



**HAL**  
open science

## Chapitre 3: Les joints de grains dans la déformation à froid

Colette Rey, Denis Solas, Olivier Fandeur

► **To cite this version:**

Colette Rey, Denis Solas, Olivier Fandeur. Chapitre 3: Les joints de grains dans la déformation à froid. Louissette Priester. Joints de grains et plasticité cristalline, Hermes, pp.121-173, 2012, Mécanique et Ingénierie des Matériaux. hal-00778505

**HAL Id: hal-00778505**

**<https://centralesupelec.hal.science/hal-00778505>**

Submitted on 20 Jan 2013

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## Chapitre 3

# Les joints de grains dans la déformation à froid et à chaud

*Colette Rey, Denis Solas et Olivier Fandeur*

### 3.1 Introduction

Les joints de grains jouent un rôle primordial lors de la déformation élastique et élasto-plastique d'un polycristal. L'influence des joints est traditionnellement appréciée à différentes échelles :

- à l'échelle microscopique, on considère les interactions entre les dislocations du réseau cristallin et les défauts propres constituant la microstructure des joints. Ce faisant on perd de vue les interactions à grande distance entre les grains,

- à l'échelle macroscopique, on considère que l'influence des joints provient des effets des incompatibilités de déformation élastique et plastique entre les grains d'un agrégat polycristallin. Ce faisant, on perd de vue les phénomènes particuliers qui se produisent au niveau des joints du fait de leurs caractéristiques propres, en n'envisageant que des effets moyens de grains à grains.

Les joints de grains sont à l'origine de la déformation hétérogène des grains. Cette hétérogénéité se manifeste par l'existence de « domaines » déformés suivant des systèmes de glissement différents. La non uniformité de la déformation est révélée par les marquages (grilles ou mouchetis) déposés sur la surface du matériau. Les incompatibilités de déformation plastique induisent dans les grains, des contraintes internes qui varient en chaque point des grains et qui peuvent être relaxées par des déformations élasto-plastiques. Les contraintes internes locales et les déformations localisées sont étroitement liées. Elles jouent un rôle prépondérant dans la réponse du matériau à une sollicitation et sur son endommagement.

Bien que de grand progrès technologiques aient permis de mieux caractériser la réponse locale des grains, les contraintes internes ne peuvent être mesurées à l'échelle du micromètre. C'est pourquoi la méthode des éléments finis utilisée dans le cadre de la plasticité cristalline, permet une évaluation des contraintes internes ainsi que leur localisation spatiale dans les grains. Les modèles polycristallins sont des outils qui permettent d'étudier la réponse locale d'un matériau à une échelle intermédiaire, dite « mésoscopique », c'est-à-dire se situant entre 0,1 et 10 micromètres. Cependant, les résultats dépendent :

- de l'agrégat censé représenter le matériau,

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

- des conditions aux limites imposées à cet agrégat de taille limitée,
- des lois de comportement introduites.

Dans ce qui suit, nous ne traiterons que des matériaux métalliques purs et des alliages homogènes (pas de variation de concentration d'éléments chimiques) ne présentant ni inclusions, ni précipités. Nous supposerons également que les joints, présentent une bonne cohésion pour les basses et moyennes températures et ne contiennent pas d'éléments de ségrégation.

Le plan général est le suivant :

- définition des incompatibilités de déformation,
- après des rappels sur la plasticité du monocristal, notion de contraintes internes et des modes de relaxation de ces contraintes.
- modélisation polycristalline.
- effet de taille de grain sur le comportement à travers la loi de Hall et Petch et modélisation associée (dislocations géométriquement nécessaires).
- formation de sous-joints et de joints de grains en recristallisation.

### 3.2. Compatibilité et incompatibilité plastiques de la déformation aux joints de grains

#### 3.2.1 Généralités

La notion d'incompatibilité a été introduite dès les années 1950 par Nye [NYE 53], Eshelby [ESH 57], Kröner [KRO 58], Hauser et Chalmers [HAU 61], et Ashby [ASH 70]. La figure 3.1 illustre la déformation plastique d'un agrégat polycristallin. Pour visualiser cette déformation, les grains de l'agrégat sont supposés sans cohésion et se déforment comme des monocristaux suivant des systèmes de glissement bien définis (figure 3.1b). Le matériau présente alors des vides et des recouvrements de matière. La cohésion entre les grains est restaurée si on ajoute des déformations élasto-plastiques supplémentaires au voisinage des joints de grains. La déformation des grains est donc hétérogène comme le montrent les figures 3.2 et 3.3.

Pour comprendre la notion d'incompatibilité de la déformation, considérons un matériau infini, composé de deux grains A et B désorientés l'un par rapport à l'autre et séparés par un joint de grains (figure 3.4).

Soient :

-  $(\bar{X}_1, \bar{X}_2, \bar{X}_3)$  le repère macroscopique lié au milieu infini,  $(\bar{x}_1^A, \bar{x}_2^A, \bar{x}_3^A)$

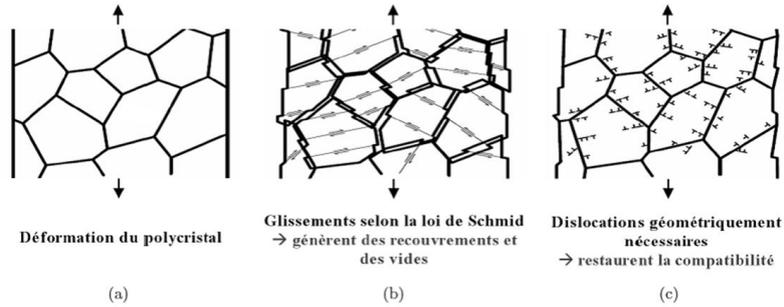
# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

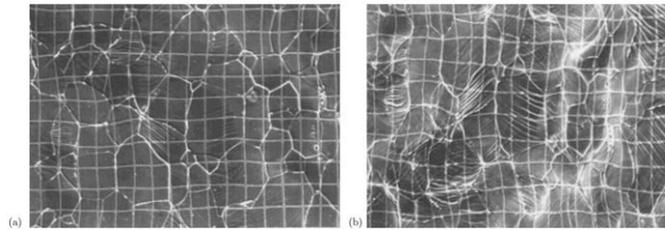
### HERMES

-  $(\square x_1^B, \square x_2^B, \square x_3^B)$  les deux repères liés au réseau cristallin des deux grains.

Supposons, pour simplifier, que le joint de grains correspond au plan  $(\square X_1, 0, \square X_3)$ .



**Figure 3.1.** Représentation de la déformation plastique d'un polycristal d'après Ashby



**Figure 3.2.** Hétérogénéités de déformation dans un polycristal de Fer 1%-Ti après déformations en tractions uniaxiale pas de la grille 5µm (a) E=5%. (b) E=27%, (Lineau et Rey, [LIN 97])



**Figure 3.3 :** Exemples d'hétérogénéités de déformation plastique, lignes de glissement secondaires au voisinage des joints de grains dans des polycristaux de cuivre. (a) bicristal en traction. (b) polycristal en traction. (c) polycristal après laminage de 100%, les grilles ont été déposées à 90% de déformation. (Rey)

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

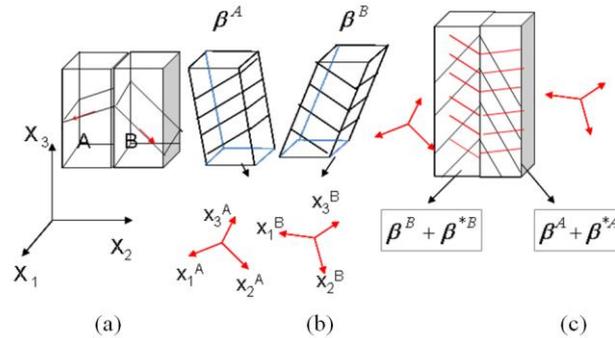
Un joint de grains (A,B) est caractérisé par l'orientation de sa normale par rapport aux axes macroscopiques et par la désorientation des grains qu'il sépare. Cette désorientation est caractérisée par  $\theta = I\Delta\theta$ , où  $I$  est l'axe de rotation commune aux deux grains et  $\Delta\theta$  la désorientation, c'est-à-dire l'angle dont il faut tourner le grain A pour obtenir le grain B. Il faut donc 3 angles pour orienter un des grains, 3 paramètres pour définir la rotation de A vers B et deux paramètres pour orienter le plan du joint par rapport aux axes macroscopiques (ou microscopiques). Soit au total 8 paramètres (voir chap. 1, § 1.1.1.1).

Soient deux points voisins  $M(X_1, X_2, X_3)$  et  $N(X_1 + dX_1, X_2 + dX_2, X_3 + dX_3)$ . Sous l'effet du champ de déformation appliqué, les deux points se déplacent en  $M'$  et  $N'$ . Si les points M et N appartiennent au même grain le déplacement relatif  $du = u(N) - u(M)$  est une fonction continue dérivable. Le développement limité de  $du$  au premier ordre est donné par :

$$d\vec{u}(N) = \left. \frac{\delta \vec{u}}{\delta X_i} \right|_M dX_i \quad [3.1]$$

Posons

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon} &= \frac{1}{2} \left[ \tilde{\nabla} \vec{u} + (\tilde{\nabla} \vec{u})^T \right] \\ \tilde{\omega} &= \frac{1}{2} \left[ \tilde{\nabla} \vec{u} - (\tilde{\nabla} \vec{u})^T \right] \end{aligned} \quad [3.2]$$



**Figure 3.4.** Illustration de l'origine de la formation des systèmes de glissement secondaires, dans un bicristal. (a) Bicristal (b) On impose un champ de déformation dans les grains séparés. (c) La cohésion est assurée avec l'ajout d'un champ de déformation secondaire.

$\tilde{\varepsilon}$  et  $\tilde{\omega}$  sont respectivement, les tenseurs de déformation et de rotation au point N

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

par rapport au point M. On a :

$$d\bar{u}(N) = \tilde{\varepsilon}(N)d\bar{X} + \tilde{\omega}(N)d\bar{X} \quad [3.3]$$

Le tenseur gradient du déplacement est donné par :  $\tilde{\beta} = \tilde{\varepsilon} + \tilde{\omega}$

Si les points M et N appartiennent au grain A et au grain B respectivement, et si les deux grains sont déformés de  $\beta^A$  et  $\beta^B$  tel que :

$$\tilde{\beta}^A \neq \tilde{\beta}^B \quad [3.4]$$

Le déplacement  $du = u(N) - u(M)$  n'est plus une fonction continue dérivable, et par conséquent :

$$Rot \tilde{\beta} \neq 0 \quad [3.5]$$

L'équation [3.5] donne 9 conditions, liées par des conditions de divergence nulle, ce qui donne au total 6 équations indépendantes. Le tenseur de déformation étant symétrique et le tenseur de rotation antisymétrique, il est possible d'exprimer la condition [3.5] en fonction de  $\tilde{\varepsilon}$ . On obtient :

$$Inc \tilde{\varepsilon} \neq 0 \quad [3.6]$$

L'opérateur Inc est défini en annexe. Il donne 3 conditions indépendantes.

Si les grains sont libres, on ne peut plus les accoler (figure 3.4b). Pour assurer la cohésion des grains, c'est-à-dire la continuité du déplacement au passage du joint, il faut ajouter, dans l'hypothèse d'une accommodation purement élastique, des champs de déformation élastique et de rotation de réseau  $\tilde{\varepsilon}^{e*}$  et  $\tilde{\omega}^{e*}$ , fonction du point considéré pour que  $du(N)$  soit continue et dérivable. On a alors,

$$Rot (\tilde{\beta} + \tilde{\beta}^{e*}) = 0 \quad [3.7a]$$

ou encore :

$$Inc (\tilde{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}^{e*}) = 0 \quad [3.7b]$$

Nye et Kröner définissent le tenseur densité de dislocations  $\tilde{\alpha}$  :

$$\tilde{\alpha} = Rot \tilde{\beta} = -Rot \tilde{\beta}^{e*} \quad [3.8]$$

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

et le tenseur incompatibilité  $\tilde{\eta}$  :

$$\tilde{\eta} = \text{Inc } \tilde{\varepsilon} = -\text{Inc } \tilde{\varepsilon}^{e*} \quad [3.9]$$

Le tenseur  $\tilde{\varepsilon}^{e*}$  correspond au champ de déformation qu'il faut ajouter en tout point pour que la déformation soit compatible.

Si le chargement appliqué induit une déformation plastique, chaque grain subit un gradient de déplacement qui dans le cadre des déformations infinitésimales s'écrit:

$$\tilde{\beta} = \tilde{\beta}^e + \tilde{\beta}^p, \text{ avec } \tilde{\beta}^A \neq \tilde{\beta}^B \quad [3.10]$$

Dans ce cas (incompatibilité élasto-plastique), le tenseur  $\tilde{\alpha}$  s'écrit:

$$\tilde{\alpha} = \text{Rot } \tilde{\beta} = -\text{Rot} ( \tilde{\beta}^{e*} + \tilde{\beta}^{p*} ) \quad [3.11]$$

Le champ  $\tilde{\beta}^*$  accomode l'incompatibilité initiale. Le champ des contraintes internes est associé à la partie élastique  $\tilde{\varepsilon}^{e*}$ .

