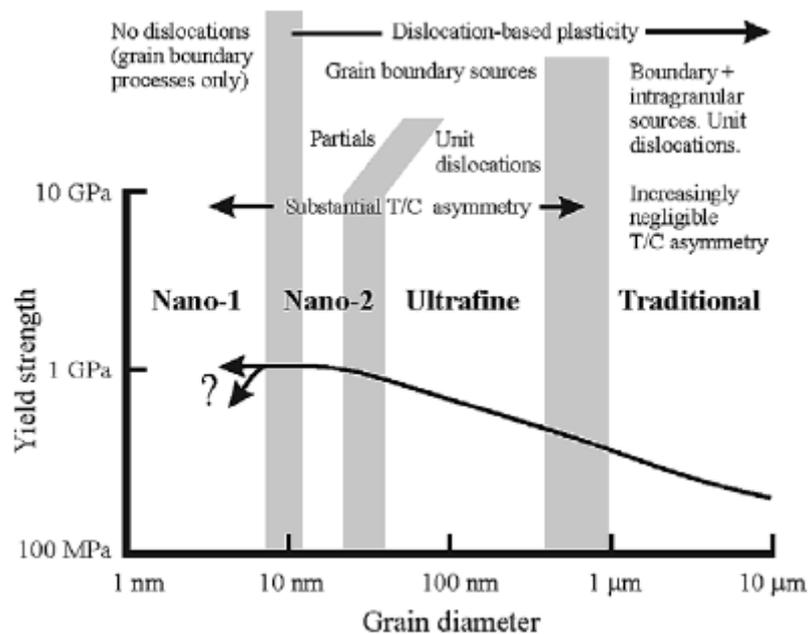


Fig. 2. 3 : Carte de mécanisme de déformation pour les métaux CFC, Cheng et al., [2003].

En particulier, les mécanismes de déformation des métaux CFC et UFG peuvent-être répartis en quatre régimes selon la taille des grains. En dessous d'une taille moyenne de 10 nm, les seuls mécanismes observables sont les mécanismes aux joints de grains tels que le glissement. Aucune activité des dislocations n'est détectée dans le matériau. Les simulations en dynamique moléculaire donne en effet une résistance mécanique en compression légèrement au-dessus de la résistance mécanique en traction. Pour une gamme de tailles de grains, approximativement entre 40 nm et 50 nm, on rentre dans le cadre d'une plasticité

classique induite par les dislocations avec en plus l'émission des dislocations partielles dans les matériaux CFC [Swygenhoven et al., 1999]. Il y a là, possibilité d'avoir des grains cisailés par les dislocations partielles de Shockley. Dans la phase des grains comprise entre 50 nm et 1000 nm, la déformation plastique est gouvernée par les dislocations entières dont les sources se trouvent au niveau des joints de grains. Au-delà de 1000 nm, on est dans le domaine des tailles de grains conventionnelles.

La déformation plastique est alors contrôlée par l'émission des dislocations aussi bien par des sources intra-granulaires qu'au niveau des joints de grains. Certains de ces mécanismes peuvent s'observer dans une étude parallèle menée par Hans Conrad, (2002) sur le cuivre (Fig. 2. 4), où l'on distingue 3 régimes caractéristiques au lieu des 4 mentionnés plus haut.

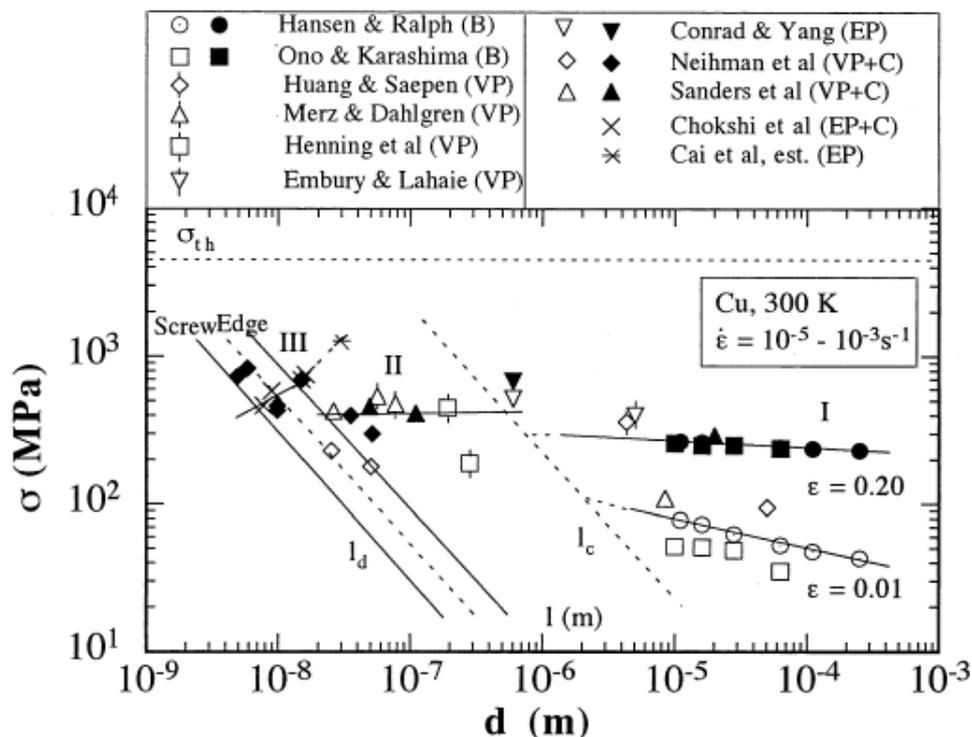
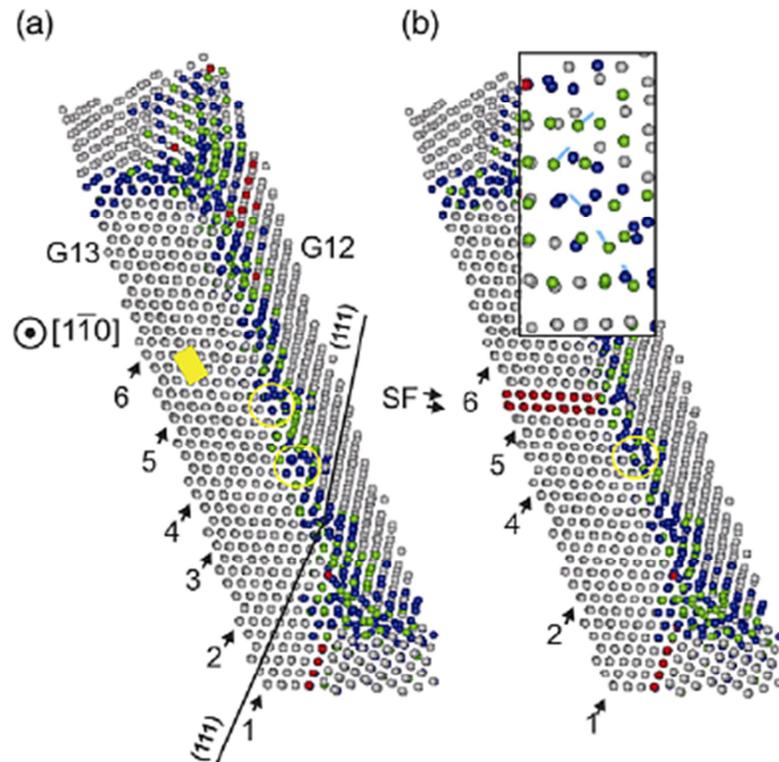


Fig. 2.4 – Contrainte d'écoulement du cuivre UFG et NC, Conrad [2003]

La Fig 2.5 représente la configuration atomique (simulation) d'une section des grains 12 et 13, dénotés G12 et G13 d'un échantillon de Nickel de taille 12 nm avant (a) et après (b) émission des dislocations partielles. Le joint de grains et les deux triples jonctions voisines sont représentés par les atomes bleu-vert, les mailles élémentaires de type hexagonal compact dans la faute d'empilement derrière la partielle sont représentés en rouge. Des mécanismes de maclage sont aussi observés dans les échantillons d'aluminium nanométriques (45 nm)

déformés en traction [Gray, 1988 ; Embury et al., 1994 ; Embury et al., 1994]. Des observations au microscope électronique en transmission indiquent que des sources des dislocations telles que les sources de Frank-Read présents dans les matériaux MC ne sont plus opérationnelles dans les métaux NC et que, les joints de grains deviennent potentiellement des sources et des puits des dislocations.



**Fig. 2. 5 : Coupe d'un joint de grains illustrant les mécanismes d'émission des dislocations partielles, Mishra et al. [2001]**

Ainsi, tout tend à montrer que contrairement aux matériaux MC, l'activité des dislocations est difficilement détectable dans les matériaux NC. Afin de proposer une liste plus ou moins exhaustive de ces différents mécanismes (taille de grains au-dessous de 10 nm), d'autres hypothèses ont été émises telles que le glissement au joint de grains, le fluage de Coble et la rotation des grains. Certains mécanismes moins visibles à température ambiante tels que la diffusion peuvent être cités dans certaines circonstances selon le matériau. Les mécanismes d'endommagement sont généralement liés aux phénomènes physiques observés aux joints de grains (diffusion, glissement, ouverture,...) [Youngdahl et al., 2001; Yamakov et al., 2002].

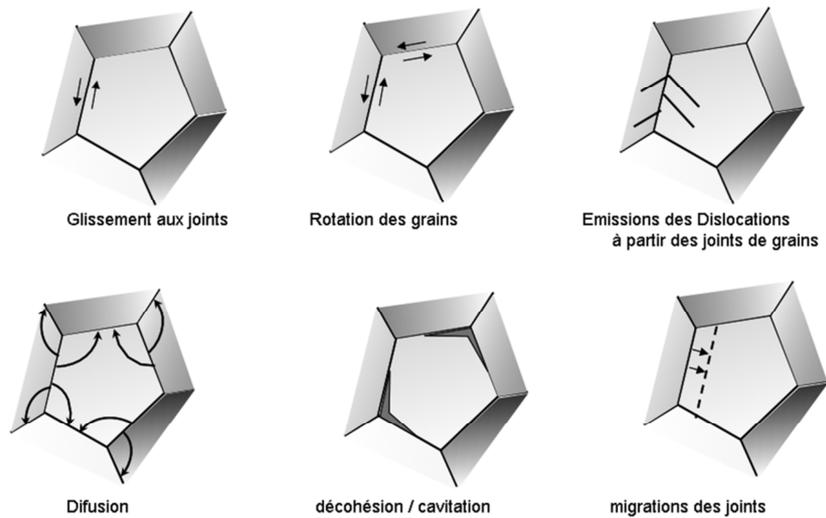
### **II. 1. 3. 2 : Mécanismes d'endommagement dans les matériaux UFG et NC.**

Les mécanismes gouvernant l'endommagement des matériaux UFG et NC sont autant nombreux que leur complexité nécessitant des études minutieuses sur la base des observations numériques ou expérimentales sinon les deux. On dénombre aujourd'hui autour d'une douzaine de mécanismes [Bieler et al., 2009] généralement concentrés aux joints de grains. Les causes sont liées à la fois aux méthodes d'élaboration et aux phénomènes physiques provoqués par les sollicitations mécaniques externes : la perte de ductilité en traction par exemple qui est liée à une baisse du taux d'érouissage dans ces matériaux. Parmi ces causes l'on peut citer : la présence des nano fissures induites dans le matériaux pendant l'élaboration ; l'activité des dislocations qui provoque la création des fissures aux joints de grains et triple-jonctions [Ovid'ko et al., 2012] ; la localisation de déformation dans la formation des bandes de cisaillement; le couplage de la plasticité induite par l'activité les dislocations et la formation et l'accroissement des fissures; la diffusion intra et extra granulaire ; la présence des bulles dans le cas des matériaux élaborés par électrodéposition. Tous ces mécanismes de déformation et les principales causes d'endommagement peuvent être regroupés schématiquement tel qu'indiqué sur la Fig. 2.6.

### **II. 1. 4 Amélioration de la ductilité.**

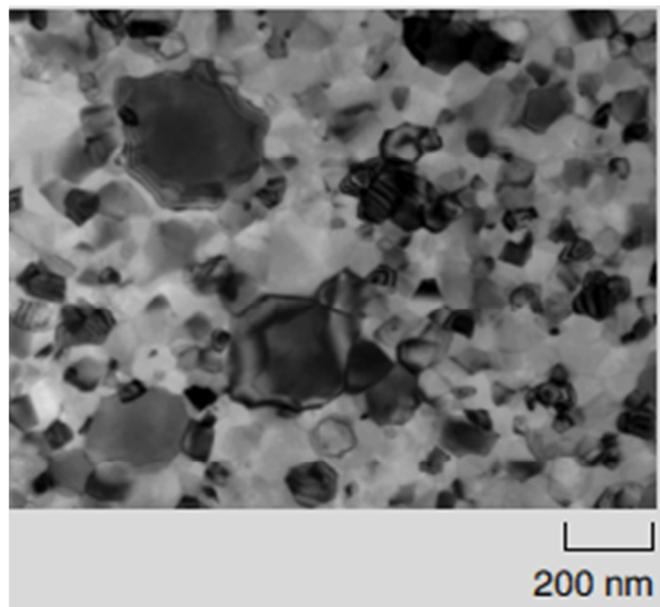
Les matériaux UFG et NC montrent une faible capacité à accommoder la déformation plastique. Ceci est dû principalement à l'instabilité de la déformation plastique en traction. Améliorer la ductilité dans ces matériaux implique que soit d'abord vaincue l'instabilité de la déformation plastique. Ma [2006], suggère 8 possibilités susceptibles d'atteindre cet objectif. La première consiste à élaborer des matériaux multi-échelle (MC-NC par exemple), par création d'une distribution bimodale de taille de grains (Fig. 2.7). L'avantage de cette méthode est l'obtention de microstructures à fort taux d'érouissage avec une déformation plastique uniforme. Toutefois, ceci s'accompagne d'une légère baisse de résistance mécanique. Cette démarche est également utilisée par [Billard, 2004 ; Bui, 2008 ; Dirras, 2010 ; Langlois, 2010 ; Dutel, 2013].

La deuxième méthode est l'élaboration des microstructures composites de deux ou plusieurs phases avec changement d'échelles et de propriétés (Fig. 2.8). Cette deuxième méthode a l'avantage de la production des matériaux avec une grande résistance mécanique du fait d'un grand nombre d'interfaces.



**Fig. 2.6 : Représentation schématique des principaux mécanismes de déformation et d'endommagement expérimentalement observés dans les matériaux NC et UFG [Dirras, 2008 ]**

Elle permet d'élèver le taux d'écroutissage par l'accumulation des dislocations dans les blocs de taille de l'ordre du micromètre, reconnu comme étant à l'origine d'une déformation plastique élevée. Une approche analogue a été développée par Fellah [Fellah, 2009] portant sur le cobalt nano structuré CFC/HCP.



**Fig. 2.7 : Des grains de taille bimodale d'aluminium déformés en traction, [Ma, 2006]**

La troisième méthode consiste en un blocage des dislocations par l'accroissement dans le matériau des macles nanométriques. Cela permet l'obtention de bonnes propriétés mécaniques là où les grains sont de taille nano métrique [Dao et al., 2007 ; Lu et al., 2012].

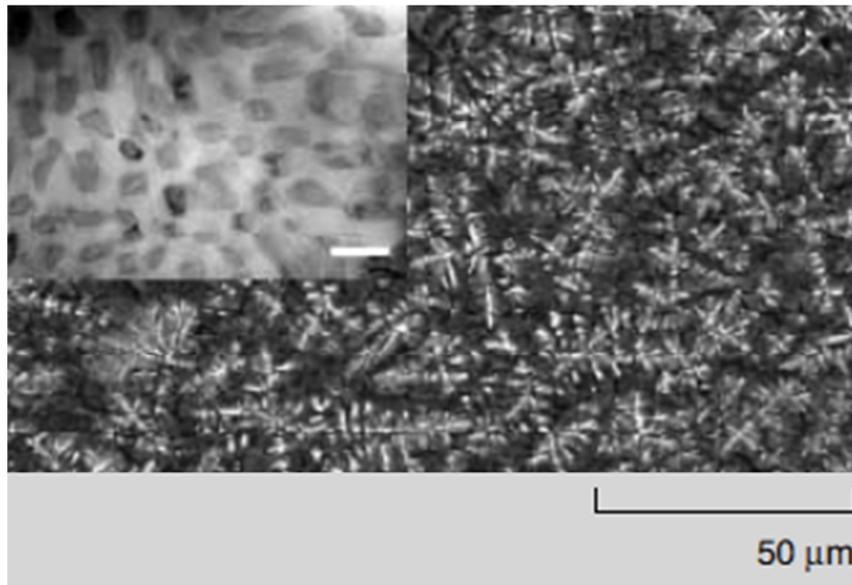
La quatrième méthode consiste à élaborer des microstructures à partir des dispersions des nanoparticules et des nano-précipités. Cette méthode a pour avantages entre autres, une grande résistance mécanique, un stockage significatif des dislocations et, un taux d'écroutissage élevé provoquant des déformations uniformes (Fig. 2.8).

La cinquième méthode consiste à élaborer des microstructures dont la plasticité est induite par une transformation chimique ou par maclage [Fellah et al., 2010]. Cette méthode est généralement utilisée dans les alliages et les matériaux conventionnels. Elle a pour avantages l'obtention d'une forte contrainte d'écoulement et une grande résistance mécanique.

La sixième méthode consiste à élaborer des microstructures par SPD à basse température, de façon à limiter les mécanismes de restauration dynamique, cause d'adoucissement.

La septième méthode est basée sur le critère de d'instabilité de Hart. Ce critère d'élaboration permet d'augmenter le taux d'écroutissage. Cette méthode permet d'élaborer des microstructures avec une grande sensibilité à la vitesse de déformation, une grande ductilité, une grande stabilité de la déformation en traction en grande déformation et la possibilité d'obtenir des microstructures avec une superplasticité (c'est par exemple le cas des microstructures de Al-Mg-Zr) [Ma et Mishra, 2005].

Enfin, étant donné que l'existence des défauts d'élaboration tels que les pores peut avoir un impact néfaste sur les propriétés mécaniques, la huitième méthode qui est la consolidation in situ s'attaque à ce problème. Elle consiste à élaborer des microstructures exemptes des défauts, notamment les pores. Cette méthode permet d'élaborer des microstructures avec une grande résistance mécanique, une grande ductilité et un fort taux d'écroutissage.

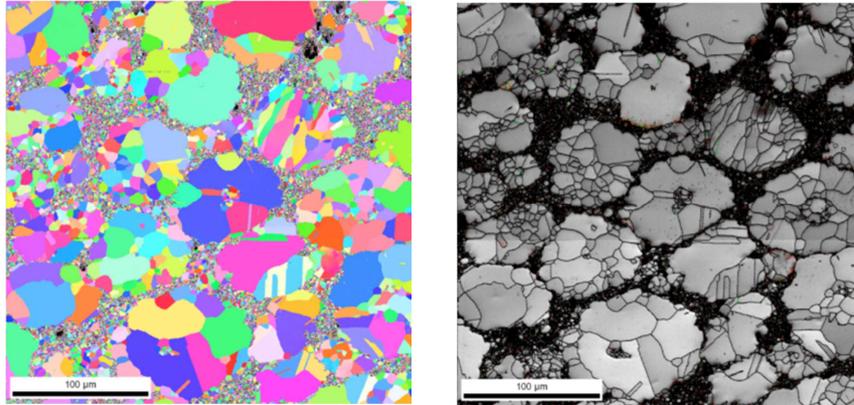


**Fig. 2.8 : Microstructure composite, [Ma, 2006]**

Toutes ces méthodes d'élaborations abordées dans le cadre de la thèse de [Dutel, 2012], financée dans le cadre du projet ANR « MIMIC » visent l'objectif principal de la mise en œuvre d'une méthodologie d'élaboration qui, in fine, permettra de concevoir des matériaux qui allient à la fois une bonne résistance mécanique et une ductilité « utile » acceptable. La principale méthode d'élaboration est basée sur la métallurgie des poudres parmi lesquelles on peut citer le SPS (Spark Plasma Sintering), le CIP (Cold Isostatic Pressing) et le HIP (Hot Isostatic Pressing).

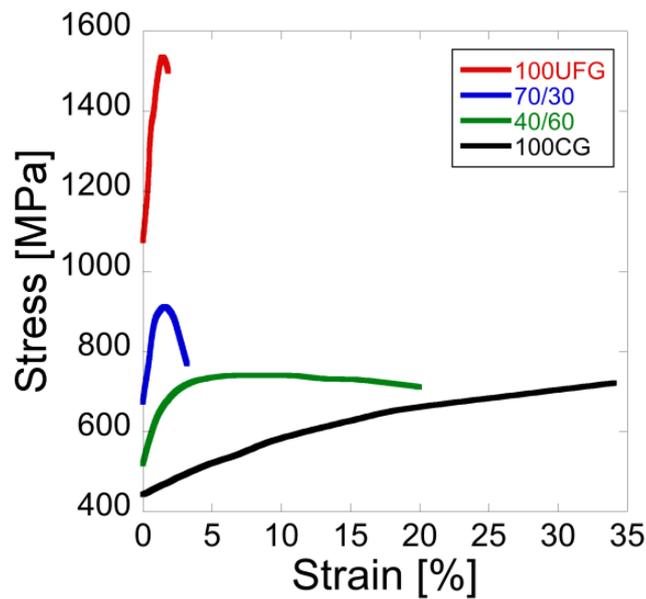
### **II. 1. 5 Microstructure du Nickel bimodal et propriétés mécaniques**

Le travail de thèse de Bui [2008], par exemple, fût consacré à la « *caractérisation mécanique des matériaux poly cristallins (Nickel) UFG élaborés par la technique de la métallurgie des poudres* ». Les nanopoudres de Nickel utilisées dans le projet proviennent généralement des sociétés *Argonide, Alfa easer, Tekna*. Ces poudres sont ensuite consolidées par SPS et/ou HIP et/ou CIP+SPS pour élaborer des matériaux massiques. Nous rappelons que, le CIP (Cleaning In Place) est une technique de nettoyage et de désinfection essentielle dans le traitement des matériaux. La problématique principale est bien évidemment la question de comment élaborer des microstructures UFG monomodales ou bimodales (UFG/MC) ayant une bonne résistance mécanique et une ductilité utile acceptable.



**Fig. 2. 9 : Microstructure de Nickel bimodal (poudres nano + conventionnelle), [Dirras, 2009 ; Bui, 2008]**

Rappelons que le Nickel monomodal UFG est caractérisé par une forte résistance mécanique et une très faible ductilité. L'idée de passer par une structure bimodale est donc de pouvoir améliorer la ductilité tout en maintenant une bonne résistance mécanique. Pour cela, des mélanges parfaitement contrôlés de particules nanométriques et micrométriques ont été réalisés et consolidés. Les matériaux massifs qui en résultent présentent une variabilité microstructurale comme illustré par la Fig. 2.9.



**Fig. 2.10 : Résistance mécanique pour différentes tailles de grains [Dutel, 2013]**

La Fig. 2.10 illustre le comportement mécanique d'une sélection de microstructures après un essai de compression quasi-statique à  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$ . On constate que la résistance

mécanique augmente à mesure que la fraction volumique des grains UFG augmente. En revanche, la ductilité en compression diminue avec la fraction volumique des grains UFG. L'érouissage est plus ou moins stabilisé pour l'échantillon 40 UFG 60 CG. Les mécanismes de déformation observés sont la plasticité classique due à l'émission des dislocations au niveau des joints de grains et l'émission des dislocations partielles. L'évolution de l'endommagement est observée sur la Fig. 2.11 ci-dessous. On peut noter clairement ici l'ouverture de la fissure par glissement des grains. En plus, la fissure est conscrite dans la matrice UFG alors que les inclusions monocristallines micrométriques dévient la fissure. Ainsi, pendant la déformation, la matrice UFG a un comportement plutôt fragile. Notons, comme l'a montré Billard [Billard, 2006], que les fissures peuvent être cependant émoussées par les CG.

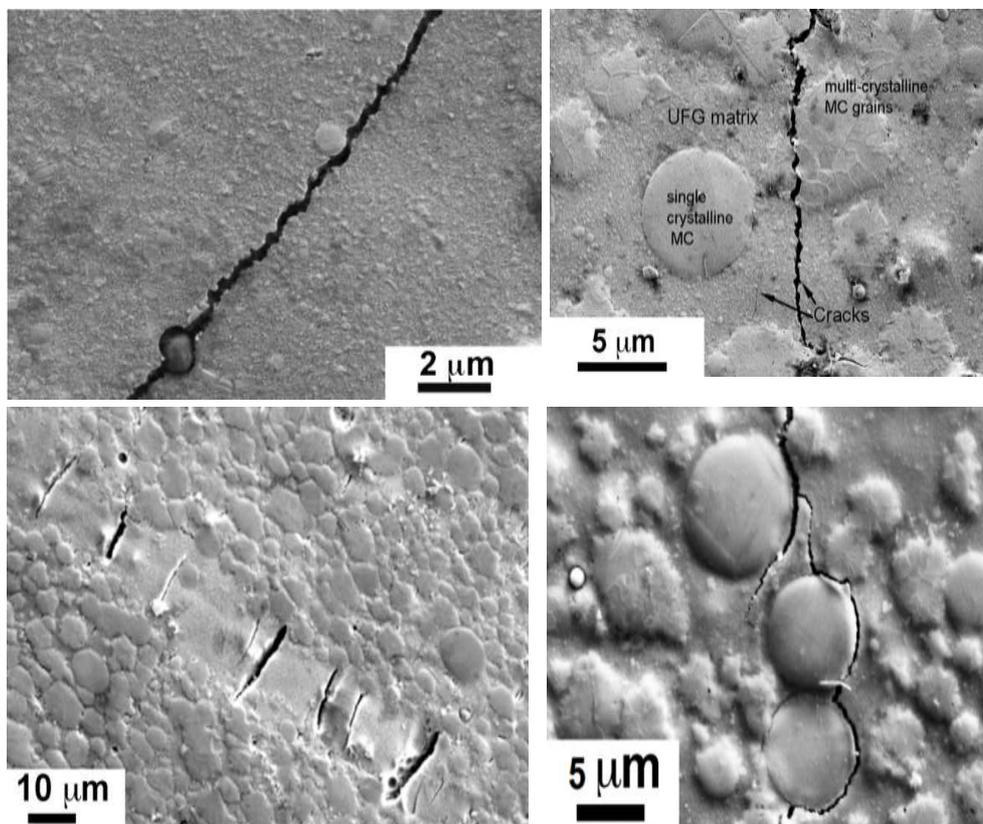
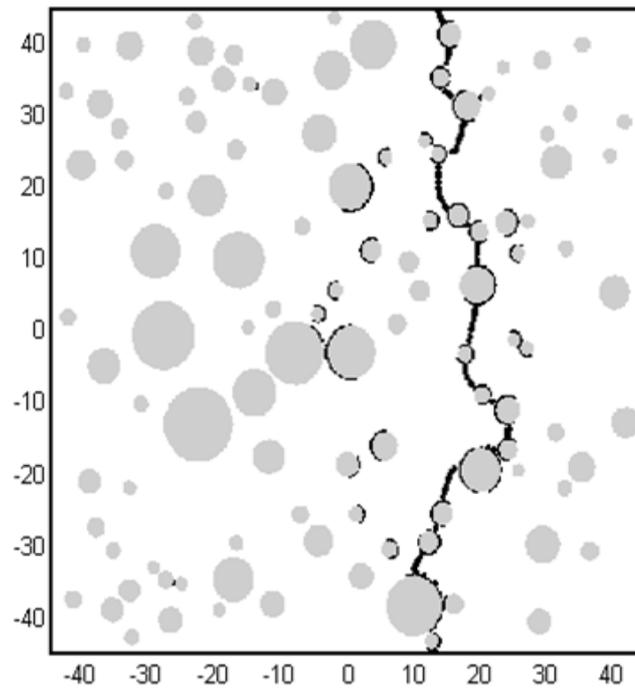


Fig. 2.11 : Evolution de l'endommagement [Dutel, 2013]

On note des similitudes intéressantes en termes de mode et de trajet de fissuration en comparant la Fig. 2.11 aux résultats numériques obtenus Fig. 2.12 par [Jia et al., 2012]. Cette simulation numérique avait pour objet l'étude de la fissuration des matériaux fragiles en utilisant la Transformée de Fourier Rapide.



**Fig. 2. 12 –Modèle de fissuration par endommagement, Jia et al., [2012]**

La déformation des matériaux à grains ultrafins semble résulter de la compétition entre les mécanismes liés à l’activité des dislocations et les mécanismes liés aux phénomènes d’endommagement par décohésion aux joints des grains. Des observations au microscope et la diffraction aux rayons X (DRX), ont permis d’élucider les micro mécanismes mis en jeu. L’intérêt porte plus particulièrement sur les interactions entre dislocations, entre dislocations et joints de grains et, à l’influence de la structure joints de grains. En outre, à cause des incompatibilités de la déformation due à la distribution des tailles de grains ou de phases de nature cristallines différentes, une attention particulière est portée aux problèmes d’interfaces. L’objectif est donc double : d’une part il s’agit de modéliser le comportement élasto-inélastique des matériaux UFG élaborés dans le cadre du projet MIMIC, d’autre part il s’agit de pousser cette modélisation en envisageant des tailles de grains plus faibles que celles atteintes expérimentalement. Cette interaction entre l’expérimental et la modélisation est de nature à permettre l’émergence de méthodologies pour le design de microstructures optimisées ayant des propriétés uniques. Il est clairement admis que l’élaboration de microstructures qui satisfassent à la fois aux conditions d’une forte résistance mécanique et d’une grande ductilité est un défi important au bout duquel se trouvent plusieurs applications technologiques et scientifiques.

## II. 2. 1. Elasticité et Plasticité cristalline

Le phénomène d'élasticité cristalline est connu depuis des temps reculés mais, sa définition en tant que science remonte au moyen âge [Timoshenko, 1953]. Il a été étudié dans le sens de la mécanique, la physique, la métallurgie et des mathématiques. On pense que cette science fut introduite par Leonard da Vinci (1452-1519) en étudiant la résistance des fils de fer. La version la plus certaine de ces affirmations se retrouve dans les travaux de Galilée (1564-1642) car, il est considéré être le père de la mécanique moderne. En effet, dans son ouvrage intitulé « Sciences nouvelles » l'on reconnaît à celui-ci d'avoir étudié la résistance des poutres en pierre.

L'un des pionniers de l'élasticité cristalline resté fameux dans l'histoire est l'anglais Hooke (1635 – 1704).

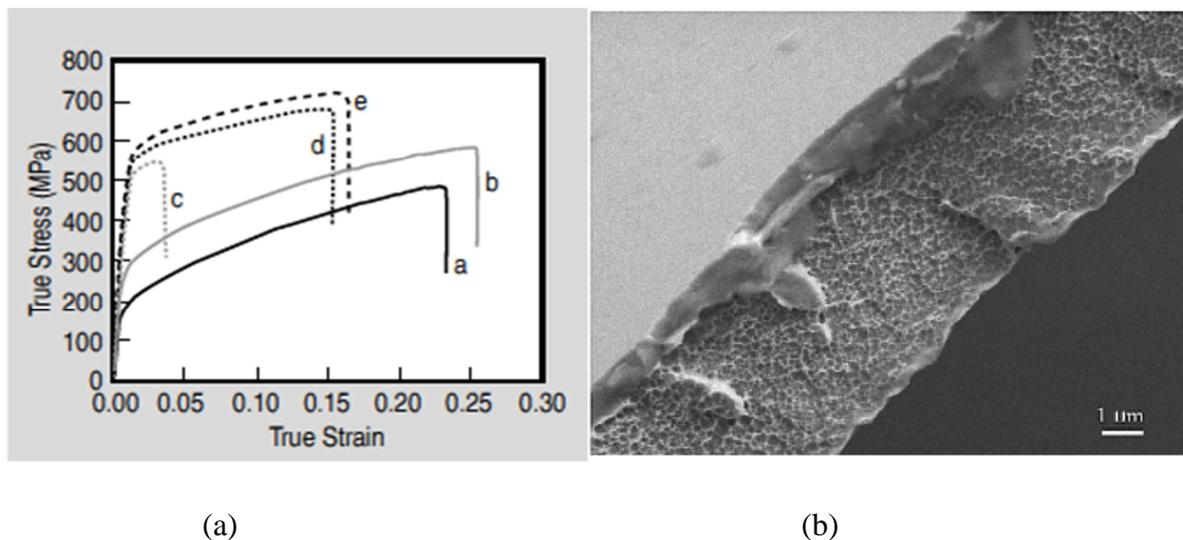


Fig. 2.13 : (a) Courbes contrainte-déformation de traction de l'alliage d'aluminium 2012 élaboré par plusieurs méthodes. (b) Image de la surface de rupture du matériau par traction, Ma [2006]

Ce dernier démontrait que le degré d'allongement d'un ressort est proportionnel au chargement dans beaucoup des cas. Ceci a donné d'emblée l'idée de la déformation élastique. Depuis lors, plusieurs autres éminents chercheurs se sont distingués dont Coulomb [1784] qui mesura pour la première fois le module de cisaillement élastique (Fig. 2.14). Tresca [1814 - 1885] fut le premier à avoir proposé une loi d'écoulement plastique des matériaux, en réalisant une série d'expériences sur la mise en forme des métaux telle que l'extrusion et la compression de plusieurs métaux afin d'étudier la relation entre le chargement de mise en forme et le déplacement. En 1871, Barré de Saint-Venant (1797 -1886) inspiré par les travaux

de Tresca, publia un ouvrage sur l'élastoplasticité mais dans lequel il traite certains problèmes de plasticité. Il y énonce quelques principes restées valides jusqu'aujourd'hui. Il constate par exemple que : (1) le volume du matériau ne change pas pendant la déformation plastique (cas des matériaux incompressibles), (2) les directions des déformations principales coïncident avec celles des contraintes principales (connue aujourd'hui sous l'appellation de théorie de la déformation totale), (3) la scission maximale en chaque point est égale à une constante dans la zone plastique.

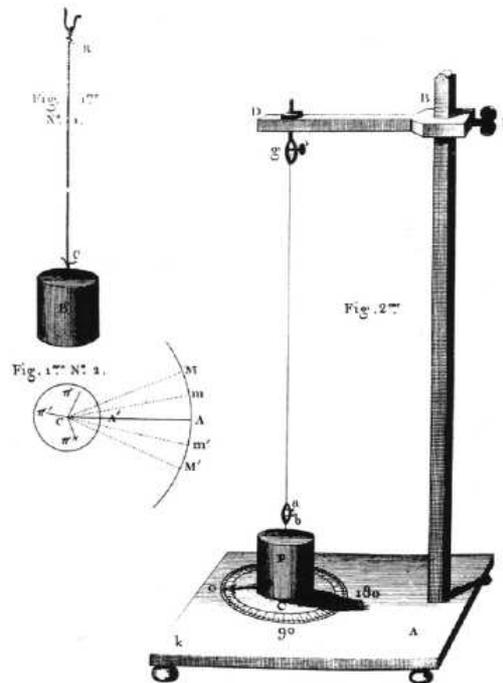


Fig. 1. Torsion test by Coulomb (Bell, 1984).

Fig. 2.14. – Test de torsion par Coulomb, [Bell, 1984]

Il confirme donc la relation d'écoulement plastique de Tresca :

$$\sigma_1 - \sigma_3 = 2k \quad (2.1)$$

exprimée en fonction de la contrainte principale maximale  $\sigma_1$  et la contrainte principale minimale  $\sigma_3$ .

L'application de la physique et de la métallurgie à la déformation plastique remonte aux années 1923 [Taylor et Elam, 1923] par l'étude d'un essai de traction sur un monocristal en aluminium (Fig. 2.15). Ils découvrirent que la déformation plastique se produit par glissement sur un plan cristallographique suivant une certaine direction. Ce qui leurs permis

de calculer la scission critique sur un plan de glissement. Cette expérience fut réalisée également sur le fer et le cuivre. Entre 1926 et 1927, le groupe constitué de Schmid, Göler et Sachs publia les mêmes travaux de traction uni-axiale sur plusieurs monocristaux et en 1938 Sachs calcula la contrainte d'écoulement d'un métal polycristallin comme la moyenne de ces monocristaux ayant des orientations aléatoires. Les contraintes d'écoulement moyennes en traction et en cisaillement trouvées étaient respectivement de  $\sigma_y = 2.2\tau_c$  et  $\sigma_y = 1.29\tau_c$ . Ce qui donne un rapport de  $\sigma/\tau_c = 0.577$ , trop petit par rapport à celui obtenu expérimentalement (même valeur que celle obtenue avec le critère de von Mises). Taylor (1938) proposa alors une méthode afin de relier la contrainte d'écoulement des métaux polycristallins à ceux des matériaux monocristallins en considérant les contraintes dues au voisinage des grains. Ainsi, il obtient une valeur proche de la valeur expérimentale ( $\sigma_y = 3.96\tau_c$ ).

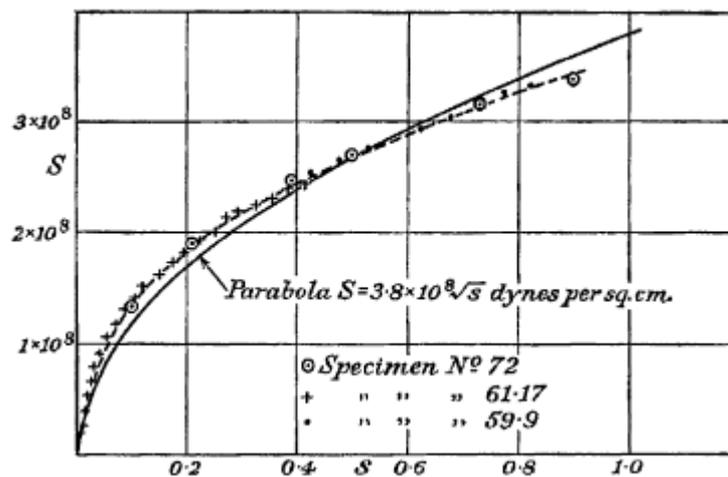


Fig. 2.15 : Courbe contrainte-déformation d'un monocristal par Taylor et Elam, [Bell, 1984].

Il faut observer que, lorsque un métal est étiré, la direction du cristal tourne à cause du glissement sur des plans particuliers et, ceux-ci tendent à devenir parallèles à la direction de l'étirement quelle que soit leur orientation (Fig. 2.16). Ce qui signifie que l'anisotropie se développe par déformation plastique des matériaux polycristallins [Osakada, 2010]. Rappelons ici que Boas et Schmid [1930] étaient les premiers à avoir étudié le développement de l'anisotropie.

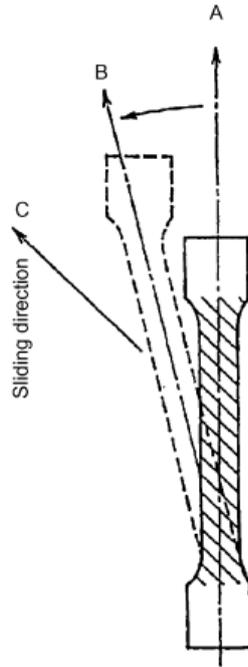


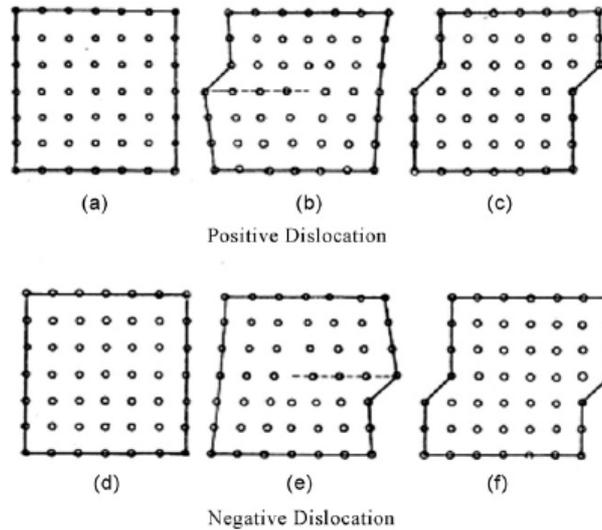
Fig. 2.16. – Rotation du cristal par glissement, [Taylor, 1938]

## II. 2. 2. La théorie des dislocations

Le premier scientifique à avoir émis l'idée de l'existence des défauts linéaires (dislocations) dans les matériaux cristallins est le japonais Yamaguchi [1929]. Quelques années plus tard [1934], plusieurs chercheurs dont Taylor, Polanyi et Orowan entreprirent des travaux dans ce sens afin de comprendre les mécanismes de la déformation plastique. De façon indépendante, ils proposèrent un premier mécanisme qui est celui du glissement par les défauts cristallins tels que les dislocations (Fig. 2.17). Mais, l'existence des dislocations dans les matériaux cristallins ne fut prouvée que dans les années 50 après l'invention du microscope électronique. Orowan fut le premier à avoir établi un lien direct entre les grandeurs macroscopiques (vitesse des déformations) et les grandeurs microscopiques d'un matériau lors d'un test mécanique. Il inspira ainsi l'idée d'une relation capable de traduire le mouvement des dislocations dans un matériau lors d'une sollicitation mécanique : c'est la loi d'Orowan de formule :

$$\dot{\gamma} = b\rho v \quad (2. 2)$$

où  $b$  est le vecteur de burgers du matériau,  $\rho$  la densité des dislocations et  $v$  la vitesse des dislocations moyenne.