*Remarque* : Si  $\delta S$  est un élément de surface de normale  $\underline{n}$ , limité par un contour fermé  $\delta C$  et  $\delta b$  la somme des vecteurs de Burgers (mesurée sur  $\delta C$ ) des dislocations qui percent la surface  $\delta S$ , le tenseur de densité de dislocations  $\tilde{\alpha}$  est défini par la relation :

$$\alpha_{ij} n_i \delta S = \delta b_j \quad [3.12]$$

### 3.2.2 Calcul des incompatibilités dans le cas du bicristal

Le bicristal à joint plan, de par sa simplicité géométrique a été utilisé pour comprendre les mécanismes d'accommodation de la déformation [HIR 72], [HOO 67], [REY 80], [REY 82]. Prenons l'exemple, d'un bicristal infini formé de deux grains A et B, séparés par une interface plane de normale  $X_2$ . Supposons que le gradient du déplacement imposé à chacun des grains soit  $\beta^A$  et  $\beta^B$  respectivement.

Si  $\beta^A$  et  $\beta^B$  sont homogènes dans les grains, alors le gradient du déplacement en tout point du bicristal peut s'écrire :

Mécanique et Ingénierie des Matériaux  
Les joints de grains dans les matériaux  
HERMES

$$\tilde{\beta} = \tilde{\beta}^A + \Delta\tilde{\beta} H(V) \quad [3.14]$$

avec

$$\Delta\tilde{\beta} = \tilde{\beta}^B - \tilde{\beta}^A \quad [3.15]$$

où V est le volume et S la surface limitant le volume V,  $H(V)$  est la fonction d'Heaviside définie par :

$$H(V) = 0 \text{ si } r \in (A) \text{ et } H(V) = 1 \text{ si } r \in (B)$$

Dans ces conditions  $\tilde{\alpha} = \Delta\tilde{\beta}\delta_2(S)$  où  $\delta_2(S) = \delta H(V) / \delta X_2 = n_2\delta(S)$  est la distribution de surface de Dirac, S la surface de l'interface de normale  $n_2$ .

Si  $\Delta\tilde{\beta} = \tilde{\beta}^B - \tilde{\beta}^A \neq 0$ , la déformation est incompatible.

Le tenseur de densité de dislocations :

$$\alpha_{pi} = e_{pij} \Delta\beta_{kj} n_j \delta S \quad [3.16]$$

se réduit dans le cas particulier du bicristal, aux termes  $\alpha_{Ii}$  et  $\alpha_{3i}$ .

La compatibilité de  $\beta$  est assurée par l'addition à  $\Delta\tilde{\beta}$  de  $\Delta\tilde{\beta}^*$  tel que :

$$\alpha_{Ii} = \Delta\beta_{3i} + \Delta\beta_{3i}^* = 0 \quad [3.17a]$$

$$\alpha_{3i} = \Delta\beta_{Ii} + \Delta\beta_{Ii}^* = 0 \quad [3.17b]$$

D'après Nye [NYE 53],  $\alpha_{jk} = b_k t_j$  où  $b_k$  est la composante k du vecteur de Burgers  $\vec{b}$  et  $t_j$  la composante j du vecteur unitaire porté par la ligne de dislocation, associée au vecteur  $\vec{b}$ .  $\Delta\tilde{\beta}^*$  est donc équivalent à une distribution continue de dislocations vis et coin dans le plan du joint de grains. La répartition de  $\Delta\tilde{\beta}^*$  et des contraintes internes associées à  $\Delta\tilde{\varepsilon}^{e*}$  dans les grains (A) et (B), ne peut être calculée simplement que dans le cas de l'élasticité isotrope où Kröner a proposé une méthode de calcul analytique. Rey et Zaoui, [REY 80], [REY 82] ont montré que dans un bicristal, il y a une discontinuité de trois des composantes du tenseur des contraintes internes qui sont, en moyenne, nulles sur le bicristal. Ces calculs ne

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

seront pas détaillés ici car la méthode des éléments finis (EF) associée aux approches polycristallines, donne plus aisément des résultats pour des agrégats contenant un nombre élevé de grains.

### 3.3. Contraintes internes dans les grains des polycristaux

Les notions de plasticité appliquées au comportement du monocristal données ci-dessous sont à la base des approches polycristallines, les grains des polycristaux, étant assimilés à des monocristaux.

#### 3.3.1 Notions de plasticité cristalline. Comportement du monocristal à l'usage des modèles polycristallins.

Les effets des joints de grains que ce soit sur le comportement local (mésoscopique) ou sur le comportement global (macroscopique), ne sont pas indépendants des mécanismes de la plasticité cristalline : A l'échelle du micromètre, les mécanismes de déformation mis en jeu ne font pas intervenir des dislocations discrètes mais la théorie continue des dislocations. Les variables internes sont soit les densités de dislocations sur les systèmes de glissement soit les amplitudes de déformation. Les premiers travaux concernant la modélisation numérique du monocristal en transformations finies, sont ceux de Asaro [ASA 77], [ASA 79], Peirce et al [PEI 82], [PEI 83] et Becker et al [BEC 95].

#### Critère de plasticité et loi de comportement du monocristal

Les systèmes de glissement (s) sont caractérisés par la normale au plan de glissement  $n^s$  et la direction de glissement  $m^s$  (12 systèmes pour les matériaux CFC et 24 pour les CC).

La loi de comportement est une loi visco-plastique déduite de la théorie des dislocations [KOK 75], [KOK 76], [KUB 78], [MEC 81], [RAU 93]:

$$\dot{\gamma}^s = 2 \frac{\rho_m^s v b^3}{\rho_F l_c^2} \frac{1}{x_c} \exp \left[ - \frac{\Delta G_0}{kT} \right] \left[ \frac{\tau^s}{\tau_i^s} \right]^{\frac{\tau_i^s \Delta V^*}{kT}} \quad [3.18]$$

qui s'écrit plus simplement :

Mécanique et Ingénierie des Matériaux  
Les joints de grains dans les matériaux  
HERMES

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left[ \frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right]^{1/n} \text{sgn}(\tau^s) \quad [3.19]$$

Où

$n$  est le coefficient de sensibilité à la vitesse qui dépende de la température

$\tau^s$  la cission réduite,

$\tau_c^s$  est la cission réduite critique,

$\dot{\gamma}^s$  est la dérivée temporelle de l'amplitude du cisaillement sur le système (s),

$\dot{\gamma}_0^s$  est une constante matériau, parfaitement définie pour une dislocation .

D'après le critère de Schmid, le système de glissement (s) est actif si la cission réduite est égale à une cission critique:

$$\tau^s = (\tilde{\sigma} \bar{n}^s) \bar{m}^s = \tau_c^s \text{ alors, } \dot{\gamma}^s \neq 0 \text{ ,sinon } \dot{\gamma}^s = 0 \quad [3.20]$$

La vitesse de déformation plastique est donnée par :

$$\tilde{\varepsilon}^{Ps} = \frac{1}{2} \dot{\gamma}^s(t) [\bar{m}^s(t) \otimes \bar{n}^s(t)]^{sym} \quad [3.21]$$

Les différences entre les différents modèles viennent de l'expression de la cission critique, donc de la loi d'écrouissage choisie. La forme la plus générale est:

$$\tau_c^s = \tau_0 + \sum_u h^{su} \gamma^u \quad [3.22]$$

où  $h^{su}$  est une composante de la matrice d'écrouissage désignant les interactions entre les systèmes (s) et (u)

*Expressions de la matrice d'écrouissage*

Les premières matrices d'écrouissage  $H^{su}$  ont été introduites par Mandel [MAN 73] :

$$H^{su} = h_2 + (h_1 - h_2) \delta_{su} \quad [3.23]$$

où  $h_1$  et  $h_2$  désignent deux coefficients du matériau.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

Beaucoup d'auteurs utilisent une loi phénoménologique qui traduit l'effet de saturation de l'écroutissage.

$$h^{su} = q^{su} \left[ h_0 \left( I - \frac{\tau_c^u}{\tau_s} \right)^a \right] \quad [3.24]$$

où  $q^{su}$  est la matrice d'interaction entre les dislocations,  $h_0$ ,  $a$ ,  $\tau_s$  sont des paramètres matériaux, identiques pour les matériaux de structure CFC.

Tabourot et al [TAB 97], puis de nombreux auteurs utilisent une loi plus physique provenant de la théorie des dislocations. La cission critique  $\tau_c^s$  est exprimée en fonction des densités de dislocations :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad [3.25]$$

$a^{su}$  est une composante de la matrice d'interaction des dislocations qui traduit les interactions entre les systèmes de glissement (s) et (u). Ces matrices d'interactions dépendent de la structure cristallographique du matériau. Pour les matériaux de structure cubique face centrée et cubique centré, ces matrices ont été soit mesurées par des essais de durcissement latent [FRA 82] et [FRA 83], soit déterminées par des simulations utilisant la Dynamique des Dislocations (DD), [DEV 06], [DEP 04], [DEP 08], [QUE 09]. Dans le premier cas, elles sont valables pour des déformations moyennes, supérieures à 1%, mais sujettes à caution dès que des microstructures de dislocations se forment dans les grains. Dans le deuxième cas, elles sont calculées pour de très faibles déformations (inférieure à 1%). Notons que les matrices ainsi obtenues présentent quelques différences.

Bien que ces équations ne concernent que les matériaux purs, elles sont généralement étendues aux solutions solides, en modifiant la valeur de  $\tau_0$ . Cependant, Stainer et al [STA 02] ont proposé des équations différentes pour les solutions solides, mais du fait de leur complexité, elles n'ont pas, à l'heure actuelle, été utilisées pour modéliser des polycristaux. Les différentes lois décrites ci-dessous sont issues de nombreux travaux, [KOC 75], [KOC 76], [RAU 93].

Les densités de dislocation en un point évoluent avec la déformation. Il est donc nécessaire d'introduire une loi donnant l'évolution de ces densités de dislocations au cours de la déformation.

Mécanique et Ingénierie des Matériaux  
Les joints de grains dans les matériaux  
HERMES

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( \frac{l}{l^s} - 2 y_c \rho^s \right) \quad [3.26]$$

Le premier terme correspond à une source de dislocations, le second à un puits de dislocations.

$l^s = K / \sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}$  est le libre parcours moyen des dislocations,  $y_c$  est un paramètre

plus ou moins physique qui décrit la distance d'annihilation des dislocations.

$y_c$  et  $K$  sont des paramètres du matériau qui dépendent de la déformation, de la vitesse de déformation et de la température. Ils sont généralement identifiés par méthode inverse sur la base d'essais mécaniques macroscopiques ou par des observations au Microscope à Transmission.

La matrice d'écrouissage s'écrit alors :

$$h^{su} = \frac{\mu}{2} \frac{a^{su}}{\sqrt{\sum_p a^{sp} \rho^p}} \left[ \frac{l}{l^u} - 2 y_c \rho^u \right] \quad [3.27]$$

D'autres lois ont été proposées. Le modèle introduit par Cailletaud [CAI 87], Barbe et al [BAR 01], consiste à transposer à l'échelle microscopique les modèles usuels d'écrouissage de la macroplasticité.

L'écrouissage cinématique est pris en compte par la loi de comportement :

$$\text{si } |\tau^s - r^s| \geq \tau_c^s, \text{ alors } \dot{\gamma}^s = \left( \frac{|\tau^s - r^s| - \tau_c^s}{K} \right)^m \text{sign}(\tau^s - r^s), \text{ sinon } \dot{\gamma}^s = 0 \quad [3.28]$$

Leurs variables d'écrouissage cinématique  $x^s$  et isotrope  $r^s$  sont ainsi définies :

$$x^s = C \alpha^s \text{ avec } \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d |\dot{\gamma}^s| \alpha^s \quad [3.29]$$

$$r^s = r_0 + q \sum_u H^{su} \left( 1 - \exp \left( -b \int_0^t |\dot{\gamma}^u| dt \right) \right) \quad [3.30]$$

Les paramètres  $C$ ,  $r_0$  et  $d$  sont des constantes à déterminer par simulation inverse.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

L'article de revue de Roters et al [ROT 10] donne l'ensemble des lois de comportement pour le monocristal.

#### **3.3.2. Contraintes internes dans les polycristaux**

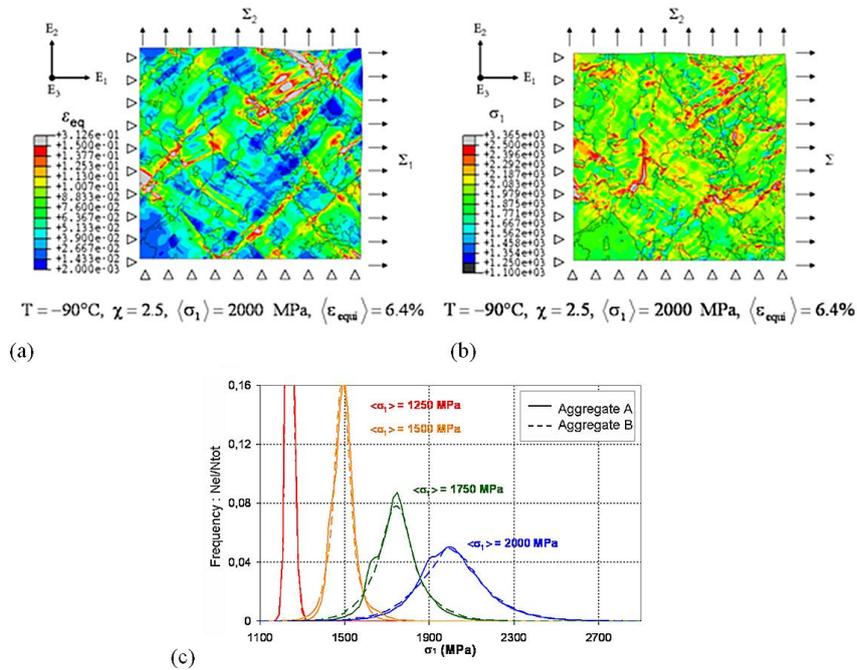
Dans l'exemple du bicristal du paragraphe 3.2.2, les contraintes internes peuvent être calculées à partir du champ de contrainte des dislocations continues  $\alpha_{pi}$ . Dans un polycristal, le problème est plus complexe. En chaque point des grains, les contraintes locales dépendent à la fois de la désorientation des grains adjacents et de l'orientation des interfaces par rapport au chargement appliqué, de la position du point dans l'agrégat et des microstructures de dislocations qui se forment au cours de la déformation. Les simulations par la méthode des éléments finis (EF) permettent de visualiser la répartition des contraintes dans un polycristal.