**Fig. 2. 17 : Illustration d'une dislocation selon Taylor et Elam [1923]**

## II. 2.3 Déformation plastique des monocristaux

L'hétérogénéité de l'écoulement plastique provoque des contraintes internes. Cette hétérogénéité peut exister entre grains monophasés en provoquant des contraintes intergranulaires ou entre phases en provoquant des contraintes entre différentes phases.

### II. 2. 3.1 Glissement dans les monocristaux

Le glissement est le mode de déformation le plus courant dans les matériaux cristallins. Jusqu'à des températures moyennes, la déformation plastique d'un monocristal est provoquée par le mouvement des dislocations (glissement) sur des plans cristallographiques [Hosford et François, 1993; Pineau et Zaoui, 1991]. Dans les matériaux CFC (Cu, Al, Ni, ...), la direction de glissement est  $\langle 011 \rangle$  et les plans de glissement sont du type  $\{111\}$ . On dénombre en tout 12 systèmes de glissement possibles dans les matériaux CFC (Table 2.1). D'après la relation de Schmid, un système de glissement n'est activé et contribue à la déformation plastique que lorsque sa contrainte de cisaillement atteint une valeur critique  $\tau_c$  (contrainte critique projetée). En déformation uni-axiale (traction, compression), le glissement des dislocations commence lorsque la contrainte imposée  $\sigma$  atteint sa valeur critique. Ce qui donne la relation suivante :

$$\tau_c = f\sigma_c \quad (2.3)$$

où  $f$  est le facteur de Schmid qui a pour expression :

$$f = \cos\lambda\cos\phi \quad (2.4)$$

et  $\lambda$  est l'angle entre la direction de glissement  $\vec{b}$  et l'axe de sollicitation et  $\phi$  l'angle entre la normale  $\vec{n}$  au plan de glissement et l'axe de sollicitation (Fig. 2.18).

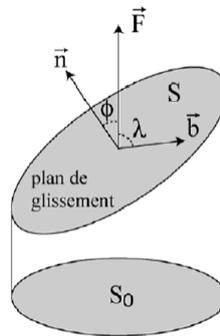
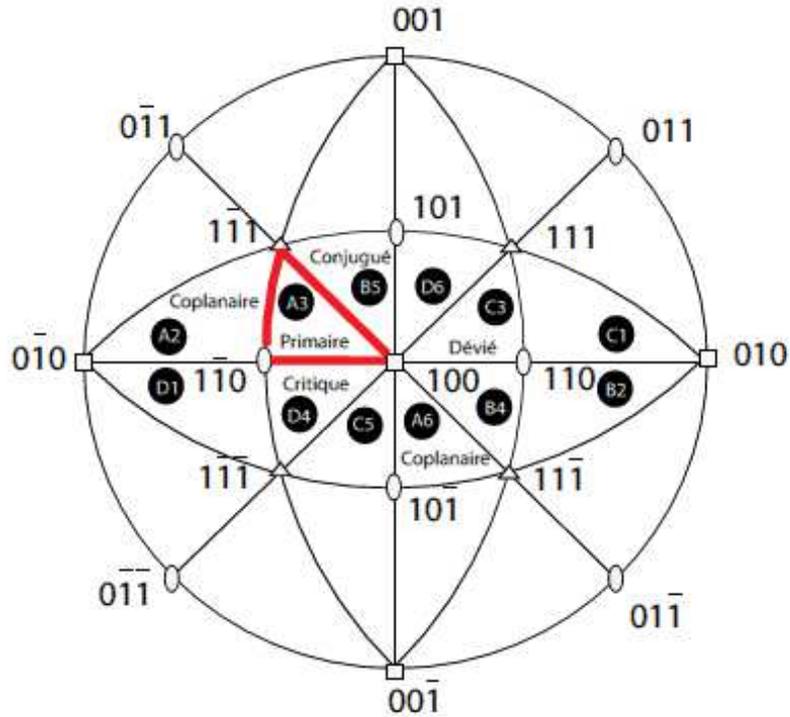


Fig 2. 18 : Schéma représentatif de la loi de Schmid.

Tableau 2. 1 : Systèmes de glissement d'un matériau CFC.

Numéro système	Plan	Direction
1	(111)	$[\bar{1}01]$
2	(111)	$[0\bar{1}1]$
3	(111)	$[\bar{1}10]$
4	$(1\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$
5	$(1\bar{1}1)$	$[011]$
6	$(1\bar{1}1)$	$[110]$
7	$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}1]$
8	$(\bar{1}11)$	$[110]$
9	$(\bar{1}11)$	$[101]$
10	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[\bar{1}10]$
11	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[101]$
12	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[011]$



**Fig. 2.19 : Nomenclature de systèmes de glissement interagissant avec le système primaire dans un cristal CFC [Hosford, 1993]. Les systèmes sont notés d'après la convention de Schmid et Boas, [1935]**

Le triangle  $[100][1\bar{1}0][1\bar{1}1]$  a été choisi comme triangle de référence (Fig. 2.19). Pour toute orientation de l'axe à l'intérieur de ce triangle, le système de glissement qui a le plus grand facteur de Schmid, c'est-à-dire le système primaire, est  $(\bar{1}11)[101]$ . Dans la notation de Schmid et Boas [1935], ce système est appelé A3. Ces conventions sont rappelées dans le Tableau 2. 2, la lettre représente le plan de glissement et le chiffre le vecteur Burgers. Pendant la déformation plastique en traction, le glissement simple sur le système primaire est associé à une rotation qui amène la direction de traction vers l'axe de zone  $[100] - [1\bar{1}1]$  du triangle. Ce qui favorise le système B5 que l'on appelle le système conjugué.

**Tableau 2.2 : Systèmes de glissements des cristaux CFC : notations de Schmid et Boas**

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
Plan	$(\bar{1}11)$			$(111)$			$(\bar{1}\bar{1}1)$			$(1\bar{1}1)$		
Burgers	$0\bar{1}1$	$101$	$110$	$0\bar{1}1$	$\bar{1}01$	$\bar{1}01$	$011$	$101$	$\bar{1}10$	$011$	$\bar{1}01$	$110$
N°	10	12	7	9	1	6	4	11	5	3	2	8

Le système dévié C3 est le plan qui contient la même direction de glissement (même vecteur de Burgers) que le système primaire. Les systèmes coplanaires A2 et A6 ont le même plan de glissement que le système primaire et un vecteur de Burgers différent. Enfin, le système critique D4 n'est jamais activé en traction lorsque l'axe de sollicitation est situé dans ce triangle de référence. Si l'on compte l'interaction du système primaire avec lui-même (self-interaction), on dénombre donc 6 types d'interactions entre systèmes de glissement dans un cristal CFC. Lorsque l'orientation initiale de l'axe de sollicitation n'est pas située sur l'axe de zone, la courbe de traction des monocristaux présente typiquement trois stades [Gottstein, 2004 ; Pineau et Zaoui, 1991].

Dans un polycristal, la déformation d'un grain est influencée par celle des grains voisins qui peuvent ou pas se déformer. Ainsi, la cohésion du polycristal est imposée par une continuité des déformations normales aux joints de grains. Ceci produit des contraintes d'accommodations constituant une source supplémentaire des contraintes internes. Pour qu'un grain subisse une déformation uniforme, il faut définir les 6 composantes de son tenseur de déformation. Dans les cas des matériaux incompressibles, le matériau se déforme en conservant son volume, ce qui ramène le nombre de composantes du tenseur de déformation à 5. On peut alors définir 5 systèmes indépendants [Mises, 1928]. Par rapport au monocristal, le traitement du grain considéré comme un milieu continu s'avère donc plus complexe. Il existe plusieurs modèles permettant de passer du monocristal au polycristal. Ces modèles sont basés sur une approche continue ignorant l'existence des dislocations mais tenant compte de la structure cristallographique du matériau et de la loi de Schmid. Dans ce qui suit, l'on va rappeler quelques modèles classiques et des modèles plus évolués.

## II. 2. 4 Modèles de plasticité du poly cristal

### II. 2. 4.1 Modèle de Sachs

Le modèle fut proposé en 1928 et considère que le tenseur des contraintes de chaque grain  $\underline{\sigma}^g$  est proportionnel au tenseur des contraintes macroscopiques  $\underline{\Sigma}$ . Ce qui permet d'écrire :

$$\underline{\sigma}^g = \lambda_g \underline{\Sigma} \quad (2.5)$$

où  $\lambda_g$  dépend de l'orientation du grain. Ce modèle est basé sur l'hypothèse d'un champ de contrainte uniforme dans tout le matériau. Autrement dit, la contrainte granulaire (locale) est égale à la contrainte moyenne (macroscopique) :

$$\underline{\sigma}^g = \underline{\Sigma} \quad (2.6)$$

#### II. 2. 4. 2 Modèle de Taylor

Le modèle de Taylor fut développé en 1938. Ce développement visait à construire un modèle poly cristallin satisfaisant la condition de compatibilité. Il est basé sur l'hypothèse d'un champ de déformations uniforme pour tous les grains. Il ressemble beaucoup au modèle d'élasticité de Voigt. Lorsque la scission sur chaque système de glissement  $s$  atteint la valeur critique telle que :  $\tau^s = \tau_c$ , la contrainte d'écoulement a pour expression :

$$\sigma_y = \tau_c \frac{\sum_{s=1}^N d\gamma^s}{d\varepsilon} = m \tau_c \quad (2.7)$$

où  $m$  est le facteur d'orientation de Taylor.

Pour un poly cristal CFC dont les orientations sont prises au hasard,  $m$  est égal à 3.06 pour Taylor [1938] contre 2.24 pour Sachs [1928]. Ce modèle de Taylor présente de nombreuses insuffisances notamment dans la prédiction de la texture [Honeff et Mecking, 1981].

#### II. 2. 4. 3 Modèle auto-cohérent

Le modèle auto-cohérent joue un rôle déterminant dans la modélisation du comportement mécanique d'un polycristal car, il permet de prédire les propriétés mécaniques des matériaux hétérogènes tels que les polycristaux [Kröner, 1961 ; Hill, 1965 ; Berveiller et Zaoui, 1979; Molinari et al., 1987; Abdul-Latif, 2004; Mercier et al., 2005; Mercier et Molinari, 2009; Abdul-Latif et Radi, 2010]. Contrairement aux modèles de Sachs et de Taylor, le modèle auto-cohérent peut prendre en compte la forme des grains par le biais de la théorie d'Eshelby ([957] et décrire ainsi l'interaction entre les grains et le polycristal. Dans ce modèle, chaque grain ou groupe de grains est considéré comme une inclusion non homogène noyée dans une matrice homogène ayant les propriétés moyennes de l'agrégat. La réponse macroscopique du polycristal est donc le résultat de la contribution de chaque grain. C'est pourquoi, afin de résoudre le problème de l'interaction entre le grain et le polycristal, une loi d'interaction doit au préalable être proposée.

Rappelons ici que contrairement au modèle de Pilvin and Cailletaud [1990] qui considère respectivement, un couple de variables internes tensorielles  $(\underline{\beta}^g, \underline{X}^g)$  pour définir l'érouissage intra-granulaire et deux couples de variables internes scalaires  $(q^s, R^s)$  et  $(\alpha^s, x^s)$  pour définir l'érouissage isotrope et l'érouissage cinématique, l'érouissage cinématique, dans cette étude, est défini de façon explicite grâce à une loi d'interaction appropriée. Ainsi, du fait de l'existence d'une phase de comportement élastique granulaire (translation du domaine élastique), l'accommodation inter-granulaire est de nature élastique. L'érouissage cinématique est introduit au moyen du paramètre de couplage  $\alpha$  facilitant à cet effet la prise en compte des trajectoires de chargement complexes.

## II. 3 Quelques modèles micromécaniques auto-cohérents

### II. 3. 1 Modèle de Berveiller et Zaoui

Berveiller et Zaoui [1979] ont proposé un modèle à accommodation plastique isotrope afin de simplifier l'influence de l'interaction plastique par rapport à la formulation de Hill. Ils ont introduit dans la loi d'interaction proposée initialement par Kröner [1961] un facteur d'accommodation plastique  $\alpha$ , dépendant de la déformation plastique. Rappelons que les résultats que prédit le modèle de Kröner [1961] sont très proches de ceux de Taylor [1938] à cause de la valeur de  $\mu$  très élevée. Or le modèle de Taylor [1938] présente des nombreuses insuffisances notamment la prédiction de la texture. Le modèle d'interaction de Berveiller et Zaoui [1979] s'écrit alors :

$$\underline{\sigma}^g - \underline{\Sigma} = \alpha\mu(\underline{E} - \underline{\varepsilon}^p) \quad (2.8)$$

où

$$\alpha = \frac{1}{1+\mu\bar{h}} \quad (2.9)$$

Le paramètre  $\bar{h}$  dépend de l'état de plastification de la matrice. Il peut se calculer en faisant des essais de traction. Ainsi l'on trouve à partir des réponses contrainte-déformation la valeur suivante :

$$\bar{h} = \frac{2}{3} \frac{\underline{\Sigma}}{\underline{E}^p} \quad (2.10)$$

Ce qui donne, par conséquent, la relation suivante :

$$\alpha = \frac{1}{1+(2/3)(\underline{\Sigma}/\underline{E}^p)\mu} \quad (2.11)$$

A noter que le coefficient  $\alpha$  assure le relâchement des contraintes internes au cours de la déformation plastique. Avec ce coefficient, on peut artificiellement aller du modèle statique au modèle de Taylor en le faisant varier de zéro à l'infini. Pour la valeur de  $\alpha=1$ , on retrouve le modèle de Kröner [1961] - Budiansky et Wu [1962] «appelé KBW». Soulignons que le modèle de KBW peut être mathématiquement considéré comme un cas particulier ( $\alpha=1$ ) et que ce coefficient d'interaction plastique a été validé pour un chargement proportionnel basé sur une formulation incrémentale ( $\alpha \ll 1$ ). Cette valeur peut conduire à une réponse d'interaction douce. Cette suggestion représente une façon simplifiée d'inclure les accommodations plastiques qui donnent une réponse plus douce que le modèle KBW. Encore une fois, la nature incrémentale de cette approche et l'accumulation d'erreurs associée à l'hypothèse des propriétés uniformes dans la matrice favorisent une réponse un peu trop raide.

### II. 3. 2. – Modèle viscoplastique auto-cohérent (VPSC)

Le modèle viscoplastique auto-cohérent (VPSC) a été formulé par [Molinari et al., 1987 ; Ahzi, 1987] et est basé sur une formulation largement utilisée en plasticité poly cristalline en grandes déformations. Sa première version s'écrit :

$$\underline{s}^g - \underline{S} = \left( \underline{\Gamma}^{-1} + \underline{A}^t \right) : \left( \underline{\dot{\epsilon}}^g - \underline{D} \right) \quad (2.12)$$

où  $\underline{\Gamma}$  est un tenseur d'interaction d'ordre 4 et  $\underline{A}^t$  un tenseur d'ordre 4 représentant le module tangent du polycristal. Ce modèle a été amélioré [Molinari et Toth, 1994] en y introduisant dans la loi d'interaction un paramètre  $\gamma$ . La nouvelle loi d'interaction devient :

$$\underline{s}^g - \underline{S} = \alpha \left( \underline{\Gamma}^{s-1} + \underline{A}^s \right) : \left( \underline{\dot{\epsilon}}^g - \underline{D} \right) \quad (2.13)$$

avec  $\Gamma^s$  un tenseur d'ordre 4 tel que :  $\underline{\Gamma}^{-1} = m \underline{\Gamma}^{s-1}$ ,  $\underline{A}^s$  est un tenseur d'ordre 4 représentant le module sécant tel que  $\underline{A}^t = m \underline{A}^s$ , et  $m$  est la sensibilité à la vitesse de déformation.

Pour  $\alpha = 0$ , on obtient le modèle de Sachs [1928] et lorsque  $\alpha$  tend vers l'infini, on obtient le modèle de Taylor [1938]. La première version du modèle s'obtient lorsque  $\alpha$  égal à  $m$ .

L'interaction entre le grain et le poly cristal est du type tangent. Dans le même esprit, Lebensohn et Tomé [1993] avait proposé le modèle suivant :

$$(\underline{\dot{\epsilon}}^g - \underline{D}) = \underline{K}^{-1} : (\underline{s}^g - S) \quad \text{ou} \quad \underline{s}^g - S = \underline{K}(\underline{\dot{\epsilon}}^g - \underline{D}) \quad (2.14)$$

$\underline{K}$  est un tenseur d'interaction d'ordre 4 et a pour expression :

$$\underline{K} = n^{eff^{-1}} \underline{\bar{M}}^{-1} \cdot \underline{E}^{-1} : (\underline{I} - \underline{E}) \quad (2.15)$$

$\underline{I}$  représente le tenseur unitaire d'ordre 4 et E le tenseur d'Eshelby et le paramètre  $n^{eff}$  équivaut à l'inverse du paramètre  $\gamma$ .

Ainsi, on obtient le critère de Taylor [1938] lorsque  $n^{eff} = 0$ , le critère de Sachs [1928] lorsque  $n^{eff} = \infty$ , le critère sécant lorsque  $n^{eff} = 1$  et le critère tangent lorsque  $n^{eff} = n = 1/m$  [Lebensohn et Tomé, 1993].

Dans cette thèse, nous utilisons le modèle auto-cohérent développé par Abdul-Latif [2002] avec un certain nombre de spécificités. Notamment notre modèle auto-cohérent prend en compte le comportement élastique, la déformation plastique des matériaux est supposée incompressible. Et plus, le modèle d'interaction hérité de [Molinari et al., 1987] est modifiée de telle sorte qu'il prenne en compte des chargements plus complexes. Plusieurs autres modèles de plasticité cristalline que nous ne citerons pas dans ce travail de thèse, existent dans la littérature tels que : le modèle non linéaire viscoplastique de Ahzi et M'Guil [2009], le modèle élasto-plastique de Peirce et al. [1983], Asaro et Needleman [1985].

# Chapitre III : Modélisation micromécanique

---

<b>III. 1. Cadre général</b> .....	52
<b>III. 2 Notion de petites déformations et équations constitutives du modèle</b> .....	53
III.2. 1 Comportement local.....	60
III. 2. 2 Modèle de comportement élasto-inélastique d'un monocristal. ....	62
III. 2. 3 Homogénéisation.....	67
III. 2. 4 Validité thermodynamique du modèle.....	67
<b>III. 3. Quelques résultats et discussions</b> .....	68
III. 3.1 Résultats bibliographiques.....	69
III. 3.2 Résultats pour l'étude actuelle.....	70
<b>III. 4 Prise en compte des grandes déformations</b> .....	72
<b>III. 5 Mise à jour de la texture cristallographique</b> .....	74
<b>III. 6 Influence de la rotation cristallographique</b> .....	77
<b>III.7 Résultats et discussion</b> .....	78
III.7.1 Caractéristiques de l'essai numérique.....	79
III.7.2 Résultats selon les modèles de Taylor, Sachs et VPSC.....	79
III.7.3 Résultats de notre modèle.....	81
III.7.4 Influence du paramètre de couplage sur la contrainte d'écoulement.....	83
III.7.5 Comparaison simulation numérique - expérience.....	85

### III. 1. Cadre général

Comme énoncé dans les chapitres précédents, l'étude des matériaux à microstructures UFG et NC s'est de plus en plus élargie [Valiev et al., 2000]. Les raisons d'une telle expansion sont nombreuses, elles vont des propriétés exceptionnelles et variées aux multiples phénomènes rencontrés dans ces matériaux dont certains n'ont pas encore une explication expérimentale satisfaisante. Le recours à la modélisation et aux simulations s'avère être un bon complément pour aller explorer les possibilités inaccessibles par l'expérience. Aussi, le choix d'un modèle devrait impérativement répondre à la fois aux exigences mécaniques (lois de comportement, phénomènes physiques) et numériques (modèles numériques opposables) c'est-à-dire qu'il est nécessaire d'abord d'identifier les propriétés mécaniques de ces matériaux et de rechercher les modèles numériques représentatifs du ou des phénomènes mécaniques identifiés.

Rappelons en effet, que le projet ANR MIMIC dans lequel s'inscrit cette thèse est basé sur l'élaboration, la caractérisation des mécanismes de déformation et d'endommagement des échantillons de nickel. Ces derniers peuvent être monomodaux ou multi structurés avec une composante UFG (taille moyen de grains  $< 1000$  nm) et une composante CG (taille de grains  $> 1000$  nm). L'étude consacrée à ce Nickel dans le chapitre 3 a précisé et confirmé l'existence de deux comportements mécaniques classique à savoir : le comportement élastique, le comportement plastique intra-granulaire et la naissance d'autres mécanismes de déformation plastique extra-granulaire ayant une forte influence sur la contrainte d'écoulement des microstructures. Parmi les phénomènes mécaniques rencontrés, figure également la présence de deux écrouissages dont l'écrouissage isotrope (quoiqu'il soit faible à certaines tailles de grains) et l'écrouissage cinématique. Les mécanismes de déformations recensés résultent généralement de l'activité des dislocations et des mécanismes liés au processus d'endommagement.

Le choix d'un modèle micromécanique peut donc être justifié en tenant compte des éléments énumérés ci-dessus. Contrairement à la plupart des modèles de plasticité, dans notre étude, nous considérons le matériau compressible (volume du matériau non constant en déformation totale) du fait de la prise en compte du comportement élastique. Ceci aura pour conséquence numérique la définition de 6 composantes directes de contrainte et de déformation au lieu de 5 composantes définies dans le cas d'un matériau incompressible

(volume du matériau constant en déformation plastique dans le cas d'un comportement rigide-viscoplastique ou plastique).

Le recours à l'approche micromécanique auto-cohérente a été largement justifié dans le chapitre 3 dans sa dernière partie dédiée à l'étude des modèles de plasticité cristalline. Ces phénomènes micromécaniques identifiés ont permis de développer un premier modèle micromécanique auto-cohérent dans lequel la rotation des grains a été supposée négligeable (hypothèse des petites déformations).

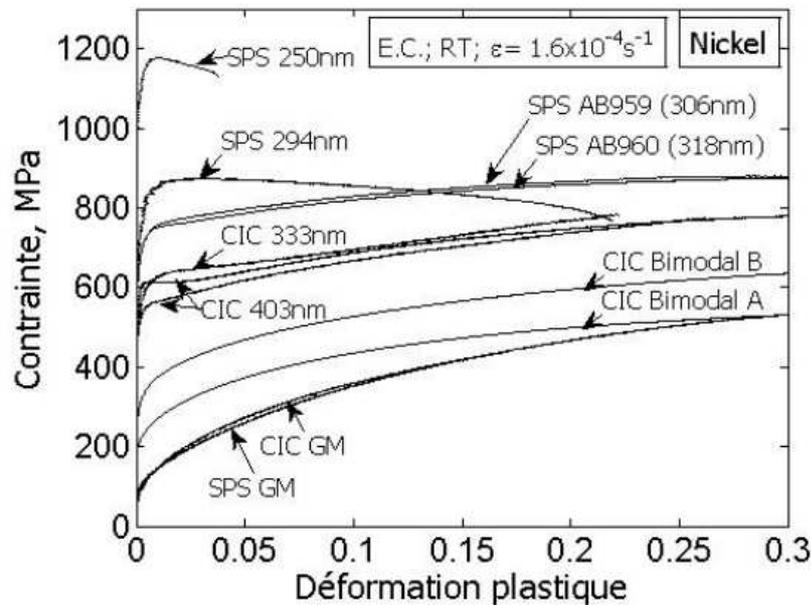


Fig. 3. 1 – L'effet de la taille moyenne des grains sur le comportement mécanique, [Bui, 2008].

### III. 2 Notion de petites déformations et équations constitutives du modèle

Ce modèle micromécanique en petites déformations suit un schéma non incrémental et se base sur le modèle auto-cohérent élasto inélastique proposé par Molinari et al. [1997] pour les comportements plastiquement incompressibles et élastiquement compressibles des poly cristaux tenant compte aussi bien de l'élasticité que de la plasticité et de l'interaction entre grains. Ce modèle a été modifié par Abdul-Latif et al. [2002] en considérant une inclusion sphérique noyée dans une matrice élastique, isotrope et uniforme à l'infini. Dans ce cas, la loi d'interaction a été simplifiée en remplaçant le module tangent visqueux macroscopique par un paramètre phénoménologique constant. Ces simplifications ont en effet, permis de décrire un nombre important de comportements inélastiques cycliques des matériaux poly cristallins

sous chargements multiaxiaux complexes tels que : l'effet Bauschinger, le sur-écrouissage, l'effet de rochet, l'effet de mémoire, etc. Plus récemment, Abdul-Latif et al, [2010], ont proposé le modèle d'une inclusion ellipsoïdale afin de prendre en compte l'influence de la forme de grains sur le comportement élasto-plastique des poly cristaux métalliques de type CFC dans le modèle auto-cohérent pour une plasticité dépendant du temps. Molinari et al. [1987] avait proposé un modèle auto-cohérent viscoplastique linéaire en grandes déformations, basée sur la méthode mathématique des équations intégrales et tenant compte de l'effet de forme, l'interaction entre grains, l'anisotropie géométrique et l'écrouissage. Les interactions élastiques n'étant pas prise en compte, le modèle est applicable aux seuls matériaux incompressibles donnant ainsi l'équation suivante :

$$\underline{\underline{s}}^g - \underline{\underline{S}} = \left( \mathfrak{S}'^{s^{-1}} + \underline{\underline{A}} \right) : (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^g - \underline{\underline{\dot{E}}}) \quad (3.1)$$

où  $\underline{\underline{s}}^g$  et  $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^g$  ( $\underline{\underline{S}}$  et  $\underline{\underline{\dot{E}}}$ ) sont respectivement le tenseur déviateur des contraintes et la vitesse de déformations microscopiques (respectivement macroscopique).  $\mathfrak{S}'^{s^{-1}}$  est le tenseur (ordre 4) d'interaction et  $\underline{\underline{A}}$  représente le module tangent macroscopique.

La transformation de ce dernier modèle en un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique applicable aux matériaux incompressibles a été faite par Kouddane et al. [1994] en adoptant la méthode utilisée par Molinari et al. [1987] pour une inclusion sphérique lorsque le comportement du matériau supposé élastique et uniforme, incompressible et isotrope dans l'hypothèse en petites déformations. La relation d'interaction simplifiée s'écrit :

$$\underline{\underline{\dot{s}}}^g - \underline{\underline{\dot{S}}} + \frac{\mu}{\eta_0} (\underline{\underline{s}}^g - \underline{\underline{S}}) = 3\mu (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^g - \underline{\underline{\dot{E}}}) \quad (3.2)$$

où  $\mu$  est le module de cisaillement élastique isotrope et  $\eta_0$  le coefficient de viscosité.

L'avantage de cette relation réside dans sa capacité à tenir compte à la fois d'une réponse instantanée, caractérisée par une relation analogue à celle de Kröner pour le problème de l'inclusion élastique et d'une relaxation viscoplastique différée, identique à celle conçue par Molinari et al. [1987]. Dans la même chronologie, Molinari et al. [1997] avaient proposé une formulation plus générale du modèle de Kouddane et al. évoqué ci-dessus en considérant

le comportement élastique-inélastique anisotrope et compressible. Leur relation d'interaction est un couplage de deux modèles de comportement telles que :

$$\left( \underline{\underline{\mathfrak{S}}}^s^{-1} + \underline{\underline{\mathbf{C}}} \right)^{-1} : (\underline{\dot{\underline{\mathbf{s}}}}^g - \underline{\dot{\underline{\mathbf{S}}}}) + \left( \underline{\underline{\mathfrak{S}}}^{'s^{-1}} + \underline{\underline{\mathbf{A}}} \right)^{-1} : (\underline{\mathbf{s}}^g - \underline{\mathbf{S}}) = (\underline{\dot{\underline{\mathbf{e}}}}^g - \underline{\dot{\underline{\mathbf{E}}}}) \quad (3.3)$$

où  $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$  est le tenseur (d'ordre 4) des modules d'élasticité macroscopique,  $\underline{\underline{\mathfrak{S}}}^s$  et  $\underline{\underline{\mathfrak{S}}}^{'s}$  représentent les tenseurs (d'ordre 4) d'interaction et  $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$  le tenseur module tangent inélastique macroscopique.

Les deux modèles précédents constituent le point de départ des modèles proposés par Abdul-Latif et al. [1998, 2000, 2002 et 2004] et, utilisés comme modèle de référence dans ce travail. Se basant sur l'hypothèse d'un comportement élasto-viscoplastique linéaire incompressible, Abdul-Latif et al. [1998] avaient proposé, dans l'hypothèse des petites déformations, la relation d'interaction (3.2) pour laquelle lorsque  $\eta_o$  tend vers l'infini, on obtient une réponse élastique instantanée via l'équation (3.4) et faisant analogie à la loi de Kröner.

$$\underline{\dot{\underline{\mathbf{s}}}}_g - \underline{\dot{\underline{\mathbf{S}}}} \approx -3\mu (\underline{\dot{\underline{\mathbf{e}}}}^g - \underline{\dot{\underline{\mathbf{E}}}}) \quad (3.4)$$

De même, lorsque le caractère visqueux est dominant (ou prépondérant) et pour des temps longs, la relation d'interaction suivante s'impose :

$$\underline{\dot{\underline{\mathbf{s}}}}_g - \underline{\dot{\underline{\mathbf{S}}}} \approx -3\eta^o (\underline{\dot{\underline{\mathbf{e}}}}^g - \underline{\dot{\underline{\mathbf{E}}}}) \quad (3.5)$$

Par ailleurs, l'écroutissage cinématique se manifestant par une translation du centre du domaine d'élasticité, induisant de ce fait une anisotropie, est naturellement décrit à l'échelle macroscopique. Ce résultat a été montré par Kouddane et al. [1994] dans le cas d'un chargement cyclique uni axial. En effet, dans le cadre de l'approche auto-cohérente, le paramètre  $\eta_o$ , qui dépendant de l'histoire de la déformation, doit être ajusté à chaque incrémentation de temps, de manière à satisfaire la condition d'auto-cohérence. Nous avons donc en déformation totale imposée :

$$\underline{\dot{\underline{\mathbf{E}}}} = \underline{\dot{\underline{\mathbf{E}}}}' \quad (3.6)$$

avec  $\underline{\dot{E}}$  est la vitesse de déformation macroscopique imposée. En contrainte imposée, nous avons :

$$\underline{\dot{S}} = \underline{\dot{S}} \quad (3.7)$$

où  $\underline{\dot{S}}$  représente la vitesse de contrainte déviatorique macroscopique imposée,  $\underline{\dot{S}}$  la vitesse de contrainte déviatorique macroscopique calculée.  $\eta^o$  est calculé de façon à ce que l'erreur relative définie par les équations (3.7) (ou 3.8) soit minimale afin de satisfaire la condition d'auto-cohérence (équations 4.7 ou 4.8). Dans le cadre de la déformation imposée, nous avons :

$$\text{Re} = \left\| \underline{\dot{E}} - \underline{\dot{E}} \right\| / \left\| \underline{\dot{E}} \right\| \quad (3.8)$$

Par contre, en contrainte imposée :

$$\text{Re} = \left\| \underline{\dot{S}} - \underline{\dot{S}} \right\| / \left\| \underline{\dot{S}} \right\| \quad (3.9)$$

Avec Re le pourcentage d'erreur et la norme  $\|\underline{x}\|$  définie comme:  $\|\underline{x}\| = \sqrt{a \underline{x} : \underline{x}}$  et  $a=3/2$  pour les contraintes,  $a=2/3$  pour les déformations.

Limitée au seul cas du chargement uni axial, cette approche décrit néanmoins, avec succès, le comportement cyclique des matériaux métalliques. Sous cette sollicitation, le paramètre  $\eta_o$  est ainsi déterminé à chaque incrément de temps. Dans le cas des chargements multiaxiaux, le scalaire  $\eta_o$  pourrait être remplacé par un tenseur d'ordre 4. Ceci complique considérablement la détermination, à chaque incrément de temps, des différentes composantes du tenseur. Pour contourner cette difficulté, une solution simple est proposée Abdul-Latif et al. [1998] et qui consiste à:

- remplacer le rapport  $\left(\frac{\mu}{\eta_o}\right)$  par un coefficient phénoménologique scalaire ( $\beta$ ) qui

reste à déterminer par identification avec des résultats expérimentaux.

- négliger la viscosité dans les comportements du grain et du VER
- exprimer les comportements élastiques incompressibles (global et granulaire)

considérés respectivement par :  $\underline{\dot{S}} = 2\mu \underline{\dot{E}}_e$  et  $\underline{\dot{S}}^g = -2\mu \underline{\dot{E}}_e^g$ .

La relation d'interaction simplifiée peut être déduite par :

$$\dot{\underline{s}}^g - \dot{\underline{S}} + \beta (\underline{s}^g - \underline{S}) = -3\mu (\dot{\underline{\varepsilon}}^g - \dot{\underline{E}}) \quad (3.10)$$

Notons que la condition d'auto-cohérence est systématiquement vérifiée, avec une valeur de  $\beta$  constante.

En se basant sur ces deux modifications, tous les principaux phénomènes, concernant les chargements cycliques notamment bi-axiaux, peuvent être convenablement reproduits. Dans le cas d'un comportement compressible comme c'est le cas pour la plupart des matériaux métalliques poly cristallins, l'hypothèse d'incompressibilité représente alors une restriction majeure loin de la réalité physique. Une extension du modèle au cas de l'élasticité compressible a été ainsi proposée [Dingli et al., 2000], [Abdul-Latif et al., 2002]. Seules les relations de comportement élastique (granulaire et macroscopique) et surtout la loi d'interaction sont modifiées par rapport au cas incompressible. En revanche, le comportement du monocristal reste inchangé par rapport au travail d'Abdul-Latif et al. [1998].

Au niveau granulaire, le comportement élastique isotrope est décrit en dérivant la relation de Hooke classique suivante:

$$\underline{\sigma}^g = \rho \frac{\partial \psi_e^g}{\partial \underline{\varepsilon}_e^g} = 2\mu \underline{\varepsilon}_e^g + \lambda (\text{tr} \underline{\varepsilon}_e^g) \underline{1} \quad (3.11)$$

$\mu = \mu^g$  et  $\lambda = \lambda^g$  sont les constantes de Lamé,  $\underline{1}$  tenseur unité du second ordre.

Le taux de contrainte granulaire est donné alors par la relation:

$$\dot{\underline{\sigma}}^g = 2\mu \dot{\underline{\varepsilon}}_e^g + \lambda (\text{tr} \dot{\underline{\varepsilon}}_e^g) \underline{1} \quad (3.12)$$

Par contre, le comportement isotrope élastique du VER est obtenu par la méthode d'homogénéisation:

$$\dot{\underline{S}} = 2\mu \dot{\underline{E}}_e + \lambda (\text{tr} \dot{\underline{E}}_e) \underline{1} \quad (3.13)$$

Tout en gardant la même structure de la relation d'interaction identique à celle de Kouddane et al. [1993] avec une partie élastique et une partie inélastique, Molinari et al. [1997] ont proposé une généralisation du modèle de Kouddane et al. [1993] en considérant le cas d'un comportement élasto-inélastique anisotrope et compressible, conduisant ainsi à (3.3).

L'isotropie du comportement élasto-inélastique est admise comme hypothèse dans le but d'une meilleure simplification des calculs [Abdul-Latif et al., 2002]. Ainsi, la partie **élastique** est décrite par la relation suivante :

$$\left( \mathfrak{S}^{s^{-1}} + \underline{\underline{C}} \right)^{-1} : (\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^g - \underline{\underline{\dot{\Sigma}}}) = (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^g - \underline{\underline{\dot{E}}}_e) \quad (3.16)$$

alors que la partie **inélastique** est présentée sous la forme suivante :

$$\left( \mathfrak{S}'^{s^{-1}} + \underline{\underline{A}} \right)^{-1} : (\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^g - \underline{\underline{\dot{S}}}) = (\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^g_{in} - \underline{\underline{\dot{E}}}_{in}) \quad (3.17)$$

où  $\underline{\underline{\dot{\Sigma}}} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\dot{E}}}_e$  est la relation de comportement élastique de le VER et  $\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{\dot{E}}}_{in}$  représente la relation du comportement inélastique global (viscoélastique).

En ce qui concerne la solution de la relation d'interaction générale de l'élasticité des milieux hétérogènes (3.15), la solution démontrée par François et al., [1993] est utilisée. En effet, pour une inclusion sphérique de module d'élasticité  $\underline{\underline{c}}^I$  dans une matrice homogène infinie de module  $\underline{\underline{C}}^0$  soumise à une déformation à l'infini, on a :

$$(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\delta c}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}_e^I = \underline{\underline{\varepsilon}}_e^0 \quad (3.18)$$

où  $\underline{\underline{\delta c}}$  est le tenseur d'élasticité élémentaire et,

$$E_{ijkl} = \frac{1}{15\mu(3k+4\mu)} \left[ -(3k+\mu)\delta_{ij}\delta_{kl} + 9(k+2\mu)I_{ijkl} \right] \quad (3.19)$$

Le tenseur identité  $I_{ijkl}$ , d'ordre 4 et le module de compressibilité  $k$  sont donnés par :

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (3.20)$$

$$k = \lambda + \frac{2\mu}{3} \quad (3.21)$$

Le module d'élasticité de l'inclusion est déterminé par la relation suivante :

$$\underline{\underline{c}}^I = \underline{\underline{C}}^0 + \underline{\underline{\delta c}} \quad (3.22)$$

Par analogie avec l'équation (3.13), on a alors :

$$\underline{\underline{\mathfrak{S}}}^s = -\underline{\underline{E}} \quad (3.23)$$

$$\underline{\underline{C}}^0 = \underline{\underline{\bar{C}}} \quad (3.24)$$

Il ne reste plus qu'à déterminer les termes du tenseur :

$$\left( \underline{\underline{\mathfrak{S}}}^{s^{-1}} + \underline{\underline{\bar{C}}} \right)^{-1} = \underline{\underline{N}}^{-1} \quad (3.25)$$

Avec

$$\mathfrak{S}_{ijkl}^s = \frac{1}{15\mu(3k+4\mu)} \left[ (3k+\mu)\delta_{ij}\delta_{kl} - 9(k+2\mu)I_{ijkl} \right] \quad (3.26)$$

$$\bar{C}_{ijkl} = 2\mu I_{ijkl} + \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (3.27)$$

On obtient alors la relation:

$$N_{ijkl}^{-1} = 2AI_{ijkl} + B\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (3.28)$$

où

$$A = \frac{-(8\mu+3\lambda)}{2\mu(14\mu+9\lambda)} \quad (3.29)$$

$$B = \frac{(6\mu+\lambda)(3\lambda+8\mu)}{\mu(448\mu^2+456\mu\lambda+108\lambda^2)} \quad (3.30)$$

Revenons à la partie inélastique de la relation d'interaction:

$$\left( \underline{\underline{\mathfrak{S}}}^{s^{-1}} + \underline{\underline{\bar{A}}} \right)^{-1} : (\underline{\underline{s}}^g - \underline{\underline{S}}) = (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_m^g - \underline{\underline{\dot{E}}}_m) \quad (3.31)$$

Le tenseur  $\underline{\underline{\mathfrak{S}}}^{s^{-1}}$  doit être normalement calculé par la méthode des fonctions de Green. Pour le

cas d'un comportement inélastique isotrope et incompressible,  $\underline{\underline{\mathfrak{S}}}^{s^{-1}}$  a une forme isotrope et

est composée d'un unique coefficient en fonction du module visqueux tangent  $\eta_o$ . La même solution "pragmatique" que pour la loi d'interaction de Kouddane et al. [1993] a été adoptée en remplaçant le terme visqueux, que nous n'avons pas besoin de déterminer explicitement, par un paramètre phénoménologique ( $\alpha \geq 0$ ). La relation d'interaction inélastique est alors déduite :

$$-\frac{1}{3\eta_o}(\underline{s}^g - \underline{S}) = (\dot{\underline{\epsilon}}_{in}^g - \dot{\underline{E}}_{in}) \quad (3.32)$$

$$-\alpha(\underline{s}^g - \underline{S}) = (\dot{\underline{\epsilon}}_{in}^g - \dot{\underline{E}}_{in}) \quad (3.33)$$

Le signe «-» est ajouté pour respecter l'égalité des signes entre les deux termes  $\alpha(\underline{s}^g - \underline{S})$  et  $(\dot{\underline{\epsilon}}_{in}^g - \dot{\underline{E}}_{in})$  car  $-\alpha \geq 0$ . En additionnant les deux parties (élastique et inélastique), on obtient ainsi la relation d'interaction élasto-inélastique [Abdul-Latif et al., 2002] :

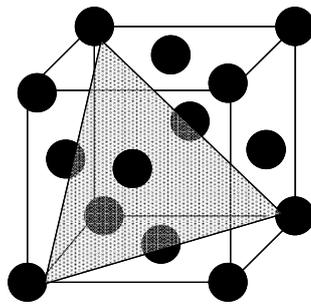
$$2A(\dot{\underline{\sigma}}^g - \dot{\underline{\Sigma}}) + Btr(\dot{\underline{\sigma}}^g - \dot{\underline{\Sigma}})\underline{1} - \alpha(\underline{s}^g - \underline{S}) = (\dot{\underline{\epsilon}}^g - \dot{\underline{E}}) \quad (3.34)$$

Cette solution adoptée dans les deux cas (incompressible et compressible) consiste à simplifier la relation auto-cohérente de Molinari et al. [1997] en négligeant le caractère viscoélastique des comportements local et global. D'un point de vue physique, cette solution représente une régression. En effet, pour un poly cristal, le comportement inélastique a des effets de viscosité. La viscosité de la matrice doit être alors prise en compte dans la relation auto-cohérente [Abdul-Latif, 2000]. Néanmoins, avec une telle simplification, la description du comportement mécanique des poly cristaux métalliques reste convenable notamment sous chargements multiaxiaux. De plus, ce modèle peut qualitativement décrire toutes les possibilités offertes par le modèle de Kouddane et al. [1993] sous chargements cycliques uni-axiaux. Cet argument permet d'adopter une telle simplification afin de reproduire les phénomènes liés aux chargements cycliques non-proportionnels.