Prenons l'exemple d'un agrégat polycristallin d'un acier faiblement allié de structure bainitique, déformé en chargement bi-axial [LIB 07]. L'agrégat colonnaire, formé de 3 couches d'éléments, est construit à partir d'une carte des orientations obtenue par Electron Back Scattering Diffraction (EBSD). Les champs de contraintes et de déformation calculés par EF sont donnés sur les figures 3.5a et 3.5b. On constate une dispersion des contraintes locales, mais la moyenne sur tout l'agrégat donne la contrainte macroscopique  $\tilde{\Sigma}$  (ici  $\Sigma_{II}$ ) correspondant à la courbe de traction simulée. Dans cet exemple, les maxima des contraintes sont localisés près de certains joints de grains. Les cartes montrent une forte hétérogénéité des champs locaux. Si on admet que le degré d'hétérogénéité est représenté par la largeur du pic à mi-hauteur des distributions des contraintes, on constate que l'hétérogénéité de celle-ci augmente avec le chargement.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES



**Figure 3.5.** Agrégat polycristallin de bainite déformé en chargement bi-axial. (a) cartes de la contrainte principale maximale et de déformation équivalente. (b) histogramme de la contrainte à différentes étapes du chargement [LIB07] (LIB 10).

On appelle contraintes internes en un point :

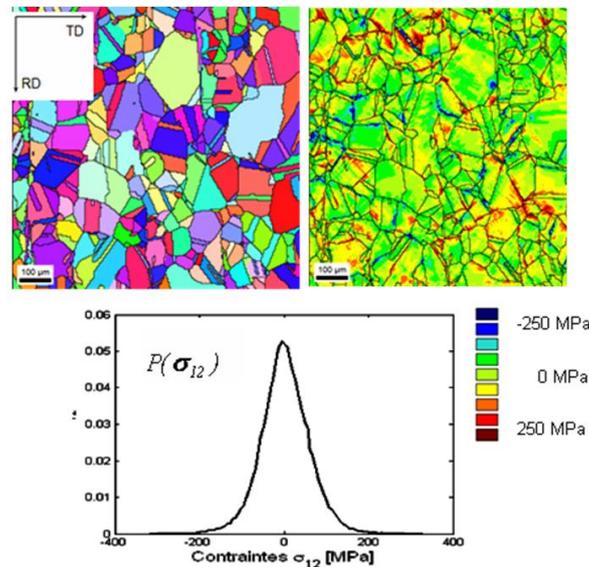
$$\tilde{\sigma}^i = \tilde{\Sigma} - \tilde{\sigma}^T \text{ avec } \tilde{\Sigma}(t) = \langle \tilde{\sigma}^T(t) \rangle \quad [3.31]$$

On note  $\langle \rangle$  la moyenne des contraintes dans chaque élément du maillage. La contrainte appliquée sur l'agrégat étant  $\tilde{\Sigma}$ , la moyenne des contraintes internes doit être nulle.

Un deuxième exemple est donné pour un agrégat d'un alliage 316L, déformé en fatigue oligocyclique ( $\Delta \varepsilon^p / 2 = 0,5\%$ ) après 10 cycles [SCH 10]. Le champ de contraintes simulé présente une composante de cisaillement qui, en moyenne, est nulle (figure 3.6).

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES



**Figure 3.6.** Répartition des contraintes de cisaillement dans un agrégat soumis à une contrainte uniaxiale (a) agrégat initial. (b) carte de la répartition des contraintes de cisaillement. (c) Distribution des contraintes de cisaillement. [SCH 10]

Les origines des contraintes internes sont diverses et liées à des mécanismes agissant à des échelles différentes : incompatibilité des déformations aux joints de grains, empilements de dislocations sur les joints, microstructure de dislocations dans les grains. Comme il est impossible de les distinguer expérimentalement et numériquement, une classification a été proposée. D'après cette classification :

- les contraintes d'ordre III sont des contraintes intragranulaires qui peuvent présenter de fortes variations dans un grain,
- les contraintes d'ordre II, correspondent aux contraintes intergranulaires. Elles présentent quelques fluctuations dans les grains, dues entre autres, aux hétérogénéités de déformation (formation de sous joints, voire de joint de grains au cours de la déformation plastique).
- les contraintes d'ordre I correspondent à la moyenne des contraintes d'ordre II et I. Leur fluctuation est de l'ordre de plusieurs grains.
- la contrainte macroscopique est la moyenne des contraintes d'ordre I.

L'avantage de cette classification, bien que très simplificatrice, est de préciser à quelle échelle se situent les mesures et les calculs de contraintes. Les mesures de contraintes par neutrons et RX correspondent à l'ordre I. Si on diminue la taille du

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

faisceau, on peut atteindre les contraintes d'ordre II (quelques micromètres). De gros efforts sont faits actuellement sur les mesures des contraintes d'ordre III (quelques nanomètres), par les méthodes de Kossel et de Kikuchi. Les calculs par élément finis donnent accès aux contraintes d'ordre II avec une plus ou moins bonne précision selon le maillage et le type de modèle de plasticité.

La portée de ces contraintes a fait l'objet de plusieurs études [MUG 88], [MUG 06], [FEA 99], [FEA 04], mais dans les simulations du polycristal, cette portée n'est pas prise en compte.

#### *3.3.3. Mécanismes de relaxation des contraintes*

Il existe plusieurs modes de relaxation des contraintes internes, qui dépendent de la structure du matériau, de la température et de la nature du joint de grains. Ces modes consistent (à basse et moyenne température) en l'activation de systèmes de glissement dits secondaires, de glissement aux joints de grains, voire d'une décohésion des joints.

Pour des joints de grains présentant une bonne cohésion, c'est-à-dire sans éléments d'addition et de précipités et pour des déformations effectuées dans le domaine des basses et moyennes températures (correspondant à  $T/T_F < 0,3$  où  $T_F$  est la température de fusion du matériau), la relaxation des contraintes internes se fait principalement par activation de systèmes de glissement au voisinage des joints de grains. Lorsque que la température augmente, si les matériaux constituant les grains possèdent peu de systèmes de glissement (métaux hexagonaux) il peut y avoir relaxation des contraintes par glissement des joints de grains. A très hautes températures et selon la vitesse de déformation, le glissement plastique est remplacé par la diffusion de lacunes, et la relaxation des contraintes se fait par glissement des joints de grains : c'est le phénomène de fluage. Pour les très basses températures, la déformation plastique dans les grains est difficile, la relaxation des contraintes internes se fait par endommagement inter ou intragranulaire entraînant la rupture du matériau. Dans ce chapitre, ne seront abordés que les phénomènes de relaxation par déformation plastique et par glissement aux joints de grains.

#### *Relaxation par déformation plastique*

Dans le cas de polycristaux métalliques, si la contrainte totale ou la cisssion réduite en un point dépasse la cisssion critique, les systèmes de glissements les plus chargés sont activés. Cette cisssion réduite, étant en général plus élevée à proximité des joints de grains, on observe des systèmes de glissement secondaires localisés près des joints.

Dans un polycristal, où on ne peut que mesurer des désorientations

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

intragranulaires et visualiser des systèmes de glissement, il est difficile de préciser, à chaque incrément de déformation, les scénarii de relaxation. De plus, les échelles auxquelles sont conduites les observations, comme celles des calculs par EF, ne sont pas forcément les plus pertinentes pour apporter de informations précises quant aux mécanismes recherchés.

Dans un bicristal, la diminution des contraintes internes après apparition d'un glissement plastique secondaire a été calculée analytiquement [REY 82]. Dans un polycristal, seule la méthode des éléments finis permet de visualiser l'évolution des contraintes. En fait, l'activation de systèmes de glissement secondaires localisés dans des zones voisines du joint n'est pas systématique, comme on peut l'observer sur les simulations données sur la figure 3.6. Seuls les joints qui, du fait de leur orientation et de la désorientation des grains par rapport à la sollicitation conduisant à de fortes contraintes internes, présentent des systèmes secondaires. On remarque également, sur les cartes des champs de déformations et de contraintes du paragraphe 3.4.5, que les maxima de contrainte et de déformation sont localisés dans des zones adjacentes. En effet dès qu'un système secondaire est activé en un point, la contrainte locale totale en ce point diminue. Notons que la taille des éléments du maillage est importante. Pour visualiser ces contraintes, il faut que la taille des éléments soit inférieure à 2-4  $\mu\text{m}$ , pour une taille de grain de 50 $\mu\text{m}$ . En revanche, en deçà de 1 $\mu\text{m}$  (taille d'une cellule de dislocations), les lois de comportement ne sont plus valables.

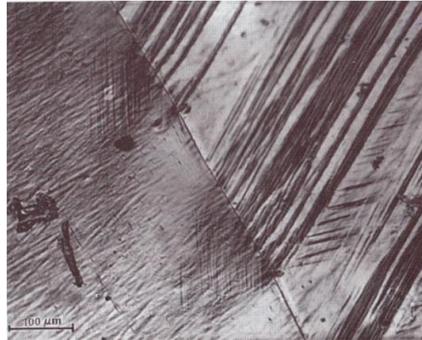
A l'échelle de quelques micromètres, il est difficile d'observer les manifestations du modèle biphasé proposé par Mughrabi. A cette échelle, on observe parfois (figure 3.7) qu'une bande de glissement bloquée par un joint de grains, induit dans le grain voisin des distorsions du réseau cristallin (qui traduisent l'existence de contraintes internes), qui sont relaxées au pas de déformation suivant par des systèmes de glissement. A une échelle un peu inférieure, les observations en microscopie électronique à transmission montrent qu'un empilement de dislocations, génère de fortes contraintes à sa tête et peut activer des sources de dislocations dans le grain voisin. Nous renvoyons au chapitre 2 pour l'étude de ces mécanismes à l'échelle nanométrique.

Notons que la concentration de dislocations près des joints, est en partie à l'origine de l'écrouissage cinématique responsable de l'effet Bauschinger en fatigue.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES



**Figure 3.7 :** *Glissement secondaire localisé en tête d'un paquet de lignes de glissement. Polycristal de cuivre déformé en traction simple (Mussot-Rey).*

A froid ou à moyenne température (où les phénomènes de diffusion des lacunes et les montées de dislocations sont peu probables), du glissement au joint de grains peut également relaxer les contraintes internes. Ce phénomène n'a été observé que dans les métaux hexagonaux possédant peu de systèmes de glissement.

#### *Glissement aux joints de grains*

Ce type d'accommodation fait toujours l'objet de débats, bien que des corrélations existent entre déformation plastique intragranulaire et glissement du joint. Dans le cas de polycristaux de zinc, matériau de structure hexagonale, donc possédant peu de systèmes de glissement, du glissement aux joints de grains a été observé à la température ambiante ( $T/T_F=0,4$ ). Ce glissement, qui part des nœuds triples, est hétérogène (figure 3.8). Mussot et al [MUS 85] ont montré qu'un glissement hétérogène peut effectivement accommoder des incompatibilités de déformation, donc relaxer les contraintes internes associées à proximité des nœuds triples.

Ces auteurs ont montré que le déplacement d'un grain par rapport à l'autre est de la forme :

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{U}(\vec{r}) + \vec{W}(\vec{r})H(V) \quad [3.32]$$

Où  $\vec{U}(\vec{r})$  et  $\vec{W}(\vec{r})$  sont des fonctions continues et dérivables.

$\vec{W}(\vec{r})$  correspond au champ de déplacement des grains adjacents dans le plan du joint de grains (surface S). Il correspond donc à une discontinuité de déplacement sur la surface S et doit vérifier :

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

$$W(\underline{r})n(\underline{r}) = 0 \quad \text{si} \quad \underline{r} \in S \quad [3.33]$$

où  $n(\underline{r})$  est la normale à la surface S au point  $\underline{r}$ .

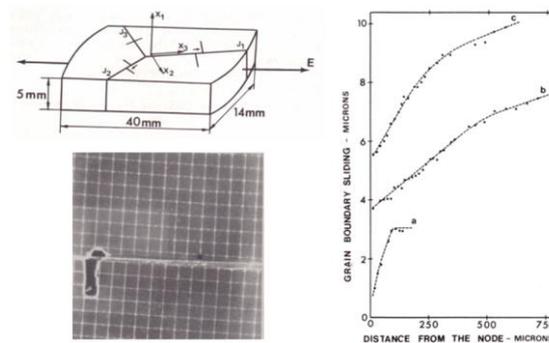
Le tenseur gradient du déplacement s'écrit :

$$G_{ij} = u_{i,j} = U_{i,j} + W_{i,j}\delta^0(V) - W_i n_j \delta(S) \quad [3.34]$$

Le tenseur  $\tilde{G}$  comprend trois termes :

- un terme qui est continu dans chaque élément de volume V de part et d'autre du joint considéré et qui peut correspondre au glissement plastique.
- un terme de discontinuité à l'interface.
- un terme correspondant à une singularité et qui est la contribution spécifique du glissement.

Cette théorie a été appliquée au cas d'un tricristal formé de trois grains colonnaires séparés par trois interfaces planes qui ont une interface commune. Le tricristal est déformé en traction simple à une vitesse très faible de  $10^{-6} \text{ s}^{-1}$  pour permettre le glissement au joint (figure.3.8). Les mesures du déplacement sont faites sur le tricristal, pour des déformations macroscopiques de  $7 \cdot 10^{-3}$  et  $2 \cdot 10^{-2}$ , grâce à une microgrille de pas  $14 \mu\text{m}$ , déposées au préalable sur la surface du tricristal.



**Figure 3.8 :** Glissement au joint de grains dans un tricristal de zinc (MUS 85)

Si chaque interface plane est représentée par le plan  $(x_1, x_3)$  de normale  $\underline{x}_2$ , le champ de déformation s'écrit :

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

$$\varepsilon_{ij}(x_1, x_2, x_3) = a_{ij}(x_1, x_2, x_3) + b_{ij}(x_1, x_2, x_3)H(x_2) + c_{ij}(x_1, x_3)\delta(x_2) \quad [3.35]$$

Si on suppose qu'il n'y a pas de décohésion à l'interface :  $c_{22}(x_1, x_3) = 0$  [3.36]

Les conditions de compatibilité sur  $\tilde{\varepsilon}$  donnent des relations entre les tenseurs de déformation  $\tilde{c}$  et  $\tilde{b}$ , dont on déduit des relations, à une rotation de corps rigide près, entre les composantes de  $\tilde{c}$  et la discontinuité de champ de déplacement  $W$ .

$$\begin{aligned} c_{12}(x_1, x_3) &= \frac{1}{2}W_1(x_1, 0, x_3) + [qx_3 + A] \\ c_{132}(x_1, x_3) &= \frac{1}{2}W_3(x_1, 0, x_3) + [-qx_1 + B] \end{aligned} \quad [3.37]$$

Il semble donc qu'il peut y avoir des corrélations entre la déformation plastique et le glissement des joints.

#### 3.4. Modélisation des champs mécaniques locaux par la méthode des éléments finis (EF)

La méthode des éléments finis permet une représentation, des effets des joints de grains dans les polycristaux. Les résultats dépendent du modèle utilisé, du choix de l'agrégat, et des conditions aux limites imposées. Pour que les représentations des champs locaux de contrainte, de déformation et de rotation du réseau, soient exploitables à l'échelle de quelques micromètres, il est important d'avoir un maillage assez fin contenant plusieurs éléments par grain. Pour des grains de  $(50\mu\text{m})^3$ , il faut au moins 1000 éléments par grain. Le temps de calcul dépendant du nombre de points de Gauss, il y a toujours un compromis entre le nombre de grains traité, le nombre d'éléments et le temps de calcul autorisé. En plus du maillage, le résultat dépend des conditions aux limites appliquées à l'agrégat. Ces conditions doivent représenter la sollicitation appliquée à la structure, sachant que l'agrégat est en général à l'intérieur de la structure ou en surface donc soumis aux conditions transmises par le reste de la structure.

##### 3.4.1 Les agrégats

Pour représenter un polycristal sous une taille réduite mais représentative du comportement, trois types d'agrégats peuvent être distingués:

- les agrégats colonnaires fictifs ou basés sur la microstructure du matériau, déterminés par la technique EBSD. La surface ainsi analysée, est extrudée sur plusieurs éléments du maillage afin de donner une épaisseur à l'agrégat.

- les agrégats à trois dimensions (3D) obtenus par différentes techniques expérimentales : Soit par une succession d'abrasions mécaniques et d'orientations EBSD [SCH 11] (figure 3.9a), soit par une méthode d'abrasion ionique combinée à la technique EBSD [CED 08]. Dans les deux cas une reconstruction numérique est nécessaire.

- les agrégats 3D construits numériquement [OSI 07] (figure 3.9b) en respectant un certain nombre de lois physiques portant sur les macles, la texture, etc.



**Figures 3.9 :** Agrégats obtenus (a) par reconstruction de couches polycristallines d'un acier 316L orientées par EBSD, [SCH 11]. (b) agrégat obtenu par simulation numérique [OSI 07]

Pour les simulations numériques, un joint de grains est représenté par une interface séparant deux grains dont les orientations cristallines sont définies. La difficulté pour décrire les joints de grains est grande, car si la désorientation peut être très précise, la géométrie du joint est difficile à reproduire avec une grande exactitude. Les agrégats doivent contenir un nombre suffisant de grains orientés. On admet que l'agrégat est représentatif du point de vue de sa texture cristallographique, s'il suit la loi de Mackenzie.

Le problème le plus délicat est la définition des conditions aux limites à appliquer à l'agrégat, compte tenu de la position de l'agrégat dans la structure et du chargement imposé à celle-ci. Une analyse détaillée est proposée par Schwartz [SCH 11]. Dans un polycristal, le comportement de chaque grain est assimilé à celui du monocristal. Ce comportement est décrit dans le paragraphe 3.3.1.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

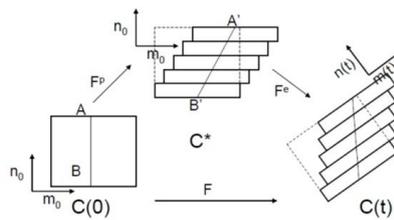
## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

#### 3.4.3. Du monocristal au polycristal en transformations finies

Les modèles polycristallins présentés ici reposent sur l'hypothèse d'une parfaite cohésion des grains au cours de la déformation. Cela écarte donc le glissement au joint (fluage), qui se manifeste à haute température et faibles vitesses de déformation (inférieures à  $10^{-3}s^{-1}$ ) et les mécanismes de ségrégation des précipités aux joints de grains ou dans la zone adjacente aux joints. Si les différents mécanismes liés au fluage à la ségrégation sont connus, leur intégration dans des codes de calcul par éléments finis pour des études de comportement de polycristaux reste délicate.

Dans les polycristaux, la rotation du réseau cristallin sous l'effet du chargement conduit à la formation d'une texture cristallographique qui confère au polycristal des propriétés mécaniques différentes du matériau initial. Pour que le comportement du matériau soit correctement représenté dès que la déformation macroscopique imposée dépasse 5-10%, il est nécessaire d'utiliser le formalisme des transformations finies selon le schéma de la figure 3.10, proposé par Peirce et al [PEI 83] (voir annexe) :



**Figure 3.10 :** Schéma représentant la décomposition de la transformation  $\tilde{F} = \tilde{F}^e \tilde{F}^p$

Ce schéma est utilisé pour chaque grain du polycristal. Il fait intervenir trois configurations  $C_0$ ,  $C^*$  et  $C(t)$  qui représentent respectivement la configuration initiale à l'instant  $t=0$  (où la géométrie de la structure est bien définie), une configuration isocline et la configuration finale à l'instant  $t$ .

La transformation finale s'écrit :

$$\tilde{F} = \tilde{F}^e \tilde{F}^p \quad [3.38]$$

La figure 3.10 montre qu'il n'y a pas de modification de l'orientation des vecteurs définissant les systèmes de glissement  $(m_s^0, n_s^0)$  entre la configuration initiale  $C_0$  et la configuration isocline  $C^*$ . En revanche pour respecter les conditions aux limites perçues par chaque grain, leur réseau cristallin doit subir une transformation  $F^e = U^e R^e$  où  $R^e$  définit la rotation du réseau cristallin par rapport au réseau macroscopique et où  $U^e$  définit la déformation. Dans tout ce qui suit, on

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

se place dans le cadre des grandes rotations de réseau et des petites déformations élastiques  $U^e = (I + \tilde{\varepsilon}^e)$ . Par conséquent le couple  $(\underline{m}_0, \underline{n}_0)$  devient à l'instant  $t$  :  $(\underline{m}^s(t), \underline{n}^s(t))$ .

$\underline{m}_0$  est un vecteur matériel, sa transformation dans  $C(t)$  est donnée par :

$$\underline{m}(t) = F^e \underline{m}_0 \quad [3.39]$$

$\underline{n}_0$  n'est pas un vecteur matériel, on lui impose donc de se transformer en un vecteur  $\underline{n}^s(t)$  perpendiculaire  $\underline{m}^s(t)$ , soit :

$$\underline{n}(t) = \underline{n}_0^s F^{e-1} \quad [3.40]$$

La position du réseau cristallin par rapport au réseau macroscopique est donc redéfinie, à chaque pas du temps du calcul. Par conséquent, la position du joint de grains ainsi que sa dimension évoluent dans l'agrégat au cours du calcul, mais un élément de joint plan reste plan.

Pour résoudre le problème de la déformation des grains, il est nécessaire de travailler par incréments de temps et donc d'utiliser les dérivées temporelles des équations définissant le comportement du monocristal. Si les dérivées temporelles des tenseurs vitesses de la déformation et de la rotation sont objectives, il n'en est pas de même pour la dérivée temporelle du tenseur de Cauchy  $\tilde{\sigma}$ . Celle-ci doit être exprimée en fonction d'une dérivée objective. Parmi les dérivées existantes, la plus utilisée dans les modèles polycristallins est celle de Jaumann, qui s'écrit dans la configuration déformée:

$$\dot{\tilde{\sigma}} = \dot{\tilde{\sigma}} - \tilde{W} \tilde{\sigma} + \tilde{\sigma} \tilde{W} \quad [3.41]$$

Où  $\tilde{W}$  est le tenseur vitesse de rotation (voir annexe)

Plutôt que le tenseur de Cauchy, on utilise le tenseur des contraintes de Kirchhoff :

$$\tilde{\tau} = \det \tilde{F} \tilde{\sigma} \quad [3.42]$$

Pour plus de détails, le lecteur se reportera aux articles de Peirce et al [PEI 83] et de Teodosiu et al [TEO 93]. A chaque incrément de calcul, le logiciel donne la contrainte de Cauchy mais l'amplitude de glissement  $\Delta\gamma^s = \dot{\gamma}^s(t) \Delta t$  doit être déterminée pour chaque système de glissement et pour chaque grain. Peirce propose une méthode : le Forward Gradient, qui maintenant, peu être remplacé par d'autres méthodes numériques aussi précises mais plus faciles d'emploi. Ce cadre a conduit au développement de nombreux modèles polycristallins, [HOC 01], [BAR 01]

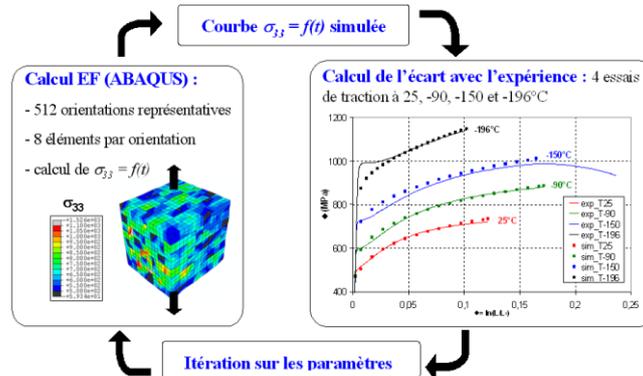
# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES

[ERI 04], [MA 07].

### 3.4.4 Identification des paramètres des lois de comportement et d'écroutissage

Les différentes lois proposées par le modèle Asaro-Peirce-Teodosiu-Tabourot sont fonctions d'un nombre importants de paramètres ( $n, \tau_0, K, g_c, \rho_0, a^{su}, \dots$ ) qui doivent être identifiés. Si la densité de dislocation initiale peut être mesurée par microscopie en transmission et si certains paramètres matériaux peuvent être fournis par la littérature, il en reste un certain nombre à identifier. On utilise généralement une procédure de résolution développée par Cailletaud et al [CAI 94]. Cette procédure consiste à trouver un jeu de paramètres reproduisant des essais mécaniques macroscopiques par identification inverse. A titre d'exemple, un principe d'identification inverse via un couplage entre les deux logiciels Sidolo™ [CAI 94] et Abaqus™ a été proposé par Libert [LIB 07], [LIB 10]. Ce principe est donné sur la figure 3.11. L'identification est faite sur un agrégat simplifié formé de 512 grains cubiques représentant 512 orientations, chaque grain contenant 8 éléments. Avec cette technique, les joints de grains sont très simplifiés, mais les interactions de grain à grain sont prises en compte, ce qui n'est pas le cas des modèles auto cohérents.



**Figure 3.11:** Identification des paramètres des lois de comportement par méthode inverse en utilisant des courbes de traction (LIB 07)

### 3.4.5 Exemples de champs mécaniques locaux proposés par les modèles polycristallins

#### 3.4.5.1 Champs mécaniques locaux dans les tous premiers stades de déformation en

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

*fatigue.*

La simulation des tous premiers stades de la déformation est assez délicate car elle dépend fortement de la matrice d'écroutissage, de la loi de comportement et de la loi d'évolution des densités de dislocations. Un exemple est donné sur la figure 3.12 qui correspond au dixième cycle de déformation à la température ambiante, sous air, d'un alliage 316L (amplitude de déformation :  $\Delta\varepsilon^p/2 = 5.10^{-3}$ ). La simulation est effectuée sur un agrégat colonnaire, formée de 5 couches d'éléments cubiques à intégration réduite ( $4 \times 4 \times 4 \mu\text{m}^3$ ).