### III.2. 1 Comportement local

L'apparition des déformations inélastiques au sein des matériaux métalliques polycristallins est généralement due au glissement des plans cristallographiques. Ce glissement se produit toujours selon des familles de directions particulières. Les directions de

glissement dans le cas des matériaux de type CC (Cubique Centré) correspondent à celles de la famille  $\langle 111 \rangle$ . Les plans de glissement sont ceux des familles  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  et plus rarement  $\{123\}$ . Concernant les matériaux cubiques à faces centrées (CFC), constituant l'objet de notre étude, les directions de glissement sont  $\langle 110 \rangle$  et les plans  $\{111\}$  (Fig.4.2). Ces derniers nous permettent d'obtenir directement tous les systèmes de glissement possibles.



**Fig 3.2: directions de glissement  $\langle 110 \rangle$  et plans  $\{111\}$  pour les structures CFC**

Quand on soumet un échantillon monocristallin à une force  $F$  en traction simple, seule la composante projetée sur un système de glissement activable peut induire une déformation plastique. En considérant la composante tangentielle  $\tau^s$  au plan de glissement et dans la direction de glissement, et à l'aide des notations de la Fig. 2.14, on obtient alors la loi classique de Schmid [1924] qui donne la scission résolue :

$$\tau^s = \frac{F}{S_0} \cos\phi \cos\lambda \quad (3.35)$$

Le facteur  $(\cos\phi \cos\lambda)$  est appelé facteur de Schmid pour le système de glissement  $s$  considéré. Il permet de calculer la contrainte nécessaire à l'activation d'un système en fonction de la direction d'application de la force. A l'exception de certains cas (très particuliers), on constate que le mouvement par glissement n'est pas colinéaire à l'effort appliqué. Ces remarques montrent que la déformation plastique est de nature anisotrope. Par conséquent, dans un monocristal, plusieurs systèmes de glissement peuvent être activés. Il est donc nécessaire de considérer les contributions possibles des différents systèmes à la déformation plastique. A présent, nous donnons quelques définitions mathématiques de base de la loi de Schmid qui est utilisée par la suite. Les systèmes de glissement sont définis par leur normale au plan de glissement  $\vec{n}^s$  ainsi que par la direction de glissement  $\vec{l}^s$ . La direction est elle-même liée au vecteur de Burgers du système par :

$$\vec{l}^s = \frac{\vec{b}^s}{\|\vec{b}^s\|} \quad (3.36)$$

Le couple  $(\vec{n}^s, \vec{l}^s)$  permet de définir le tenseur d'orientation du système donné  $\underline{m}^s$  pour les structures CFC par :

$$\underline{m}^s = \frac{1}{2}(\vec{l}^s \otimes \vec{n}^s + \vec{n}^s \otimes \vec{l}^s) \quad (3.37)$$

avec  $\otimes$  le produit tensoriel.

Chaque système de glissement vérifie la loi de Schmid et la scission résolue  $\tau^s$  est calculée par projection de la contrainte granulaire appliquée  $\underline{\sigma}^g$  sur les systèmes de glissement.

$$\tau^s = \underline{\sigma}^g : \underline{m}^s \quad (3.38)$$

Dans un grain, le glissement cristallographique engendre la déformation plastique, i.e., l'entrée en plasticité obéit à la loi de Schmid. En effet, le comportement du matériau est relié à la loi de Schmid, connaissant la contrainte dans chaque grain, et supposant qu'un système cristallographique  $s$  est actif quand la cession résolue  $\tau^s$  qui s'y exerce atteint une valeur critique.

### III. 2. 2 Modèle de comportement élasto-inélastique d'un monocristal.

La description de la loi de comportement avec l'élasticité isotrope granulaire se fait à deux niveaux parmi lesquels : au niveau du potentiel d'état et au niveau de la dissipation par le concept de la plasticité non associée. En effet, l'énergie libre globale  $\psi$  (i.e., au niveau du volume élémentaire représentatif : VER) est choisie comme potentiel d'état et peut être partitionnée en une contribution élastique  $\rho\psi_e$  et en une contribution inélastique  $\rho\psi_{in}$  :

$$\rho\psi = \rho\psi_e + \rho\psi_{in} \quad (3.39)$$

En se basant sur le fait que l'écoulement inélastique de la matière n'influe pas sur le comportement élastique, on assure ainsi le découplage des phénomènes (élastique et inélastique). Dans le but de simplifier le problème, on adopte aussi l'hypothèse des petites

déformations et on néglige les effets thermiques. La partie élastique de l'énergie libre spécifique peut s'écrire à l'échelle globale, comme la somme de tous les potentiels élastiques granulaires sur tout l'agrégat poly cristallin en supposant dans un premier temps que le comportement élastique à ce niveau est uniforme, isotrope et compressible. Le tenseur des déformations élastiques  $\underline{\underline{\varepsilon}}_e^g$  est considéré comme une variable interne, et le tenseur des contraintes granulaires de Cauchy  $\underline{\underline{\sigma}}^g$  est sa variable duale associée. On note que  $\underline{\underline{\sigma}}^g$  est calculée à l'aide de la loi d'interaction (3.34). Ce choix conduit clairement à une nouvelle définition du potentiel d'état. Donc, l'énergie libre élastique spécifique macroscopique peut s'écrire comme la somme de tous les potentiels granulaires sur tout l'agrégat polycristallin:

$$\rho\psi_e(\underline{\underline{\varepsilon}}_e^g) = \sum_{g=1}^{N_g} \rho\psi_e^g \quad (3.40)$$

La partie élastique granulaire  $\psi_e^g$ , qui représente l'énergie réversible, prend la forme quadratique isotrope classique suivante:

$$\rho\psi_e^g = \frac{1}{2} \lambda^I (tr(\underline{\underline{\varepsilon}}_e^g))^2 + \mu^I (tr(\underline{\underline{\varepsilon}}_e^g))^2 \quad (3.41)$$

Pour le comportement local (i.e., granulaire), le tenseur des contraintes de Cauchy  $\underline{\underline{\sigma}}^g$  s'obtient alors en dérivant l'équation (3.41):

$$\underline{\underline{\sigma}}^g = \rho \frac{\partial \psi_e^g}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}_e^g} = 2\mu^I \underline{\underline{\varepsilon}}_e^g + \lambda^I (tr \underline{\underline{\varepsilon}}_e^g) \underline{\underline{1}} \quad (3.42)$$

La relation de comportement (3.42) est obtenue en utilisant les relations classiques de l'élasticité et à partir de (3.40) en remplaçant les constantes de Lamé granulaire  $\mu^I$  et  $\lambda^I$  par le module d'Young  $E^g$  et le coefficient de Poisson  $\nu^g$  à l'échelle granulaire :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_e^g = \frac{(1 + \nu^g)}{E^g} \underline{\underline{\sigma}}^g - \frac{\nu^g}{E^g} tr(\underline{\underline{\sigma}}^g) \underline{\underline{1}} \quad (3.43)$$

Quant à la partie inélastique de l'énergie libre macroscopique, elle peut également s'écrire comme la somme de tous les potentiels granulaires sur tout l'agrégat polycristallin.

$$\rho\psi_{in} = \sum_{g=1}^{N_g} \rho\psi_{in}^g \quad (3.44)$$

La partie inélastique granulaire du potentiel d'état, partie représentant l'énergie irréversible granulaire, s'écrit comme la fonction quadratique de la variable d'écroutissage isotrope intragranulaire  $q^s$  [Saanouni et Abdul-Latif, 1996].

$$\rho\psi_{in}^g(q^s) = Q^s \sum_{r=1}^{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} H_{rs} q^r q^s \quad (3.45)$$

$Q^s$  est le module d'écroutissage isotrope intra granulaire du système de glissement  $s$ .  $H_{rs}$  est la matrice d'interaction de l'écroutissage isotrope intra granulaire permettant de rendre compte, non seulement, de l'auto-écroutissage d'un système de glissement  $s$ , mais aussi de l'effet des autres systèmes actifs du même grain (écroutissage latent) sur ce même système  $s$ . Cette matrice autorise différents choix pour sa forme : diagonale, symétrique ou non symétrique, et peut être envisagée constante dans le temps, ou au contraire, dépendante de l'histoire de la déformation [Françiosi, 1985]. La forme et la variation de cette matrice ont été étudiées à partir d'essais expérimentaux dits d'écroutissage latent, dans lesquels on active successivement et individuellement deux systèmes différents de glissements d'un matériau donné pour déterminer les effets croisés du glissement de l'un sur l'écroutissage de l'autre [Kocks et Brown, 1966; Jackson et Basinski, 1967; Françiosi et al., 1980]. Nous adoptons ici le choix d'une matrice symétrique avec six paramètres restants constants dans le temps [Françiosi, 1978]. Pour les structures cristallines n'ayant que des systèmes octaédriques, la matrice  $H_{rs}$  est de dimension 12x12. Pour d'autres structures, ayant des systèmes cubiques et octaédriques (cas de monocristaux à base de nickel à température élevée), une matrice 18x18 est nécessaire [Poubanne et al., 1988]. On note que la source essentielle de l'écroutissage cinématique d'après l'expérience est représentée par les joints de grains dans les polycristaux. Il est prédominant comparé à l'écroutissage cinématique produit au cœur du grain. Ainsi, l'effet de l'écroutissage cinématique peut-être globalement décrit d'une manière implicite et naturelle par le paramètre  $\alpha$  de la loi d'interaction inélastique. Quant à l'écroutissage isotrope intra granulaire, sa variable duale  $R^s$  est obtenue par dérivation de l'équation (3.45):

$$R^s = \frac{\partial \psi_{in}^g}{\partial q^s} = Q^s \sum_{r=1}^{N_s} H_{rs} q^r \quad (3.46)$$

Où la matrice  $H_{rs}$  est introduite dans le potentiel d'état, donnant ainsi une contrainte interne d'Orowan  $R^s$  (taille du domaine d'élasticité sensible à la multiplicité des systèmes de glissement actifs) [Abdul-Latif, 1994].

En général, l'érouissage isotrope dépend de cette matrice  $H_{rs}$ . Cette formulation permet une saturation de l'érouissage aussi bien en chargement monotone qu'en chargement cyclique et prend en compte les interactions entre les différents systèmes de glissement à travers cette matrice  $H_{rs}$ . Une fois la variable duale  $R^s$  déterminée par la loi d'état (équation 4.46), il reste à définir les relations complémentaires, décrivant les processus dissipatifs, i.e., les lois d'évolution de la variable interne  $q^s$ . La définition de l'écoulement inélastique local est élaborée en utilisant un critère de plasticité. Il s'agit d'introduire un domaine élastique (surface de charge) pour chaque système de glissement, ainsi qu'un potentiel de dissipation inélastique, en considérant le formalisme de la plasticité non associée. La surface de charge s'exprime alors pour chaque système de glissement par:

$$f^s = \left| \tau^s \right| - R^s - k_o^s \quad (3.47)$$

où  $k_o^s$  est la contrainte de friction (la scission critique résolue) sur le système  $s$ . Dans cette description de la surface de charge proposée par Abdul-Latif (1994), la variable  $R^s$  représente bien l'évolution de la taille de cette surface, lui donnant un sens physique. En effet, un système est actif si la scission  $|\tau^s|$  est supérieure à  $\tau_c = (R^s + k_o^s)$ . Le taux de glissement peut être déterminé, pourvu que la variable d'érouissage et celle du glissement cumulé  $\lambda^s$  soient connues. Pour chaque système de glissement, le potentiel de dissipation inélastique intra granulaire, s'écrit:

$$F^s = \left| \tau^s \right| - R^s - k_o^s + b^s q^s R^s \quad (3.48)$$

$b^s$  est un coefficient dépendant du matériau, caractérisant la non-linéarité de l'érouissage, pour chaque système ( $s$ ). On retrouve l'érouissage isotrope linéaire dans le cas où  $b^s = 0$ . En effet, étant donné que l'hypothèse de linéarité de cet érouissage isotrope ne correspond pas à la réalité physique des matériaux métalliques, ce terme de non-linéarité est alors introduit dans le potentiel inélastique (3.48). Au niveau granulaire, on obtient les relations d'évolution de la déformation inélastique granulaire et de l'érouissage isotrope intra granulaire par la règle de normalité, en dérivant le potentiel plastique (équation 4.48).

$$\dot{\underline{\epsilon}}_{in}^g = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\lambda}^s \frac{\partial F^s}{\partial \underline{\sigma}^g} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\lambda}^s \text{sign}(\tau^s) \underline{m}^s \quad (3.49)$$

où  $\dot{\lambda}^s$  est le pseudo-multiplicateur inélastique. Les vitesses de glissement de chaque système  $s$ ,  $\dot{\gamma}^s$ , et la vitesse de déformation inélastique  $\dot{\underline{\epsilon}}_{in}^s$  sont définies par:

$$\begin{cases} \dot{\gamma}^s = \dot{\lambda}^s \text{sign}(\tau^s) \\ \dot{\underline{\epsilon}}_{in}^s = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \underline{m}^s \end{cases} \quad (3.50)$$

Au niveau microscopique, l'évolution de la variable de l'écrouissage isotrope est donnée par:

$$\dot{q}^s = \dot{\lambda}^s \frac{\partial F^s}{\partial R^s} = \dot{\lambda}^s (1 - b^s q^s) \quad (3.51)$$

Afin d'éviter les problèmes relatifs à la détermination des systèmes de glissement actifs du modèle, une formulation viscoplastique est choisie. Nous introduisons un seuil de plasticité en traction et en compression sur chaque système de glissement. La densité de dislocation n'intervient pas explicitement. Dans ce cadre, l'expression du multiplicateur inélastique est donnée par une fonction puissance de la surface de charge  $f^s$ :

$$\dot{\lambda}^s = \left\langle \frac{f^s}{K^s} \right\rangle^{z^s} = \left\langle \frac{|\tau^s| - R^s - k_o^s}{K^s} \right\rangle^{z^s} \quad (3.52)$$

où  $K^s$  et  $z^s$  sont des constantes matérielles permettant de décrire l'effet local de la viscosité du matériau. Si l'on souhaite se placer dans le cadre de la plasticité indépendante du temps, le multiplicateur plastique sera généralement déterminé par la condition de cohérence  $\dot{f}^s = 0$ . Toutefois, ce choix a l'inconvénient de poser des problèmes d'indétermination et de non unicité, étant donnée la relative complexité du formalisme par rapport à une certaine approche phénoménologique macroscopique. On peut néanmoins traiter ce cas de la plasticité indépendante du temps en choisissant les coefficients  $K^s$  et  $z^s$ , de manière à rendre la contrainte visqueuse faible et constante. En effet, le comportement plastique peut être pratiquement décrit en choisissant relativement une grande valeur d'exposant  $z^s$  et une petite valeur du coefficient  $K^s$ , i.e., réduisant au minimum l'effet de viscosité.

$$\sigma_v^s = K^s \left| \dot{\gamma}^s \right|^{z^s} \quad (3.53)$$

### III. 2. 3 Homogénéisation

La problématique de l'homogénéisation des matériaux hétérogènes réside dans la méthode employée pour effectuer l'opération de « moyenne » qui est sensée nous permettre d'aboutir aux grandeurs macroscopiques recherchées. Le recours à des moyennes élémentaires sera privilégié. En effet, l'hypothèse d'uniformité de la déformation au niveau des systèmes de glissement n'étant pas réellement établie, la description statistique de l'agrégat n'est donc pas indispensable [Zaoui, 1990]. Dans ce travail, le VER étant supposé monophasé, on peut donc appliquer les opérations de moyenne classique. Ainsi, la vitesse de déformation macroscopique (inélastique et élastique) est considérée comme une simple moyenne de toutes les vitesses de déformations inélastiques et élastiques granulaires sur tout l'agrégat:

$$\underline{\dot{E}}_{in} = \sum_{g=1}^{Ng} f_v^g \underline{\dot{\epsilon}}_{in}^g \quad (3.54)$$

$$\underline{\dot{E}}_e = \sum_{g=1}^{Ng} f_v^g \underline{\dot{\epsilon}}_e^g \quad (3.55)$$

où  $f_v^g$  est la fraction volumique du grain. Donc la vitesse de déformation totale s'écrit :

$$\underline{\dot{E}} = \underline{\dot{E}}_e + \underline{\dot{E}}_{in} \quad (3.56)$$

### III. 2. 4 Validité thermodynamique du modèle

Au niveau d'un monocristal, la relation d'interaction conduit à  $\underline{\sigma}^g = \underline{\Sigma}$ . La dissipation intrinsèque se présente comme:

$$\mathfrak{R}_{in}^g = \underline{\sigma}^g : \underline{\dot{\epsilon}}_{in}^g - \sum_{s=1}^{N_s} R^s \dot{q}^s \geq 0 \quad (3.57)$$

En remplaçant les équations (3.46, 3.47, 3.48, 3.49 et 3.50) dans (3.57), nous pouvons alors montrer l'admissibilité thermodynamique du modèle à cette échelle, pourvu que les paramètres  $b^s$ ,  $Q^s$  et  $k_o^s$  soient positifs aussi. Cette condition est toujours vérifiée si les termes de la matrice  $H_{rs}$  sont toujours positifs. L'admissibilité thermodynamique peut être vérifiée à

l'échelle globale. Pour généraliser l'équation (3.57), la dissipation intrinsèque macroscopique s'écrit comme :

$$\mathfrak{R}_{in}^T = \underline{\Sigma} : \dot{E}^{in} - \sum_{g=1}^{N_g} \sum_{s=1}^{N_s} R^s \dot{q}^s \geq 0 \quad (3.58)$$

Cette étude peut être rangée en trois niveaux, à savoir : le niveau macroscopique, représenté par le VER, le niveau mésoscopique représenté par le grain et le niveau microscopique représenté par le système de glissement (Fig. 3.3). Ce modèle de référence a déjà fait l'objet de plusieurs publications [A. Abdul-Latif et al., 2009 ; J. P. Dingli et al., 2000]. Il constitue donc à cet effet une base fiable sur laquelle nous allons bâtir notre futur développement. Notre étude porte surtout sur un certain nombre de paramètres jugés nécessaires, il s'agit de l'influence du paramètre de couplage  $s$ , de l'influence de l'agrégat sur la réponse macroscopique, de l'influence de la vitesse de sollicitation sur la réponse macroscopique et enfin de la stabilité du modèle par rapport aux types de matériaux.

### III. 3. Quelques résultats et discussions

En effet, le paramètre de couplage joue (ou peut jouer) un rôle clé dans cette modélisation et dans toute la suite. Dans la mesure où il joue la transition entre le comportement élastique et plastique, il peut servir de valeur d'ajustement dans le cas de l'étude de l'évolution de la texture (Chapitre suivant).

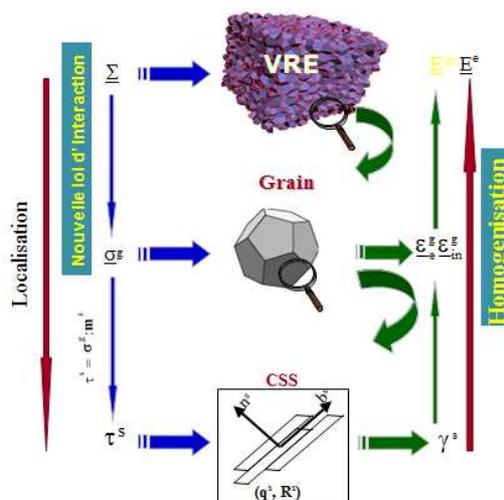


Fig. 3.3 – Schéma des différentes échelles du modèle.

### III. 3.1 Résultats bibliographiques

Le rôle de ce paramètre a déjà été étudié par Abdul-Latif [Abdul-Latif et al., 2002] en choisissant trois valeurs de  $\alpha$  dont deux extrêmes ( $5 \times 10^{-7}$ ,  $5 \times 10^{-6}$ ,  $5 \times 10^{-4}$ ). La Fig 4.4 montre ainsi la contrainte macroscopique pour ces trois valeurs.

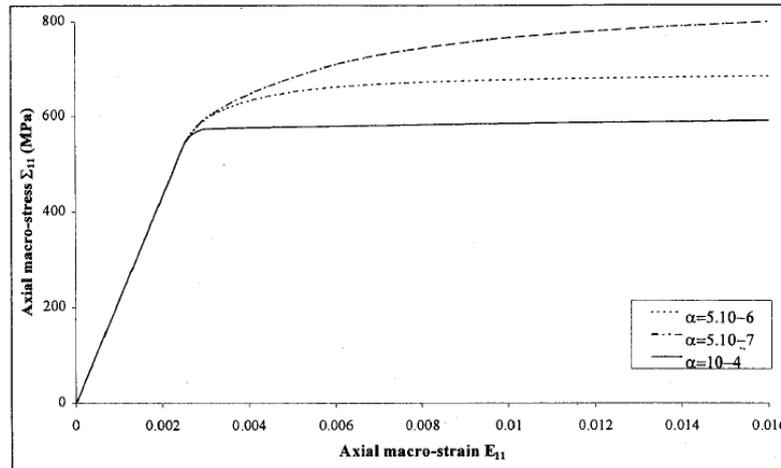
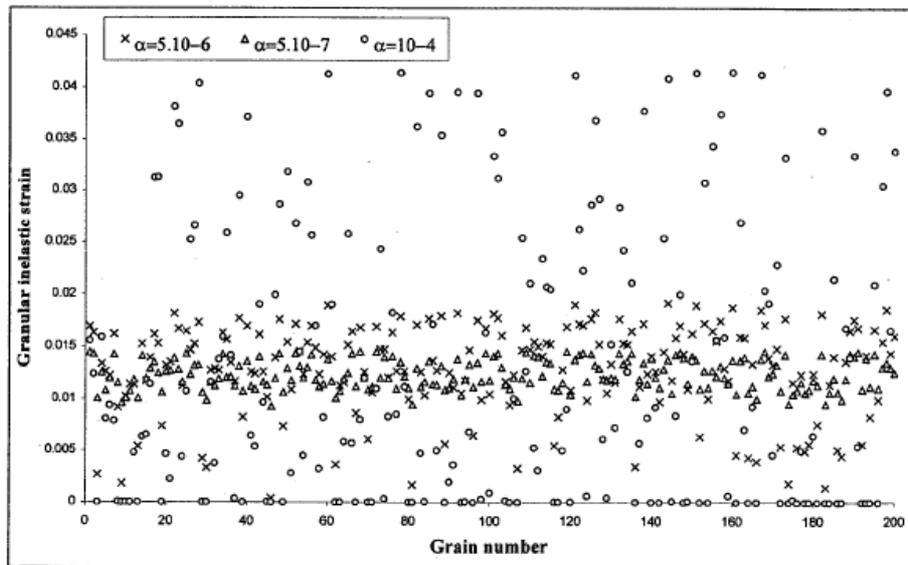
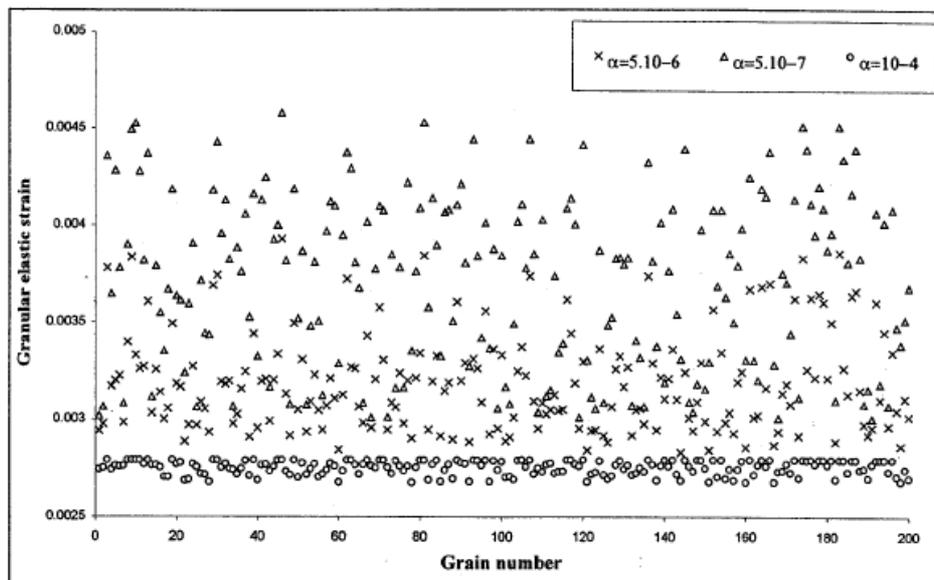


Fig. 3.4 La sensibilité du modèle au paramètre de couplage élasto-plastique  $\alpha$  sous traction uniaxiale, [Abdul-Latif et al., 2002]

Elle montre une évolution totale de l'écroutissage avec deux réponses extrêmes et une réponse intermédiaire. On note une forte hétérogénéité de la déformation plastique granulaire lorsque la valeur de  $\alpha$  est la plus grande possible ( $5 \times 10^{-4}$ ) (Fig. 3.5). En plus, d'après l'équation (3.34), le terme  $\alpha(\underline{s}^g - \underline{S})$  représentatif du comportement plastique est dominant par rapport aux termes représentatifs de l'élasticité. La réponse élastique instantanée devient par conséquent négligeable exhibant au passage une hétérogénéité considérable du comportement inélastique granulaire. Pour  $5 \times 10^{-7}$ , on note un certain équilibre entre les deux termes élastiques de l'équation (3.34). L'hétérogénéité de la réponse élastique granulaire instantanée provoque une augmentation progressive des systèmes glissements. Par conséquent, la relaxation viscoplastique à l'état stationnaire devient homogène (Fig. 3.5 et 3.6), conduisant à un adoucissement relatif des interactions entre les grains et la matrice. A ce titre, l'existence du comportement élastique hétérogène dans la loi d'interaction conduit à une description naturelle de l'écroutissage cinématique global. Ceci peut s'interpréter par le fait que l'espace intergranulaire est de nature élastique [Rougier et al., 1994].



**Fig. 3.5 – Influence du paramètre de couplage élasto-plastique  $\alpha$  sur l’hétérogénéité de la déformation inélastique granulaire de chaque grain du polycristal, [Abdul-Latif et al., 2002]**



**Fig. 3. 6 -Influence du paramètre de couplage élasto-plastique  $\alpha$  sur l’hétérogénéité de la déformation inélastique granulaire de chaque grain du polycristal, [Abdul-Latif et al., 2002]**

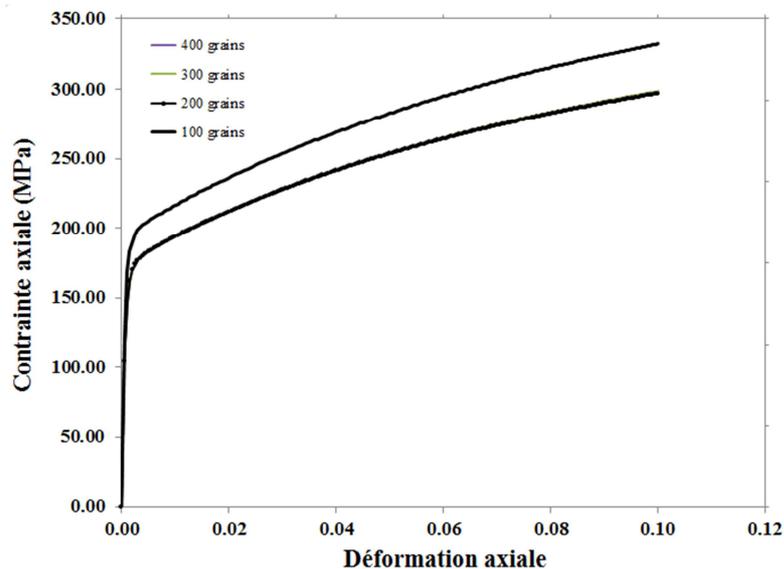
### III. 3.2 Résultats pour l’étude actuelle

Une nouvelle configuration des paramètres identifiés du modèle a cependant été utilisée dans toute la suite du travail. Nous avons choisi en effet d’abord quatre agrégats de 100, 200, 300 et 400 grains tirés au hasard afin d’étudier la stabilité du modèle en fonction de la texture.

**Tableau 3.1 : Paramètres identifiés du modèle pour le Nickel.**

Variable	Symbole	Valeur	Unité
Module d'Young	E	210000	MPa
Coefficient de poisson	$\nu$	0.312	--
Coeff. d'érouissage cinématique	$z^s$	10	--
Coefficient d'érouissage	$K^s$	90	MPa
Contrainte d'écoulement(mono..)	$k_o^s$	15	MPa
Module isotrope	$Q^s$	200	--
Coef. de non linéarité isotrope	$b^s$	20	--
Coefficient de couplage	$\alpha$	0.2E-07	--
Coeffs. d'érouissage isotrope	$h1=h2=h5$	1	--
Coeffs. d'érouissage isotrope	$h6$	2.5	--

Ainsi, les paramètres du modèle, donnés dans le table 4.1, ont été identifiés à partir d'un échantillon de Nickel. L'étude de la stabilité du modèle en fonction de la texture (l'agrégat) montre une stabilité de la réponse macroscopique à partir de 200 grains (Fig. 3.7).



**Fig. 3.7 Etude de l'influence du nombre de grains (agrégat) sur la réponse mécanique.**

On peut donc considérer que le modèle est fiable dans cette gamme des grains. Entre la plus grande vitesse de déformation imposée et la plus petite, on note une différence de contrainte d'écoulement d'environ 176 MPa (Fig. 3.8). Il y a, en effet, une grande sensibilité

du modèle à la vitesse de sollicitation qui peut être comprise sur la base de la loi puissance définie à l'équation (3.38) et caractérisée par le paramètre  $z^s = 10$ .

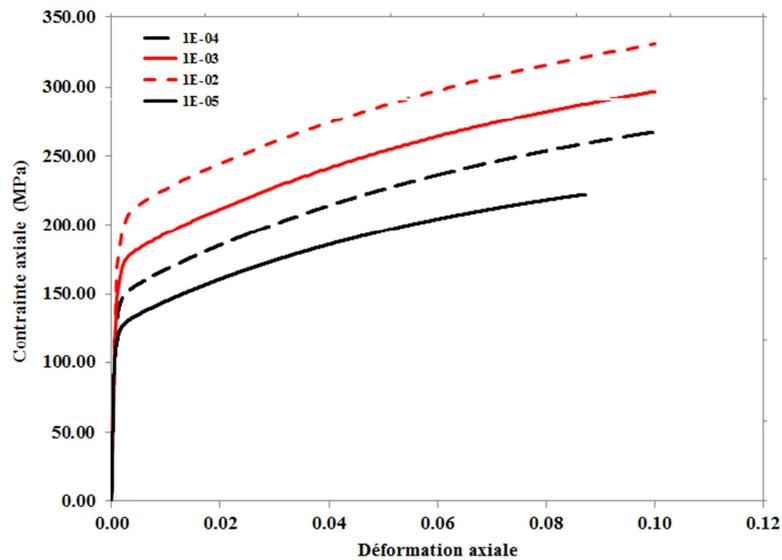


Fig. 3.8 – Sensibilité du modèle à la vitesse de sollicitation.

Enfin, ce chapitre avait pour but de baliser la route afin d'introduire l'étude sur les grandes déformations car, l'évolution de la texture via l'évolution des angles de l'euler (rotation des grains) n'a pas été prise en compte. Néanmoins, il a servi à bâtir un fondement théorique plus ou moins solide appuyé par des publications scientifiques [Abdul-Latif et al., 2009 ; Abdul-Latif et al., 2000, Abdul-Latif et al., 2004].

### III. 4 Prise en compte des grandes déformations

L'étude de la déformation mécanique avec une attention appuyée sur l'évolution de la texture cristallographique a intéressé les physiciens et mécaniciens des matériaux depuis le début du XXe siècle. Les méthodologies de modélisation proposées à cette époque constituent toujours de nos jours des bases solides dans la compréhension de la déformation plastique.

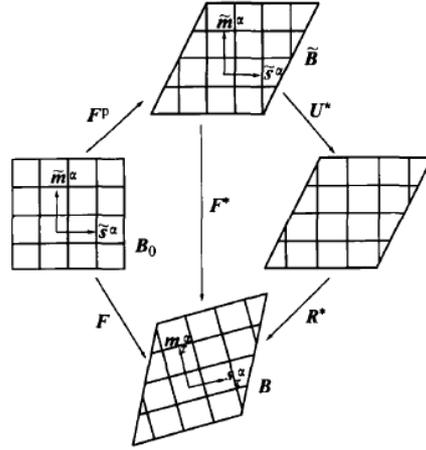


Fig. 3. 9 – Diagramme schématique de la cinématique de déformation d'un monocristal,[Wei et al., 2006]

L'étude de la déformation élasto-plastique en grandes déformations est basée sur le calcul du tenseur gradient de la transformation  $\underline{F}$  tel que :

$$\underline{F} = \underline{I} + \text{grad}\vec{U} \quad (3.59)$$

où  $\underline{I}$  est le tenseur unité d'ordre 2 et  $\text{grad}\vec{U}$  le gradient du vecteur déplacement  $\vec{U}$  dans la configuration initiale du solide. En se basant sur l'hypothèse de la déformation plastique gouvernée par les mécanismes de glissement cristallographique, le réseau cristallin subit une déformation élastique de sorte que, le gradient de la transformation totale peut se décomposer multiplicativement suivant la relation :

$$\underline{F} = \underline{F}^* \underline{F}^p \quad (3.60)$$

où  $\underline{F}^p$  est le "gradient" de la transformation plastique dû au cisaillement sur les plans de glissement cristallographique. La transformation plastique s'effectue à volume constant et l'orientation du réseau reste inchangée de telle sorte  $\det \underline{F}^p = 1$  (incompressibilité plastique).  $\underline{F}^*$  est le gradient de déformation élastique incluant, entre autres, la rotation rigide du réseau. Il peut être déterminé par la relation :

$$\underline{F}^* = \underline{F} \underline{F}^{p-1}, \det \underline{F}^* > 0 \quad (3.61)$$

Le gradient des vitesses dans la configuration courante s'écrit sous certaines conditions:

$$\underline{L} = \dot{\underline{F}} \underline{F}^{-1} = \underline{L}^* + \underline{L}^p \quad (3.62)$$

où  $\underline{L}^p$  est le gradient des vitesses plastiques qui peut être exprimé en fonction des directions et normales aux plans de glissement cristallographique (Eq. 4.5).

$$\underline{L}^p = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \underline{A}^s \quad (3.63)$$

$\underline{A}^s$  est la partie antisymétrique du tenseur d'orientation de Schmid. Les relations élastiques constitutives du matériau cristallin sont définies dans la configuration intermédiaire. Ce qui donne :

$$\underline{T}^* = \underline{\underline{C}} : \underline{E}^* \quad (3.64)$$

$\underline{T}^*$  est le tenseur des contraintes de Cauchy,  $\underline{\underline{C}}$  le tenseur des coefficients et  $\underline{E}^*$  le tenseur des déformations de Green ayant pour expression :

$$\underline{E}^* = \frac{1}{2} (\underline{F}^{*T} \underline{F}^* - \underline{I}) \quad (3.65)$$

La procédure de mise à jour de la texture cristallographique d'un polycristal peut s'avérer très complexe. Pourtant, plusieurs méthodes existent dans la littérature [Anand et Kothari, 1996 ; Wei et al., 2006 ] avec des intégrateurs de plus en plus précis (Runge-Kutta, Newton, Raphaël, ...).

### III. 5 Mise à jour de la texture cristallographique

Le comportement des matériaux poly cristallins soumis à de très grandes déformations a été l'objet de beaucoup d'études à caractère expérimental et théorique [Beausir, 2007 ; Duchêne et al., 2007]. Ces grandes déformations font apparaître, entre autres, des propriétés anisotropie reconnues comme significatives dans beaucoup de procédés de mise en forme (emboutissage, extrusion, laminage, tréfilage...) [Duchêne et al., 2007]. Il est évident que la compréhension des réponses macroscopiques en contrainte - déformation des poly cristaux est particulièrement importante et utile dans la modélisation numérique de ces opérations de mise en forme des métaux. L'introduction des grandes déformations dans le modèle précédent (voir paragraphe III.2. 2) s'est faite sur la base du schéma présenté sur la Fig. 3.10. En effet, lors des grandes déformations de la structure cristalline par les mécanismes de glissement, le réseau cristallin tourne par rapport au réseau fixe (échantillon) [Dommelen et al., 1999]. La

rotation sera supposée être due à la fois au glissement sur les systèmes de glissements locaux et à la rotation rigide du réseau cristallin. La rotation totale se décompose en deux parties additives  $\underline{\Omega} = \underline{\Omega}^p + \underline{\Omega}^*$  où  $\underline{\Omega}^*$  est la rotation du réseau cristallin qui s'écrit :

$$\underline{\Omega}^* = \underline{\Omega} - \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \underline{A}^s, \quad \underline{\Omega}^p = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \underline{A}^s \quad (3.66)$$

Avec  $\underline{A}^s = \frac{1}{2} (\vec{l}^s \otimes \vec{n}^s - \vec{n}^s \otimes \vec{l}^s)$  la partie antisymétrique du tenseur d'orientation de Schmid déjà énoncée précédemment.

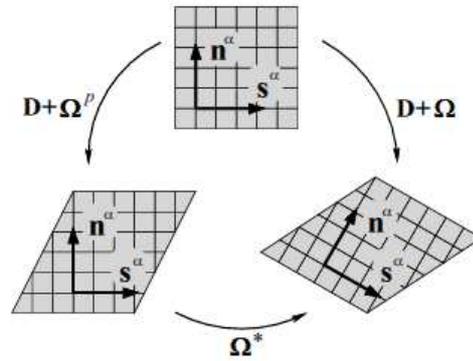


Fig. 3.10 – Schéma représentatif des différentes composantes de la rotation cristalline, [Dommelen, 1999].

Le taux de variation des axes cristallographiques  $\vec{c}$  peut ainsi se calculer par la relation suivante :

$$\dot{\vec{c}} = \underline{\Omega}^* \cdot \vec{c} \quad (3.67)$$

La rotation totale étant considérée un simple étirement, la rotation du réseau cristallin sera essentiellement gouvernée par la rotation plastique granulaire. La solution de l'équation (3.67) pour tout incrément de temps  $\Delta t$  est la suivante :

$$\vec{c}(t + \Delta t) = \underline{Q}^p \cdot \vec{c}(t) \quad \underline{Q}^p = e^{-\underline{\Omega}^p \Delta t} \quad (3.68)$$

Le théorème de Cay-Hamilton permet de linéariser le terme  $\underline{Q}^p$  et l'on obtient les expressions suivantes :

$$\underline{Q}^p = e^{\underline{\zeta}} = \underline{I} + \frac{\sin a}{a} \underline{\zeta} + \frac{1 - \cos a}{a^2} \underline{\zeta}^2 \quad (3.69)$$

$$\text{avec} \quad \underline{\zeta} = -\underline{\Omega}^p \Delta t \quad \text{et} \quad a^2 = -\frac{\text{tr}(\underline{\zeta})^2}{2} \quad (3.70)$$

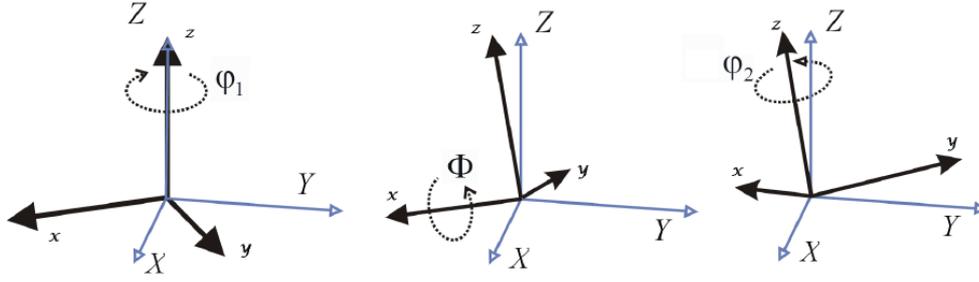
La relation (3.69) permet déjà de procéder à la mise à jour des systèmes de glissement ( $b^s, n^s$ ) à partir de  $\underline{Q}^p$  par les relations :

$$\vec{l}^s = \underline{Q}^p \vec{l}_o^s \quad \text{et} \quad \vec{n}^s = \underline{Q}^p \vec{n}_o^s \quad (3.71)$$

où  $\vec{l}_o^s$  et  $\vec{n}_o^s$  sont respectivement la direction de glissement et la normale au plan de glissement dans la configuration initiale du matériau. Nous rappelons, en plus que notre étude porte sur des matériaux polycristallins de type CFC comme le Nickel. Ce qui nous autorise à définir un système d'axes ( $X_i, i = 1, 2, 3$ ) lié au système cristallographique de directions (100), (010) et (001). Le cristal est repéré dans ce système d'axes (repère de l'éprouvette) par trois angles dits d'Euler ( $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ ) (Fig. 4. 3). Dans le formalisme de Bunge, la matrice de la transformation  $\underline{P}$  obtenue après trois rotations successives autour des axes ( $X_i$ ) :

$$\underline{P} = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \sin\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\phi & \cos\varphi_2 \sin\varphi_1 + \sin\varphi_2 \cos\varphi_1 \cos\phi & \sin\varphi_2 \sin\phi \\ -\sin\varphi_2 \cos\varphi_1 - \cos\varphi_2 \sin\varphi_1 \cos\phi & -\sin\varphi_2 \sin\varphi_1 + \cos\varphi_2 \cos\varphi_1 \cos\phi & \cos\varphi_2 \sin\phi \\ \sin\varphi_1 \sin\phi & -\cos\varphi_1 \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

D'autres formalismes existent dans la littérature [Zamiri et al., 2007]. Notre étude se limitera au formalisme de Bunge. En effet, le formalisme de Bunge consiste à repérer un cristal suivant trois axes cristallographiques par trois angles appelés angles d'Euler. Lors de la déformation du cristal en chargement, celui-ci tourne d'abord autour de l'axe vertical (axe Z de la Fig. à gauche) puis autour de l'axe horizontal transformé (axe x de la figure au centre) et enfin autour de l'axe vertical transformé (axe z de la figure à droite). Ces trois rotations permettent donc de construire trois transformations du cristal dont la transformation globale donne la transformation  $\underline{P}$  de l'équation (3.72).



**Fig. 3.11. - Angle d'Euler dans la notation de Bunge**

En plus, nous considérons vraie la relation (3.67) pour la matrice de transformation (matrice de passage)  $\underline{P}$ . Ainsi, nous écrivons:

$$\dot{\underline{P}} = \underline{\Omega}^* \underline{P} \quad (3.73)$$

La résolution de cette équation permet de trouver la loi d'évolution de ces angles d'Euler et par conséquent la relation d'évolution de la texture cristallographique. Les principales inconnues dans cette équation sont les angles d'Euler  $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ . On obtient après résolution les différentes équations suivantes [Kowalczyk et al., 2003]:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_1 &= \frac{1}{\sin\phi} (\Omega_{23}^* \sin\varphi_2 - \Omega_{13}^* \cos\varphi_2), \quad \dot{\phi} = (\Omega_{23}^* \cos\varphi_2 + \Omega_{13}^* \sin\varphi_2) \\ \dot{\varphi}_2 &= \Omega_{12}^* - \frac{\cos\phi}{\sin\phi} (\Omega_{23}^* \sin\varphi_2 - \Omega_{13}^* \cos\varphi_2) \end{aligned} \quad (3.74)$$

La mise à jour des angles d'Euler, et donc de la texture cristallographique, s'effectue selon la relation suivante :

$$\Phi_i^{t+\Delta t} = \Phi_i^t + \dot{\Phi}_i \Delta t \quad i=1,3 \quad (3.75)$$

avec  $\Phi = (\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ .

### III. 6 Influence de la rotation cristallographique

L'ensemble des modifications liées à la prise en compte de l'évolution de la texture cristallographique à travers la rotation cristallographique peut se résumer dans la réécriture des équations ci-dessous, en ne considérant que celles qui sont véritablement affectées par la rotation cristallographique. Cette évolution se fait à deux niveaux, d'abord au niveau des

variables du modèle au niveau microscopique et granulaire. Ensuite, au niveau des angles d'Euler.

- Au niveau local les équations principalement affectées sont :

$$\vec{l}^s = \left( \underline{I} + \frac{\sin a}{a} \underline{\zeta} + \frac{1-\cos a}{a^2} \underline{\zeta}^2 \right) \vec{l}_o^s ; \quad \vec{n}^s = \left( \underline{I} + \frac{\sin a}{a} \underline{\zeta} + \frac{1-\cos a}{a^2} \underline{\zeta}^2 \right) \vec{n}_o^s \quad (3.76)$$

Ici,  $l_o^s$  et  $n_o^s$  représentent les valeurs initiales de la direction et de la normale des systèmes de glissement en l'absence de toute rotation cristalline

$$\underline{m}^s = \frac{1}{2} [\vec{l}^s \otimes \vec{n}^s + \vec{n}^s \otimes \vec{l}^s] \quad (3.77)$$

- Au niveau des angles d'Euler, le calcul de la rotation cristallographique affecte directement l'équation (3.66) qui s'écrira:

$$\underline{\Omega}^* = \underline{\Omega} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \underline{A}^s \quad (3.78)$$

## III.7 Résultats et discussion

### III.7.1 Caractéristiques de l'essai numérique

Avant l'application du modèle sur le Nickel, un agrégat de 200 grains tirés au hasard a été utilisé. Chaque grain est repéré dans l'espace de l'échantillon par les trois angles d'Euler. Dans un premier temps, nous avons choisi les caractéristiques d'un Nickel conventionnel pour simuler numériquement un essai de traction et de compression à 100% de déformation.

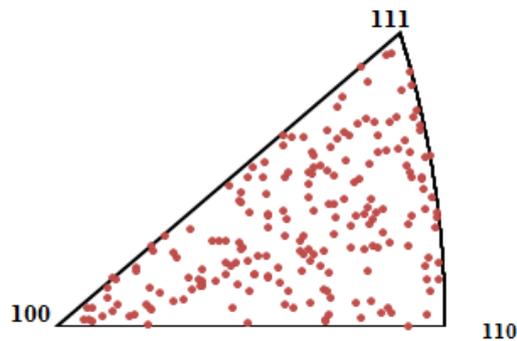


Fig. 3.12 –Texture théorique initiale pour 200 grains.

La raison d'un tel choix, repose sur la possibilité de comparer au moyen des figures de pôles inverses, nos résultats à ceux fournis par le modèle de Taylor (déformation plastique uniforme pour tous les grains), ceux fournis par le modèle de Sachs (contrainte uniforme pour tous les grains) et à ceux fournis par le modèle VPSC de l'approche auto-cohérente.

**Tableau 3.2 - Paramètres identifiés du modèle (Nickel) en grandes déformations pour la traction et la compression.**

Variable	Symbole	Valeur	Unité
Module d'Young	$E$	210000 / 214000	MPa
Coefficient de poisson	$\nu$	0.312 / 0.310	--
Coefficient de viscosité	$z^s$	10	--
Coefficient de viscosité	$K^s$	90	MPa
Contrainte d'écoulement(mono..)	$k_o^s$	15	MPa
Module d'écrouissage isotrope intragranulaire.	$Q^s$	200	--
Coefficient de non linéarité de l'écrouissage isotrope	$b^s$	20	--
Coefficient de couplage	$\alpha$	0.2E-07	--
Coeffs. d' $H_{rs}$	$h1=h2=h5$	1	--
Coeffs. d' $H_{rs}$	$h6$	2.5	--

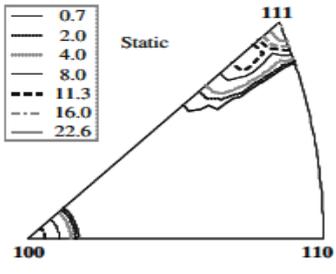
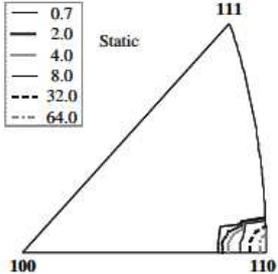
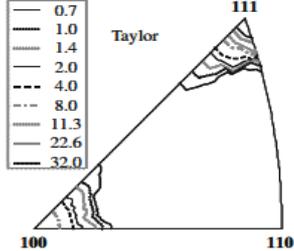
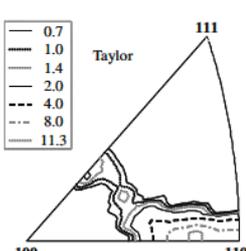
La figure de pôle inverse de la texture initiale pour un échantillon représentatif d'agrégat de 200 grains est donnée Fig. 3.12 ci-dessus. Dans cette nouvelle configuration, les paramètres du modèle ont été choisis tels que définis dans le Tableau 3.2 ci-dessus. Tous les calculs sont effectués à la même vitesse de déformation de  $0.001 \text{ s}^{-1}$ .

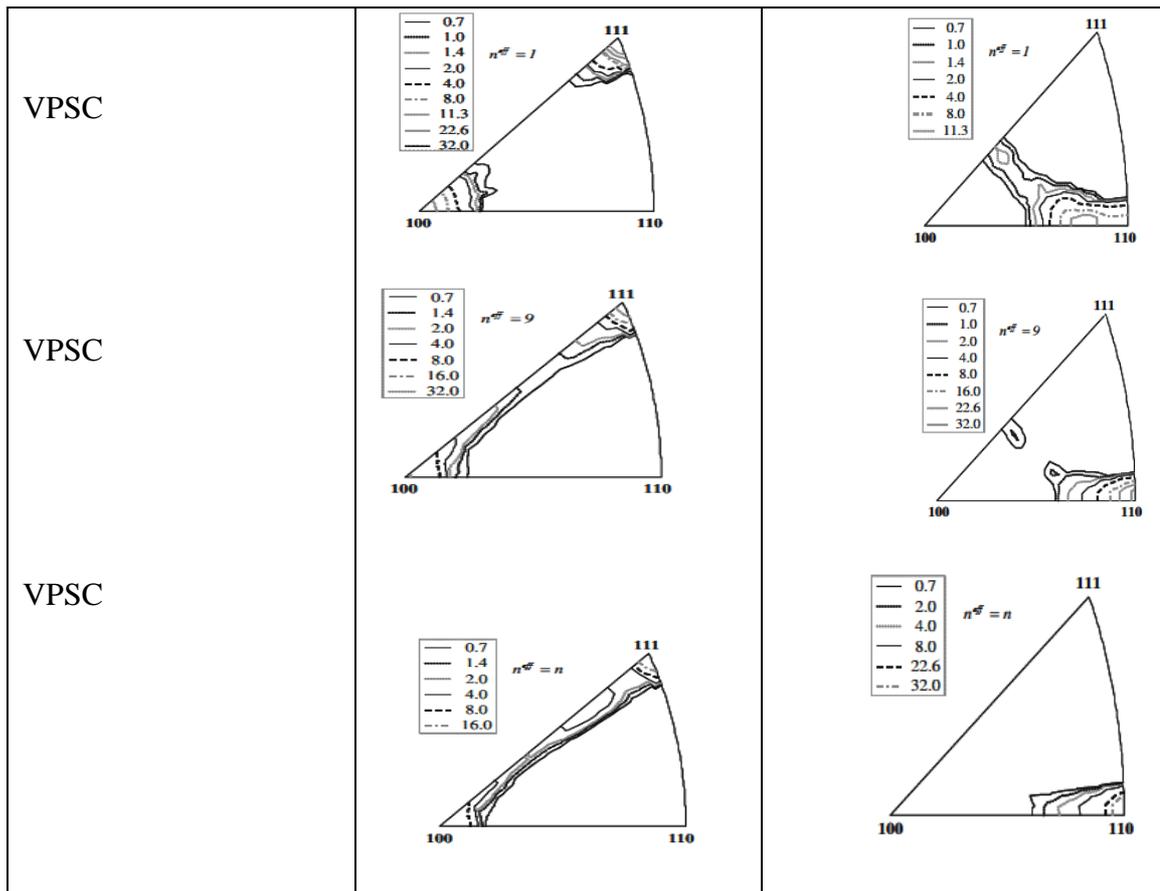
### III.7.2 Résultats selon les modèles de Taylor, Sachs et VPSC

Les critères de plasticité de Taylor et de Sachs suggèrent qu'à 100% de déformation en traction, tous les grains du matériau migrent vers deux pôles par formation de deux fibres localisées plus particulièrement aux pôles de direction  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . L'intensité des pôles

diffère d'un critère de plasticité à l'autre mais, la tendance reste la même. En compression par contre, les migrations sont concentrées vers les pôles  $\langle 110 \rangle$ . On obtient une seule fibre qui change d'intensité selon la méthode. La fibre a une grande longueur et une grande intensité avec Taylor alors que l'intensité est petite avec Sachs et plus concentrée autour du pôle  $\langle 110 \rangle$ . Mais, toutes ces observations cachent une insuffisance de possibilités d'ailleurs liées aux limitations constitutives de ces deux derniers modèles. C'est pourquoi, le modèle VPSC avait été proposé afin de combler ces insuffisances, la texture étant gérée par un paramètre  $n^{eff}$ . Ce paramètre dépend de la formulation choisie et fut introduit dans le modèle auto-cohérent par Lebensohn et Tomé, [1993]. Il peut prendre différentes valeurs et définit l'intensité du couplage entre les contraintes déviées et les vitesses de déformations déviées. Les résultats de ces différentes méthodes se trouvent consignés dans le Tableau 3.3. Le paramètre de couplage élasto-viscoplastique de notre modèle auto-cohérent permettra de migrer entre ces trois modèles.

**Tableau 3.3 – Figures de pôles inverses pour le modèle de Taylor, Sachs et VPSC à 100 % de déformation (M'Guil, 2006).**

Auteurs	Traction	Compression
Sachs (1928)		
Taylor (1938)		



### III.7.3 Résultats de notre modèle

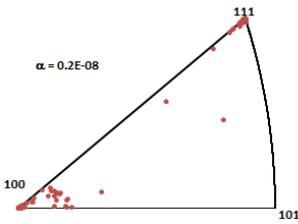
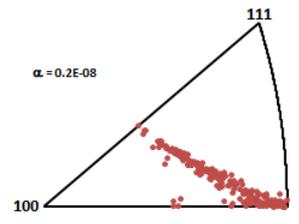
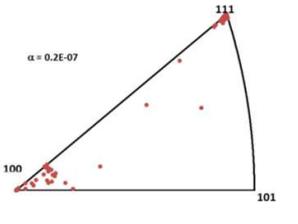
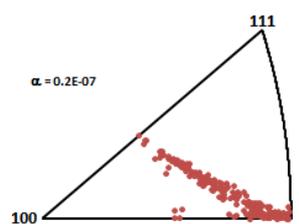
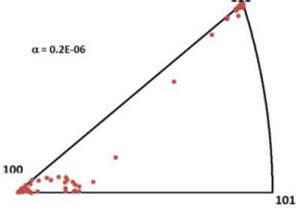
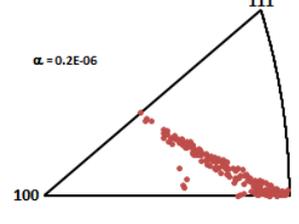
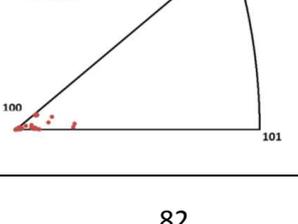
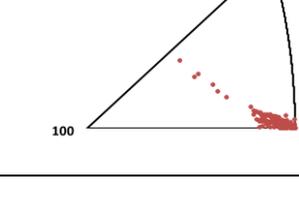
Des simulations numériques de traction et de compression à 100% de déformation sont réalisées pour plusieurs valeurs du paramètre  $\alpha$ . Dans la pratique, peu d'expériences mécaniques atteignent 100% de déformations. Pourtant, afin de valider l'évolution de la texture cristallographique, cette possibilité est numériquement acceptable [Taylor, 1938]. Nous considérons ensuite que les valeurs  $0.2 \times 10^{-8}$  et  $0.2 \times 10^{-4}$  constituent les valeurs minimale et maximale de  $\alpha$  utilisées ici.

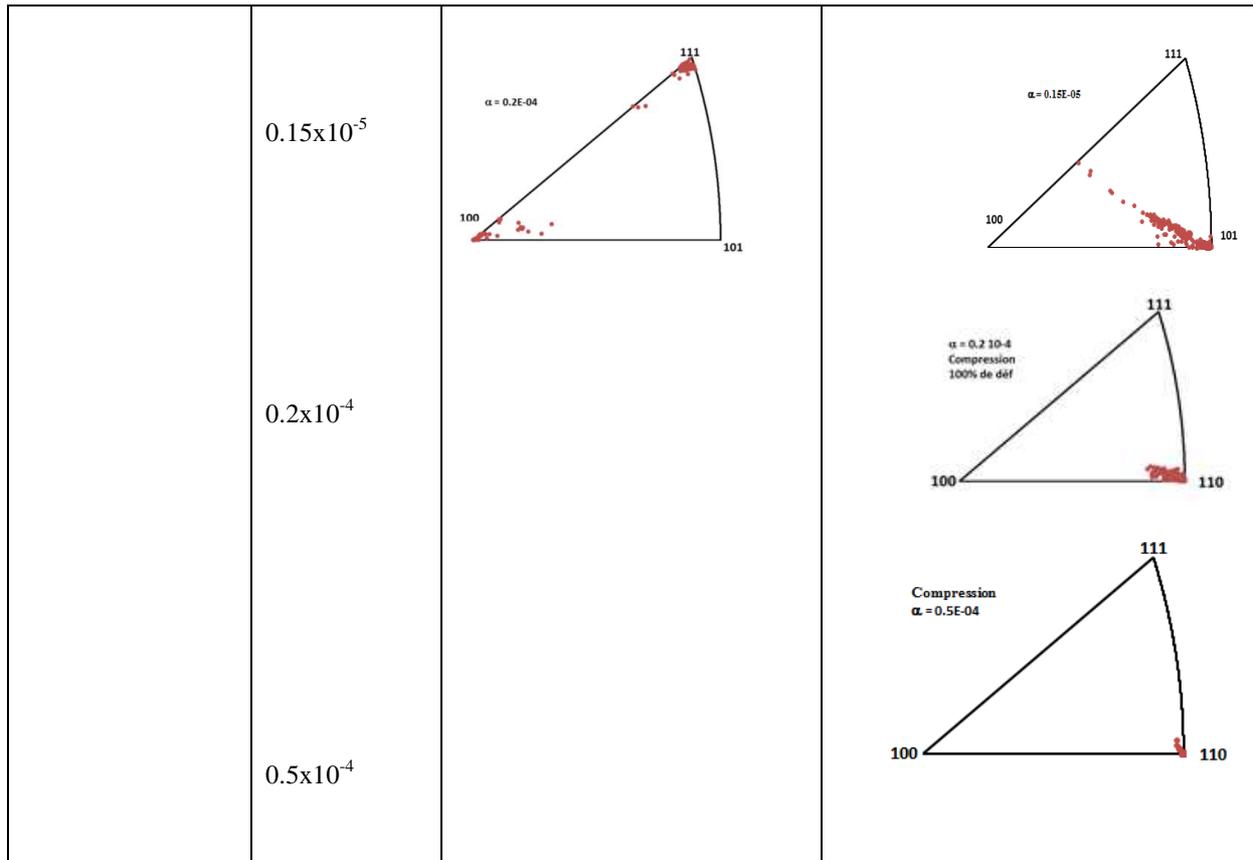
Le Tableau 3.4 donne les différentes figures de pôles inverses de notre modèle en traction et en compression pour différentes valeurs de  $\alpha$ . Ces résultats montrent une bonne tendance, comparés à ceux fournis par les modélisations de Taylor, Sachs et VPSC (viscoplastique self-consistent). Pour des conditions extrêmes, c'est-à-dire en prenant le coefficient de couplage élasto-viscoplastique plus petit (proche du critère de Taylor) ou plus grand (proche du critère de Sachs), on obtient les figures pôles inverses correspondant aux tendances de Taylor et de

Sachs respectivement excepté l'intensité des fibres. Mais ceci peut avoir plusieurs explications dont on peut citer par exemple entre autres :

- la loi d'interaction grains-matrice dont la nôtre, prenant en compte à la fois le comportement élastique et plastique contre une plasticité visqueuse rigide [M'Guil, 2006],
- les constantes du modèle qui ne sont pas forcément les mêmes pour le même matériau,
- enfin la méthode d'intégration des relations d'évolution de la texture cristallographique peut dans certaines circonstances induire des variations susceptibles d'engendrer des différences conséquentes.
- 

**Tableau 3.4 – Différentes figures pôles inverses de notre modèle.**

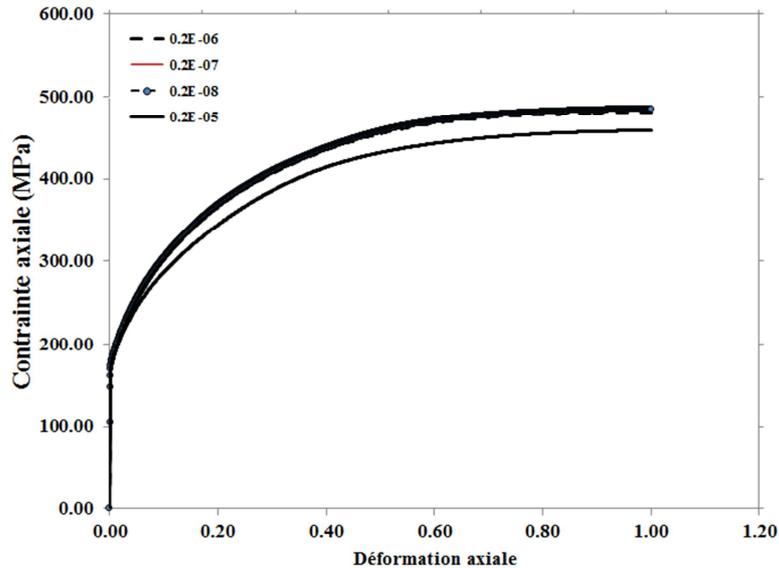
Auteur	$\chi$	Traction	Compression
<b>Notre modèle</b>	$0.2 \times 10^{-8}$		
	$0.2 \times 10^{-7}$		
	$0.2 \times 10^{-6}$		
	$0.2 \times 10^{-5}$		



Le paramètre de couplage élastoplastique [Abdul-Latif et al., 2002] peut influencer considérablement le comportement mécanique macroscopique (contrainte-déformation), selon que l'on considère la contrainte mécanique uniforme dans le matériau [Sachs, 1928] ou l'on considère le champ des déformations plastiques uniforme dans le matériau [Taylor, 1938]. Ces deux comportements se traduisent dans notre étude par le choix d'une valeur plus petite ou plus grande du paramètre de couplage élastoplastique  $\alpha$ . Ceci peut se vérifier en calculant la contrainte macroscopique pour différentes valeurs de  $\alpha$ .

### III.7.4 Influence du paramètre de couplage sur la contrainte d'écoulement

Se servant des paramètres du Tableau 3.2, plusieurs calculs en traction et en compression sont réalisés à 100% de déformation (Fig. 3.13).



**Fig. 3.13 – Influence du paramètre de couplage  $\alpha$  sur la contrainte mécanique macroscopique en traction.**

Contrairement au calcul en petites déformations [Abdul-Latif, 2002], l'écart entre les deux réponses mécaniques macroscopiques extrêmes est petit. On note une évolution de l'écroutissage alors que la contrainte mécanique globale atteint vite un régime asymptotique autour de 60% de déformation. Ceci, lorsque le paramètre de couplage devient de plus en plus petit. En compression, on constate une hétérogénéité élevée. L'évolution de l'écroutissage présente plusieurs scénarios pour les valeurs extrêmes de  $\alpha$ . En effet, le matériau présente un écroutissage léger au début de la simulation ( $\alpha = 0.2 \cdot 10^{-5}$ ) pour se durcir davantage à la fin de la simulation alors qu'il est résistant au début de la simulation ( $\alpha = 0.2 \cdot 10^{-8}$ ) pour s'adoucir à la fin de la simulation. En réalité, peu d'essais mécaniques dépassent les 50% de déformation pour les matériaux UFG. C'est pourquoi, une étude a été réalisée visant à évaluer la corrélation la déformation et la variation de la texture cristallographique. Pour ce faire, plusieurs ordres de déformations ont été définis dont 30%, 50%, 60% et 80% puis, des simulations en traction et en compression du matériau ont été réalisées. Le Tableau 3.5 fournit les différentes tendances partant des plus petites valeurs des déformations aux plus grandes. Le choix du paramètre de couplage a été fait de manière à s'approcher davantage du modèle de Sachs. Ceci se traduit dans notre modélisation par la prise d'une valeur de  $\alpha$  plus grande ( $\alpha = 0.2 \cdot 10^{-5}$ ). Nous constatons que la migration vers les pôles augmente avec le degré de déformation.

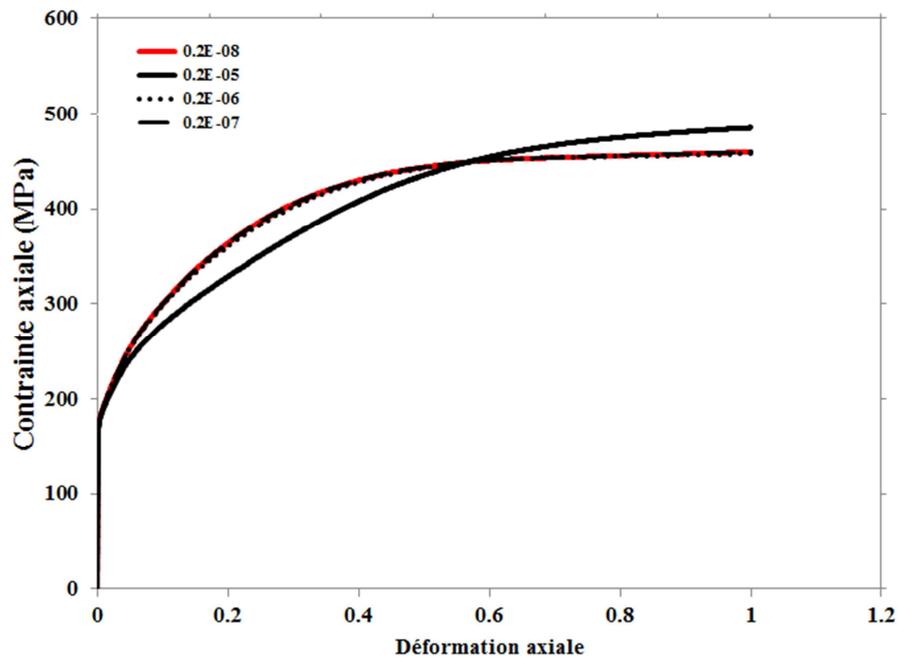
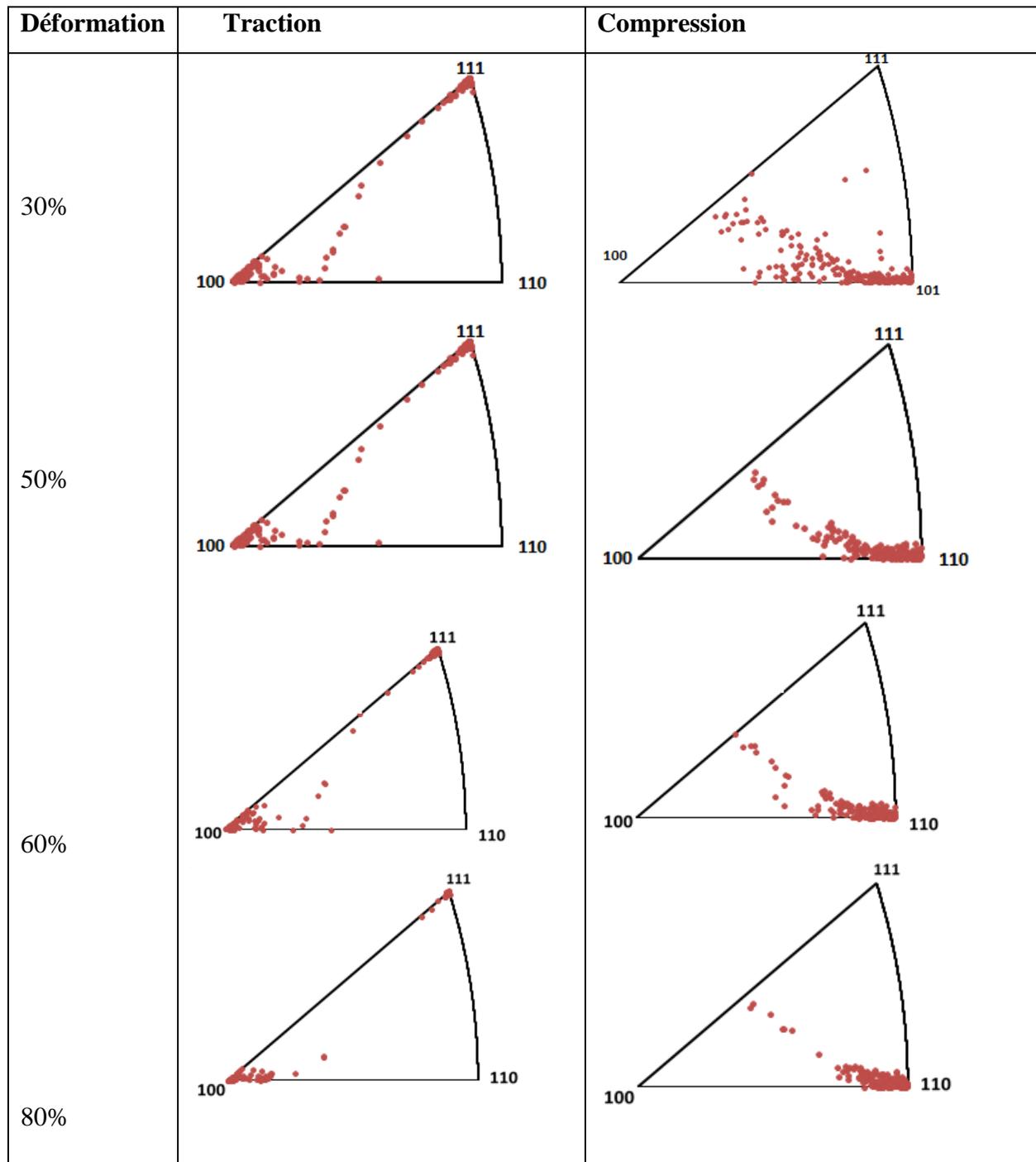


Fig. 3.14 – Influence du paramètre de couplage  $\alpha$  sur la contrainte mécanique en compression.

### III.7.5 Comparaison simulation numérique - expérience

Dans la partie suivante, nous nous sommes procurés du Nickel conventionnel (300 nm) déformé en traction uni-axiale [Dutel, 2013]. Les fichiers de données constitués des contraintes et déformations pour chaque incrément de temps ont été comparés au résultat de la simulation après des processus d'identification avec le logiciel d'optimisation SIDOLO [Pilvin, 1983] (Fig. 3.14).

**Tableau 3.5 – Evolution de la texture en fonction de la déformation macroscopique.**



Les paramètres identifiés avec le logiciel SIDOLO sont regroupés dans le Tableau 3.2. La valeur de déformation a été adaptée afin de faciliter la comparaison des résultats expérimentaux aux résultats numériques obtenus par la modélisation. La vitesse des déformations était prise égale à  $3.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . On observe une bonne capacité du modèle à reproduire l'essai de traction. Enfin, il n'est pas raisonnable d'étudier le comportement mécanique des matériaux UFG sans évoquer l'influence de la taille des grains, celle-ci jouant en effet un rôle capital dans le processus de déformation plastique. Dans le chapitre qui va

suivre, nous allons coupler l'influence de la taille des grains aux comportements élastoplastiques définis ci-dessus.

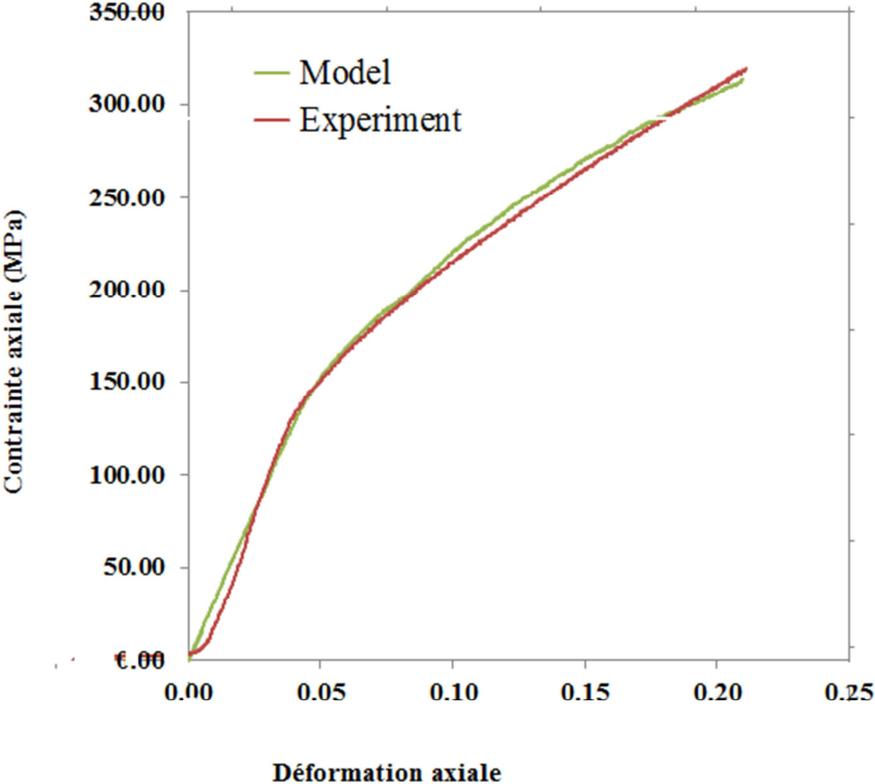


Fig. 3.15 : Identification des paramètres - comparaison entre l'expérience et la simulation

# Chapitre IV : Microstructure et contrainte d'écoulement : effet de taille de grain

---

<i>IV. 1 Variation de la densité des dislocations</i> .....	90
<i>IV. 2 Nouvelles modélisations de l'effet taille de grains.</i> .....	96
<i>IV. 2.1 Modélisation à zones de transitions : modèle 1.</i> .....	96
<i>IV. 2.2 Prise en compte des mécanismes de diffusion thermique : modèle 2.</i> .....	97
<i>IV. 3 Résultats et discussions.</i> .....	99
<i>IV. 3.1 Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille des grains modèle 1</i> .....	100
<i>IV.3.2 Influence de la vitesse de sollicitation et du coefficient de diffusion sur la contrainte d'écoulement</i> .....	101
<i>IV. 3.3 Mise en application au modèle micromécanique</i> .....	104
<i>IV. 3.3.1 Comparaison des réponses mécaniques à la loi de Hall-Petch classique</i> .....	104
<i>IV. 3.3.2 Influence de la taille de grains sur la résistance mécanique</i> .....	106
<i>IV. 3.3.3 Représentation et profile des figures de pôles inverses</i> .....	107
<i>IV. 3.3.4 Influence du coefficient de diffusion thermique dans le processus d'inversion de la contrainte d'écoulement : comparaison avec les résultats de la littérature</i> .....	108
<i>IV. 3.3.5 Effet de la vitesse de chargement sur la contrainte mécanique</i> .....	110
<i>IV. 3.3.6 Contrainte mécanique locale (grains) et variation des angles d'Euler en fonction de la contrainte plastique granulaire</i> .....	111
<i>IV. 3.3.7 Influence de la taille de grains sur le profile des figures pôles inverses</i> .....	114

*IV. 3.3.8 Comparaison des contraintes mécaniques en traction et en compression :  
recherche du phénomène de l'asymétrie traction/compression.....115*

L'étude des matériaux poly cristallins avec un focus sur les effets de taille de grains est d'un intérêt scientifique et technologique majeurs. L'élaboration puis la caractérisation de ces matériaux avec des tailles de grains de plus en plus petites a révélé des propriétés physiques et mécaniques intéressantes, comme par exemple une résistance mécanique élevée telle que décrit dans les chapitres précédents. Plusieurs modèles historiques (que nous citerons à titre indicatif) ont été proposés pour caractériser la loi de Hall-Petch dans les matériaux UFG (100 nm -1000 nm) et NC (< 100 nm). Il s'agit principalement du modèle d'empilements développé par Eshelby et Nabarro (1951), du modèle de stockage des dislocations aux joints de grains responsables du durcissement cristallin par les contraintes internes qu'elles induisent à l'intérieur des grains [Kocks et al., 2003] et du modèle d'Ashby encore appelé modèle d'accommodation dans lequel la loi de Hall-Petch est explicitement supposée être un effet de taille intrinsèque.

Tous ces modèles mettent en avant la notion des dislocations et, dans le cas des matériaux dont les tailles des grains sont de plus en plus petites, la dynamique des dislocations s'annonce déterminant dans l'étude puis la caractérisation de ces derniers matériaux.

#### IV. 1 Variation de la densité des dislocations

La densité de dislocation est réputée être à l'origine des mécanismes d'annihilation [Kocks, 1979; Caillard et Martin, 2003] et de restauration dynamique tels qu'exprimés dans l'équation ci-dessous :

$$\frac{d\rho_s}{d\varepsilon} = \frac{1}{b} \left( \frac{1}{L} - r\rho_s \right) \quad (4.1)$$

où  $\rho_s$  est la densité des dislocations stockées aux joints de grains,  $b$  le vecteur de Burgers,  $r$  le coefficient de restauration dynamique et  $L$  le libre parcours moyen. La plasticité cristalline induite par l'activité des dislocations représente presque la totalité des principaux mécanismes de déformations pour des tailles de grains entre 30 nm et 100 nm [Cheng et al., 2003]. Si la plupart des auteurs s'accorde sur ces résultats, il apparaît cependant que la plasticité cristalline induite par l'activité des dislocations ait été observée jusqu'à des tailles de grains de 10 nm. Au-dessous de cette taille, l'activité des dislocations disparaît peu à peu [Swygenhoven et al., 1997].

Afin d'étudier la relation entre densité des dislocations et plasticité cristalline des matériaux UFG, nous avons considéré une distribution uniforme des dislocations [Galindo-Nava et al., 2008 ; Li et Soh, 2012]. L'évolution de la densité moyenne  $\rho_s$  en fonction du glissement  $\gamma$  s'écrit :

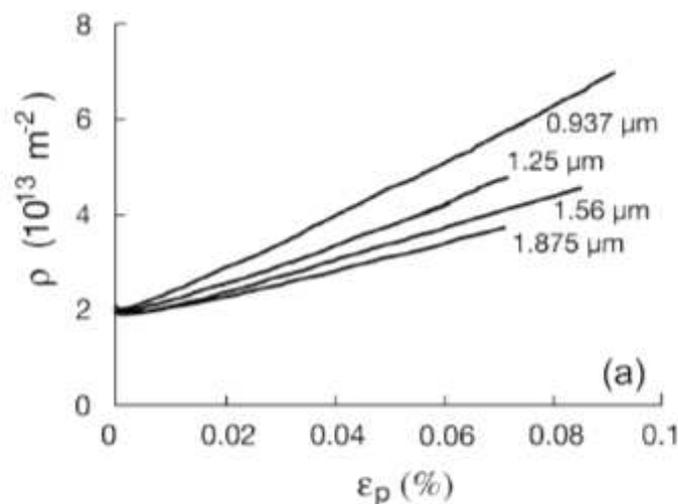
$$\frac{d\rho_s}{d\gamma} = k_f \sqrt{\rho_s} - (k_a + k_b) \rho_s \quad (4.2)$$

où  $k_f$  est le coefficient de stockage de dislocation et  $f = k_a + k_b$  le coefficient de restauration dynamique ;  $k_a$  le coefficient d'annihilation des dislocations vis par les mécanismes de glissement et détermine l'intensité de la restauration dynamique du métal déformé,  $k_b$  le coefficient d'annihilation des dislocations vis accumulées aux joints de grains. Ces coefficients peuvent être obtenus à partir des données expérimentales en décrivant le comportement d'alliages spécifiques. La résolution de l'équation 5.2 après quelques hypothèses et introduction de la relation d'Orowan donne :

$$\rho(\varepsilon) = \left[ \frac{k_f}{k_a + \frac{B}{d^2}} + 2 \left( \sqrt{\frac{\beta_o}{bd}} - \frac{k_f}{k_a + \frac{B}{d^2}} \right) \left\{ 1 - \exp \left( -\frac{\rho_m b v}{6} \left( k_a + \frac{B}{d^2} \right) \frac{\varepsilon}{\dot{\varepsilon}} \right) \right\} \exp \left( -\frac{\rho_m b v}{3} \left( k_a + \frac{B}{d^2} \right) \frac{\varepsilon}{\dot{\varepsilon}} \right) \right]^2 \quad (4.3)$$

avec  $\rho_m$  la densité des dislocations mobiles en régime d'équilibre (saturation),  $v$  la norme de la vitesse moyenne des dislocations,  $d$  la taille des grains et  $B$  fonction de  $(T, \eta, \dot{\varepsilon})$  est une constante liée au mécanisme d'activation thermique. Tous les matériaux CFC ont des valeurs de  $B$  très proches les unes des autres. En fonction de l'activation thermique, elle a pour expression :  $B = \frac{4\eta D_{gb}}{m\dot{\varepsilon}}$ , avec  $D_{gb}$  le coefficient de diffusion aux joints de grains dont la valeur à température ambiante varie entre  $10^{-19}$  et  $10^{-22}$  m<sup>2</sup>/s [Kim et al., 1999 ; Li, 1963; Meyers et al., 2006 ],  $\eta = \frac{\mu b^3}{k_B \theta}$  le coefficient d'activation thermique. Dans cette nouvelle expression,  $b$  est le vecteur de Burgers et  $b^3$  le volume d'activation,  $\theta$  la température et  $\mu$  le module de cisaillement.