Les paramètres matériaux utilisés sont donnés dans le tableau 3.1 : La plage étudiée par simulation (figure 3.12) correspond à la plage analysée au microscope à balayage (MEB), par la technique EBSD, après 2000 cycles. Les maxima de déformation des cartes de simulations correspondent aux lignes de glissement observées au MEB. Les orientations des lignes sont retrouvées dans beaucoup de grains, sauf pour certains grains proches d'une orientation en glissement double. La simulation prévoit toujours un des deux systèmes, même si c'est l'autre qui est activé expérimentalement. La figure 3.13 donne la répartition et l'amplitude de contrainte uniaxiale et de la contrainte équivalente (cette dernière rendant mieux compte de l'ensemble des composantes des contraintes).

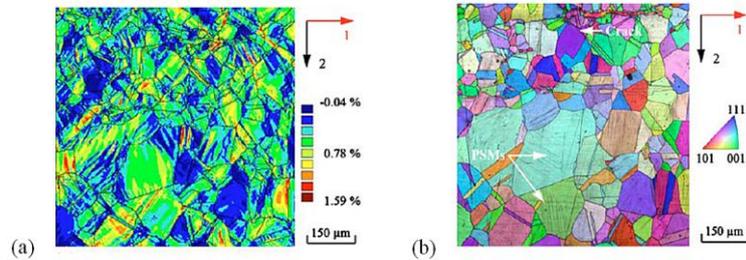
<b>Modèle local</b>							
$\tau_0$ (MPa)	<b>b (m)</b>	$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$\gamma_0$ (s <sup>-1</sup> )	<b>n</b>	<b>K</b>	$y_c$ (m)	$k_0$
22,30	$2,54 \cdot 10^{-10}$	$1,77 \cdot 10^{12}$	$4,00 \cdot 10^{-11}$	73,5	59,97	$1,29 \cdot 10^{-9}$	0
<b>Modèle non local</b>							
$\tau_0$ (MPa)	<b>b (m)</b>	$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$\gamma_0$ (s <sup>-1</sup> )	<b>n</b>	<b>K</b>	$y_c$ (m)	$k_0$
22,30	$2,54 \cdot 10^{-10}$	$1,77 \cdot 10^{12}$	$4,00 \cdot 10^{-11}$	73,5	88	$9,14 \cdot 10^{-9}$	150

**Tableau 3.1.** Paramètres identifiés pour le 316L pour les deux modèles [SCH 11].

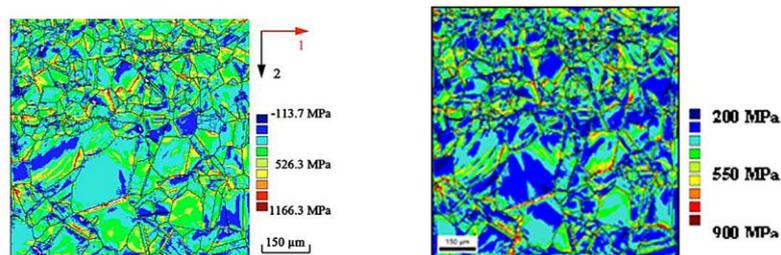
On constate, là encore, que les maxima de déformation ne correspondent pas souvent aux maxima de contraintes. La déformation plastique simulée est plutôt localisée dans les grains, bien que les lignes de glissement simulées partent des joints de grains dans la majorité des cas. En revanche les contraintes sont localisées aux joints de grains. Ces résultats ne sont pas en contradiction avec le modèle biphasé de Mughrabi, [MUG 06] la taille du maillage ne permettant pas de reproduire correctement les lignes de glissement.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES



**Figure 3.12.** Simulation de la déformation uniaxiale après 10 cycles de traction compression dans la direction 1. Comparaison avec l'image EBSD de la surface de l'éprouvette après 2000 cycles [SCH 10].



**Figure 3.13.** Simulations de la contrainte uniaxiale et de la contrainte équivalente [SCH 10].

### 3.4.5.2 Polycristal de fer IF-Ti en compression plane

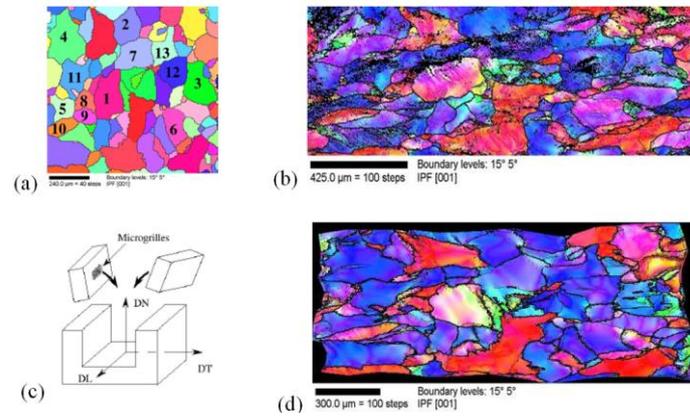
Un exemple de calcul de l'évolution des champs mécaniques, de la texture et de l'énergie stockée est donné pour un polycristal de fer IF-Ti (taille de grain moyenne est de  $75\mu\text{m}$ ) soumis à un laminage à froid [ERI 03]. L'agrégat colonnaire représentatif est déformé en compression plane de 40%. Le modèle monocristallin utilisé est celui de Asaro-Peirce-Teodosiu-Tabourot.

Les paramètres du matériau identifiés à partir d'essais mécaniques (traction, cisaillement, cycles de traction-compression) ou issus de la littérature, sont les suivants : module d'Young  $E=210\text{MPa}$ , coefficient de Poisson  $\nu=0.29$ ,  $n=100$ ,  $\dot{\gamma}_0=10^{-11}\text{ s}^{-1}$ ,  $\tau_0=20\text{MPa}$ ,  $\rho_0=1.5\cdot 10^{-11}\text{ m}^{-2}$ ,  $2\gamma_c=8\text{nm}$ ,  $K=41$ .

La validation du modèle et des paramètres identifiés est effectuée en comparant les cartes (expérimentale et simulée) des orientations de l'axe de compression. Bien que des écarts soient visibles, l'évolution des textures cristallographique et morphologique est assez bien rendue (figure 3.14).

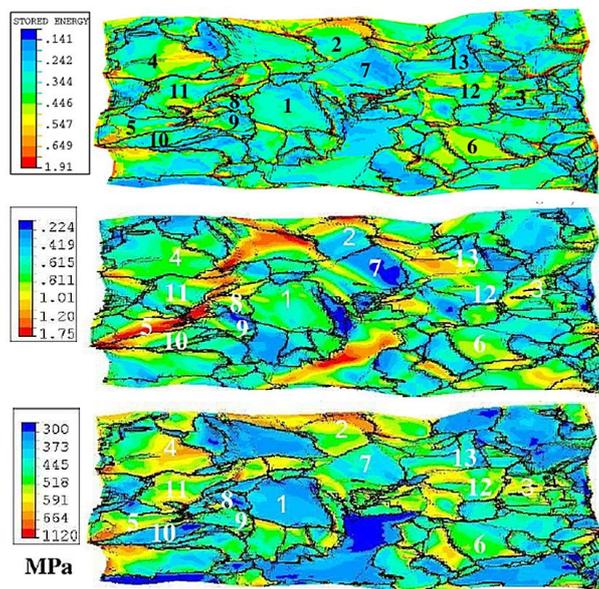
# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES



**Figure 3.14 :** Validation du modèle polycristallin (Cristal-ECPI) sur un agrégat de fer IF-Ti . (a) agrégat colonnaire initial construit à partir d'une analyse EBSD du centre d'un des deux demi échantillons réels. (b) Mesure par EBSD de l'orientation de l'axe de compression à la surface de l'échantillon réel après 40% de déformation. (c) Dispositif expérimental. (d) Simulation par EF de l'agrégat après 40 % de déformation. [ERI 03]

L'énergie stockée, prise ici proportionnelle à la densité de dislocations calculée à 40%, les champs de contraintes et de déformation, sont donnés sur la figure 3.15.



# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

**Figure 3.15 :** (a) Répartition de l'énergie stockée. (b) déformation équivalente. (c) contrainte équivalente. [ERI 04].

Cette simulation montre que les maxima des densités de dislocations (énergie stockée) sont localisés près de certains joints de grains. La déformation est localisée en bandes, ce qui, à ce taux de déformation, résulte à la fois des effets de joints de grains et de structure (éprouvette et chargement). Il apparaît ici que les maxima de déformation correspondent aux minima de contrainte. Les contraintes (appliquée et internes) subsistent mais sont relaxées dans les régions fortement déformées.

### 3.5. Loi de Hall et Petch. Dislocations géométriquement nécessaires

#### 3.5.1. Définition

La taille de grains influe fortement sur la limite d'élasticité et la pente d'écrouissage dans les polycristaux métalliques. Hall et Petch ont proposé, dans les années 1950, une loi explicitant la loi d'écoulement  $\sigma_y$  en fonction de la taille de grain moyenne  $d$ :

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_1 d^{-1/2} \quad [3.43]$$

Où  $\sigma_0$  est la contrainte de friction du réseau cristallin qui prend en compte les effets des éléments en solution et les précipités et  $k_1$  une constante. Ces deux paramètres, dépendent, pour un matériau donné, du taux de déformation. Ces paramètres sont déterminés expérimentalement ou numériquement (table 3.3).

L'origine de cette loi repose sur la concentration de contraintes au niveau des joints de grains due aux empilements de dislocations. La valeur de  $k_1$  dépend du matériau étudié et semble liée aux propriétés élastiques et à leur anisotropie  $A = 2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$ .  $k_1$  est élevé pour les matériaux fortement anisotrope comme le montre le tableau 3.3.

Matériau	G (MPa)	b (nm)	$k_1$ (MPa mm <sup>-1/2</sup> )	A
Al	26000	0,286	0,04	1,21
Ni	79000	0,249	0,16	2,37
Cu	45000	0,256	0,14	3,29
Ag	26000	0,289	0,19	3,13

**Table 3.3.** Paramètres de la loi de Hall et Petch pour Al, Ni et Cu d'après Hansen

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

[HAN 05] et pour Ag d'après Aldrich [ALD 70].

Cette relation a été commentée et améliorée par de nombreux auteurs, [ARM 62], [ARM 70],[ALD 70], [HAN

Hansen [HAN 04], [HAN 05] a fait une étude pour les matériaux ayant subi une forte déformation plastique. Il propose une loi donnée par :

$$\sigma_f = \sigma_0 + M \alpha G \sqrt{1,5(S_v \theta)_{LAB}} + k_I(\alpha) D_{HAB}^{-1/2} \quad [3.44]$$

Cette loi permet de faire la distinction entre les sous-joints ou joints de grains à faible angle dont la désorientation  $\theta$  est inférieure  $15^\circ$  et les joints de grains à grand angle tels que  $\theta > 15^\circ$ .  $M$  est le coefficient de Taylor,  $S_v$  la surface de joints,  $b$  le vecteur de Burgers,  $\alpha$  un coefficient ajustable et  $G$  le module de cisaillement,  $D_{HAB}$  est la taille de grain. Le deuxième terme de l'expression [3.44] correspond aux sous joints qui se sont formés au cours de la déformation. Pour plus de détails nous renvoyons aux deux articles de cet auteur.

#### 3.5.2. Modélisation de l'effet de taille de grains dans les polycristaux. Comparaison avec l'expérience.

La loi de Hall et Petch est une loi macroscopique qui prend en compte, de manière globale, la formation des microstructures de dislocations, voire de sous-joints de déformation. La modélisation par EF ne parvient pas à décrire l'effet de taille de grains. En effet, une homothétie de la taille des grains et du maillage, ne modifie pas les champs mécaniques macroscopiques et locaux. La mécanique classique est impuissante à décrire cet effet.

Une nouvelle classe de modèles polycristallins dits modèles « Non Locaux » (NL) est apparue vers les années 1990-2000. Elle s'appuie sur les travaux antérieurs de Nye [NYE 53] et Kröner [KRO 58], mais la compatibilité de la déformation est écrite dans le cadre des transformations finies [CER 01], [ACH 00], [BEA 95], [BEA 00] et [EVE 04], en utilisant pour le tenseur de la transformation totale  $\tilde{F}$  le produit  $\tilde{F} = \tilde{F}^e \tilde{F}^p$ .