Ce calcul représente un mécanisme de déformation continue couplant les mécanismes internes et externes sans faire exister une certaine barrière physique entre les deux comme souvent présenté par certains auteurs [Malygin, 2008]. L'équation 5.3 montre que  $B$  a la dimension d'une taille de grains à la puissance deux. Des études montrent que pour les matériaux CFC, il a des valeurs comprises entre 100 nm et 200nm en racine carrée. Dans cette hypothèse, les deux valeurs du coefficient de diffusion obtenues sont  $3.8303 \times 10^{-21} \text{ m}^{-2}$  et  $1.5583 \times 10^{-20} \text{ m}^{-2}$  respectivement pour une vitesse de déformation de  $3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  à la température ambiante. Ces valeurs sont très proches des valeurs citées plus haut. L'étude de la variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique intéresse plusieurs auteurs. Des résultats caractéristiques existent dans la littérature [De Sansal, et al., 2010]. Ces derniers ont étudié la variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique pour différentes tailles de grains (937 nm, 1250 nm, 1560 nm, 1875 nm) (Fig. 4.1).

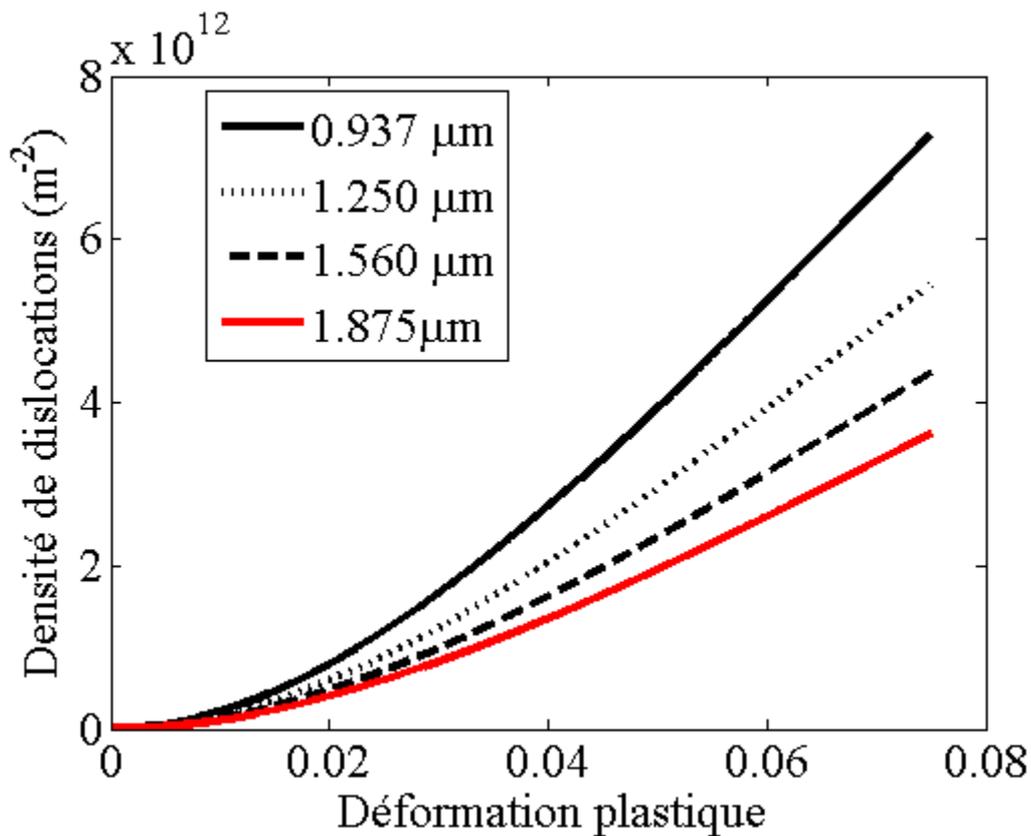


**Fig. 4.1 – Densité des dislocations totale en fonction de la déformation axiale plastique pour différentes tailles de grains [De Sansal et al., 2010].**

Cette courbe montre que la densité des dislocations augmente avec la déformation plastique. Aussi, cette densité est d'autant plus grande que la taille des grains est petite, ce qui s'accorde bien avec les observations expérimentales. En choisissant les mêmes tailles de grains que celles reportées par l'étude de C. de Sansal pour la même déformation, on obtient les résultats de la Fig 5.2. Les paramètres utilisés pour le calcul ont été pour la plupart obtenus dans les publications de la littérature [Meyers et al., 2006 ; Malygin, 2008 ; Ronald, 2009] et définis dans le Tableau 4.1 :

**Tableau 4.1 : Différents coefficients du modèle de dynamique des dislocations.**

Variable	Valeur
$k_a$	3.4
$\dot{\epsilon}$	$0.001 \text{ s}^{-1}$
$D_{gb}$	$3.8303 \times 10^{-21} \text{ m}^{-2} / 1.5583 \times 10^{-20} \text{ m}^{-2}$
$\beta_o$	0.01
$K_B$	$1.3806503 \times 10^{-23}$
$b k_f$	0.01
$\theta$ (Cu, Ni, Al)	25°C / 42.1 GPa, 76 GPa, 26 GPa
$b$ (Cu, Ni, Al)	0.256 nm, 0.24918 nm, 0.2862 nm



**Fig. 4.2 – Variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique,  $\rho_m = 9.75 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ .**

La modélisation reproduit efficacement le comportement observé par Kubin pour la même vitesse de déformation ( $0.001 \text{ s}^{-1}$ ). L'ordre de grandeur de la densité des dislocations est cependant différente. Cette différence peut-être justifiée par le choix de la densité de dislocation initiale. L'autre élément important à signaler est l'augmentation considérable de la densité des dislocations lorsque la taille de grains diminue, et la chute brutale à partir d'une taille de grains critique (entre 30 et 60 nm) ( Fig. 4.3).

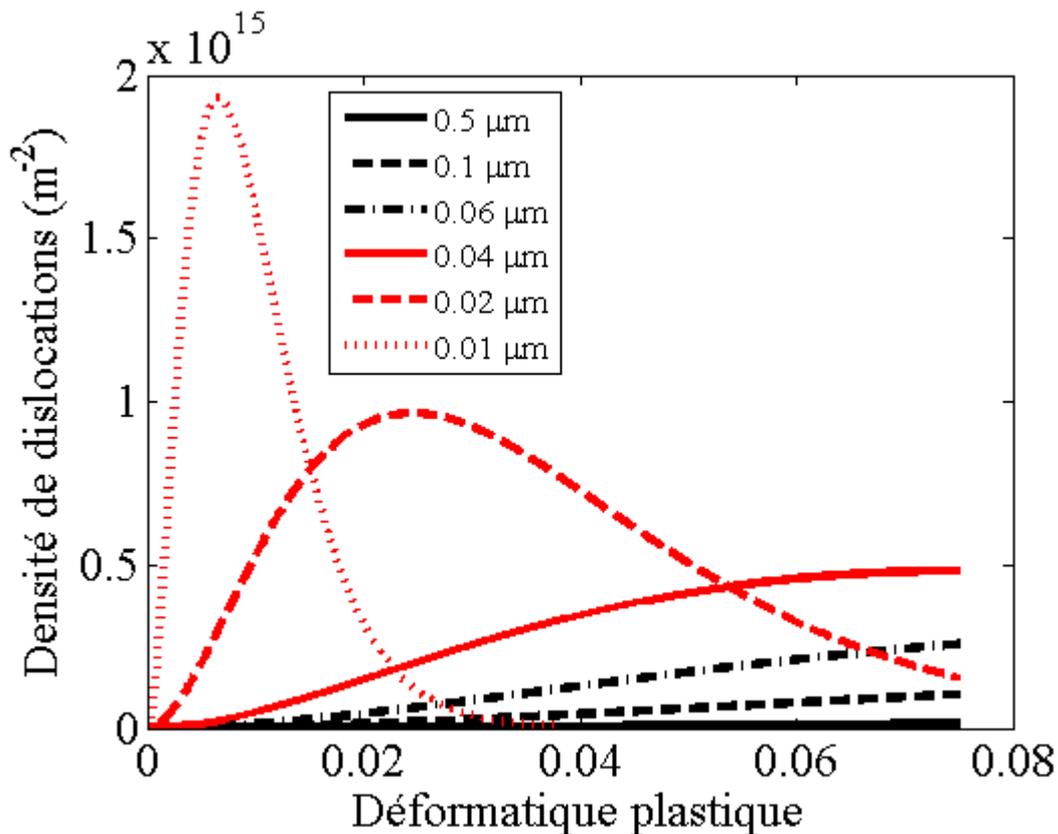


Fig. 4.3 – Variation de la densité des dislocations en fonction de la déformation plastique pour un matériau UFG ( 10 nm-500nm)

Cheng et al., [2003] démontrent que l'activité des dislocations est plus importante pour des tailles de grains entre 30 nm et 100 nm. Nous avons étudié via notre modélisation ce phénomène en calculant la variation de la densité des dislocations en fonction de la taille des grains. D'abord, pour trois matériaux CFC qui sont Cu, Al et Zn (Fig. 4.4) puis pour différentes vitesses de sollicitations (Fig. 4.5). L'activité des dislocations est très prononcée dans la gamme de taille de grains entre 30 nm et 100 nm. Au-dessous de 30 nm, l'activité des dislocations est quasiment nulle pour le Nickel alors que pour les deux autres matériaux, elle est nulle au-dessous de 10 nm. Ces résultats s'accrochent bien des observations de [Cheng et al., 2003]. On constate en plus que, la densité des dislocations est moins importante dans le Nickel que dans les deux autres matériaux (Fig. 4.4). On rappelle que ce calcul a été fait en prenant la valeur du coefficient de diffusion thermique égale à  $3.8303 \times 10^{-21} \text{ m}^2/\text{s}$  pour une vitesse de déformation égale à  $3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  à la température ambiante.

Toujours et grâce à notre modélisation, on constate que l'intervalle d'activité des dislocations varie et se déplace légèrement en fonction de la vitesse de sollicitation (Fig. 4.5) .

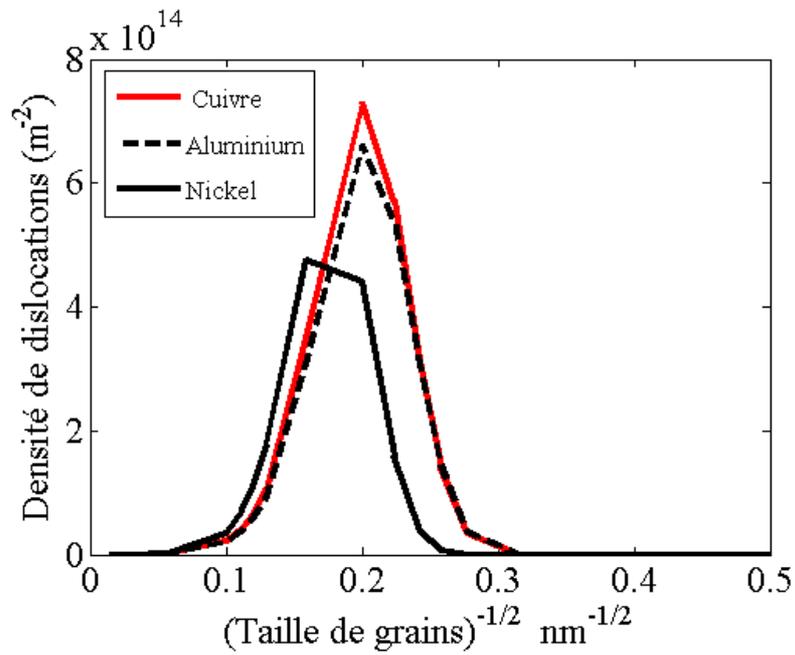


Fig. 4. 4 – Variation de la densité des dislocations en fonction de la taille des grains pour des matériaux UFG, CFC(Cuivre, l’aluminium et le Nickel).

Ces résultats consignés Fig. 4.4 et Fig. 4.5 apportent la preuve de la nécessité d’inclure la densité des dislocations dans le développement du modèle élastoplastique prenant en compte l’effet taille de grains sur la contrainte d’écoulement du matériau.

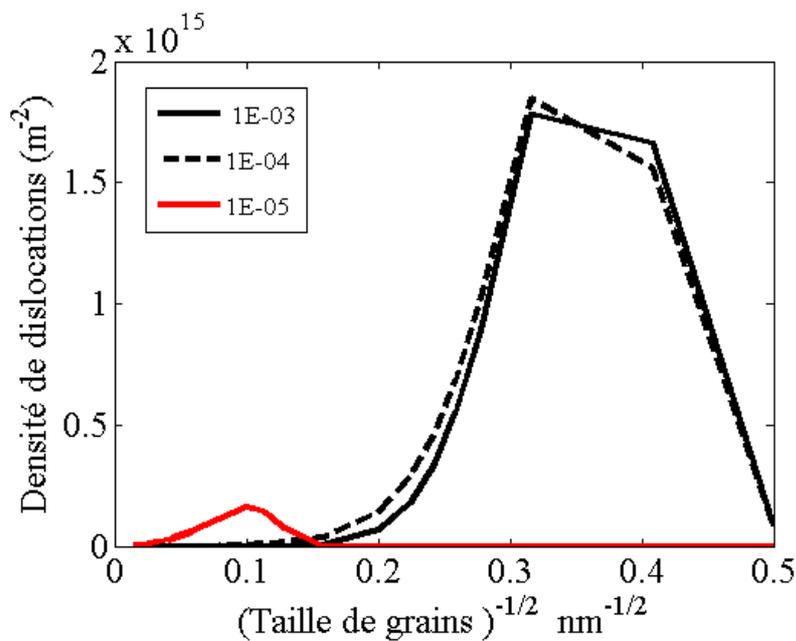


Fig. 4.5 – Influence de la vitesse de sollicitation sur la variation de la densité des dislocations dans un matériau UFG, CFC (Nickel).

## IV. 2 Nouvelles modélisations de l'effet taille de grains.

Dans les matériaux UFG, la loi de Hall-Petch qui prévoit une augmentation linéaire de la contrainte d'écoulement à mesure que la taille de grains diminue, présente des insuffisances. Des phénomènes tels que l'adoucissement de la contrainte d'écoulement et l'inversion de la pente de la relation de Hall-Petch apparaissent. Nous proposons à cet effet deux modélisations de ces phénomènes impliquant la microstructure et la contrainte d'écoulement du matériau.

### IV. 2.1 Modélisation à zones de transitions : modèle 1.

Ce modèle a été développé dans l'esprit de la Fig. 2.1(a) telle que publiée par Kumar et al., [2003]. Cette figure montre qu'il est possible de délimiter la microstructure UFG à partir de 10 nm et 100 nm en trois zones de transition de la contrainte d'écoulement. Considérant ces deux tailles de grains fixes, nous avons proposé ce premier modèle dont les principales équations sont :

$$\sigma_y = \sigma_o + \begin{cases} \frac{K}{\sqrt{d}} & d \geq d_2 \\ K_1 \left( \frac{1}{\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{d_1}} \right) + \beta ; & d_1 \leq d \leq d_2 \\ K_2 \left( \frac{1}{\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{d_\alpha}} \right) + \beta ; & d \leq d_1 \end{cases} \quad (4.4)$$

$K_1$  et  $K_2$  sont les pseudo-constantes de Hall-Petch dépendant de la constante de Hall-Petch et ayant pour expressions respectives :

$$K_1 = \frac{\beta - \frac{K}{\sqrt{d_2}}}{\frac{1}{\sqrt{d_1}} - \frac{1}{\sqrt{d_2}}} \quad ; \quad K_2 = \frac{\beta - \frac{K}{\sqrt{d_2}}}{\frac{1}{\sqrt{d_1}} - \frac{1}{\sqrt{d_\alpha}}} \quad (4.5)$$

où  $d_\alpha$  et  $\beta$  sont deux paramètres du modèle, l'une ayant la dimension d'une taille de grains et l'autre celle d'une contrainte. Les valeurs de différentes constantes et paramètres du modèle sont donnés dans le Tableau 4. 2.

**Tableau 4.2 – Paramètres de la première modélisation**

$d_\alpha$ (nm)	$\beta$ (MPa)	$d_1$ (nm)	$d_2$ (nm)	$K$ (MPa . m <sup>1/2</sup> )
8	47.5	10	100	$K_{\text{metal}}$

Deux modélisations ont été proposées par conséquent : (i) une première, basée sur une extension de la loi de Hall-Petch et (ii) une deuxième basée sur la dynamique des dislocations et la prise en compte des phénomènes intergranulaires tels que la diffusion thermique au joint de grains. Ces paramètres ont été identifiés à partir des données expérimentales conformément aux résultats de la Fig 2.1(a).  $K_1$  et  $K_2$  représentent l'influence des mécanismes des déformations aux joints de grains ou l'influence du voisinage pour un grain donné. Toutefois, il est impossible de considérer les tailles  $d_1$  et  $d_2$  fixes en raison d'autres publications contradictoires. Ceci constitue donc une faiblesse voire une limitation de cette modélisation. De même, l'absence d'un paramètre incluant explicitement la densité des dislocations constitue une faiblesse du modèle étant donné son rôle non négligeable dans le processus de plasticité cristalline des matériaux UFG. Afin de construire un modèle qui fasse sortir naturellement ces limites et inclure le rôle non négligeable de la densité des dislocations, nous avons proposé une deuxième modélisation basée sur l'équation d'évolution de la densité des dislocations moyenne (Eq.5.2).

#### IV. 2.2 Prise en compte des mécanismes de diffusion thermique : modèle 2.

L'équation (4.2) représente en effet plusieurs phénomènes physiques liés les uns aux autres et, on peut se réécrire comme suit :

$$\frac{d\rho_s}{d\gamma} + (k_a + k_b)\rho_s = k_f\sqrt{\rho_s} \quad (4.6)$$

cette équation appartient à une famille d'équations dites de « Bernoulli » dont la forme la plus explicite est  $a(x)\rho_s' + b(x)\rho_s = c(x)\rho_s^r$ , pour tout  $r$  différent de 1 et de 0 et se résout en procédant à un changement de toute fonction non nulle  $u(\gamma)$  telle que :

$$u = \rho_s^{1-r} = \rho_s^{1-1/2} = \rho_s^{1/2} \quad ; \quad \frac{d\rho_s}{d\gamma} = 2u \frac{du}{d\gamma} \quad (4.7)$$

Ceci donne une équation différentielle du second degré de la forme :

$$2 \frac{du}{d\gamma} + (k_a + k_b)u = k_f ; \quad u = A \exp\left(-\frac{k_a+k_b}{2}\gamma\right) + \frac{k_f}{k_a+k_b} \quad (4.8)$$

On peut considérer par la suite que  $u(0) = \sqrt{\rho_o} = \sqrt{\frac{\beta_o}{bd}}$  et par conséquent :

$$u = \sqrt{\frac{\beta_o}{bd}} \exp\left(-\frac{k_a+k_b}{2}\gamma\right) + \frac{k_f}{k_a+k_b} \left[1 - \exp\left(-\frac{k_a+k_b}{2}\gamma\right)\right] \quad (4.9)$$

En posant en plus :

$$\tau = \alpha_t \mu b \sqrt{\rho_s} \quad \gamma = m\tau \quad u = \frac{\tau}{\alpha_t \mu b} \quad (4.10)$$

on obtient la forme la plus condensée suivante :

$$\sigma_y = \sigma_o + \frac{D}{\sqrt{d}} \exp\left(-\frac{A+\frac{B}{d^2}}{2} m \varepsilon_y\right) + \frac{C}{A+\frac{B}{d^2}} \left[1 - \exp\left(-\frac{A+\frac{B}{d^2}}{2} m \varepsilon_y\right)\right] \quad (4.11)$$

La constante  $B$  a été défini précédemment et les autres constantes  $A$ ,  $C$  et  $D$  ont respectivement pour expressions :

$$A = k_a \quad ; \quad C = \alpha_t \mu m b k_f \quad ; \quad D = \alpha_t \mu m \sqrt{\beta_o b} \quad (4.12)$$

$\sigma_o$  est la contrainte de frottement ou contrainte du monocristal et  $m$  le coefficient d'orientation de Taylor.

L'implémentation de ces deux derniers modèles d'effet de taille de grains dans le modèle micromécanique s'est faite en s'inspirant de l'idée développée par Jiang et Weng, [2004]. En effet, dans ce modèle on considère le joint de grains comme une phase amorphe dont le comportement dépend de la pression hydrostatique et le cœur de grain suit une loi de plasticité cristalline. Dans ce qui suit, l'on considère que le coefficient de couplage élasto-viscoplastique  $\alpha$  insensible à l'influence de la taille de grains contrairement aux travaux d'Abdul-Latif et al., [2011] dans lequel il était établi un lien direct entre celui-ci et la taille des grains. En revanche, nous considérons cette influence se situer uniquement au niveau de la surface de plasticité (Eq. 5.14 et 5.16).

○ **Pour le modèle 1:**

$$R^s + \tau_t^s = Q^s \sum_r H_{rs} q^r + \tau_o^s + \begin{cases} \frac{K}{\sqrt{d}} & d \geq d_2 \\ K_1 \left( \frac{1}{\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{d_1}} \right) + \beta; & d_1 \leq d \leq d_2 \\ K_2 \left( \frac{1}{\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{d_\alpha}} \right) + \beta; & d \leq d_1 \end{cases} \quad (4.13)$$

$$f^s = |\tau^s| - Q^s \sum_r H_{rs} q^r - \tau_o^s - \begin{cases} \frac{K}{\sqrt{d}} & d \geq d_2 \\ K_1 \left( \frac{1}{\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{d_1}} \right) + \beta; & d_1 \leq d \leq d_2 \\ K_2 \left( \frac{1}{\sqrt{d}} - \frac{1}{\sqrt{d_\alpha}} \right) + \beta; & d \leq d_1 \end{cases} \quad (4.14)$$

○ **Pour le modèle 2 :**

$$R^s + \tau_t^s = Q^s \sum_r H_{rs} q^r + \tau_o^s + \frac{D}{\sqrt{d}} \exp\left(-\frac{A+\frac{B}{d^2}}{2} m \varepsilon_y\right) + \frac{C}{A+\frac{B}{d^2}} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{A+\frac{B}{d^2}}{2} m \varepsilon_y\right) \right] \quad (4.15)$$

$$f^s = |\tau^s| - \left\{ Q^s \sum_r H_{rs} q^r + \tau_o^s + \frac{D}{\sqrt{d}} \exp\left(-\frac{A+\frac{B}{d^2}}{2} m \varepsilon_y\right) + \frac{C}{A+\frac{B}{d^2}} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{A+\frac{B}{d^2}}{2} m \varepsilon_y\right) \right] \right\} \quad (4.16)$$

Enfin, ces deux modèles ont été implémentés de manière à prendre en compte l'influence de la taille des grains dans le modèle micromécanique élasto-viscoplastique retenu.

### IV. 3 Résultats et discussions.

Les paramètres identifiés dans cette partie sont ceux donnés dans le Tableau 4.3. On rappelle que ces paramètres prennent en compte les aspects liés à l'influence de la taille de grains sur la résistance mécanique.

#### IV. 3.1 Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille des grains : modèle 1

Se servant, des données consignées dans les tableaux 5.2 et 5.3, nous avons étudié l'évolution de la contrainte d'écoulement du nickel par le modèle 1. Ce modèle ne prend pas en compte explicitement les mécanismes de déformation aux joints de grains qui soient gouvernés par la diffusion thermique (Fig. 4.6)

**Tableau 4.3 : Différents coefficients du Ni (deuxième modélisation d'effet taille de grains).**

Variable	Valeur
$k_a$	3.4
$\dot{\epsilon}$	$3.0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
$D_{gb}$	$3.83 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2\text{s}^{-1} / 1.56 \times 10^{-20} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$
$\beta_o$	$10^{-2}$
$\epsilon_y$	$2.0 \cdot 10^{-3}$
$bk_f$	0.01
$T, \mu$	25°C / 76 GPa
$b$	0.249 nm
$m$	3.05
$\alpha_t$	0.24
$K_{HP}$	18.08

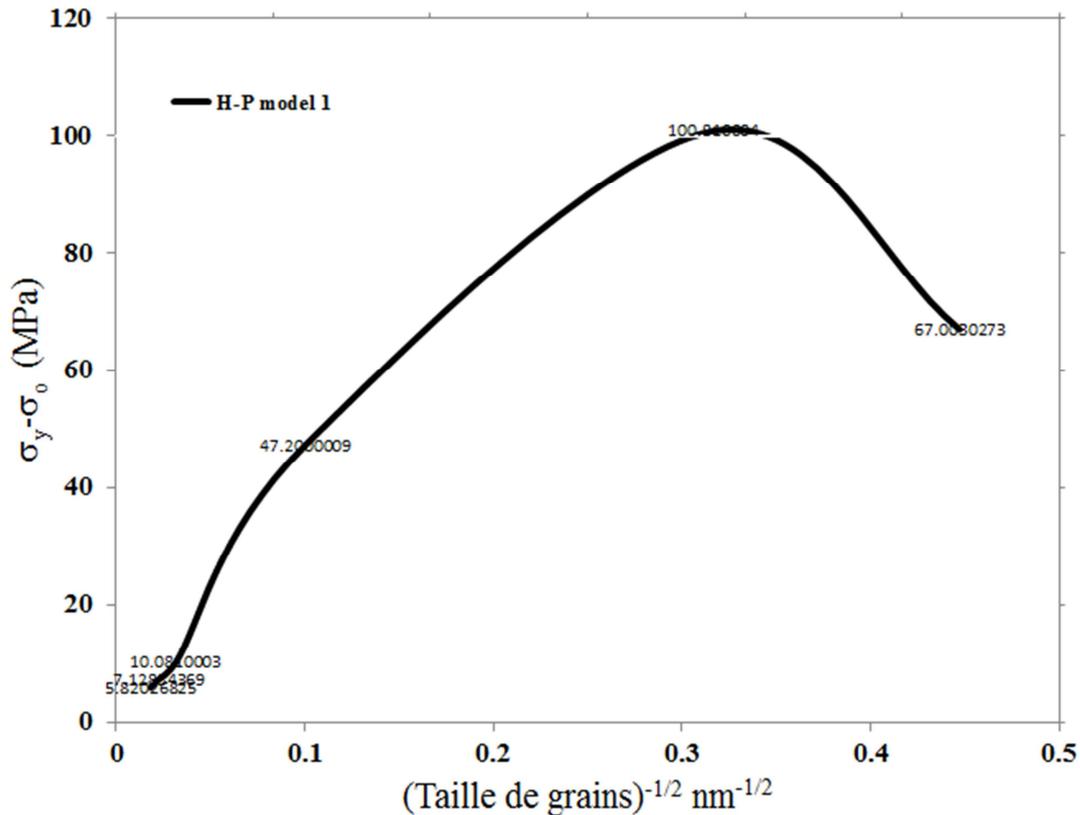


Fig. 4.6 Evolution de la limite d'élasticité du nickel : modélisation 1

#### IV.3.2 Influence de la vitesse de sollicitation et du coefficient de diffusion sur la contrainte d'écoulement

Des études montrant l'influence de la vitesse de sollicitation sur la contrainte mécanique de la microstructure UFG ont été menées par Kim et Estrin, [2005]. Ceux-ci démontrent en effet que l'effet Hall-Petch observé dans les matériaux conventionnels se casse dans les microstructures et l'on observe une inversion de cette loi pour des vitesses de sollicitation et tailles de grains plus petites. Pour des vitesses de déformation plus petites, il n'y a aucune inversion de la loi de Hall-Petch. L'origine de cette inversion semble résulter des processus gouvernés par la diffusion thermique sur la déformation totale (Fig. 4.7). Afin de procéder à des éventuelles comparaisons entre les résultats de ces derniers et ceux fournis par notre modélisation, nous avons décidé d'évaluer d'abord l'influence du coefficient de diffusion thermique sur la contrainte d'écoulement. Pour cela, nous avons fixés les deux coefficients de diffusion calculés précédemment et avons balayé une gamme de taille de grains allant de 5 nm à 2000 nm.

La Fig. 4.8 montre la sensibilité de la contrainte d'écoulement du matériau au coefficient de diffusion thermique.

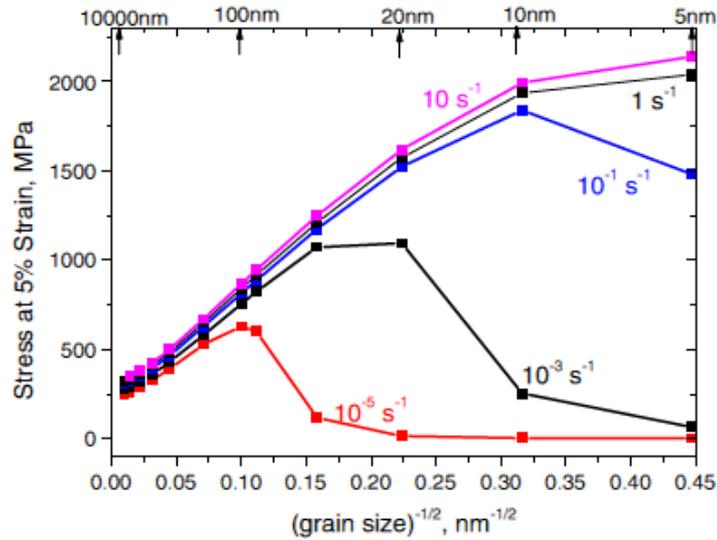
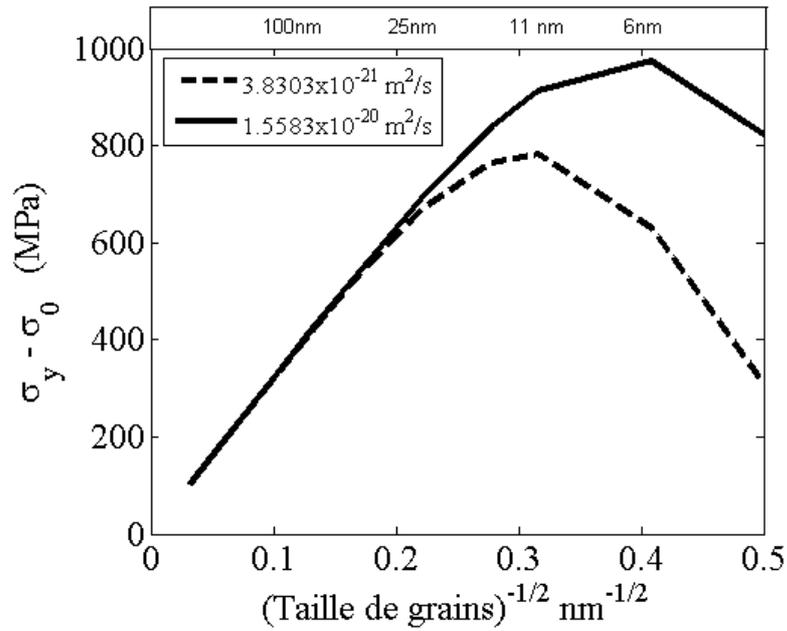


Fig. 4.7 – Dépendance taille de grains - contrainte d'écoulement pour le Cu à 5% de déformation [Kim et al., 2005]

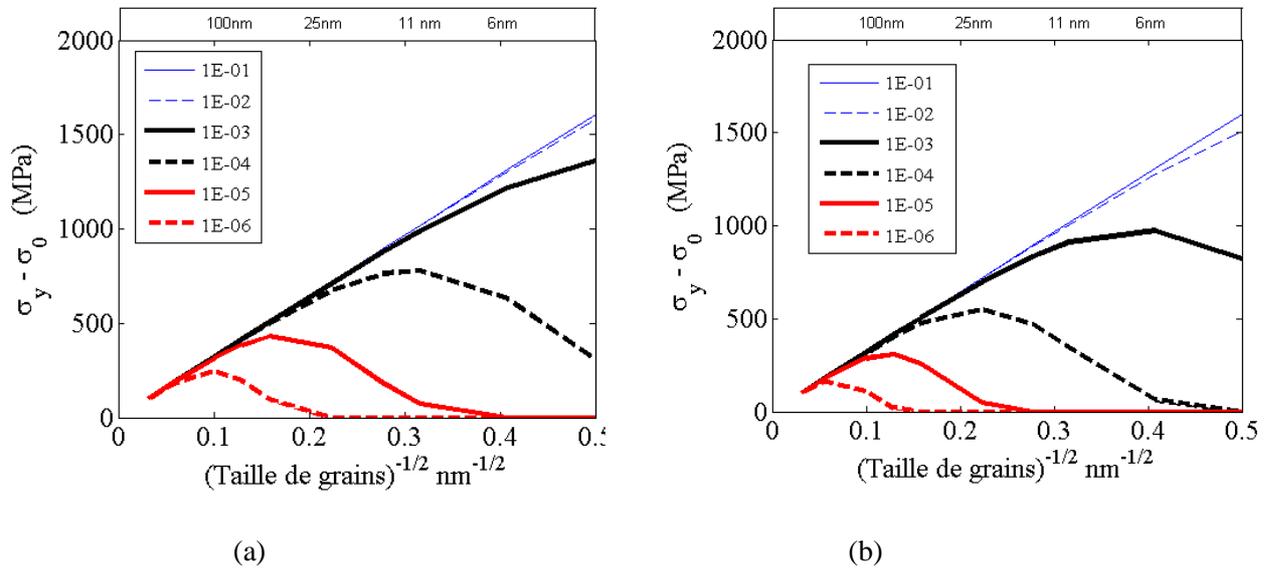
Ainsi, un coefficient de diffusion faible tend à durcir le matériau alors qu'un coefficient plus grand a tendance à l'adoucir. Les mécanismes de diffusion thermique jouent un rôle important dans la déformation cristalline aux joints de grains. Afin d'étudier l'influence de la vitesse de déformation sur la contrainte d'écoulement du matériau, nous fixons les valeurs du coefficient de diffusion calculées précédemment ( $3.8303 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  et  $1.5583 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ).

Ces résultats donnent une bonne tendance comparés aux résultats de Kim et al., [2005], car nous constatons qu'il n'y a aucune inversion de la contrainte d'écoulement pour des vitesses de sollicitations supérieures à  $10^{-2} \text{ s}^{-1}$  quelle que soit la taille des grains alors qu'on constate une inversion notable de la contrainte d'écoulement à partir de  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$  (Fig. 4.7).



**Fig. 4.8 – Influence du coefficient de diffusion sur la contrainte d’écoulement et pour une microstructure donnée.**

Les figures montrent aussi l’impact du coefficient de diffusion sur la contrainte d’écoulement (Fig. 4.8, Figs. 5.9).



**Fig. 4.9 – Influence de la vitesse de sollicitations sur la contrainte d’écoulement ( a ) pour  $D_{gb} = 3.8303 \cdot 10^{-21} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  et ( b )  $D_{gb} = 1.5583 \cdot 10^{-20} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .**

### **IV. 3.3 Mise en application du modèle micromécanique**

#### **IV. 3.3.1 Comparaison des réponses mécaniques à la loi de Hall-Petch classique**

Afin de comparer les résultats fournis par les deux modélisations concernant l'effet de taille de grains et la loi de Hall-Petch, nous avons choisi des grains de taille moyenne 80 nm. Ce choix répond à une motivation visant à identifier la phase où commence véritablement les mécanismes de déformations aux joints de grains (100 nm) par rapport aux mécanismes intragranulaires d'après Kumar [2003]. Les résultats des deux modélisations ainsi que ceux du modèle de Hall-Petch sont donnés sur la Fig. 4.10.

L'écart entre les deux modélisations est relativement petit. Cet écart s'explique par une insuffisance numérique liée entre autres à la nature et aux valeurs des certaines variables dans ces différents modèles. Il est possible de réduire considérablement cet écart en utilisant une optimisation plus précise du calcul des minimas. Il est possible aussi que cet écart soit dû à l'absence dans la première modélisation d'un paramètre incluant directement les phénomènes de diffusion thermique aux joints de grains. Ensuite, l'existence de deux tailles de grains limites dont l'une à 10 nm et l'autre à 100 nm impose un comportement linéaire de la contrainte d'écoulement pour toutes les tailles de grains au-dessus de 100nm. La modélisation 1 suit l'évolution classique de la loi de Hall-Petch jusqu'à 1400 MPa environ de la contrainte d'écoulement puisque d'après les hypothèses de base de celle-ci, les mécanismes aux joints de grains ne commencent qu'autour 100 nm. Ces mécanismes sont donc la cause de l'adoucissement. Sur la Fig 5.10, calculée à 80 nm, la contrainte du modèle 1 H-P modifié (modèle à zones de transitions) est légèrement au-dessous de la contrainte calculée avec H-P pour la même taille de grains, justifiant l'influence des mécanismes de déformation aux joints de grains.

**Tableau 4.4 : Tableau de coefficients couplés modèle élastoplastique-modélisation de l'effet de taille de grains.**

Variable	Valeur	Unité
$E$	210000 / 214000	MPa
$\nu$	0.312 / 0.310	--
$z^s$	10	--
$K^s$	90	MPa
$k_o^s$	15	MPa
$Q^s$	200	--
$b^s$	20	--
$\alpha$	$0.2 \cdot 10^{-7}$	--
$h1=h2=h5$	1	--
$h6$	2.5	--
<b>EFFET TAILLE DE GRAINS</b>		
$k_a$	3.4	--
$\dot{\epsilon}$	$3.0 \cdot 10^{-4}$	$s^{-1}$
$D_{gb}$	$3.83 \cdot 10^{-21} / 1.56 \cdot 10^{-20}$	$m^{-2}$
$\beta_o$	$10^{-2}$	--
$\epsilon_y$	$2.0 \cdot 10^{-3}$	--
$bk_f$	$10^{-2}$	--
$T, \mu$	25 / 76	$^{\circ}C/GPa$
$b$	0.249	nm
$m$	3.05	--
$\alpha_t$	0.24	--

Cependant, le comportement est tout autre pour la modélisation 2 (modèle incluant le paramètre de la diffusion thermique inter-granulaire) car, elle inclut naturellement les mécanismes de diffusion thermique aux joints de grains grâce à l'existence du coefficient de diffusion thermique. En plus, cette dernière modélisation définit automatiquement les tailles de grains d'inversion en fonction des autres mécanismes impliqués. La contrainte macroscopique est légèrement plus basse pour cette modélisation que les deux précédentes pour la même taille de grain. Dans la suite de ce travail, seule la deuxième modélisation sera considérée afin de reproduire naturellement les phénomènes observés. Les paramètres du modèle élastoplastique et de deux modélisations ayant permis ce calcul ainsi que les calculs suivants sont donnés dans le Tableau 4.4 ci-dessus.

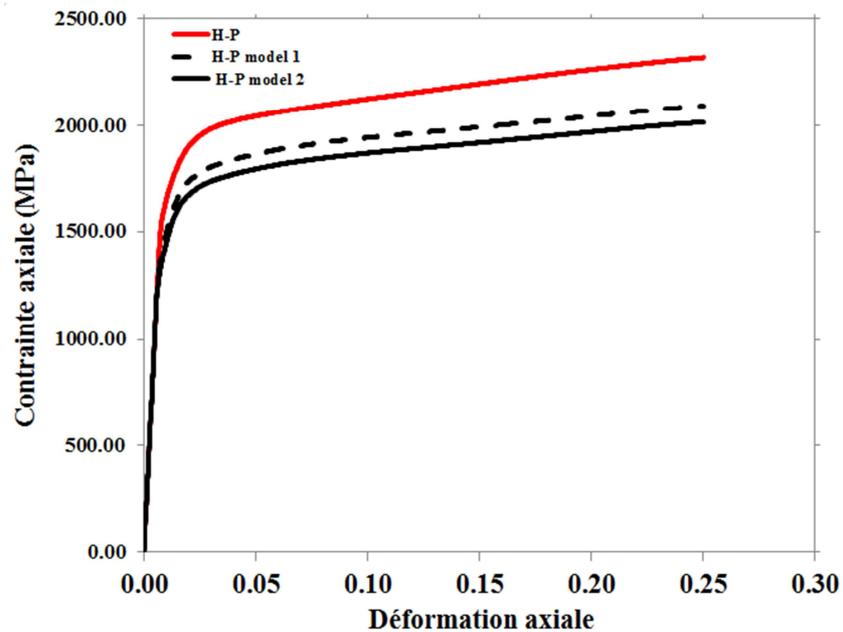


Fig. 4.10 – Etude comparée de la contrainte mécanique des trois modèles pour une taille de grains moyenne de 80 nm.

#### IV. 3.3.2 Influence de la taille de grains sur la résistance mécanique

Dans la partie qui va suivre, nous allons simuler deux essais mécaniques dont une traction et une compression uniaxiales. Trois tailles de grains de 3000 nm, 500 nm et 200 nm ont été choisies. Ces tailles de grains sont choisies de manière à constituer des échantillons représentatifs de la microstructure UFG élaborée dans le cadre du projet MIMC comme indiquée sur la Fig 3.8, y compris les matériaux conventionnels (3000 nm).

L'influence de la taille de grains sur la contrainte mécanique macroscopique est bien visible car, celle-ci augmente inversement à la taille des grains. Comme sur la Fig 3.8 du Chapitre 3, la résistance mécanique pour les grains conventionnels (3000 nm) se situe autour de 400 MPa alors que pour les grains UFG, cette résistance mécanique est beaucoup plus élevée et située autour de 1100 MPa comme sur la même Fig. 3.8.

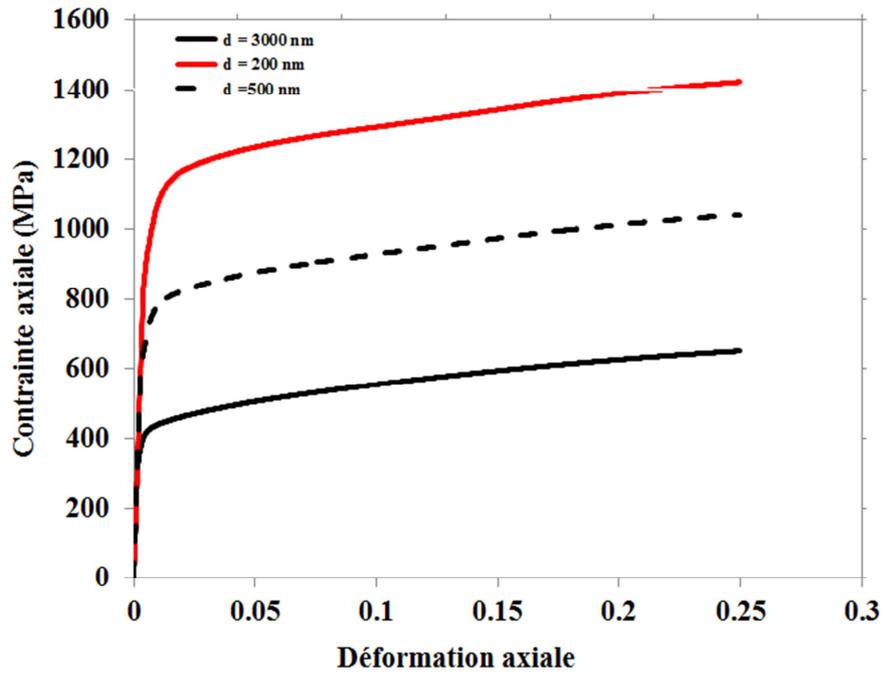


Fig. 4.11 – Influence de la taille des grains sur la contrainte mécanique macroscopique :  $D_{gb} = 3.8303 \times 10^{-21} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ .

Ces résultats prouvent donc la capacité de notre modélisation à reproduire les phénomènes mécaniques observés expérimentalement.

#### IV. 3.3.3 Représentation et profile des figures de pôles inverses

L'impact de la taille des grains sur l'évolution de la texture cristallographique s'est faite en calculant les figures pôles inverses. Le contraste des figures de pôles inverses pour ces trois tailles de grains quoique visible, reste faiblement prononcé (Fig. 4.12).

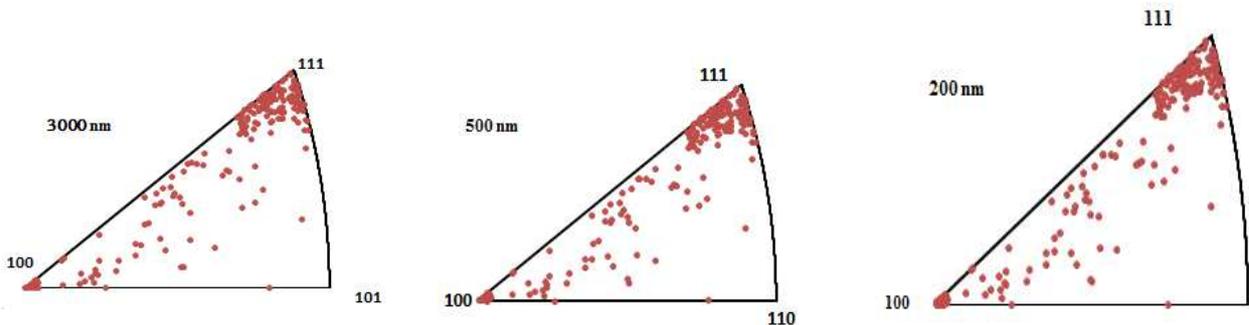


Fig.5.12 - Figures pôles inverses en fonction de la taille de grains

#### IV. 3.3.4 Influence du coefficient de diffusion thermique dans le processus d'inversion de la contrainte d'écoulement : comparaison avec les résultats de la littérature

Afin d'affiner nos résultats et dans l'objectif de les comparer à certains résultats compilés des travaux de bibliographie, la simulation des essais de traction et de compression uniaxiales a été reprise pour le même agrégat que précédemment pour 10 nm, 20 nm, 34 nm et 50 nm. Les paramètres du modèle élastoplastique prenant en compte l'effet taille de grains ainsi que la vitesse de déformation sont également les mêmes que précédemment. En revanche, la déformation est modifiée à 4% de façon à faciliter les comparaisons. A cause de l'influence avérée du coefficient de diffusion thermique aux faibles tailles de grains, une étude séparée a été menée afin d'identifier celui qui reproduit au mieux les adoucissements de la contrainte d'écoulement et de l'inversion de la loi de Hall-Petch observés expérimentalement. Premièrement, on a choisi  $D_{gb} = 3.8303 \times 10^{-21} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ . On note une augmentation significative de la résistance mécanique à mesure que la taille de grains diminue. En plus, pour cette valeur du coefficient de diffusion thermique, aucune inversion de la loi de Hall-Petch n'est observée (Fig. 4.13).

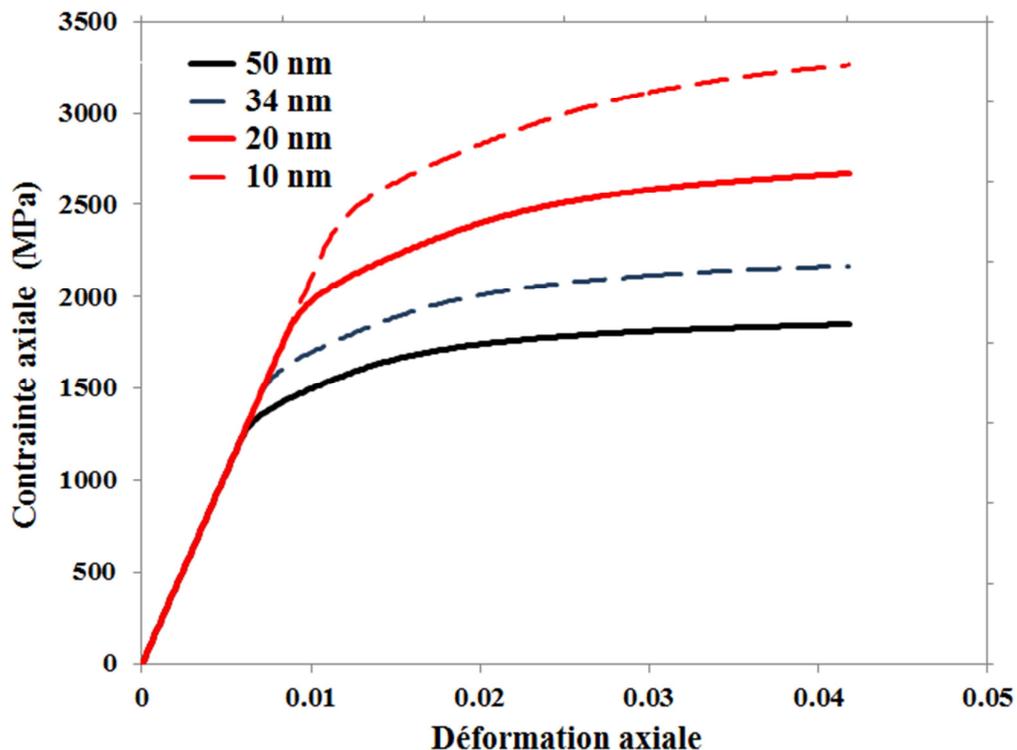


Fig. 4.13 Influence de la taille des grains sur la contrainte mécanique :  $D_{gb} = 3.8303 \times 10^{-21} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ .

Dans le deuxième cas, le coefficient de diffusion thermique  $D_{gb}$  est pris égal à  $1.5583 \times 10^{-20} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ . Dans ce dernier cas, on note une inversion de la loi de Hall-Petch autour

de 20 nm alors qu'au-dessous de 10 nm, l'adoucissement de la contrainte d'écoulement est de plus en plus perceptible. Pour tous les grains dont la taille de grains est supérieure à 20 nm, la résistance mécanique est élevée et l'évolution de la contrainte d'écoulement suit l'évolution classique décrite par Hall-Petch (Fig 5.14). L'explication de ces phénomènes est clairement liée à l'influence du coefficient de diffusion thermique dans le matériau aux faibles tailles de grains. Ces résultats s'accordent bien avec ceux obtenus par Wei et al., [2006] en dépit de quelques écarts pouvant dépendre de la préparation des données (Fig 5.15).

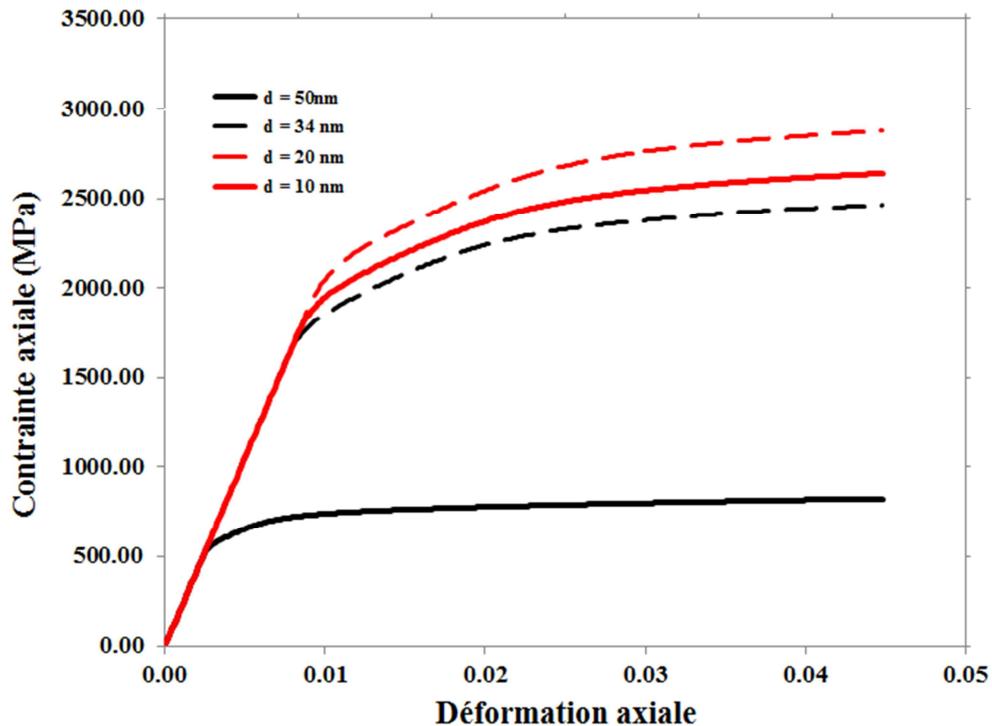


Fig. 4.14 – Influence de la taille des grains sur la contrainte mécanique :  
 $D_{gb} = 1.5583.10^{-20} m^2 s^{-1}$ .

La grande résistance mécanique était déjà démontrée dans cette étude à travers l'étude expérimentale des microstructures UFG élaborées dans le cadre du projet MIMIC sur la Fig 3.8. Ce qui prouve encore une fois de plus la capacité de notre modèle 2 à reproduire les phénomènes mécaniques observés expérimentalement.

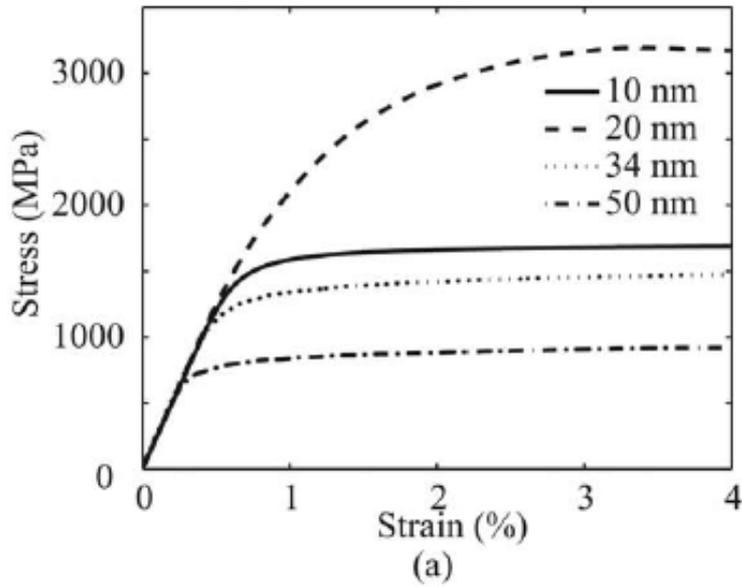


Fig. 4.15 – L'influence de la taille de grains sur la résistance mécanique du Nickel NC, [Wei et al., 2006].

#### IV. 3.3.5 Effet de la vitesse de chargement sur la contrainte mécanique

Compte tenu de la sensibilité du matériau et de notre modélisation à la vitesse de sollicitation, il a été décidé de calculer la contrainte mécanique macroscopique pour une gamme donnée de vitesses de déformation. La sensibilité de notre modélisation à la vitesse de déformation est caractérisée par les paramètres  $K^s$  et  $z^s$ , représentant entre autres la viscosité du matériau. L'écart entre les deux vitesses limites n'est pas notable (Fig. 4.16).

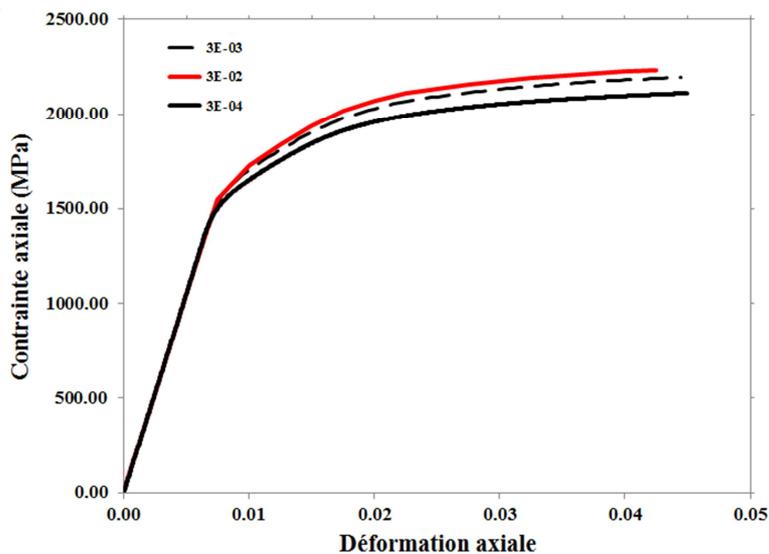
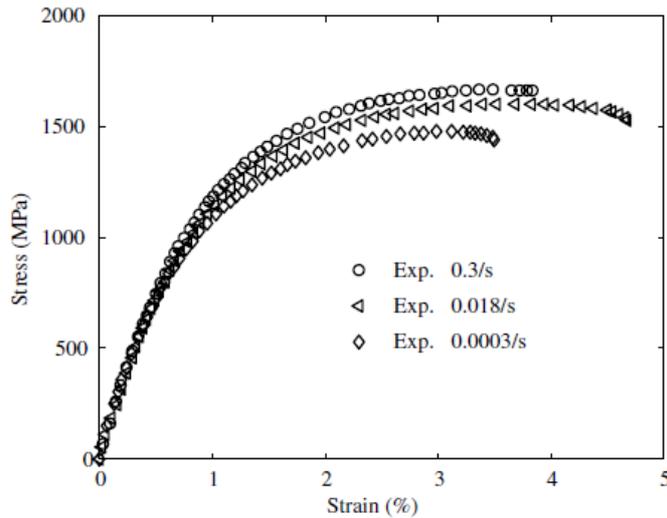


Fig. 4.16 – Influence de la vitesse de sollicitation en traction : taille moyenne des grains de 35 nm.

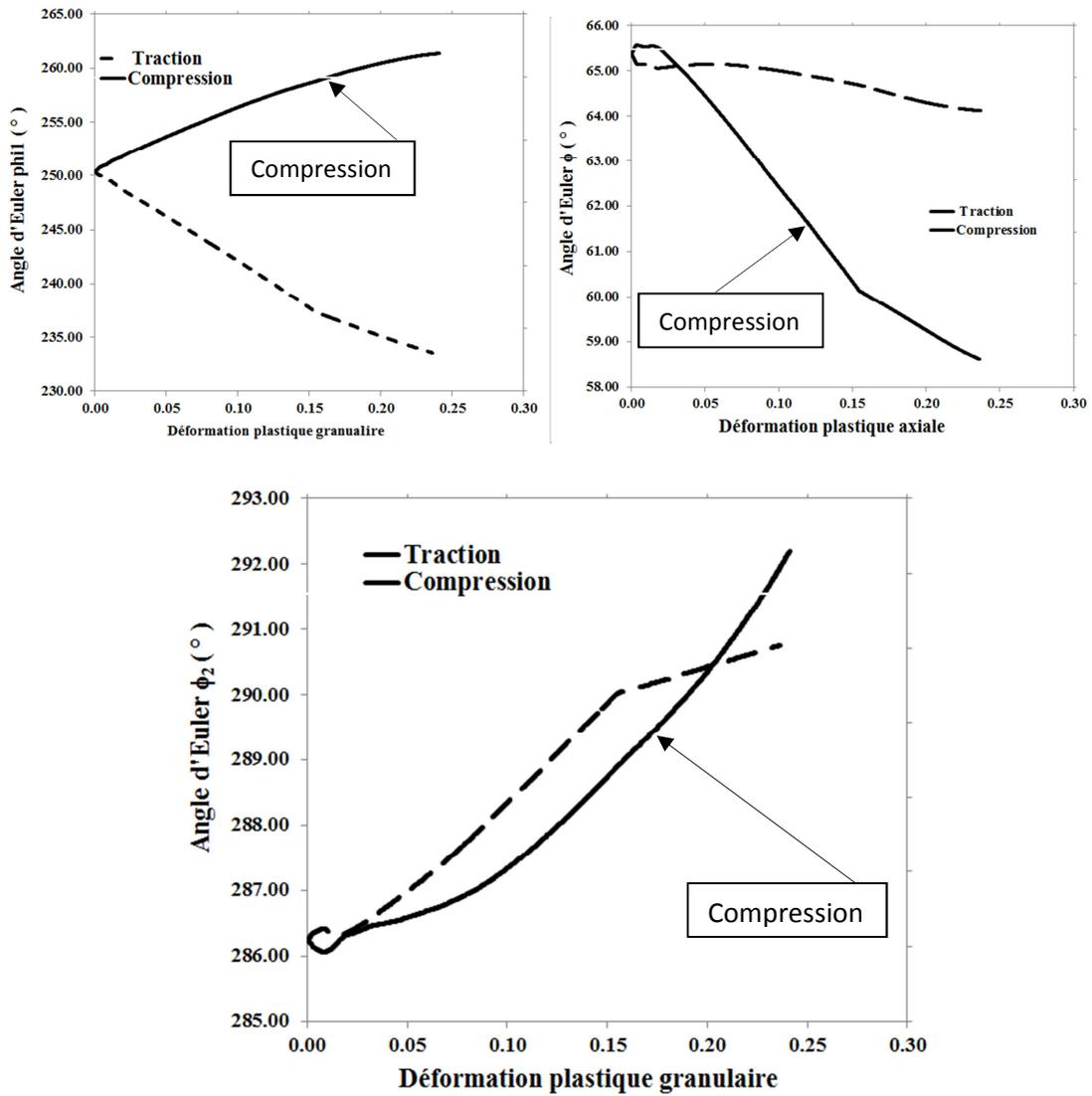


**Fig. 4.17 Influence de la vitesse de sollicitation sur la contrainte mécanique en traction : taille moyenne des grains de 35 nm , [Wei et al., 2006].**

En plus, la contrainte mécanique semble se stabiliser sur une position asymptotique lorsque la vitesse augmente. Ce même comportement est observé sur le Fig 5.17 obtenu par Wei et al., [2006] et, confirme ainsi la capacité de notre modélisation à caractériser l'écoulement cinématique dans la microstructure.

#### **IV. 3.3.6 Contrainte mécanique locale (grains) et variation des angles d'Euler en fonction de la contrainte plastique granulaire**

Une étude au niveau local (grain) a été aussi menée. Elle visait deux objectifs à savoir l'étude de l'évolution des angles d'Euler en fonction de la déformation plastique granulaire et l'étude de l'évolution de la contrainte locale (grain) en fonction de la déformation plastique granulaire. Ainsi, un grain a été choisi au hasard (grain numéro 80). Sur la Fig 5.18, on a représenté les trois angles d'Euler en traction et en compression. On constate que la variation des angles est plus importante en traction qu'en compression. Autrement dit, le matériau durcit plus en compression qu'en traction dans les matériaux à microstructures UFG. Ce qui confirme les observations expérimentales [Barai, 2008]. De même, cette variation n'est pas linéaire justifiant l'influence des autres grains sur la rotation de celui-ci. Ceci se traduit par les inversions de la variation des angles d' Euler à certains degrés de déformation (15% par exemple en traction).



**Fig. 4.18 – Variation des angles d'Euler en fonction de la déformation plastique: grain n° 80**

Concerant la contrainte locale, quatre grains numérotés 10, 80, 100 et 180 ont été choisis au hasard. Les contraintes locales sont représentées sur la Fig 5.19.

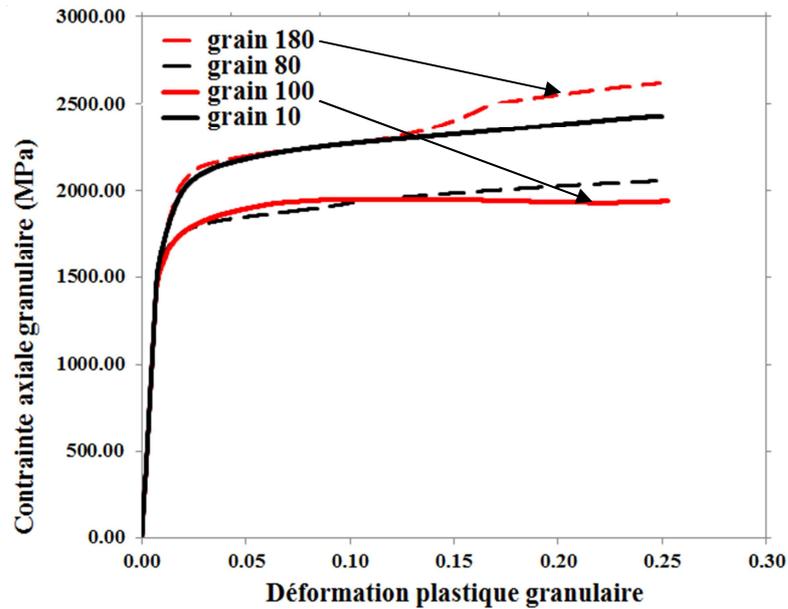


Fig. 4. 19 – Contrainte mécanique granulaire pour différents grains en traction

Les contraintes granulaires pour quatre (4) grains 10, 80, 100 et 180 montrent une grande disparité. Chacun de ces grains semble avoir sa propre limite d'élasticité. On peut considérer que ce phénomène résulte de la position du grain dans le polycristal (Fig. 4.19). Le grain 10 présente une faible contrainte par rapport aux autres.

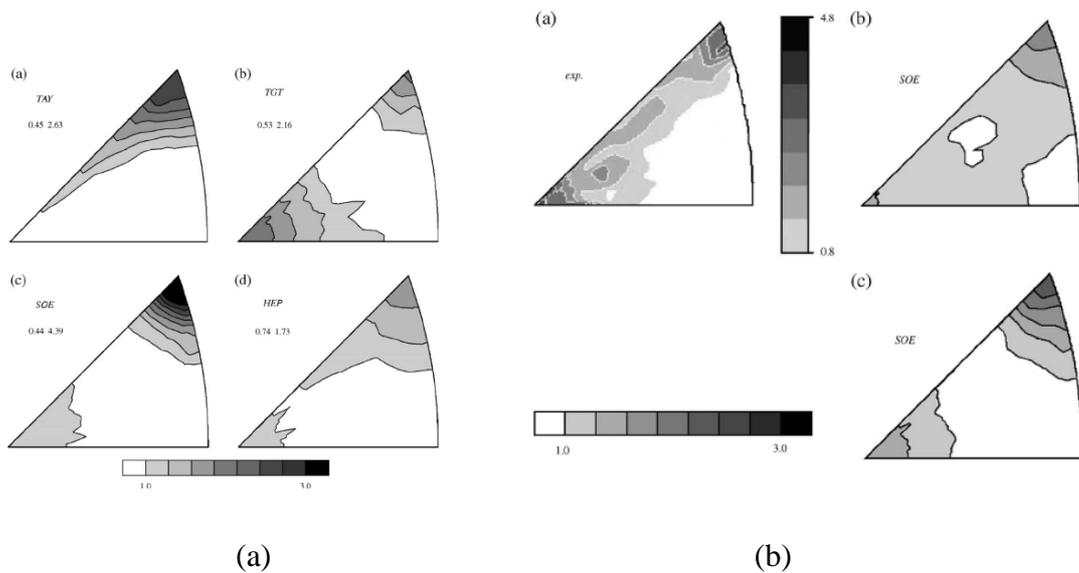


Fig. 4.20 – Figures pôles inverses du Halite à température ambiante pour une déformation : (a) 30% et (b) 15% en traction, [Yi et al., 2005].

### IV. 3.3.7 Influence de la taille de grains sur le profil des figures pôles inverses

La réalisation des figures de pôles inverses en traction et en compression donne des tendances telles que décrites par plusieurs publications de littérature.

**Tableau 4.5 – Figures pôles inverses du Nickel UFG**

Taille de grains	Traction	Compression
d = 10 nm		
d = 20 nm		
d = 35 nm		
d = 50 nm et 5 nm		

Celles-ci montrent la formation de deux fibres au niveau des pôles  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ , dans le cas de la traction uni-axiale et une seule fibre au pôle  $\langle 110 \rangle$  dans le cas de la compression uni-axiale (Tableau 4.5). Ce résultat se rapproche bien des résultats de Yi et al., [2005] sur l'étude de la texture de Halite à 30% de déformation (Fig.5.20). Ces derniers résultats confirment aussi les observations expérimentales sur l'évolution de la texture cristallographique en grandes déformations.

#### IV. 3.3.8 Comparaison des contraintes mécaniques en traction et en compression : recherche du phénomène de l'asymétrie traction/compression

Cependant, notre étude sur les microstructures ne s'est pas arrêtée là car, d'autres phénomènes aussi importants que la nécessité de les connaître ont motivé le besoin de caractériser numériquement le phénomène d'asymétrie traction/compression observé dans les matériaux UFG. Cette asymétrie est en fait un phénomène donnant une résistance mécanique plus grande en compression qu'en traction, très souvent observé dans les matériaux UFG à faibles tailles de grains. On l'observe sur le cuivre, le fer, l'aluminium ou encore le nickel tel que décrit par Cheng et al. [2003] sur la Fig. 4.21.

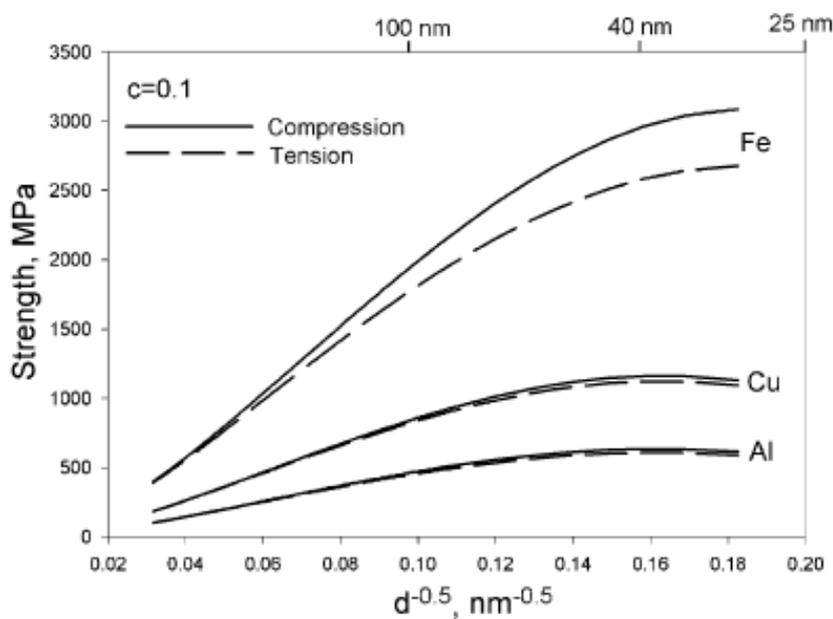


Fig. 4.21 – Prédications de la résistance mécanique en traction et en compression, Cheng et al., [2003].

La contrainte mécanique en traction et en compression montrent une légère différence au niveau de la contrainte d'écoulement pour une résistance mécanique en compression légèrement au dessus de la résistance mécanique en traction (Fig. 4.22). On constate de même qu'au dessous de 10% de déformation, la contrainte mécanique en compression est en dessous de la contrainte mécanique en traction. Ce phénomène, malheureusement, nous étions incapable de l'expliquer en raison entre autres de l'absence des données disponibles dans la littérature en la matière concernant le nickel. On peut en revanche penser que ce phénomène est accéléré par la rotation cristalline en fonction de la déformation plastique granulaire.

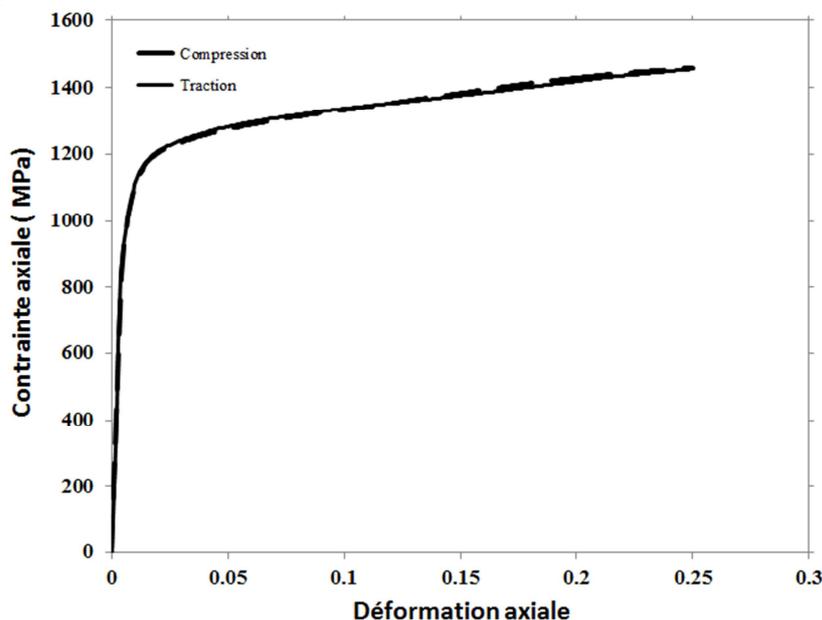


Fig. 4.22 : Asymétrie traction / Compression du Nickel UFG : taille moyenne des grains  $d = 120$  nm.

Plusieurs données expérimentales reportées sur les microstructures UFG et plus particulièrement sur celle du nickel montrent que celles-ci dépassent difficilement le 10% de déformation en raison de leur faible taux d'écrouissage souvent responsable des endommagement précoces. Dans le chapitre six qui va suivre, nous allons tenter d'associer le comportement élastoplastique des matériaux UFG aux mécanismes d'endommagement par décohesion.

# Chapitre V : Endommagement par décohésion d'interface

---

<i>V. 1 Quelques phrases et types d'endommagement des matériaux UFG.....</i>	<i>118.</i>
<i>V. 2 Les modèles de Needleman, Lee et Kim.....</i>	<i>120</i>
<i>V. 3 Le nouveau modèle cohésif : ouverture et glissement .....</i>	<i>123</i>
<i>V. 3.1 Cas d'une simple ouverture.....</i>	<i>125</i>
<i>V. 3.2 Cas d'un simple glissement.....</i>	<i>126</i>
<i>V. 4. Résultats et Discussions.....</i>	<i>127</i>
<i>V. 4.1 Etude des différents potentiels et contraintes cohésives.....</i>	<i>127</i>
<i>V. 4.2 Influence de la taille de grains sur l'intensité des forces cohésives.....</i>	<i>130</i>
<i>V. 4.3 Application de l'endommagement au le modèle élasto-plastique. ....</i>	<i>130</i>
<i>V. 4.3.1 Comportement endommagé en ouverture : comparaison avec la littérature.....</i>	<i>131</i>
<i>V. 4.3.2 Comportement endommagé en glissement : comparaison avec la littérature.....</i>	<i>133</i>

Les matériaux UFG et NC sont connus pour leurs propriétés exceptionnelles mais aussi, pour leur faible taux d'écroutissage caractérisé par des phénomènes d'endommagement précoces. Plusieurs investigations ont été menées depuis, afin de comprendre l'origine et les mécanismes d'endommagement. Comme rappelé dans le chapitre 2, on dénombre aujourd'hui plusieurs mécanismes à l'origine de celui-ci [Bieler et al., 2009], généralement concentrés aux joints de grains. Afin de pouvoir dégager quelques éléments de compréhension, nous avons choisi de faire un bref historique de l'endommagement.

### V. 1 Quelques phrases et types d'endommagement des matériaux UFG

L'étude de l'endommagement des matériaux polycristallins UFG est d'un intérêt considérable dans la mesure où l'on veut prévoir la nucléation de celui-ci lors des essais expérimentaux. Il est souvent déclenché par une déformation plastique intense et fortement localisée. C'est le cas par exemple de la rupture ductile par cavitation caractérisée par une phase de germination, de croissance et de coalescence de cavités telles qu'illustrées sur la Fig. 5.1.

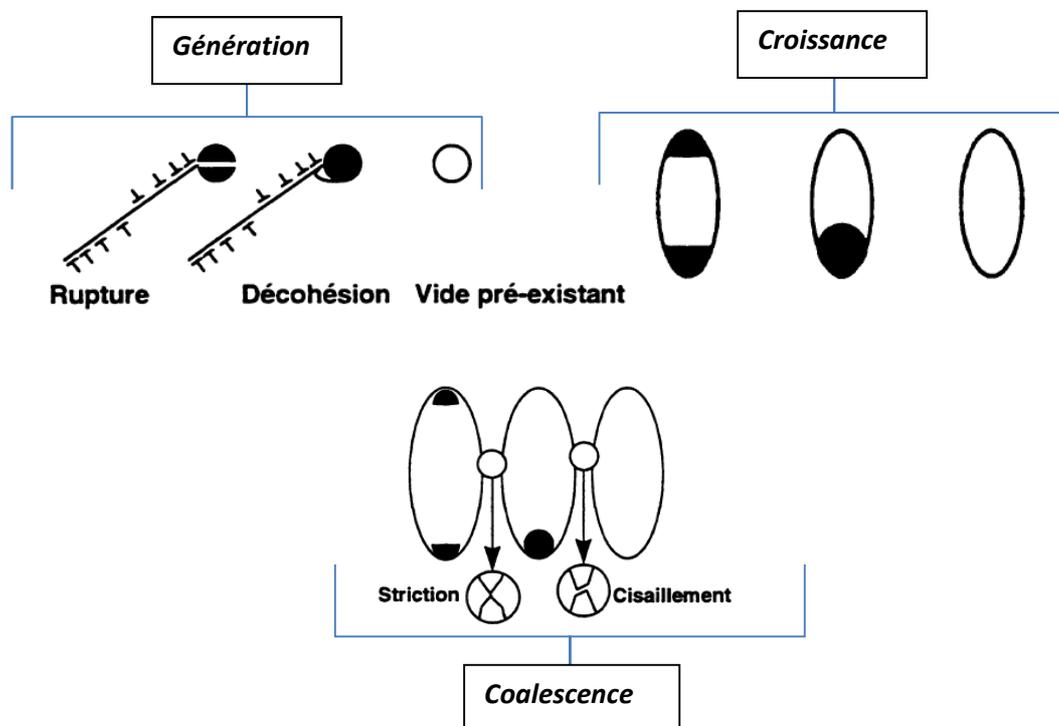


Fig. 5.1 – Mécanismes de la germination, de croissance et de coalescence de la rupture ductile par cavitation, Wang et al., [1984]

D'autres types d'endommagement, autres que la rupture ductile, existent. Il s'agit de l'endommagement ductile et différé suite à des sollicitations de type fluage, fatigue, etc...L'usage des outils numériques peut alors s'avérer nécessaire pour étudier ce type de comportement comme dans la présente étude. En effet, plusieurs travaux sur l'endommagement des matériaux UFG existent dans la littérature. On peut les répartir en trois groupes: (i) l'approche asymptotique dans laquelle la solution du problème se présente comme une série de paramètres [Suquet, 1987; Michel et al., 1994; Lebon et al., 2004; Mishuris et Ochner, 2004]; (ii) l'approche de régularisation visqueuse [Chaboche et al., 2001], (iii) l'approche d'un joint de grains, interface cohésive d'épaisseur nulle [Onck et Van der Giessen, 1997; Needleman, 1987]. Les modèles d'interfaces cohésives sont de plus en plus utilisés pour simuler les processus de rupture discrète dans les matériaux homogènes et hétérogènes. Ces modèles sont généralement exprimés comme des forces de séparation normale et tangentielle [Chandra et al., 2002]. Ce sont ces derniers modèles que nous utiliserons dans notre étude. Il existe plusieurs modèles cohésifs dans la littérature parmi les plus connus, les modèles de Needleman dont nous nous inspirerons dans la suite du travail. Une liste plus ou moins exhaustive de ces modèles avait été proposée par [Chandra et al., 2002]. L'introduction de l'endommagement dans le modèle élastoplastique est faite par le biais de l'énergie libre de Helmholtz  $\psi = \psi(\underline{E}^e, q^s)$  en y ajoutant un terme cohésif tel que :  $\psi = \psi(\underline{E}^e, q^s, \lambda)$ . Ainsi, en fonction des forces volumiques on obtient l'équation suivante :

$$\rho \psi^g(\underline{E}^e, q^s, \lambda) = \rho \psi^g(\underline{E}^e) + \rho \psi^g(q^s) + \rho \psi^g(\lambda) \quad (5.1)$$

où  $\lambda$  est le déplacement effectif. La contrainte cohésive est obtenue par dérivation de l'énergie cohésive en négligeant les forces volumiques. Nous posons :

$$\rho \psi^g(\lambda) = \phi^g(x, y) \quad (5.2)$$

où  $\phi^g(x, y)$  est un potentiel cohésif couplant les mécanismes d'ouverture ( $x = \frac{\lambda}{\lambda_c}$ ) et de glissement ( $y = \frac{\lambda_t}{\lambda_{t_c}}$ ). Ces différents termes sont définis en détails dans la suite de l'étude. La contrainte cohésive se calculera par la formule suivante :

$$\sigma_{co}^g = \frac{\partial}{\partial \lambda} (\rho \psi^g(\lambda)) = \frac{\partial}{\partial \lambda} (\phi^g(x, y)) \quad (5.3)$$

Dans la partie suivante, nous allons proposer l'expression du potentiel cohésif  $\phi^g(x, y)$  se basant sur ce cadre thermodynamique et s'inspirant d'autres modèles cohésifs présents dans la littérature.