La condition de compatibilité d'un tenseur du second ordre continu, inversable et dérivable  $\tilde{A}$  est donné si  $\tilde{A} = \tilde{F}^{e-l}$  par :

$$\left( \text{rot} \tilde{F}^{e-l} \right)_{ij} = \left( \tilde{\nabla} \wedge \tilde{F}^{e-l} \right)_{ij} = e_{irs} F^e_{js,r} = \alpha_{ij} \quad (\text{voir annexe A3.4}),$$

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

Les différents auteurs définissent le vecteur de Burgers moyen des dislocations induites par la déformation. Ces dislocations qui accommodent l'incompatibilité de déformation sont nommées dislocations géométriquement nécessaires (Geometrically Necessary Dislocations, GND) pour les distinguer des dislocations réparties de façon statistique qui assurent la plus grande partie de la déformation. Cette distinction s'appuie sur les travaux de Mughrabi [MUG 01], [MUG 04], [MUG 06] qui considère le grain comme un matériau biphasé formé d'une région dure en glissement multiple et qui correspond à la zone de stockage des GNDs et une région molle (cœur du grain) qui contient les dislocations  $\rho_s^s$  réparties aléatoirement. Dans la pratique, il est plus facile de calculer le tenseur densité de dislocations  $\tilde{\alpha}$ . Mais, les neuf composantes de ce tenseur sont, à l'heure actuelle, impossibles à identifier. Acharya et Beaudoin [ACH 00], [BEA 00], [ACH 02] définissent pour caractériser la compatibilité, le scalaire  $\lambda^k$  qui représente la densité de dislocations géométriquement nécessaires du système (s) perçant la surface  $S$ , limitée par le circuit  $C$ . Les densités  $\lambda^s$  sont calculées à partir du gradient du tenseur de la transformation élastique entre deux points d'intégration (voir annexe). Elles se distinguent des dislocations  $\rho_s^s \approx \rho^s$  qui proviennent de la multiplication des dislocations réparties de façon aléatoire.

Acharya [ACH 00] puis Beaudoin et al [BEA 00]; considèrent alors deux types de libre parcours moyen,  $l$  et  $L$ . Le premier, correspond à un arrangement aléatoire des dislocations avec  $l \propto (b/\rho_s^s)^{1/2}$ . Le deuxième, à des arrangements de type « murs » avec  $L \propto 1/\lambda^k$ . Ces auteurs modifient donc la loi d'évolution des densités de dislocations [3.26], qui devient :

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( k_0 \lambda^s + K \sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u} - g_c \rho^s \right) \quad [3.45]$$

Aux densités  $\rho^s$  s'ajoutent donc un deuxième type de variables internes, les densités (GNDs)  $\lambda^s$ , directement liées aux hétérogénéités. Les GNDs sont introduites dans les lois d'écrouissage par le biais des cissions critiques réduites  $\tau_c^s$  qui contrôlent l'écrouissage :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} (\lambda^u) \quad [3.46]$$

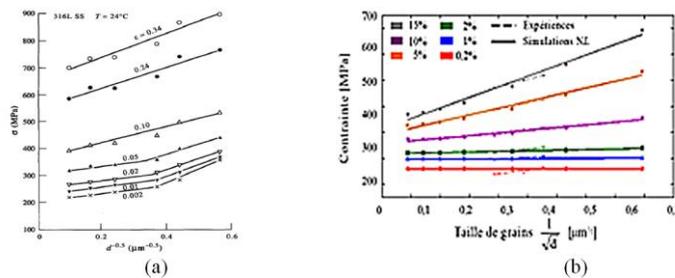
A partir de ces considérations un grand nombre de modèles ont été proposés. Ces

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

modèles dus entre autre à Fleck et Hutchinson [FLE 97], [FLE 03], Acharya et Beaudoin [ACH 00] et Gurtin [GUR 02], [GUR 03], [GUR 05] Meissonnier et Busso [MEI ], Schwartz et al [SCH 10 ] varient d'un auteur à l'autre dans la forme des lois. Dans tous les cas, ces modèles rendent compte de la taille de grains, comme le montre la figure 3.16.



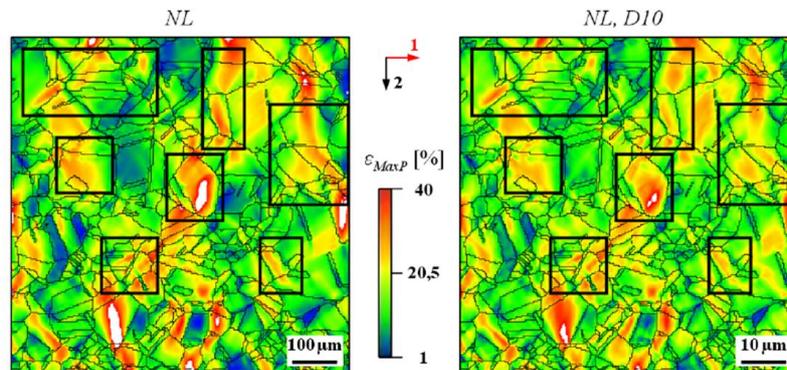
**Figure 3.16 :** (a) l'évolution de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille de grain  $d$  pour l'alliage 316LN [KAS 95]. (b) Evolution de la contrainte d'écoulement calculée (par simulation numérique) en fonction de la taille de grain pour l'alliage 316L [SCH 11.]

A titre d'exemple, la figure 3.17 représente la couche en surface d'un quart de l'agrégat 3D de 316L de la figure 3.9a. Deux simulations sont présentées : l'une (NL) où l'agrégat 3D est celui de la figure 3.11, l'autre (NL, D10) qui correspond au même agrégat ayant subi, ainsi que le maillage, une homothétie de 10. La taille de grains des deux agrégats passe de 50 à 5  $\mu\text{m}$ . L'agrégat est en traction uniaxiale de 15%. Le maillage est formé d'éléments cubiques ( $4 \times 4 \times 4 \mu\text{m}^3$ ) à huit points d'intégration.

La carte de déformation  $\varepsilon_{equ}$  de l'agrégat NLD10 est plus homogène que la carte NL (figure 3.16), bien que les distributions des déformations dans les éléments du maillage ne présentent pas de fortes différences. En revanche, les contraintes (figure 3.18) augmentent fortement entre NL et NLD10, comme le montre les courbes des distributions (figure 3.19). Le champ de contrainte est plus hétérogène pour NLD10 que pour NL, son maximum augmente de 400MPa. Ces résultats sont cohérents avec l'expérience. D'après la simulation, le libre parcours moyen des GNDs limite le mouvement des dislocations et le champ de contrainte ne peut plus être relaxé. Dans la réalité, d'autres mécanismes peuvent entrer en jeu comme le glissement des joints de grains. De plus, un rapide endommagement vient limiter la ductilité de ces matériaux à faibles tailles de grains.

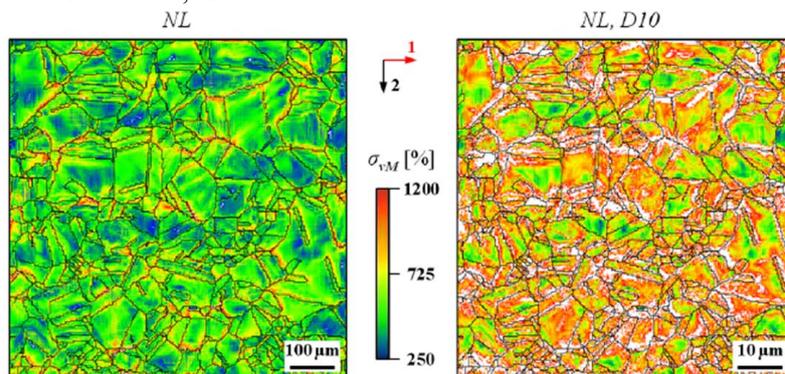
# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES

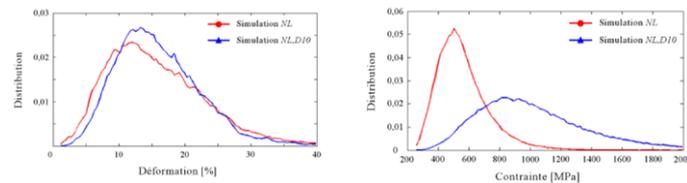


**Figure 3.17.** Cartes des déformations principales pour la couche de surface des agrégats 3D, NL et NLD10.

Notons que la mécanique des milieux continus généralisée (milieux de Cosserat), a été appliquée à des agrégats [FOR 06], [ZEG 05]. Cette théorie permet de rendre compte de l'effet de taille de grains. Mais le grand nombre de paramètres du matériau ainsi introduit, est difficile à identifier.



**Figure 3.18.** Cartes de la contrainte équivalente pour la couche de surface des agrégats 3D, NL et NLD10.



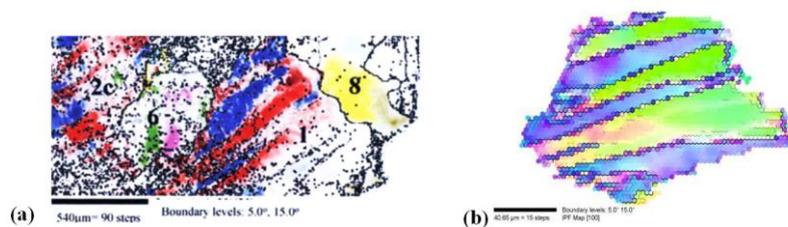
**Figure 3.19.** Distributions de la déformation principale maximale et de la contrainte équivalente dans les agrégats NL et NLD10. L'hétérogénéité des champs mécaniques est mesurée par la largeur à mi-hauteur des distributions.

### 3.6. Sous-joints et joints de grains de déformation et de recristallisation

Les sous-joints dont la désorientation est comprise, suivant la définition usuelle, entre 0 et 15°, apparaissent soit par fragmentation des grains lors des déformations à basse température, soit par fragmentation et restauration lors des déformations à haute température. La fragmentation du grain en domaines est le résultat de plusieurs mécanismes dont le scénario est, compte tenu de la complexité des polycristaux, quasiment impossible à définir. Ce phénomène a été observé à la surface des polycristaux et le plus souvent sur des polycristaux colonnaires qui fournissent des conditions d'analyse et d'observation simplifiées.

#### 3.6.1 Sous-joints et joints de grains de déformation

Etudiée par de nombreux auteurs [REY 80], [REY 82], [BHA 01], [BEC 95], [HOC 01],[ERI 04], la fragmentation en domaines s'effectue préférentiellement dans des grains orientés en glissements multiples. Si les interactions entre les systèmes des domaines sont importantes, les systèmes s'interpénètrent difficilement, construisant ainsi des interfaces stables. Les domaines ainsi créés vont peu à peu se désorienter du fait de la rotation plastique et de la rotation du réseau cristallin. La désorientation entre domaine a été mesurée par EBSD, entre autres, par Bhattacharyya [BHA 01] sur des polycristaux d'aluminium à grains colonnaires (figure 3.13). Ce type de polycristaux est le siège de fortes rotations intragranulaires, du fait de la présence de surfaces libres. La modélisation par EF [ERI 04] a permis d'expliquer en partie, la formation de ces domaines (figure 3.20).



**Figure 3.20.** Formation de domaines d'orientation alternée (a) dans un polycristal d'aluminium à grains colonnaires comprimé de 40%, [BHA 01]. (b) simulation (modèle polycristallin) dans un polycristal de fer à grains colonnaires déformé en compression plane de 60% (grain 3 de la figure 12). La désorientation est de 40 degrés [ERI 04]

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

#### 3.6.2 *Sous-joints de recristallisation*

##### 3.6.2.1 *Généralités*

La formation de sous-joints et de joints de grains résulte le plus souvent de traitements thermiques après déformation ou de traitements thermomécaniques tels qu'ils interviennent dans la mise en forme à chaud. Dans le premier cas, il s'agit de phénomènes statiques, dans le deuxième cas, il s'agit de phénomènes dynamiques continus (CDRX) ou discontinus (DDRX). Ces mécanismes ont été largement étudiés [HUT 92], [JON 94], [MON 09]. Le livre de Humphreys et Hatherly [HUM 02] constitue une large synthèse de la recristallisation. Bien que les premières tentatives de modélisation par EF concernent la recristallisation statique, [SOL 01] [ROL 01], [ERI 03] et la recristallisation dynamique continue [GOU 03], nous ne présenterons, dans ce chapitre qu'une récente modélisation des mécanismes dynamiques discontinus par EF, [THE 08], [SOL 09].

La recristallisation dynamique se manifeste sur les courbes de compression uniaxiale à chaud. La courbe contrainte/déformation présente un stade d'écroutissage, un maximum de contrainte puis un plateau correspondant à un régime stationnaire. Entre le maximum et le régime stationnaire, on observe soit une décroissance de la contrainte (CDRX), soit des oscillations de la contrainte (DDRX). L'allure des courbes dépend de la température et de la vitesse de déformation. Pour une température faible et une vitesse de déformation élevée, un seul maximum peu accentué est observé correspondant à la recristallisation continue. Pour des températures élevées et des vitesses de déformation faibles, on observe plusieurs maxima de contrainte qui correspondent à la recristallisation discontinue. Entre ces deux extrêmes, il est difficile de déterminer la nature de la recristallisation. Les mécanismes de recristallisation dynamique CDRX, dépendent aussi de la taille de grains initiale  $D_0$ .

On admet que :

- si la taille de grains finale  $D_s$  atteinte en régime stationnaire est telle que  $D_s < D_0/2$ , la recristallisation se produit en collier et les grains recristallisés envahissent peu à peu les grains initiaux, tout en se déformant sous l'action de la déformation. Ce mécanisme conduit d'abord à une diminution de la contrainte d'écoulement puis au régime stationnaire.

- si  $D_s > D_0/2$ , la croissance des premiers grains recristallisés est limitée par leurs interactions mutuelles. La première recristallisation conduit à une diminution de la contrainte d'écoulement, mais ne permet pas d'atteindre la taille  $D_s$  du régime stationnaire. Il y a donc de nouveau écroutissage jusqu'au déclenchement d'une nouvelle recristallisation. La courbe contrainte/déformation présente donc une série de maxima, écroutissage et recristallisation évoluent de façon synchronisée (DDRX).

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

Dans tous les cas, la recristallisation (statique comme dynamique), fait intervenir trois mécanismes : la restauration, la germination et la croissance des grains. Ces mécanismes ont été traduits par un ensemble de lois couramment admises mais faisant intervenir un nombre de paramètres élevé.

#### 3.6.2.2 Modélisation numérique de la recristallisation discontinue.

Les simulations numériques de la DDRX, reposent sur un couplage de la modélisation de la déformation plastique par EF et d'une modélisation de la recristallisation (MR) utilisant des logiciels du type monte carlo ou automates cellulaires, dont le maillage des grains est reproduit sur la figure 3.21.

Le modèle de plasticité polycristalline par EF fournit après chaque étape de la déformation, les variations locales de densité de dislocation et les réorientations intragranulaires. Il donne donc :

- les densités de dislocations  $\rho$  en tout point de l'agrégat, donc la densité d'énergie stockée :

$$E_{sto} = 1/2 \mu b^2 \rho \quad [3.47]$$

- la localisation dans l'agrégat des nouveaux sous joints de déformation, ainsi que leur désorientation cristalline.

Il est possible de calculer l'énergie des joints de grains :

$$E_{gb}^s = \sum_{s'} \gamma^{ss'} \quad [3.48]$$

qui dépend de la désorientation  $\theta^{ss'}$  d'un site (s) avec les sites (s') voisins. Cette énergie est donnée par la relation de Read et Shockley :

$$\gamma^{ss'} = \begin{cases} \gamma_m \frac{\theta^{ss'}}{\theta^*} \left[ 1 - \ln \left( \frac{\theta^{ss'}}{\theta^*} \right) \right] & \text{si } \theta^{ss'} \leq \theta^* \\ \gamma_m & \text{si } \theta^{ss'} \geq \theta^* \end{cases} \quad [3.49]$$

Où  $\gamma_m$  est l'énergie des joints de grains de grands angles,  $\theta^*$  est la désorientation limite pour les sous-joints (prise arbitrairement à 15°,  $\theta^{ss'}$  est la désorientation cristallographique entre deux voisins ou site (s) et (s').

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

Quel que soit le type de recristallisation, celle-ci s'effectue en trois étapes principales : la formation d'un germe puis sa croissance et enfin la restauration.

*Germination :*

Il y a germination des sites de plus forte énergie stockée, c'est-à-dire de ceux proches des joints de grains. L'énergie stockée en un site (s) est calculée numériquement en fonction de la densité de dislocations totale sur ce site par :

$$E_{sto}^s = \frac{1}{2} \mu b^2 \rho^{tot} V \quad [3.50]$$

où V est le volume du site.

Le site (s) est considéré comme un germe si :

$$E_{sto}^s \geq E_{seuil} \quad [3.51]$$

$E_{seuil}$  est une valeur fixée arbitrairement

Si (s) est un germe, alors son orientation cristallographique est inchangée et son énergie stockée prend la valeur  $E_{rec}$  qui correspond à la densité de dislocations  $\rho_{rec}$  d'un grain recristallisé.

*Croissance.*

Pour qu'il y ait croissance, il faut soit être en présence d'un germe, soit sur un site déjà recristallisé. Cependant, pour qu'un site, ayant recristallisé au cycle N-1, puisse, après avoir subi une faible déformation au cycle N, continuer à croître lors de l'étape de recristallisation N, une valeur  $E_{lim}$  a été introduite. La vitesse de croissance du germe (s) dépend de la mobilité  $M^{ss'}$  de l'interface entre (s) et ses voisins (s'). La vitesse est donnée par :

$$V = -M^{ss'} \Delta E^s \quad [3.52]$$

$$M^{ss'} = M_m \left[ 1 - \exp \left( - \frac{\theta^{ss'}}{10} \right)^3 \right] \quad [3.53]$$

Où  $M_m$  est la mobilité des joints de grains de forte désorientation (la désorientation étant exprimée en degrés). Le coefficient 10 a été identifié de façon à obtenir une forte mobilité des joints de grains et une faible mobilité des sous-joints.

La force motrice  $\Delta E^s$  correspond à la variation d'énergie du système, entre l'état initial et l'état final (figure 3.21).

Mécanique et Ingénierie des Matériaux  
 Les joints de grains dans les matériaux  
 HERMES

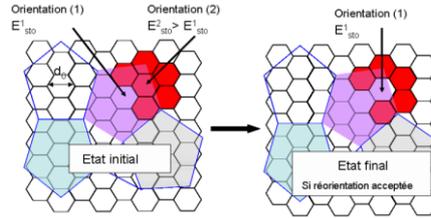


Figure 3.21. Schéma illustrant le calcul de la force motrice  $\Delta E^s$ , les centres des hexagones correspondent aux sites.

Cette force motrice comprend deux termes :

$$\Delta E^s = \Delta E_{gb}^s + \Delta E_{sto}^s \quad [3.54]$$

$\Delta E_{sto}^s$  est la variation d'énergie stockée entre un état déformé et un état recristallisé.  
 $\Delta E_{gb}^s$  est la variation d'énergie de joint associé au changement d'orientation du site 2 lors de la migration du joint de grains.  
 L'énergie du joint de grains  $E_{gb}^s$  est fonction de la désorientation entre le site considéré et ses 6 voisins :

$$E_{gb}^s = \frac{I}{d_0} \sum_{s'} \gamma^{ss'} \quad [3.55]$$

Où  $d_0$  correspond à la taille du site et  $\gamma^{ss'}$  est donné par l'équation [3.49].

Si cette force motrice est positive, le site (s) garde son orientation initiale. Si elle est négative, on calcule la probabilité de réorientation en faisant l'hypothèse que la vitesse de migration d'un joint est donnée par la relation :

$$v = -M \Delta E^s \quad [3.56]$$

La probabilité  $P$  est le rapport entre la distance  $d$  parcourue par le joint de grain à l'intérieure de la cellule de taille  $d_0$  pendant un incrément de temps  $t_{inc}$  :

$$P = \frac{d}{d_0} = \frac{-M \Delta E^s t_{inc}}{d_0} \quad [3.57]$$

Pour chaque site, cette probabilité est calculée avec les 6 réorientations possibles (il y a 6 voisins pour chaque cellule), et on ne garde que la réorientation ayant la plus grande probabilité. La microstructure est mise à jour une fois que toutes les probabilités sont calculées et seuls les sites dont la probabilité est supérieure à une

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

nombre donné sont effectivement réorientés.

#### *Restauration*

La restauration est perçue comme la diminution de l'énergie stockée des sites non recristallisés, elle conduit à une diminution de la densité de dislocations, sans changement d'orientation. La relation cinétique choisie est de la forme :

$$E_{sto}(t_n) = E_{sto}(t_{n-1}) \exp\left(-\frac{t_{inc}}{t_{res}}\right) \quad [3.58]$$

$E_{sto}(t_n)$  et  $E_{sto}(t_{n-1})$  sont respectivement les énergies stockées à  $t_n$  et  $t_{n-1}$ .

#### *Couplage des modèles de déformation et de recristallisation*

Le modèle polycristallin par EF est celui décrit au paragraphe 3.3.1. Le modèle de recristallisation utilise dans ces grandes lignes les équations classiques, mais adaptées au couplage du modèle de déformation et du modèle de recristallisation. Chaque séquence, faisant intervenir les deux modèles, est assimilée à un cycle noté N. La simulation comprend donc N cycles déformation/recristallisation. Lors du cycle N, le transfert du modèle de déformation vers celui de recristallisation, se fait pour des incréments de déformation  $\Delta\varepsilon$ , choisis ici à 5%. Plus l'incrément est faible, mieux la courbe contrainte/déformation sera décrite. Le pas de temps  $t_{inc} = t/n$  défini pour le modèle de recristallisation, est fixé par le nombre n de pas du modèle de recristallisation, t est défini par  $\Delta\varepsilon / \dot{\varepsilon}$ . Pendant  $t_{inc}$  le joint de grain migre de la distance  $d$  qui est comparée à la taille initiale du site  $d_0$ . Il faut donc que le nombre de pas soit suffisant pour que  $d$  reste inférieure à  $d_0$ .

Le transfert du modèle de déformation vers le modèle de recristallisation (cycle N vers le cycle N+1) est plus complexe. Le modèle de recristallisation fournit, au modèle de déformation en chaque point de Gauss du maillage EF:

- les nouvelles orientations cristallographiques,
- les nouvelles densités de dislocation

Le problème est de gérer correctement le passage des deux maillages. Le lecteur est invité à se référer aux travaux de Thébault [THE 08, 09].

#### *Exemple de modélisation d'un super alliage de nickel pendant le forgeage*

La simulation présentée figure 3.22, correspond au forgeage de l'UDIMET 720. Cet alliage comprend deux phases  $\gamma$  et  $\gamma'$ . La phase  $\gamma$  est la matrice et la phase

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES

$\gamma'$  forme des précipités. Les deux phases sont prises en compte dans le modèle de déformation. Dans le stade de recristallisation, la phase  $\gamma$  subit recristallisation et restauration et la phase  $\gamma'$  subit uniquement de la restauration.

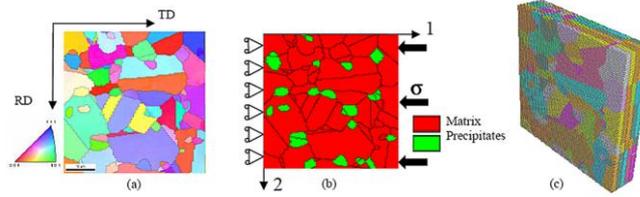


Figure 3.22 : (a) carte d'orientations de l'agrégat extrudé. (b) Conditions aux limites imposées et visualisation des deux phases. (c) Agrégat formé de 4 couches identiques [THE 08].

*Choix des paramètres* : Les paramètres utilisés pour modéliser la déformation et la recristallisation, ainsi que les paramètres du couplage sont donnés dans le tableau 3.2. Ils ont été obtenus par des observations au Microscope à Balayage et au Microscope à Transmission et par des identifications inverses sur les courbes de compression plane à différentes vitesses et températures.

Modèle EF			Modèle de recristallisation		Couplage	
Phase	$\gamma$	$\gamma'$			$\Delta \varepsilon$	$5 \cdot 10^{-2}$
E (GPa)	126	129	$E_{lim}$ (mJ/mm <sup>3</sup> )	0,15	$\Delta \varepsilon \dot{\varepsilon} (s^{-1})$	$10^{-2}$
$\nu$	0,3	0,3	$E_{seuil}$ (mJ/mm <sup>2</sup> )	variable	$t_{inc}$ (s)	$5 \cdot 10^{-2}$
$a^{su}$	$8 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$\gamma_m$ (mJ/mm <sup>2</sup> )	$2,5 \cdot 10^{-4}$		
$\gamma_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^{-5}$	$M_m$ (mm <sup>4</sup> /mJ/s)	10-2		
n	6,2	100	$E_{res}$ (mJ/mm <sup>3</sup> )	0,02		
$g_c$ (nm)	10	10	$t_{res}$ (s)	5		
K	100	100	$E_{rec}$ (mJ/mm <sup>3</sup> )	$2 \cdot 10^{-5}$		
$\tau_0$ (MPa)	5,5	5	$\rho_{rec}$ (mm <sup>-2</sup> )	$1,2 \cdot 10^{-4}$		
$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$10^{14}$	$10^{13}$	$d_0$ (μm)	0,6		
D	10	33	$\theta^*$ (degré)	15		
b (nm)	0,26	0.26				

Tableau 3.2. Paramètres utilisés pour la simulation de la recristallisation [THE 09].

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux HERMES

La figure 3.23 donne les courbes de compression plane expérimentale et simulée. L'écroutissage correspond aux incréments de déformation (5%) et la recristallisation conduit à une chute de la valeur de la contrainte. La figure 3.24 illustre les cycles de recristallisation sur un agrégat colonnaire formé de 5 couches d'éléments identiques. La carte des orientations est obtenue par une analyse EBSD d'une plage de l'UDIMET 720.

Ce type de simulation a également été appliqué à un agrégat hétérogène (UDIMET 720), composé de zones à petits et gros grains (figure 3.25). Ceci afin d'examiner les différences de recristallisation entre les différentes zones.

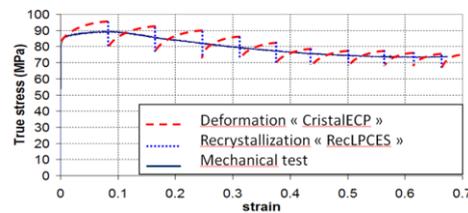


Figure 3.23. Approche pour 10 cycles déformation- recristallisation, [THE 08]

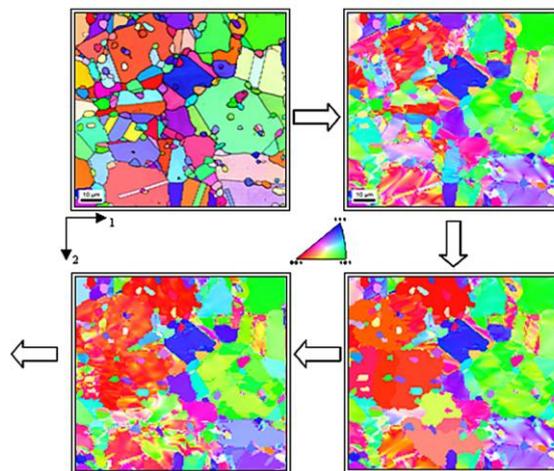


Figure 3.24. Evolution des cartes d'orientation de l'axe de forgeage. (a) Agrégat initial. (b) Déformation de 5%. (c) Recristallisation. (d) Déformation de 5% [THE 08].