## V. 2 Les modèles de Needleman, Lee et Kim

Il existe deux familles de modèles cohésifs de Needleman, il s'agit des modèles dits polynomiaux et exponentiels construits en fonction des besoins. Mais, tous ces modèles ont un seul fondement théorique physique. Il est donc nécessaire avant de proposer notre modèle, de donner quels éléments de motivations sur la base des résultats obtenus par celui-ci. Le cadre théorique de ce développement est emprunté des travaux de Needleman, (1990). Il s'agit d'une approche énergétique basée sur le principe des travaux virtuels dont l'équilibre statique global se réduit à :

$$\int_V \tau^{ij} \delta E_{ij} dV + \int_{S_{int}} \delta \phi dS = \int_{S_{ext}} T^i \delta u_i dS \quad (5.4)$$

où  $\tau^{ij}$  sont les composantes contravariantes de la contrainte de Kirchhoff ( $\tau^{ij} = J\sigma^{ij}$ ) avec  $\sigma$  la contrainte de Cauchy et  $J$  le déterminant du gradient de la transformation.  $V$ ,  $S_{ext}$  et  $S_{int}$  respectivement le volume, les surfaces externe et interne (inter faciale) de la particule dans la configuration de référence.

$$T^i = (\tau^{ij} + \tau^{i,k} u_{,k}) u_j, E_{ij} = (u_{,i,j} + u_{,j,i} + u_{,i}^k u_{k,j}) \quad (5.5)$$

avec  $u_j$  les composantes du vecteur déplacement ;  $_{,i}$  les différentielles des composantes covariantes dans la configuration de référence et  $\phi^g$  est un potentiel cohésif dont on donnera la forme dans la suite. Ce modèle est supposé être continu. On définit un vecteur unitaire  $\vec{n}$  parallèle à la direction  $x_2$  et un vecteur tangent  $\vec{t}$  parallèle à la direction  $x_1$ . Le déplacement initial de la matrice particule sur l'interface peut s'écrire,

$$u_n = \vec{n} \cdot \vec{u}; u_t = \vec{t} \cdot \vec{u}, T_n = \vec{n} \cdot \vec{T} \text{ et } T_t = \vec{t} \cdot \vec{T} \quad (5.6)$$

où  $T^i$  sont les composantes contravariantes du vecteur contrainte de séparation nominale (force par unité de surface de référence).

On définit en outre pour l'interface (joint) une relation constitutive dont les forces cohésives dérivent d'un potentiel  $\phi^g$  dépendant de  $u_n$  et  $u_t$  que sont la différence de déplacement sur

l'interface. Les contraintes d'ouverture et de glissement sont calculées à partir des équations (5.4) suivantes :

$$T_n = -\frac{\partial \phi^g}{\partial u_n}, \quad T_t = -\frac{\partial \phi^g}{\partial u_t} \quad (5.7)$$

L'énergie cohésive ou énergie de séparation  $G_c$  se calcule par la relation :

$$G_c = \int_0^\infty \sigma^g(u) du \quad (5.8)$$

où  $u$  est le déplacement effectif.

Ces modèles ont été maintes fois cités et parfois utilisés en fonction des besoins de l'utilisateur. Dans ce qui va suivre, on va s'intéresser aux récentes modifications proposées par Lee et Kim, [2002] dans lesquelles se trouvent condensées tous les autres modèles cohésifs exponentiels de [Needleman, 1990]. Ces derniers s'étaient inspirés du modèle de Xu et Needleman, [1994] dans lequel un paramètre cohésif  $\gamma_n$  avait été introduit, donnant le potentiel cohésif suivant :

$$\phi^g(u_n, u_t) = \phi_n + \phi_n \exp\left(-\gamma_n \frac{u_n}{\delta_n}\right) \left[ -\left(1 + \gamma_n \frac{u_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\frac{u_t^2}{\delta_t^2}\right) \right] \quad (5.9)$$

Les composantes normale et tangentielle de séparation ont pour expressions respectives :

$$\begin{aligned} T_n &= -\gamma_n \frac{\phi_n}{\delta_n} \exp\left(-\gamma_n \frac{u_n}{\delta_n}\right) \left[ \left(\gamma_n \frac{u_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\frac{u_t^2}{\delta_t^2}\right) \right] \\ T_t &= 2 \frac{\phi_n}{\delta_t} \frac{\delta_t}{\delta_t} \left(1 + \gamma_n \frac{u_n}{\delta_n}\right) \exp\left(-\gamma_n \frac{u_n}{\delta_n}\right) \left[ \exp\left(-\frac{u_t^2}{\delta_t^2}\right) \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

Ces expressions satisfont aux conditions  $T_n = 0$  quand  $\frac{u_n}{\delta_n} = 0$  et  $T_t = 0$  quand  $\frac{u_t}{\delta_t} = 0$ .

Fig.5.2a est représenté, pour différentes valeurs du paramètre  $\gamma_n$ , le potentiel cohésif pour l'ouverture en fonction du déplacement effectif normé. L'énergie de séparation (représentée par la aire au-dessous de la courbe) décroît au même titre que le paramètre  $\gamma_n$ . La Fig.5.2b représente, pour différentes valeurs de  $\gamma_n$ , l'ouverture en fonction du déplacement effectif. La valeur maximale de  $-T_n$  est  $\sigma_{max}$  et est atteinte pour  $u_n/\delta_n = 1/\gamma_n$ . Contrairement au cas précédent, la diminution de la valeur de  $\gamma_n$  conduit à un haut niveau d'énergie en ouverture. Le glissement  $T_t$  est inversement dépendant du paramètre  $\gamma_n$ . Il se produit lorsque le déplacement effectif vérifie la relation :  $|u_t| = \frac{\delta_t\sqrt{2}}{2}$ .

Ce modèle d'endommagement peut être d'un grand intérêt mais, la difficulté réside dans le comment faut-il l'intégrer dans un modèle élastoplastique ? A quel moment faut-il considérer que l'énergie de séparation normale ou tangentielle est suffisante pour déclencher le processus d'endommagement ? Quel doit en être le facteur déclencheur, quelle peut être l'influence de la microstructure dans le processus d'endommagement du modèle tel que décrit par ces équations ?

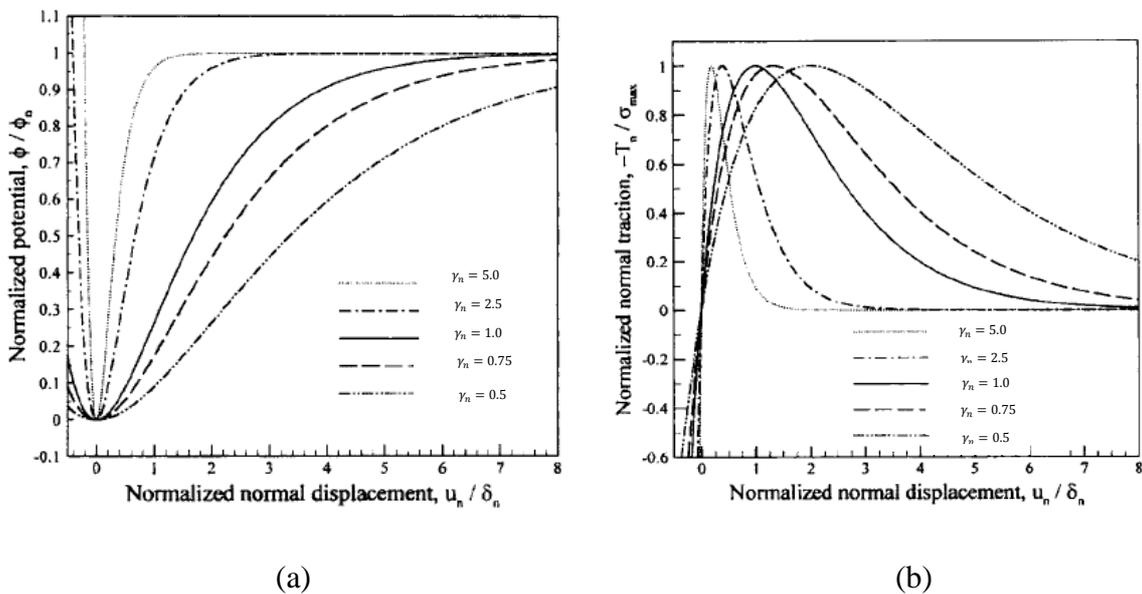


Fig. 5.2 – (a) Potentiel de séparation normalisé  $\phi_n$  en fonction de  $\frac{u_n}{\delta_n}$  pour différentes valeurs de  $\gamma_n$ ;  
 (b) Séparation normale  $T_n$  en fonction de  $\frac{u_n}{\delta_n}$  pour différentes valeurs de  $\gamma_n$ , [Lee et al., 2002]

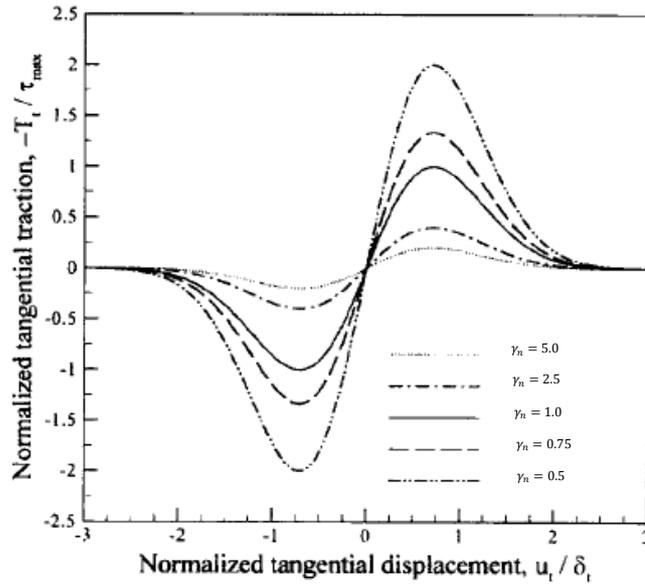


Fig. 5.3 – Séparation tangentielle ou glissement  $T_t$  en fonction de  $\frac{u_t}{\delta_t}$  pour différentes valeurs de  $\gamma_n$ , [Lee et al., 2002].

Afin de répondre à ces interrogations, nous privilégions l’hypothèse selon laquelle l’endommagement est exclusivement dû aux mécanismes d’endommagement d’ouverture et de glissement tels qu’illustrés sur les Figs. 3.7 et 3.9. Vu donc l’importance de l’aspect taille de grains et de la densité des dislocations dans les matériaux UFG, aspects que ce dernier modèle ne prenait pas en compte, nous avons décidé de proposer un nouveau modèle incluant entre autres, une variable sur l’effet de la taille des grains (le diamètre moyen des grains) et une variable représentant l’influence de la densité des dislocations (densité des dislocations moyenne).

### V. 3 Le nouveau modèle cohésif : ouverture et glissement

Considérant les mécanismes d’ouverture et de glissement comme dominants dans le processus d’endommagement des matériaux UFG et NC et; s’inspirant des modèles cohésifs de type exponentiel proposés par [Needleman, 1990], nous avons proposé le modèle suivant :

$$\begin{aligned}
& \phi_{\alpha_1, \alpha_2}(x, y) \\
&= \alpha_t \mu \lambda_c \sqrt{\frac{\beta_0 \alpha_1}{\alpha_1 - \alpha_2} \frac{b}{d} \frac{2}{p}} \left[ \exp(-py^2) \right. \\
&+ \frac{1}{2^{\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} - 1}} \sum_{k=0}^{\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} - 1} C_{\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} - 1}^k \frac{\exp \left[ i \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} - 1 - 2k \right) \arcsin \sqrt{1 - \exp(-px)} \right]}{i \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} - 1 - 2k \right)} \\
&- \left. \frac{1}{2^{\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} + 1}} \sum_{k=0}^{\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} + 1} C_{\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} + 1}^k \frac{\exp \left[ i \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} + 1 - 2k \right) \arcsin \sqrt{1 - \exp(-px)} \right]}{i \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} + 1 - 2k \right)} - 1 \right]
\end{aligned} \tag{5.11}$$

où  $p = \alpha_1 - \alpha_2$ .

Si l'on pose en plus :

$$\frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} = q ; \quad \zeta = \frac{2\alpha_t \mu (1+q) \lambda_c}{vr \rho_m} \sqrt{\beta_0 (1+q) \frac{b}{d}} ; \quad \alpha_1 = vr \rho_m \tag{5.12}$$

On obtient la forme simplifiée suivante :

$$\begin{aligned}
\phi_q(x, y) &= \frac{2\alpha_t \mu (1+q) \lambda_c}{vr \rho_m} \sqrt{\beta_0 (1+q) \frac{b}{d}} \left[ \exp \left( -\frac{vr \rho_m}{1+q} y^2 \right) \right. \\
&+ \frac{1}{2^{q-1}} \sum_{k=0}^{q-1} C_{q-1}^k \frac{\exp \left[ i(q-1-2k) \arcsin \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr \rho_m}{1+q} x \right)} \right]}{i(q-1-2k)} \\
&- \left. \frac{1}{2^{q+1}} \sum_{k=0}^{q+1} C_{q+1}^k \frac{\exp \left[ i(q+1-2k) \arcsin \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr \rho_m}{1+q} x \right)} \right]}{i(q+1-2k)} - 1 \right]
\end{aligned} \tag{5.13}$$

$x = \frac{\lambda}{\lambda_c}$  et  $y = \frac{\lambda_t}{\lambda_{t_c}}$  sont respectivement les déplacements effectifs normaux et tangents caractéristiques de l'ouverture et du glissement des grains durant une sollicitation mécanique,  $v$  la vitesse moyenne des dislocations selon la loi d'Orowan,  $\rho_m$  la densité des dislocations

mobiles,  $b$  le vecteur de Burgers,  $d$  le diamètre moyen des grains,  $r$  le coefficient de restauration dynamique,  $\lambda_c$  le déplacement effectif critique en ouverture,  $\lambda_{t_c}$  le déplacement effectif critique en glissement et  $q$  un entier désignant le numéro du potentiel cohésif dans cette formulation,  $\beta_0$  le coefficient de dilation isotherme du matériaux.

Ce potentiel représente deux mécanismes d'endommagement que nous avons décidé d'étudier d'abord séparément.

### V. 3.1 Cas d'une simple ouverture

Dans le cas d'un endommagement par ouverture, les déformations ainsi que les déplacements relatifs  $\frac{\lambda_t}{\lambda_{t_c}}$  induits par le glissement sont supposés nuls, la rotation des grains étant négligeable (hypothèse des petites déformations). Le potentiel cohésif par mécanismes d'ouverture devient :

$$\begin{aligned} \rho\psi^g(\lambda) &= \phi_q(x, 0) \\ &= \zeta \left[ \frac{1}{2^{q-1}} \sum_{k=0}^{q-1} C_{q-1}^k \frac{\exp \left[ i(q-1-2k) \arcsin \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m x}{1+q} \right)} \right]}{i(q-1-2k)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2^{q+1}} \sum_{k=0}^{q+1} C_{q+1}^k \frac{\exp \left[ i(q+1-2k) \arcsin \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m x}{1+q} \right)} \right]}{i(q+1-2k)} - 1 \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

La séparation normale (ouverture) se calcule par le biais des équations (5.7), en considérant qu'elles dérivent d'un potentiel cohésif en fonction du déplacement effectif normal. On obtient ainsi la relation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\rho\psi^g(\lambda)) &= \sigma_{co}^g = T_q(x, 0) \\ &= \alpha_t \mu \sqrt{\beta_0(1+q)} \frac{b}{d} \left[ \frac{1}{2^{q-1}} \sum_{k=0}^{q-1} C_{q-1}^k \frac{\exp \left[ i(q-1-2k) \arcsin \sqrt{1 - \exp(-\zeta_m x)} - \frac{\zeta_m}{2} x \right]}{\sqrt{1 - \exp(-\zeta_m x)}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2^{q+1}} \sum_{k=0}^{q+1} C_{q+1}^k \frac{\exp \left[ i(q+1-2k) \arcsin \sqrt{1 - \exp(-\zeta_m x)} - \frac{\zeta_m}{2} x \right]}{\sqrt{1 - \exp(-\zeta_m x)}} - 1 \right] \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\text{où } \zeta_m = \frac{vr\rho_m}{1+q}.$$

Il est n'est pas possible de négliger la rotation des grains durant une sollicitation mécanique en grandes déformations. Les mécanismes des déformations par glissement sont à cet effet inévitables, d'où la nécessité d'inclure une contrainte cohésive gouvernant l'endommagement par glissement.

### V. 3.2 Cas d'un simple glissement

Dans le cas d'un endommagement par simple glissement, les déformations ainsi que les déplacements relatifs  $\frac{\lambda}{\lambda_c}$  provoqués par l'ouverture des grains sont nuls. La forme réduite du potentiel par glissement s'écrit alors :

$$\rho\psi(\lambda) = \phi_q(0, y) = \frac{2\alpha_t\mu(1+q)\lambda_c}{vr\rho_m} \sqrt{\beta_0(1+q)} \frac{b}{d} \left[ \exp\left(-\frac{vr\rho_m}{1+q} y^2\right) - 1 \right] \quad (5.16)$$

L'ensemble des séparations tangentielles dues au mécanisme de glissement peut ainsi se calculer comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}(\rho\psi(\lambda)) = \sigma_{co}^g = T_q(0, y) = -4\alpha_t\mu \frac{\lambda_c}{\lambda_{tc}} \sqrt{\beta_0(1+q)} \frac{b}{d} y \exp\left(-\frac{vr\rho_m}{1+q} y^2\right) \quad (5.17)$$

Dans la pratique, ces deux mécanismes sont indissociables même si souvent leurs ordres de grandeurs alternent pendant un essai mécanique couplé à l'endommagement. Nous avons à cet effet, utilisé le principe de la loi de mélange afin d'essayer de caractériser l'endommagement couplant les deux mécanismes (Eq. 6.18).

$$T_q(x, y) = \frac{\lambda_c}{\lambda_{tc}} T_q(0, y) + \left(1 - \frac{\lambda_c}{\lambda_{tc}}\right) T_q(x, 0) \quad (5.18)$$

Avant l'implémentation de la partie cohésive dans le modèle général (couplant à la fois l'élastoplasticité, les grandes déformations, l'effet taille de grains et l'endommagement), nous avons étudié de manière séparée le comportement de celle-ci afin de pouvoir comparer les résultats au modèle de référence cité au début de ce chapitre [Needleman, 1990]. Pour ce faire, les paramètres optimisés du nickel pour cette partie incluant l'endommagement cohésif, ont été définis et représentés dans le Tableau 7.1. On rappelle que certains paramètres ont été inspirés des publications présentes dans la littérature [Malygin, 2008 ; Ronald, 2009].

**Tableau 5.1 - Coefficients de la partie cohésive**

Variable	Valeur	Unité
$\alpha_t$	0.24	SI
$\mu$	210	GPa
$r$	0.13	SI
$\rho_m$	$3.50 \cdot 10^{10}$	$m^{-2}$
$\lambda_c/\lambda_{t_c}$	0.1	SI
$v$	1	$nm \cdot s^{-1}$

## V. 4. Résultats et Discussions

### V. 4.1 Etude des différents potentiels et contraintes cohésives

Des valeurs de  $q$  sont fixées dans cette partie afin d'étudier d'abord le comportement au niveau des potentiels et forces cohésives. Pour ce faire, deux valeurs de  $q$  (2 et 4) ont été choisies afin d'obtenir les expressions ci-dessous :

**Pour  $q=2$ ,**

$$\phi^g(x, y) = \frac{6\alpha\mu\lambda_c}{vr\rho_m} \sqrt{3\beta_0 \frac{b}{d}} \left[ \exp + \frac{1}{3} \left( 1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} x \right) \right) \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} x \right)} - 1 \right] \quad (5.19)$$

- Cas du glissement

$$\phi^g(0, y) = \frac{6\alpha\mu\lambda_c}{vr\rho_m} \sqrt{3\beta_0 \frac{b}{d}} \left[ \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} y^2 \right) - 1 \right] \quad (5.20)$$

$$\sigma_{co}^g = -4\alpha\mu \frac{\lambda_c}{\lambda_{t_c}} \sqrt{3\beta_0 \frac{b}{d}} y \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} y^2 \right) \quad (5.21)$$

- Cas de l'ouverture

$$\phi^g(x, 0) = \frac{2\alpha\mu\lambda_c}{vr\rho_m} \sqrt{3\beta_0 \frac{b}{d}} \left[ \left( 1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} x \right) \right) \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} x \right)} \right] \quad (5.22)$$

$$\sigma_{co}^g = \alpha\mu \sqrt{3\beta_0 \frac{b}{d}} \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} x \right) \sqrt{1 - \exp \left( -\frac{vr\rho_m}{3} x \right)} \quad (5.23)$$

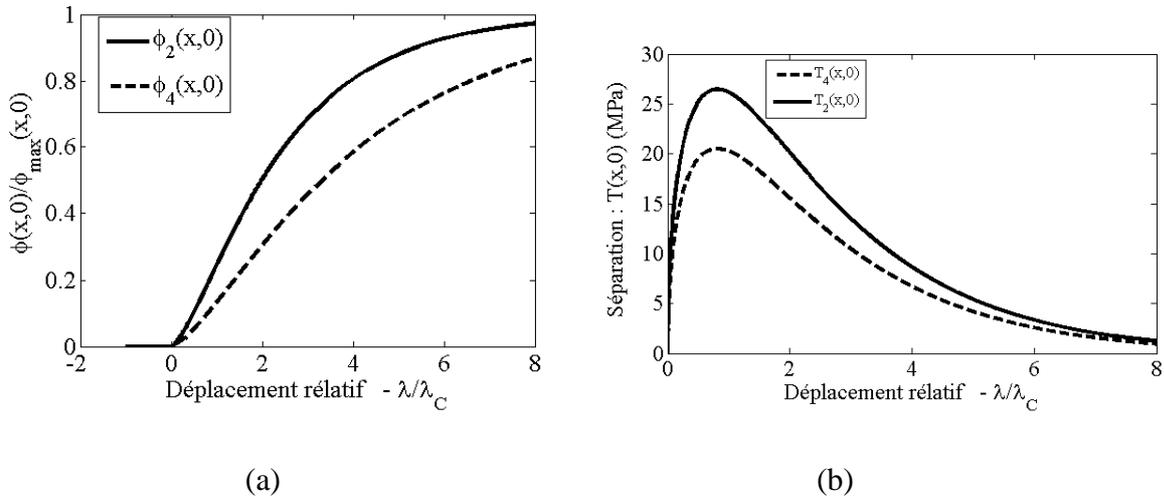
**Pour  $q=4$ ,**

- Cas de l'ouverture

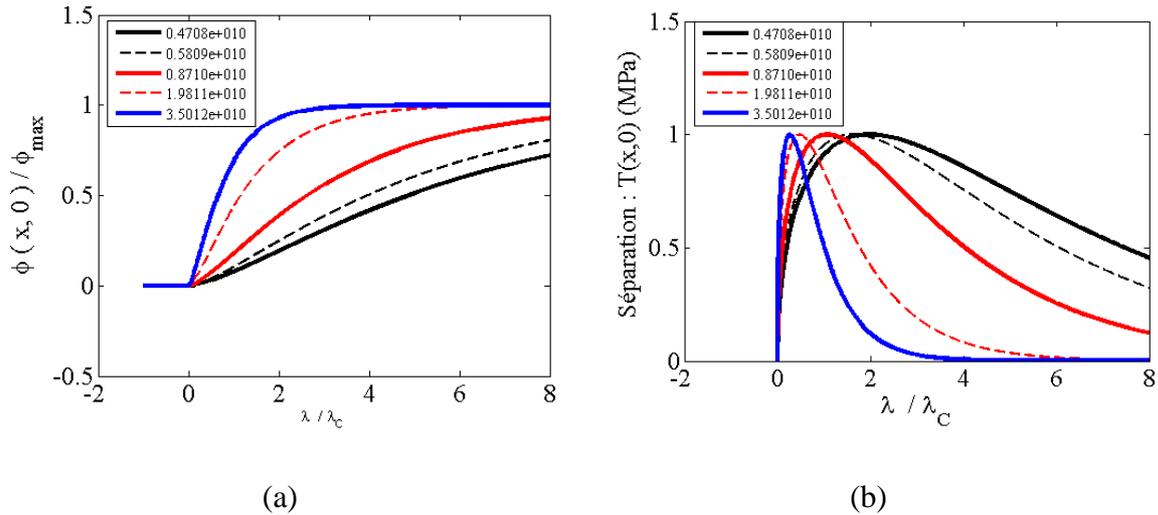
$$\phi^g(x, y) = \frac{10\alpha\mu\lambda_c}{vr\rho_m} \sqrt{5\beta_0 \frac{b}{d} \left[ \frac{1}{3} - \frac{1}{5} \left( 1 - \exp\left(-\frac{vr\rho_m}{5}x\right) \right) \right]} \left( 1 - \exp\left(-\frac{vr\rho_m}{5}x\right) \right)^{3/2} \quad (5.24)$$

$$\sigma_{co}^g = \alpha\mu \sqrt{5\beta_0 \frac{b}{d}} \exp\left(-\frac{2vr\rho_m}{5}x\right) \sqrt{1 - \exp\left(-\frac{vr\rho_m}{5}x\right)} \quad (5.25)$$

Ces deux potentiels ont été tracés afin de fixer celui qui nous servira de potentiel de référence dans la suite. A cause de sa plus grande intensité en force  $T_2$ ,  $\phi_2$  a été choisi (Fig.6.4). Ayant fixé ainsi ces deux grandeurs, nous avons défini plusieurs densités des dislocations et avons tracé les potentiels et forces cohésives respectives, afin de faciliter la comparaison avec les résultats obtenus précédemment. L'énergie de séparation normale augmente lorsque la densité des dislocations diminue, les séparations normales sont maximales aux points de déplacements  $x_m = 3 \log[3/2rv\rho_m]$ . On constate que lorsque la densité des dislocations diminue, l'énergie de séparation augmente (Fig. 5.5). On note en outre que les déplacements pour lesquels la séparation normale est maximale dépendent de la densité des dislocations.

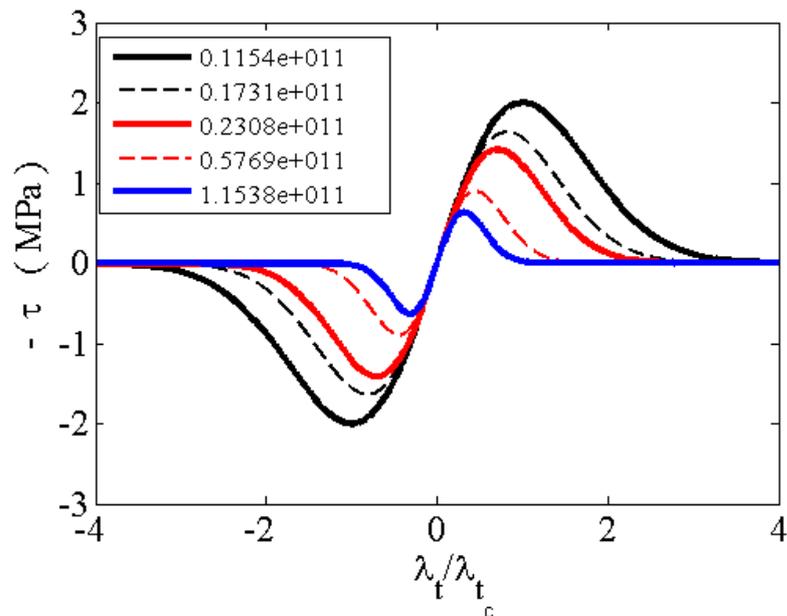


**Fig. 5.4 – (a) Potentiels cohésifs en séparation normale en fonction de  $\frac{\lambda}{\lambda_c}$  ;  
(b) Séparations normales en fonction de  $\frac{\lambda}{\lambda_c}$ .**



**Fig. 5.5 - (a) Influence de la densité des dislocations sur le potentiel de séparation normale; (b) influence de la densité des dislocations sur le potentiel de séparation tangentielle.**

Contrairement à la séparation normale, la séparation tangentielle dépend inversement de la densité des dislocations. De même, la séparation tangentielle est maximale au point de déplacement  $|\lambda_t| = \lambda_{t_c} \sqrt{3/2\nu r \rho_m}$ . A la différence du modèle de Kim [2002], les déplacements pour lesquels la séparation tangentielle est maximale dépendent de la densité des dislocations (Fig. 5.6).



**Fig. 5.6 - Influence de la densité des dislocations sur le potentiel de séparation tangentielle.**

Ces résultats montrent tout l'intérêt et le rôle de la densité des dislocations dans cette modélisation tout comme, par analogie, le rôle joué par le paramètre  $\alpha$  dans les modèles de Lee, [2002].

#### V. 4.2 Influence de la taille de grains sur l'intensité des forces cohésives

Notre modèle reproduit ainsi les mêmes comportements à côté du fait que nous prenons en compte l'influence de la taille des grains. En effet, on constate que plus la taille des grains est grande, plus l'intensité des séparations (normale et tangentielle) est grande et, le mécanisme d'endommagement par ouverture est lent à s'affirmer (Fig. 5.7).

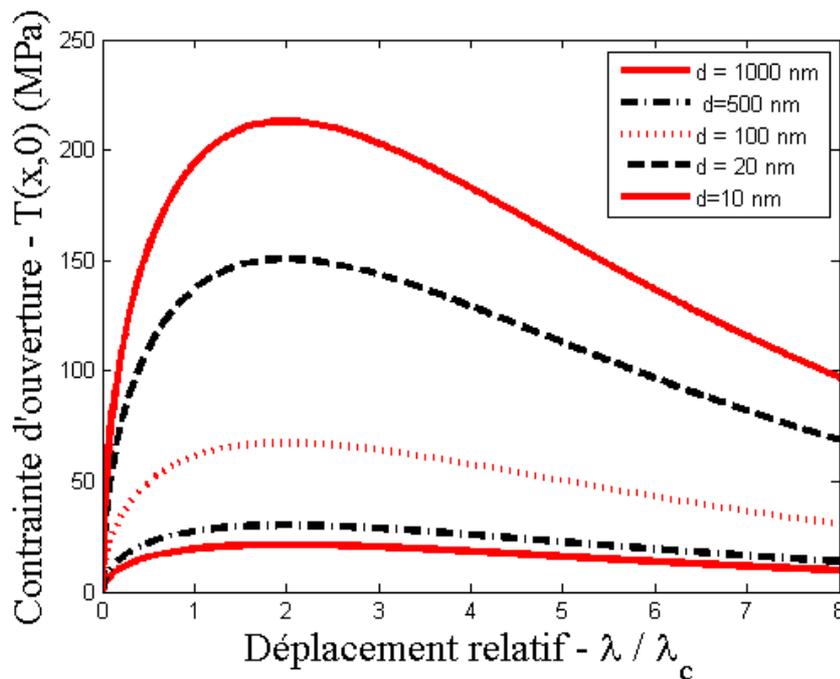


Fig. 5.7 – Influence de la taille des grains sur l'intensité des forces de séparation normale.

#### V. 4.3 Application de l'endommagement au le modèle élasto-plastique.

L'implémentation de ce modèle cohésif d'endommagement dans le modèle élastoplastique a été faite par l'introduction d'une contrainte cohésive  $\underline{\sigma}_{co}^g$  additive à la contrainte locale résultant de la loi de comportement élasto-viscoplastique définie au chapitre 4. On proposera alors :

$$\tau^s = (\underline{\sigma}^g + \underline{\sigma}_{co}^g) : \left\{ \frac{1}{2} \left[ \underline{Q}^P \cdot \vec{b}_0^s \otimes \underline{Q}^P \cdot \vec{n}_0^s + \underline{Q}^P \cdot \vec{n}_0^s \otimes \underline{Q}^P \cdot \vec{b}_0^s \right] \right\}$$

$$f^s = \tau^s - (R^s + \tau_t^s)$$

(5.26)

Le processus d'endommagement est supposé débiter lorsque la contrainte cohésive  $\sigma_{co}^g$  atteint sa valeur maximale appelée contrainte de décohésion. Ces contraintes maximales peuvent se calculer en considérant qu'elles correspondent aux déplacements pour lesquels les séparations  $\sigma_{co}^g = \frac{\partial \phi}{\partial \lambda_i}$  sont maximales ( $i = n, t$ ).

Combinant tous les paramètres optimisés du modèle relatifs au comportement élasto-viscoplastique, à l'effet de taille de grains et à l'endommagement, nous avons étudié l'influence de la densité des dislocations dans le processus d'endommagement. La taille moyenne des grains a été fixée à 200 nm (taille proche de nos microstructures UFG) et considérée que celle-ci n'avait aucun lien direct avec la densité des dislocations. Cette démarche avait pour but de faciliter le calcul et le choix d'une densité des dislocations qui resterait constante quelle que soit la taille des grains. Autrement (et ce qui semble évidemment puisque nous avons prouvé dans le chapitre précédent le lien direct entre ces deux grandeurs), il faudra faire correspondre à chaque densité des dislocations une taille de grains appropriée.

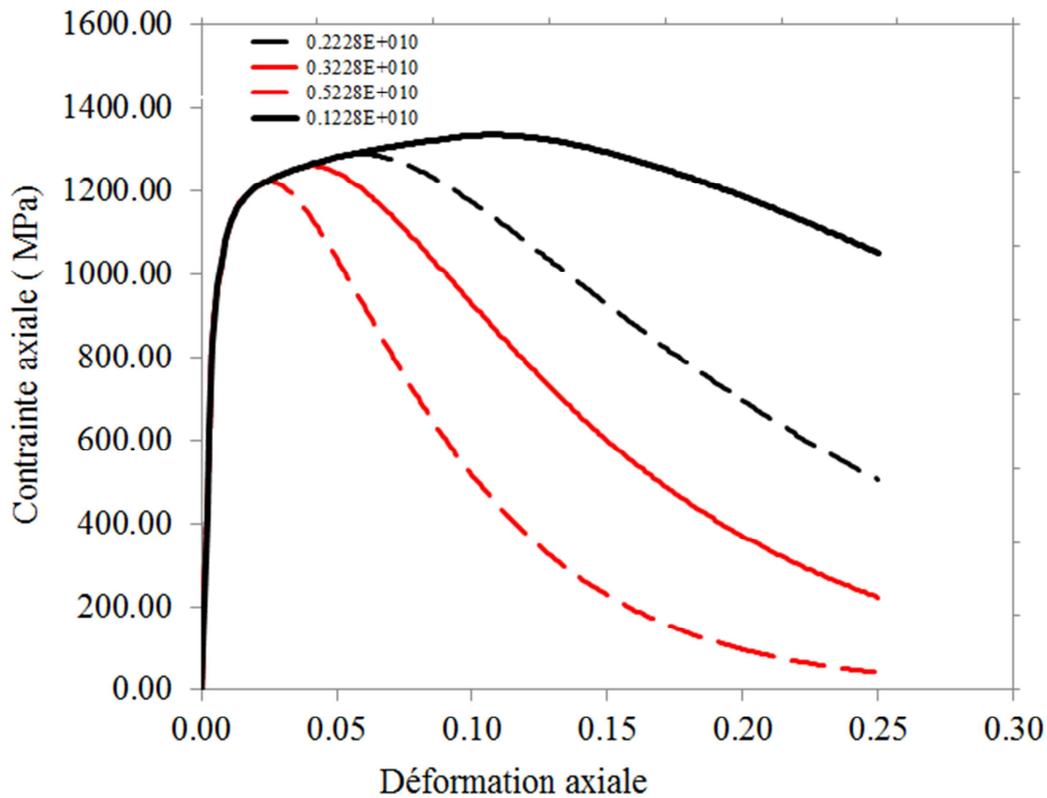
Les paramètres couplant modèle élastoplastique, effet taille de grains et endommagement sont donnés dans le Tableau 4.2.

#### V. 4.3.1 Comportement endommagé en ouverture : comparaison avec la littérature

La Fig. 5.7 montre l'influence de la densité des dislocations sur l'endommagement en ouverture des joints.

**Tableau 5.2 - Tableau de coefficients couplé modèle élastoplastique, effet de taille de grains et endommagement.**

Variable	Valeur	Unité
$E$	210000 / 214000	MPa
$\nu$	0.312 / 0.310	--
$z^s$	10	--
$K^s$	90	MPa
$k_o^s$	15	MPa
$Q^s$	200	--
$b^s$	20	--
$\alpha$	$0.2 \cdot 10^{-7}$	--
$h1=h2=h5$	1	--
$h6$	2.5	--
Effet taille de grains		
$k_a$	3.4	--
$\dot{\epsilon}$	$3.0 \cdot 10^{-4}$	$s^{-1}$
$D_{gb}$	$3.83 \cdot 10^{-21} / 1.56 \cdot 10^{-20}$	$m^2/s$
$\beta_o$	$10^{-2}$	--
$\epsilon_y$	$2.0 \cdot 10^{-3}$	--
$bk_f$	$10^{-2}$	--
$T, \mu$	25 / 76	
$b$	0.249	$^{\circ}C/GPa$
$m$	3.05	nm
$\alpha_t$	0.24	--
		--
Paramètres sur l'endommagement		
$r$	0.13	---
$\rho_m$	$[0.1-0.3] \cdot 10^{10}$	$m^{-2}$
$\lambda_c/\lambda_{t_c}$	0.1	---
$v$	1.0	$nm \cdot s^{-1}$

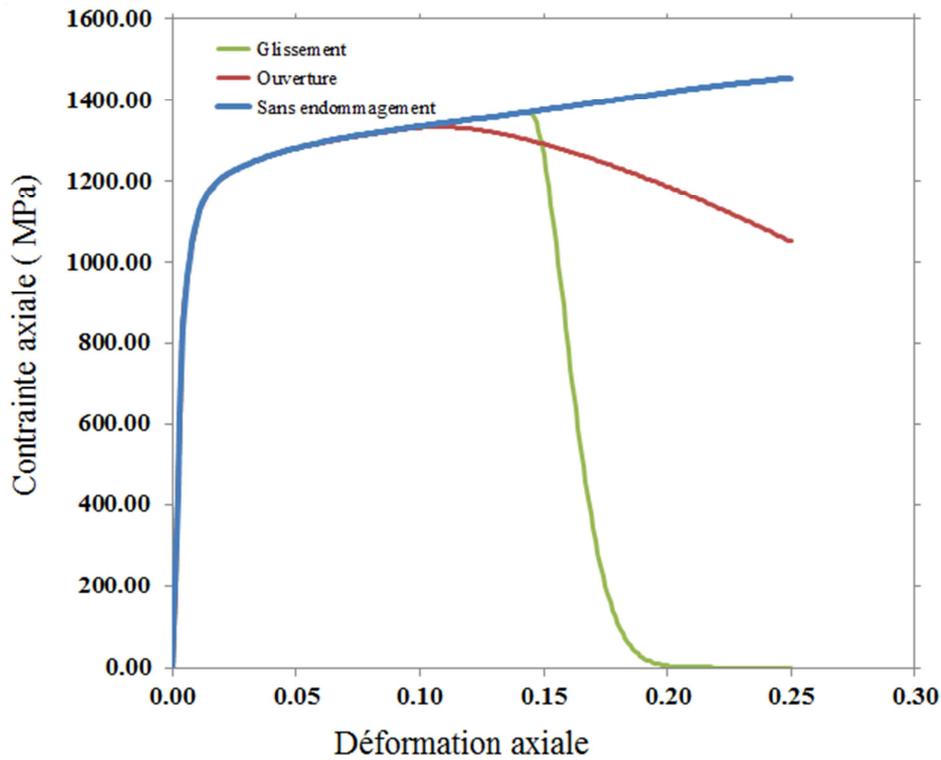


**Fig. 5.8 – Influence de la densité des dislocations dans le processus d’endommagement par ouverture des points de grains pour des grains de taille 200 nm.**

On constate sur la Fig. 5.8 que, plus la densité des dislocations est grande, plus le processus d’endommagement est précoce, ce qui correspond bien aux observations expérimentales pour cette taille de grains car les matériaux UFG dans cette gamme de taille de grains sont connus pour avoir une forte densité des dislocations et, en même temps, une faible ductilité telle qu’annoncée au début de notre étude.

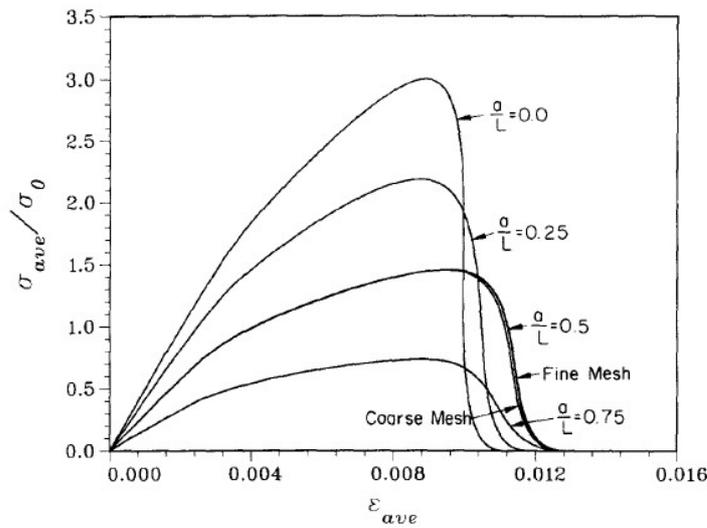
#### **V. 4.3.2 Comportement endommagé en glissement : comparaison avec la littérature**

La décohésion par ouverture conduit à un adoucissement contrôlé de la réponse globale alors que la décohésion par glissement conduit, au-delà d’un seuil de déformation, à une chute quasi-instantanée de la contrainte globale telle qu’illustrée sur la Fig. 5.9 ci-dessous.



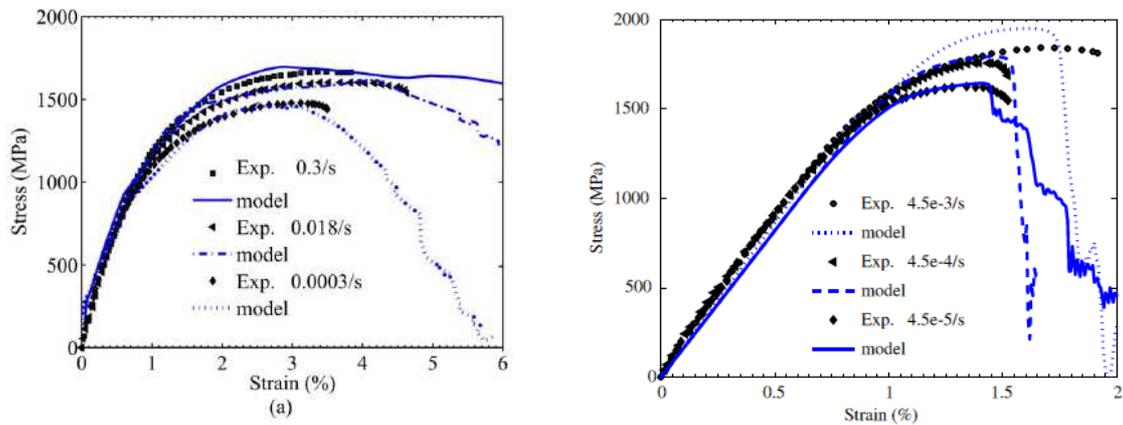
**Fig. 5.9 – Mécanismes d’endommagement comparés: ouverture et glissement avec la réponse non endommagée.**

Cette étude peut être comparée à celle menée par Needleman, [1990] dans le cadre d’une pièce rectangulaire contenant un paramètre d’imperfection car, ce paramètre joue le rôle de la densité des dislocations dans notre cas (Fig. 5.10).



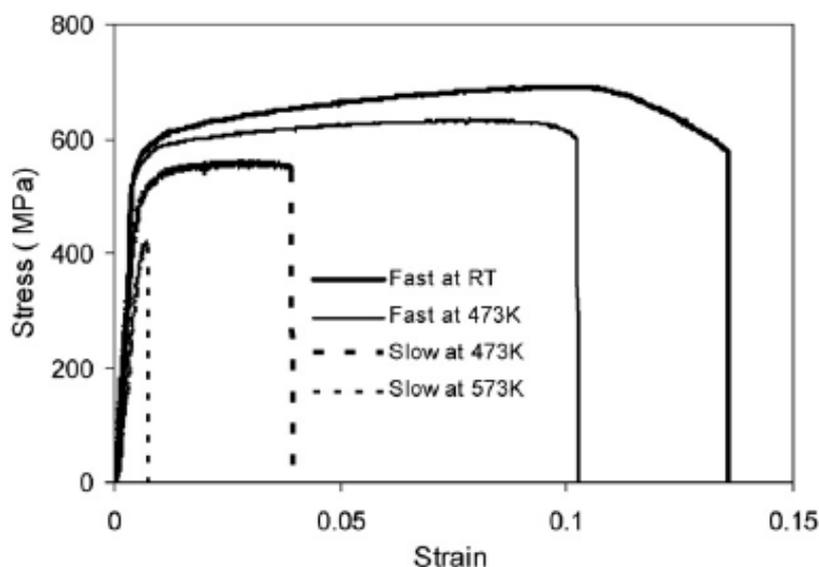
**Fig. 5.10 – Réponse mécanique avec endommagement par décohésion, [Needleman 1990].**

Des résultats de l'endommagement du nickel NC (20 -120 nm) existent et semblent fournir des résultats proches des comportements de notre modélisation (Fig. 5.11). C'est le cas de l'étude numérique menée par Wei et al., [2006] puis comparée aux données expérimentales fournies par Zhu et al., [2005].



**Fig. 5.11 – Endommagement du nickel pour différentes vitesses de sollicitations :  
taille moyenne des grains 20 nm, [Wei et al., 2006]**

Quoique les tailles de grains n'aient pas été les mêmes pour simuler l'endommagement du Nickel nanométrique, nous pouvons au regard de ces résultats [Wei et al., 2006] dire que notre modèle d'endommagement reproduit bien les comportements observés expérimentalement.



**Fig. 5.12 – Typique Stress -Strain plots for AR material at :  
RT, 473 K, 573 K with  $2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  and  $5 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ , [Sun et al., 2008].**

La difficulté dans notre démarche réside dans la mesure de la densité des dislocations mobiles, de la vitesse moyenne des dislocations ainsi que du coefficient de restauration dynamique. En outre, la détermination de la contrainte à partir de laquelle l'endommagement débute (nucléation) pose de nombreuses complications. Le calcul de l'énergie de nucléation s'avère souvent fastidieuse [Sun et al., 2008] tel qu'illustré sur la Fig. 5.12 Ceci pose donc un sérieux problème d'optimisation de ce modèle d'endommagement. Enfin, vu la gamme importante des microstructures du projet MIMIC dont entre autres les microstructures bimodales, tous nos modèles sur l'effet de taille de grains et l'endommagement devront être adaptés afin de pouvoir caractériser la déformation plastique des matériaux bi-phasiques ou multi-phasiques.

## Chapitre VI : Conclusions générales et Perspectives

---

Cette étude a permis de mettre en évidence tout l'intérêt d'une modélisation micromécanique intégrant les grandes rotations, les transitions d'échelle de taille de grains et l'endommagement par décohésion des matériaux UFG. Les principaux mécanismes de déformations sont la plasticité cristalline induite par l'activité des dislocations intra-granulaires et les mécanismes de déformation aux joints de grains. Cependant, dans le cas des microstructures dont la taille des grains est inférieure à 10 nm, de nombreuses études [Cheng et al., 2003; Conrad, 2003] démontrent la naissance de mécanismes de déformation inter-granulaire en l'absence de toute plasticité cristalline induite par l'activité des dislocations. Bien que notre modèle numérique soit en mesure de caractériser les comportements mécaniques des microstructures de taille supérieure, inférieur ou égale 10 nm, l'élaboration de microstructures extrêmement fines (< 10 nm) n'était pas à l'ordre du jour du projet ANR MIMIC [Dutel, 2013]. Ceci nous a donc conduit à faire usage des données présentes dans la littérature [Zhu and al., 2005; Wei et al., 2006] et à estimer les limites fonctionnelles de nos modèles, plus précisément sur l'effet de taille de grains et l'endommagement par décohésion. L'étude des microstructures bi-phasiques (bimodales) ou multiphasiques (multimodales), se présente comme une perspective d'évolution qu'il faudra aborder dans un futur proche. Nous entendons aussi, toujours dans le cadre des perspectives, réaliser un certain nombre d'essais expérimentaux bien ciblés: pour différents matériaux, pour différentes trajectoires de chargement, à différentes échelles microstructurales, afin de fournir une fonctionnalité plus optimale et une validation de notre modèle.

De même, si l'impact du paramètre de couplage élasto-viscoplastique  $\alpha$  sur le comportement mécanique ainsi sur l'évolution de la texture cristallographique a été bien abordé, il reste encore à évaluer le rôle d'autres paramètres du modèles tels que les coefficients d'écroutissage isotropes et cinématiques.

L'étude de la dynamique des dislocations a été introduite dans cette étude afin d'étudier la variation de la densité moyenne des dislocations en fonction de la déformation plastique d'une part (Fig. 4.2) et la variation de la densité des dislocations moyenne en fonction de la taille des microstructures (Fig. 4.4) d'autre part. De même, l'activité des

dislocations est plus présente dans les microstructures entre 20 nm et 100 nm ; ce qui est en accord avec les observations de Cheng, [2003]. Nous avons aussi démontré que ce résultat dépend de la vitesse des déformations (Fig.5.5). Il conviendra donc de procéder par une série d'essais mécaniques afin de vérifier si les résultats produits par la modélisation pour différentes vitesses de sollicitation sont en accord.

Dans l'équation (5.12), lorsqu'on néglige l'influence du coefficient de diffusion, on retrouve la loi de *Hall-Petch* définie au chapitre I. Le paramètre *B* regroupant quelques mécanismes (diffusion, activation thermique,..), joue un rôle déterminant dans les différentes phases de comportement mécanique observées. Il sera nécessaire d'étudier la sensibilité de ce modèle à la température puisque dans ce cas présent, nous avons considéré les conditions d'étude normales (à température ambiante).

Notre modèle d'endommagement a été construit à partir des mécanismes de la dynamique des dislocations sur la base de laquelle nous avons ensuite développé une série de potentiels traduisant la variation de la densité des dislocations en fonctions de la déformation.

Enfin, ce travail de thèse répondait à une volonté forte visant à développer et compléter un savoir-faire dans le domaine de la modélisation micromécanique du comportement des matériaux poly cristallins (CFC) à grains ultrafins élaborés dans le cadre du projet MIMIC. Après avoir développé un outil numérique capable de suivre l'évolution de la texture initiale, de caractériser l'influence de la taille moyenne des grains sur la contrainte d'écoulement ainsi que l'endommagement par décohésion en ouverture et/ou en glissement, nos résultats ont été comparés aux différents travaux de la littérature. Les résultats de la modélisation confirment les observations expérimentales sur l'évolution de la limite d'élasticité dans les matériaux UFG élaborés dans le projet MIMIC.

Ce travail nous a permis aussi, d'étudier et de proposer un modèle numérique liant taille de grains et densité des dislocations dans les microstructures. Comme attesté par plusieurs résultats expérimentaux, notre modèle est capable de fournir une explication de la plasticité cristalline induite par l'activité des dislocations à travers la variation de la densité des dislocations en fonction de la microstructure. Cependant, des phases d'optimisation et de validation restent encore à mener afin de dégager toute la pertinence et la puissance de cette nouvelle modélisation.

# Bibliographie

- Abdul-Latif, A.**, 2004 “Pertinence of the grains aggregate type on the self-consistent model responses”, *International Journal of Solids and Structures* 41, pp. 305-322
- Abdul-Latif, A.; Dingli, J.P. and Saanouni, K.**, 2002 “Elastic-Inelastic Self-Consistent Model for Polycrystals”, *Journal of Applied Mechanics* 69, pp 309
- Abdul-Latif, A.; Dirras, G.F.; Ramtani, S. and Hocini, A.**, 2009 “A new concept for producing ultrafine-grained metallic structures via an intermediate strain: experiments and modeling”, *International Journal of Mechanical Sciences* 51, pp 797-806
- Ahzi, S. and M’Guil, S.**, 2009 “A comparison of viscoplastic intermediate approaches for deformation texture deformation in face-centered cubic polycrystals”, *Acta Materialia* 57, pp 2496-2508
- Aifantis, E.C.**, 2009 “Deformation and failure of bulk nanograined and ultrafine-grained materials”, *Materials Sciences and Engineering* 503, pp 190-197
- Amstrong, R.W.**, 2009 “Dislocations mechanisms of copper and iron in high rate deformation tests”, *Journal of Applied Physics* 105, pp 1
- Anand, L. and Kothari, M.**, 1996 “A computational procedure for rate-dependent crystal plasticity”, *J. Mech. Phys. Solids* 44, pp 528-558
- Asaro, R.J. and Needleman, A.**, 1985 “Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals”, *Acta Metallurgica* 33, pp 923-953
- Abdul-Latif, A.; Radi, M.**, 2010 “Modeling of grain shape effect on the elastic-inelastic behaviour of polycrystals with self-consistent scheme”, *Journal of Engineering Materials and Technology* 132, pp 011008
- Abdul-Latif, A.**, 2004 “Pertinence of the grains aggregate type on the self-consistent model responses”, *International Journal of Solids and Structures* 41, pp. 305-322
- Barai, P.**, 2008 “Creep resistance and strain-rate sensitivity of nanocrystalline materials”, PhD thesis Rutgers, State University of New Jersey.
- Beausir, B.**, 2007 “Plasticité cristalline des matériaux hexagonaux sous cisaillement : application au magnésium”, thèse de doctorat l’Université Paul Verlaine et de l’Université de Sherbrooke.
- Beltz, G.E. and Rice, J.R.**, 1992 “Dislocation nucleation at metal-ceramic interfaces”, *Acta Metallurgica eand Materialia* 40, pp 321-331
- Berbenni, S.; Favier, V.; Lemoine, X. and Berveiller., M.**, 2004 “Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures”, *Materials Science and Engineering* 372, pp 128-136

- Berveiller, M. and Zaoui, A.,** 1978 “An extension of the self-consistent scheme to plasticity-flowing polycrystals”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 26, 325-344
- Budiansky and Wu, T.T.,** 1962 *Proc. 4<sup>th</sup> Congr. Appl. Mech.*, pp 1175
- Bieler, T.R.; Eisenlohr, P.; Roters, F.; Kumar, D.; Mason, D.E.; Crimp, M.A. and Raabe, D.,** 2009 “The role of heterogeneous deformation on damage nucleation at grain boundaries in single phase metals”, *International Journal of Plasticity* 25, pp 1655-1683
- Bui, Q.H.,** 2008 “Polycristaux à Grains Ultrafins Elaborés par Métallurgie des Poudres : Microstructure, Mécaniques et Modélisation Micromécanique”, Thèse de Doctorat de l’université Paris 13
- Cai, B.; Kong, Q.P.; Lu, L. and Lu, K.,** 1999 “Interface controlled diffusional creep of nanocrystalline pure copper”, *Scripta Materialia* 41, pp 755-759
- Caillard, D. and Martin, J.L.,** 2003 “Thermally activated mechanisms in crystal plasticity”, *Pergamon Materials Series* 8, pp 17-18
- Cailletaud, G. and Sai, K.,** 2008 “A polycrystalline model for the description of ratcheting: Effect of intergranular and intragranular hardening”, *Materials Science and Engineering* 480, pp 24-39
- Cao, W.Q.; Dirras, G.; Benyoucef, M. and Bacroix, B.,** 2007 “Room temperature deformation mechanisms in ultrafine-grained materials processed by hot isostatic pressing”, *Materials Science and Engineering* 462, pp 100-105
- Champion, Y.,** 2013, “Computing regimes of rate dependent plastic flow in ultrafine grained metals”, *Materials Science & Engineering* 560, pp 315-320
- Chandra, N.; Li, H.; Shet, C. and Ghonem, H.,** 2002 “Some issues in application of cohesive zone models for metal-ceramic interfaces”, *International Journal of Solids and Structures* 39, pp 2827-2855
- Cheng, S.; Spencer, J.A. and Milligan, W.W.,** 2003 “Strength and tension/compression asymmetry in nanostructured and ultrafine-grain metals”, *Acta Materialia* 51, pp 4505-4518
- Chokshi, A. H.; Rosen, A.; Karch, J. and Gleiter, H.,** 1989 “On the validity of Hall-Petch relation in nanocrystalline materials”, *Scripta metallurgica* 23, pp 1676-1684
- Chu, G.; Liu, W.; Yang, T.; Tang, Y.J.,** 2009 “Properties of nanocrystalline copper prepared by vacuum-warm-compaction method”, *Trans. Nonferrous Met. Soc.* 19, pp 394-398
- Conrad, H.,** 2003 “Grain size dependence of plastic deformation kinetics in copper”, *Materials Sciences and Engineering* 341, pp 216-228
- Crumbach, M.; Gottstein, G.,** 2004 “Analysis of the activity of {110}<110> slip in AA3103 by inverse modeling”, *Materials Sciences and Engineering* 387-389, pp 282-287

- De Sansal, C. ; Devincere, B. and Kubin, L.,** 2010 “ Scale transitions in crystal plasticity by dislocation dynamic simulations”, *Comptes Rendus Physique* 11, pp 274-284
- Dingli, J.Ph.; Abdul-Latif, A. and Saanouni, K.,** 2000 “Predictions of the complex cyclic behavior of polycrystals using a self-consistent modeling”, *International Journal of Plasticity* 16, pp 411-437
- Duchêne L., El Houdaigui F. and Habraken A.M.,** 2007 “Length changes and texture prediction during free end torsion test of copper bars with FEM and remeshing techniques”, *International Journal of Plasticity*, 23 pp 1417-1438.
- Dutel, G.D.,** 2013 “Comportement Mécanique et Mécanismes de Déformation et d’Endommagement de Polycristaux de Nickel mono-et bimodaux élaborés par SPS”, Thèse de Doctorat de l’université Paris 13
- Embury, J. D. and Hirth, J.P.,** 1994 “On dislocations storage and the mechanical responses of fine scale microstructures”, *Acta Metallurgica and Materialia* 42, pp 2051-2056
- Embury, J.D.,** 1994 “Structural aspects of materials subjected to large strains”, *Materials Science and Engineering* 175, pp 105-111
- Erb, U.,** 1995 “Electrodeposited nanocrystals:Synthesis, properties and industrial applications”, *Nanostructured Materials* 6, pp 533-538
- Eshelby, J.D.; Bilby, B.A. and Kundu, A.K.,** 1975 “The change of shape of a viscous ellipsoidal region embedded in a slowly deforming matrix having a different viscosity”, *Tectonophysics* 28, pp 408-409
- Evrard, P. ; Aubin, V. ; Pilvin, Ph.; Degallaix, D. and Kondo, D.,** 2008 “Implementation and validation of a polycrystalline model for a bi-phased steel under non-proportional loading paths”, *Mechanics Research Communications* 35, pp 336-343
- Fisher-Cripps, A.C.,** 2006 “Critical review of analysis and interpretation of nanoindentation test data”, *Surface & Coatings Technology* 200, pp 4153-4165
- Franciosi, P. and Berbenni, S.,** 2007 “Heterogeneous crystal and poly-crystal plasticity modeling from a transformation field analysis within a regularized Schmid law”, *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 55, pp 2265-2299
- François, D. ; Pineau, A. and Zaoui, A.,** 1991 “Comportement Mécanique des Matériaux ”, volume 1. Hermès, Paris.
- Franciosi, P. and Berbenni, S.,** 2008 “Multi-laminate plastic-strain organization for non-uniform TFA modeling of poly-crystal regularized plastic flow”, *International Journal of Plasticity* 9, pp 1549-1580
- Franciosi, P.; Berveiller, M. and Zaoui, A.,** 1980 “Latent hardening in copper and aluminium single crystals”, *Acta Metallurgica* 28, pp 273-283

- Franciosi, P., 1985** “The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals”, *Acta Metallurgica* 33, pp 1601-1612
- Galindo-Nava, E.I., 2008** “A thermostatic theory of low and high temperature deformation in metals”, *Materials Science and Technology* 24, pp 495-40
- Gao, Y.C. and Nemat-Nasser, S., 1984** “Mode II dynamic fields near a crack tip growing in an elastic-perfectly-plastic Solid”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 32, pp 1-19
- Gleiter, H., 1982** “On the microstructure of grain boundaries in metals”, *Materials Science and Engineering* 52, pp 91-131
- Gleiter, H., 1989** “Nanocrystalline materials”, *Prog Material Science* 33, pp. 223-315
- Gürses, E. and El Sayed, T., 2010** “On tension-compression asymmetry in ultrafine-grained and nanocrystalline metals”, *Computational Materials Science* 50, pp 639-644
- Hall, E. O., 1951** “Macroscopic aspect of Lüders band deformation in mild steel”, *Proc. R. Soc. Lond* 64, pp 474
- Hamzaoui, R.; Elkedim, R.; Fenineche, N.; Gaffet, E. and J. Craven, 2003** “Structure and magnetic properties of nanocrystalline mechanically alloyed Fe-10%Ni and Fe-20%Ni”, *Materials Science and Engineering* 360, pp 299-305
- Hansen, N. and Ralph, B., 1982** “The strain and grain size dependence of the flow stress of copper”, *Acta metallurgica* 30, pp 411-417
- Henning, C.A.O; Boswell, F.W and Corbett, J.M., 1975** “Mechanical properties of vacuum-deposited metals films—III. Layered Cu and Ni single crystal composite”, *Acta Metallurgica* 23, pp 193-197
- Hill, R., 1965** “Theory of mechanical properties of fiber-strengthened materials – III. Self-consistent model”, *International Journal of Solids and Structures* 13, pp 189-198
- Hosford, W. F., 1993** “The Mechanics of Crystals and Textured Polycrystals”. Oxford Science Publications, Oxford.
- Inoue, K., 1966** US Patent, N° 3 241 956
- Inoue, K., 1966** US Patent, N° 3 250 892
- Jackson, P. J.; Basinski, 1967** “The stability of the tensile axis in f.c.c crystals oriented for multiple glide”, *Acta Metallurgica* 15, pp 1253-1255
- Kim, H. S. and Estrin, Y., 2005** “Phase mixture modeling of the strain rate dependent mechanical behavior of nanostructured materials”, *Acta Materialia* 53, pp 765-772
- Knezevic, M.; McCabe, R.J.; Lebensohn, R.A.; Tomé, C.N.; Liu, C.; Lovato, M.L. and Mihaila, B., 1993** “Integration of self-consistent polycrystal plasticity with dislocation

density based hardening laws within an implicit finite element framework: Application to low-symmetry metals”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61, pp 2034-2046.

**Koch, C.C.**, 1997 “Synthesis of nanostructured materials by mechanical milling: problems and opportunities”, *Nanostructured Materials* 9, pp 13-22

**Kocks, U.F. and Mecking, H.**, 2003 “Physics and phenomenology of strain hardening : the fcc case”, *Progress in Materials Science* 48, pp 171-273

**Kouddane, R.; Zouhal, N.; Molinari, A. and Canova, G.R.**, 1994 “Complex loading of viscoplastic materials: micro-macro modeling”, *Materials Science and Engineering* 175, pp 31-36

**Kowalczyk, K. and Gambin, V.**, 2004 “Model of plastic anisotropy evolution with texture-dependent yield surface”, *International journal of Plasticity* 20, pp 19-54

**Krasilnikov, N.; Lojkowski, W.; Pakiela, Z. and Valiev, R.**, 2005 “Tension strength and ductility of ultra-fine-grained nickel processed by severe plastic deformation”, *Materials Science and Engineering* 397, pp 330-337

**Kröner, E.**, 1961 “Zur plastischen verformung des vielkristalls”, *Acta Metallurgica* 9, pp 155-161

**Kocks, U. F.; Brown, T. J.**, 1966 “Latent hardening in aluminium”, *Acta Metallurgica* 14, pp 87-98

**Kouddane, R.; Zouhal, N.; Molinari, A.; Canova, G. R.**, 1994 “Complex loading of viscoplastic materials: micro-macro modeling”, *Materials Science and Engineering* 175, pp 31-36

**Kumar, K. S.; Van Swygenhon, H. and Suresh, S.**; 2003 “Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys”, *Acta Materialia* 51, pp. 5743-5774

**Lebensohn, R. A. and Tomé, C.N.**, 1993 “Self-consistent modeling of visco-elastic polycrystals : Application to irradiation creep and growth”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41, pp 1191-1211

**Lebensohn, R.A. and Tomé, C.N.**, 1993 “A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys”, *Acta Metallurgica and Materialia* 41, pp 2611-2624

**Lee, G. H.; Rhee, C.K.; Lee, M.K.; Kim, W.W. and Ivanov, V.V.**, 2004 “Nanostructures and mechanical properties of copper compacts prepared by magnetic pulsed compaction method”, *Materials Science and Engineering* 375-377, pp 604-608

**Lee, J.S.; Kang, Y.S.; Kwon, S.K.; Cha, B.H. and Qin, X.**, 2004 “A new processing route for net-shaped nanoparticulate materials”, *Advanced Powder Technology* 15, pp 639-655

- Lee, Y. and Kim, K.S.**, 2002 “A Cohesive Surface Separation Potential”, *KSME International Journal* 16, pp 1435-1439
- Li, H.; Yang, H. and Sun, Z.**, 2006 “Explicit increment-update algorithm for modeling crystal elasto-viscoplastic response in finite element simulation”, *Trans. Nonferrous Metals Soc. China* 16, pp 624-630
- Li, J. and Soh, A. K.**, 2012 “Modeling of the plastic deformation of nanostructured materials with grain size gradient”, *International Journal of Plasticity* 39, pp 88-102
- Li, J.; Tian, X.X. and Abdelmoula, R.**, 2012 “A damage model for crack prediction in brittle and quasi-brittle materials solved by the FFT method”, *International Journal of Fracture* 173, pp 135-146
- Lin, T.H.**, 1957 “Analysis of elastic and plastic strains of a face-centered cubic crystal”, *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 5, pp 143-149.
- Lipinski, P. Naddari, N.A. and Berveiller, M.**, 1992 “Recent results concerning the modeling of polycrystalline plasticity at large strains”, *International Journal of Solids and Structures* 29, pp 1873-1881
- Liu, Y.; Gilormini, P. and Ponte Castañeda, P.**, 2005 “Homogenization estimates for texture evolution in halite”, *Tectonophysics* 406, pp 179-195
- Ma, Z.Y. and Mishra, R.S.**, 2005 “Development of ultrafine-grained microstructure and low temperature (0.48 T<sub>m</sub>) superplasticity in friction stir processed Al-Mg-Zr”, *Scripta Materialia* 53, 75-80
- Malygin, G. A.**, 2008 “Strength and Plasticity of Nanocrystalline Metals with a Bimodal Grain Structure”, *Physics of the Solid State* 50, pp 6
- Mercier, S. and Molinari, A.**, 2009 “Homogenization of elastic-viscoplastic heterogeneous materials: Self-consistent and Mori-Tanaka schemes”, *International Journal of Plasticity* 25, pp 1024-1048
- Mises, V. and Angrew, Z.**, 1928 “ ”, *Math. Mech.* 8, pp 161
- Mercier, S.; Jacques, N.; Molinari, A.**, 2005 “Validation of an interaction law for the Eshelby inclusion problem in elasto-viscoplasticity”, *International Journal of Solids and Structures* 42, pp 1923-1941
- Molinari, A. and Ortiz, M.**, 1965 “Global viscoplastic behavior of heterogeneous thermoelastic materials”, *International Journal of Solids and Structures* 23, pp 1676-1684
- Meyers, M.A.; Mishra, M.A. and Benson, D.J.**, 2006 “Mechanical properties of nanocrystalline materials”, *Progress in Materials Science* 51, pp 427-456
- Molinari, A. and Ortiz, M.**, 1987 “Global viscoplastic behavior of heterogeneous thermoelastic materials”, *International Journal of Solids and Structures* 23, pp 1285-1300

- Molinari, A.; Ahzi, S. and Kouddane, R.**, 1997 “On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals”, *Mechanics of Materials* 26, 43-62
- Needleman, A.**, 1990 “An analysis of decohesion along an imperfect interface”, *International Journal of Fracture* 42, pp 21-40
- Ovid’ko, I.A. and Skilba, N.V.**, 2012 “Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials”, *Scripta Materialia* 67, pp 13-16
- Peirce, D.; Asaro, R.J. and Needleman, A.**, 1983 “Material rate dependence and localized in crystalline solids”, *Acta Metallurgica* 31, pp 1951-1983
- Petch, N. J.**, 1954 “Fracture of metals”, *Progress in Metal Physics* 5, pp 1-52
- Pilvin, P.**; 1983 “Modélisation du comportement d’assemblages des structures à barres”, Thèse, Université Paris VI, Paris, France
- Pilvin, P., Cailletaud, G.**; 1990 “Intergranular and Transgranular Hardening in Viscoplasticity”, In *Creep in Structures* (ed. M. Zyczkowski), pp. 171-178
- Pipard, J.M.; Nicaise, N.; Berbenni, S.; Bouaziz, O. and Berveiller, M.**, 2009 “A new mean field micromechanical approach to capture grain size effects”, *Computational Materials Science* 45, pp 604-610
- Plunkett, B.; Cazacu, O.; Lebensohn, R. A. and Barlat, F.**, 2007 “A viscoplastic micromechanical model for the yield strength of nanocrystalline materials”, *Acta Materialia* 55, pp 261-271
- Ramtani, S.; Dirras, G. and Bui, H.Q.**, 2010 “A bimodal bulk ultra-fine-grained nickel: Experimental and micromechanical investigations,” *Mechanics of Materials* 42, pp. 522–536
- Rougier, Y.; Stola, C. and Zaoui, 1994** “Self-consistent modeling of Elastic-Viscoplastic Polycrystals”, *C. R. Acad. Sci. Paris* 319, pp 145
- Saada, G. and Dirras, G.**, 2009 “Mechanical properties of Nanograined Metallic Polycrystals”, *Dislocations in Solids* 15, pp 199-248
- Sachs, G.**, 1928 “Zur Ableitung einer Fließbedingung. *Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure* 72, pp 734
- Sarma, G. and Sacharia, T.**, 1999 “Integration algorithm for modeling the elasto-viscoplastic response of polycrystalline materials”, *J Mech. Physics of Solids* 47, pp 1219-1238
- Schaefer, H.; Wurschum, R.; Gessmann, T.; Stockl, G.; Scharwaechter, P.; Frank, W.; Valiev, R.Z.; Fecht, H. and Moelle, C.**, 1995 “Diffusion and free volumes in nano crystalline Pd”, *Nanostructured Materials* 6, pp 869-872

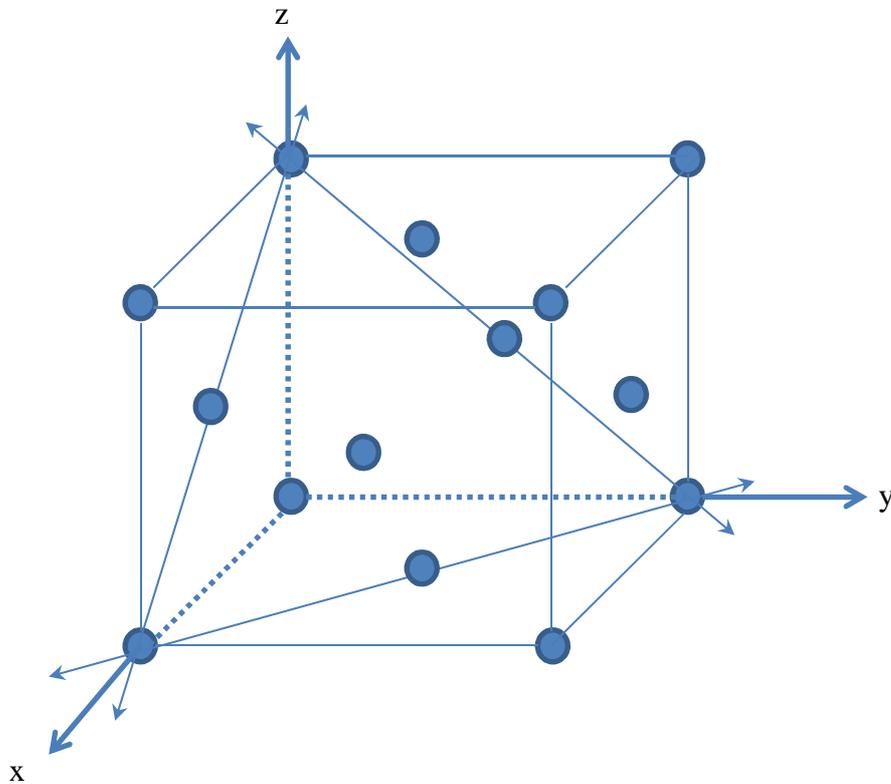
- Valiev, R. Z.; Islamgaliev, R. K.; Alexandrov, I. V.**, 2000 “Bulk nanostructured materials from plastic deformation”, *Progress in Materials Science* 45, pp 103-189
- Schaefer, H.; Wurschum, R.; Gessmann, T.; Stockl, G.; Scharwaechter, P.; Frank, W.; Valiev, R.Z.; Fecht, H. and Moelle, C.**, 1995 “Synthesis of nanoamorphous alloys by particle condensation and compaction”, *Nanostructured Materials* 6, pp 377-380
- Schmitt, C.; Lipinski, P.; Berveiller, M.**, 1997 “Micromechanical modeling of the elastoplastic behavior of polycrystals containing precipitates”, *International Journal of Plasticity* 13, pp 183-199
- SiDoLo** version 2.4495; 2003 “Notice d’utilisation”, Laboratoire Génie Mécanique et Matériaux de l’Université de Bretagne-Sud, Lorient, France
- Sun, Z.; Laitem, C. and Vincent, A.**, 2008 “Dynamic embrittlement at intermediate temperature in a Cu-Ni-Si alloy”, *Materials Sciences and Engineering* 477, pp 145-152
- Taylor, G.**, 1938 “Plastic strain in metals”, *Journal of Institute of Metals* 62, pp 307-324
- Valiev, R.Z.; Islamgaliev, R.K. and Alexandrov, I.V.**, 2000 “Bulk nanostructured materials from plastic deformation”, *Progress in Materials Science* 45, pp 103-189
- Valiev, R.Z.; Kozlov, E.V.; Ivanov, Y.F.; Lian, J.; Nazarov, A.A. and Baudalet, B.**, 1994 “Deformation behavior of ultra-fine-grained copper”, *Acta Metallurgica and Materialia* 42, pp 2467-2475
- Van Dommelen, J.A.W.; Brekelmans, W.A.M. and Baaijens, F.P.T.**, 1999 “Computational visco-plasticity for crystals lacking five independent slip systems”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 32, pp. 5-8
- Van Petegem, S.; Dalla Torre, F.; Segers, D. and Van Swygenhoven, V.**, 2003 “Free volume in nanostructured Ni”, *Scripta Materialia* 48, pp 17-22
- Van Swygenhoven, H.; Spaczér, M. and Caro, A.**, 1999 “Characterization of Microstructure of nanophase Ni: A molecular dynamics simulation study”, *Nanostructured Materials* 12, pp 629-632
- Wang, L.; Zhang, J. and Jiang, W.**, 2013 “Recent development in reactive synthesis of nanostructured bulk materials by spark plasma sintering”, *Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 39, pp 103-112
- Wang, R.; Mughrabi, H.; McGovern, S. and Rapp, M.**, 1984 “Fatigue of Copper Single Crystals in Vacuum and in Air I: Persistent Slip Bands and Dislocations Microstructures”, *Materials Science and Engineering* 65, pp 219-233
- Wang, Y.M.; Hamza, A.V. and Ma, E.**, 2006 “Temperature-dependent strain rate sensitivity and activation volume of nanocrystalline Ni ”, *Acta Materialia* 54, pp 2715 – 2726

- Wei, Y.; Su, C. and Anand, L.,** 2006 “A computational of the mechanical behavior of nanocrystalline fcc metals”, *Acta Materialia* 54, pp 3177-3190
- Wolf, D.; Yamakov, V.; Phillpot, S.R.; Mukherjee, A. and Gleiter, H.,** 2005 “Deformation of nanocrystalline materials by molecular-dynamic simulation: relationship to experiments?”, *Acta Materialia* 53, pp 1-40
- Xu, X.P. and Needleman, A.,** 1994 “Numerical Simulations of Fast Crack Growth in Brittle Solids”, *J. the mechanics and physics of Solids* 42, pp 1397-1434
- Yamakov, V.; Wolf, D.; Phillpot, S.R. and Gleiter, H.,** 2002 “Deformation twinning in nanocrystalline Al by molecular-dynamics simulation”, *Acta Materialia* 50, pp 5005-5020
- Yamakov, V.; Wolf, D.; Phillpot, S.R. and Gleiter, H.,** 2002 “Grain-boundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular-dynamics simulation”, *Acta Materialia* 50, pp 61-73
- Youngdahl, C.J.; Weertman, J. R.; Hugo, R.C. and Kung, H.H.,** 2001 “Deformation behavior in nanocrystalline copper”, *Scripta Materialia* 44, pp 1475-1478
- Zamiri, A.; Pourboghrat, F. and Barlat, F.,** 2007 “An effective computational algorithm for rate-dependent crystal plasticity based on a single yield surface with an application to tube hydroforming”, *International journal of Plasticity* 23, pp 1126-1147
- Zbib, H.M. and Aifantis, E.C.,** 2003 “Size effects and length scales in gradient plasticity and dislocations dynamics”, *Scripta Materialia* 48, pp 155-160
- Zhu, B.; Asaro, R.J.; Krysl, P. and Bailey, R.,** 2005 “Transition of deformation mechanisms and its connection to grain size distribution in nanocrystalline metals”, *Acta Materialia* 53, pp 4825-4838
- Zontsika, N.A.; Abdul-Latif, A. and Ramtani, S.,** (en préparation) “ Grain-size effects on ultrafine Grained materials yield stress: a modified self - consistent approach”, *Journal visé : International Journal of Mechanical Sciences.*
- Zorzi, J.E. and Perottoni, C.A.,** 2013 “ Estimating Young’s modulus and Poisson’s ration by instrumented indentation test” , *Materials Science and Engineering* 574, pp 25-30

# Annexes

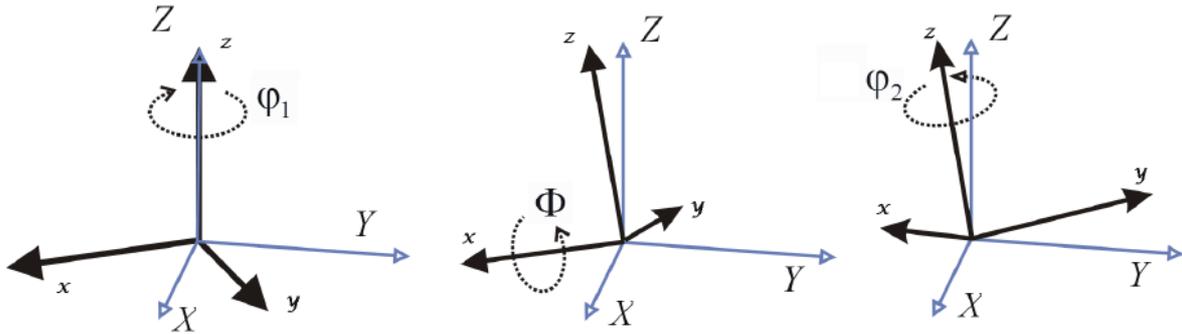
## Annexe 1 : Calcul de la matrice de transformation

Dans cette thèse, nous avons traité exclusivement des matériaux polycristallins cubiques face centrée. Cela nous a permis de considérer trois axes principaux du matériau [100], [010] et [001] pour calculer après des rotations spéciales de celui, la matrice de la transformation,



*Représentation de la maille cubique face centrée (CFC)*

### A – Transformation de Bunge



La matrice de la transformation se calcule par la relation :  $g = g_3 \times g_2 \times g_1$ .

$$g_1 = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 & \sin\varphi_1 & 0 \\ -\sin\varphi_1 & \cos\varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; g_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\Phi & \sin\Phi \\ 0 & -\sin\Phi & \cos\Phi \end{pmatrix}; g_3 = \begin{pmatrix} \cos\varphi_2 & \sin\varphi_2 & 0 \\ -\sin\varphi_2 & \cos\varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$g = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \sin\varphi_1 \sin\varphi_2 \cos\Phi & \cos\varphi_2 \sin\varphi_1 + \sin\varphi_2 \cos\varphi_1 \cos\Phi & \sin\varphi_2 \sin\Phi \\ -\sin\varphi_2 \cos\varphi_1 - \cos\varphi_2 \sin\varphi_1 \cos\Phi & -\sin\varphi_2 \sin\varphi_1 + \cos\varphi_2 \cos\varphi_1 \cos\Phi & \cos\varphi_2 \sin\Phi \\ \sin\varphi_1 \sin\Phi & -\cos\varphi_1 \sin\Phi & \cos\Phi \end{pmatrix}$$

### B – Transformation de Kocks : définie par les angles $\Psi$ , $\Phi$ et $\Theta$

$$g = \begin{pmatrix} \sin\Psi \sin\Phi - \cos\Psi \cos\Phi \cos\Theta & \cos\Psi \sin\Phi + \sin\Psi \cos\Phi \cos\Theta & \cos\Phi \sin\Theta \\ \sin\Psi \cos\Phi - \cos\Psi \sin\Phi \cos\Theta & -\cos\Psi \cos\Phi + \sin\Psi \sin\Phi \cos\Theta & \sin\Phi \sin\Theta \\ \cos\Psi \sin\Theta & \sin\Psi \sin\Theta & \cos\Theta \end{pmatrix}$$

### C – Transformation de Roe : définie par les angles $\psi$ , $\Phi$ et $\Theta$

$$g = \begin{pmatrix} -\sin\psi \sin\Phi + \cos\psi \cos\Phi \cos\Theta & \cos\psi \sin\Phi + \sin\psi \cos\Phi \cos\Theta & -\cos\Phi \sin\Theta \\ -\sin\psi \cos\Phi - \cos\psi \sin\Phi \cos\Theta & \cos\psi \cos\Phi - \sin\psi \sin\Phi \cos\Theta & \sin\Phi \sin\Theta \\ \cos\psi \sin\Theta & \sin\psi \sin\Theta & \cos\Theta \end{pmatrix}$$