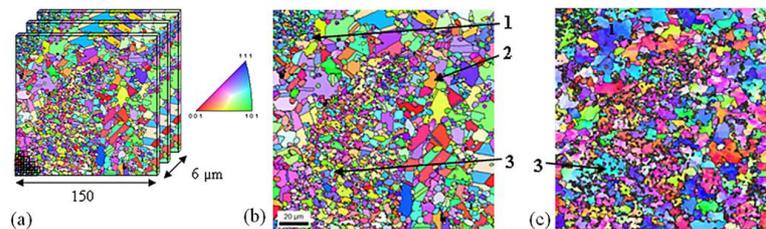
La simulation conduit, après 10 cycles, à une recristallisation dynamique continue des gros grains. Les petits grains, dont les joints sont bloqués par les précipités, évoluent peu, ce qui est conforme à l'expérience. En revanche, l'agrégat présente une

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

texture finale de forgeage, différente de la texture expérimentale et les désorientations cristallines simulées ne présentent pas de désorientations de 60 degrés correspondant à des joints de grains de type  $\Sigma_3$ . Il apparaît donc que le maillage de recristallisation, qui n'est pas pris en compte dans le modèle, joue un rôle important.



**Figure 3.25.** Modélisation de la recristallisation dynamique pendant le forgeage d'un agrégat d'UDIMET 720. (a) Agrégat. (b) Orientation initiale des grains. (c) Agrégat recristallisé après 10 cycles de déformation-recristallisation [THE 09].

### 3.7. Conclusion

Les joints de grains, la nature et la taille des grains contrôlent le comportement global et local des polycristaux. Les joints de grains, du fait des incompatibilités de déformation et des contraintes internes qui en résultent, induisent de fortes hétérogénéités intra et intergranulaires. Aux échelles macroscopique et mésoscopique, les joints sont caractérisés par la désorientation des grains qu'ils séparent et par leur position dans le polycristal par rapport à la sollicitation imposée. Les approches polycristallines basées sur la méthode des éléments finis sont des outils précieux qui, s'ils sont validés expérimentalement, aident à la compréhension des mécanismes de déformation et permettent de mieux visualiser et de prévoir, le comportement local.

Il ne faut pas oublier que les tentatives pour décrire les champs mécaniques locaux ont pour objectif de prévoir l'endommagement (à froid) des matériaux. Or, pour comprendre l'endommagement au niveau des joints, il faut se placer à une échelle microscopique et faire intervenir l'épaisseur du joint, son degré de cohésion, son énergie propre, ses interactions avec les dislocations de la matrice. Pour prévoir les contraintes très locales qui vont induire une microfissure, il faut se placer à l'échelle des dislocations discrètes et à l'échelle atomique en effectuant des allers et retours entre expérience et modélisation. Le passage micro-macro, sur lequel tant de chercheurs se focalisent actuellement, n'est pas aisé, mais il est indispensable à la

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

compréhension des effets des joints de grains. Un autre problème important est la prise en compte des chemins thermo-mécaniques (comme la recristallisation) qui peuvent conduire vers de nouvelles structures. Ce domaine repose aussi sur la même problématique, expérience-simulation, avec passage des échelles microscopiques aux échelles macroscopiques.

## Annexes

Le but de ces annexes est de fournir un formulaire utile à la compréhension des équations.

### A3.1 Notations

$$(\tilde{A}\tilde{B})_{ij} = A_{ik}B_{kj}$$

$$(\tilde{A} : \tilde{B}) = A_{ij}B_{ij}$$

$$(\tilde{rot}\tilde{A})_{ij} = (\tilde{\nabla} \times \tilde{A})_{ij} = e_{irs} A_{js,r} . \text{ La dérivée est effectuée par rapport à } X^{\square},$$

vecteur de la configuration  $C_R(0)$ ,  $e_{ijr}$  est le tenseur de permutation.

$$(\tilde{rot}\tilde{A})_{ij} = (\tilde{\nabla} \times \tilde{A})_{ij} = e_{irs} A_{js,r} . \text{ La dérivée est effectuée par rapport à } x^{\square},$$

vecteur de la configuration  $C(t)$ ,  $e_{ijr}$  est le tenseur de permutation.

### A3.2. Déformations infinitésimales

$$d\tilde{u}^{\square} = \tilde{\varepsilon}dX^{\square} + \tilde{\omega}dX^{\square} \text{ avec } du_i = \varepsilon_{ij}dX_j + \omega_{ij}dX_j$$

$$\beta_{ij} = (Gra \tilde{d} \tilde{u})_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial X_j}$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\delta u_i}{\delta X_j} + \frac{\delta u_j}{\delta X_i} \right) \text{ et } \omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\delta u_i}{\delta X_j} - \frac{\delta u_j}{\delta X_i} \right)$$

Les conditions de compatibilité des tenseurs  $\tilde{\beta}$  et  $\tilde{\varepsilon}$  sont donnée par :

$$(\tilde{rot}\tilde{\beta})_{ij} = (\tilde{\nabla} \wedge \tilde{\beta})_{ij} = e_{ijk} \beta_{ki,j} \text{ et } (\tilde{inc}\tilde{\varepsilon})_{ij} = e_{ikl} e_{jmn} \varepsilon_{lm,kn}$$

*Déformation et rotation plastique.* Les monocristaux et les grains de polycristaux de structure cubique face centrée, cubique centré et hexagonaux se déforment suivant des systèmes de glissement (s), caractérisés par la normale au plan de glissement  $n^{\square_s}$

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

(vecteur unitaire) et la direction de glissement  $\underline{m}^s$ , (vecteur unitaire parallèle au vecteur de Burgers  $\underline{b}^s$ ).

Le critère d'activation du système (s) est généralement le critère de Schmid :

$$\tau^s = \bar{m}^s \tilde{\sigma} \bar{n}^s = \tau_c^s$$

Où  $\tau^s$ ,  $\tilde{\sigma}$ ,  $\tau_c^s$ , sont respectivement la cission réduite, le tenseur des contraintes et la cission critique réduite, en un point M du monocristal ou d'un grain. Il existe plusieurs expressions de la cission critique réduite.

Lorsque le système (s) est activé, le déplacement en M est donné par l'expression :

$$\bar{u}(M) = \gamma(M) [OM \cdot \bar{n}^s] \bar{m}^s$$

O étant un point de référence supposé fixe et  $OM = \underline{X}$ .

Pour les déformations infinitésimales, le tenseur gradient de la transformation

$$\text{est : } \beta(M) = \text{Grad}(\bar{u}(M)), \beta_{ij} = \frac{\delta u_i}{\delta X_j}$$

Le tenseur de la déformation plastique est donné par la partie symétrique de  $\tilde{G}$  et le tenseur de rotation plastique par la partie antisymétrique

$$\tilde{\varepsilon}^P = \frac{1}{2} [\tilde{\beta}^T + \tilde{\beta}], \tilde{\omega}^P = \frac{1}{2} [\tilde{\beta}^T - \tilde{\beta}]$$

Dans le cas d'une déformation élastique et plastique les tenseurs s'ajoutent (il y a commutativité). la déformation totale et la rotation totale sont données

$$\text{par : } \tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}^e + \tilde{\varepsilon}^P \text{ et } \tilde{\omega} = \tilde{\omega}^e + \tilde{\omega}^P$$

### A3.3 Transformations finies

**Géométrie.** Lorsque que les déformations sont supérieures à 5-6%, il est nécessaire d'utiliser un formalisme où les gradient de la transformation ne sont plus commutatifs.

Il est nécessaire de différencier la configuration initiale C(0) où la géométrie de la structure est bien définie et la configuration déformée C(t) où les forces appliquées à la structure sont connues. On ajoute une configuration virtuelle (configuration isocline) C\* afin de différencier plus aisément les transformations élastique  $\underline{F}^e$  et plastique  $\underline{F}^P$ .

Soient  $(\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{E}_3)$  la base orthonormée de C(0),  $(\bar{e}_1^*, \bar{e}_2^*, \bar{e}_3^*)$  la base orthonormée de C\* et  $(\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3)$  la base orthonormée de C(t).

La transformation totale s'écrit :  $\tilde{F} = \tilde{F}^P \tilde{F}^e$

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

Si  $dX$  est un vecteur matériel appartenant à la configuration initiale  $C(0)$ , il se transforme en  $d\bar{x}$  sous l'effet de la déformation plastique, avec  $d\bar{x} = F^p dX$ .  
 $d\bar{x}$  se transforme en  $dx$  sous l'effet de la transformation élastique  $\tilde{F}^e$ .

$$\tilde{F}^p = \nabla_{dX} \square, \left( F_{ij}^p = \frac{\delta x_i^*}{\delta X_j} \right)$$

$$\tilde{F}^e = \nabla_{d\bar{x}} \square, \left( F_{ij}^e = \frac{\delta x_i}{\delta \bar{x}_j^*} \right)$$

On a donc  $dx = \tilde{F}^e d\bar{x} = \tilde{F}^e \tilde{F}^p dX$

Le tenseur de la transformation totale est donné par  $\tilde{F} = \tilde{F}^e \tilde{F}^p$  ( $F_{ij} = F_{ik}^e F_{kj}^p$ )

Ce tenseur est un tenseur mixte  $\tilde{F} = F_{ij} (e_i \otimes E_j)$

Dans ce qui suit, on confondra les bases orthonormées  $(\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{E}_3)$  de  $C(0)$ ,  
 $(\bar{e}_1^*, \bar{e}_2^*, \bar{e}_3^*)$  de  $C^*$  et  $(\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3)$  de  $C(t)$ .

**Cinématique.** Dérivons par rapport au temps l'expression A :

$$d\bar{x} = \tilde{F} dX = \tilde{F} \tilde{F}^{-1} d\bar{x}$$

Le tenseur vitesse de la transformation s'écrit :  $\tilde{L} = \dot{\tilde{F}} \tilde{F}^{-1}$ ,  $\tilde{L} = L_{ij} (e_i \otimes e_j)$ ,

$L_{ij} = \dot{F}_{ik}^e F_{kj}^{-1}$ . C'est un tenseur Lagrangien défini dans  $C(t)$ .

Les tenseurs, vitesse de la déformation et vitesse de la rotation, sont donnés respectivement par la partie symétrique et antisymétrique de  $\tilde{L}$  :  $\tilde{D} = \frac{1}{2}(\tilde{L} + \tilde{L}^T)$

$$\text{et } \tilde{W} = \frac{1}{2}(\tilde{L} - \tilde{L}^T).$$

On montre que  $\tilde{L} = \tilde{L}^e + \tilde{L}^p$  et par conséquent  $\tilde{D} = \tilde{D}^e + \tilde{D}^p$  et  $\tilde{W} = \tilde{W}^e + \tilde{W}^p$

Tous ces tenseurs sont lagrangien, ils sont définis dans  $C(t)$ .

Remarque :  $\tilde{L}^p = \tilde{F}^e (\dot{\tilde{F}}^p \tilde{F}^{p-1}) \tilde{F}^{e-1} = \tilde{F}^e (\tilde{L}^{p*}) \tilde{F}^{e-1}$  où  $\tilde{L}^{p*}$  est défini dans  $C^*$   
 puis transporté dans  $C(t)$ .

Un élément de surface  $n_R dS_R$  dans la configuration de référence  $C_R(0)$  se transforme dans  $C(t)$  en l'élément de surface  $n dS$  avec  $n dS = J \tilde{F}^{-T} \bar{n}_R dS_R$ .

$J$  est le déterminant de  $\tilde{F}$

*Tenseur des contraintes de Cauchy* : il est défini par  $df = \tilde{\sigma} \bar{n} ds$

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

où  $df$  est un incrément de la force appliquée sur  $nds$  l'élément de surface.

$\tilde{\sigma}$  n'est pas un tenseur objectif, sa dérivée temporelle passe par la définition d'une dérivée objective qui est ici la dérivée de Jaumann. Pour plus d'informations, il est conseillé de se reporter à Peirce et al [PEI 83], Teodosiu et al [TEO 91].

#### A3.4 Incompatibilité en transformations finies

Pour plus d'informations, il est conseillé de se reporter à Acharya et al [ACH 00], Cermelli et al [CER 01], Acharia et al [ACH 03].

Considérons le schéma de la figure 3.9, il y a compatibilité de la déformation plastique si  $Rot \tilde{F}^p = 0$

Cela signifie que le défaut de fermeture, du aux dislocations qui percent, dans  $C^*$ , la surface  $S_R$  limité par le contour fermé  $\partial S_R$  est donné par :

$$\bar{b}^p(\partial S_R) \equiv \int_{\partial S_R} \tilde{F}^p d\bar{X} = \int_{S_R} (Rot \tilde{F}^p)^T \bar{n}_R dA_R$$

$\bar{n}_R dA_R = \frac{I}{J^p} \tilde{F}^p \bar{n}^* dA^*$  est l'élément de surface de normale  $\bar{n}_R$  dans la configuration de référence

$$\bar{n}_R dA_R = \frac{I}{J^p} \tilde{F}^p \bar{n}^* dA^*$$

$\bar{n}^* dA^*$  est l'élément de surface dans  $C^*$ , transformé de l'élément de surface  $\bar{n}_R dA_R$  définie dans  $C_R(0)$ . De la même façon, il est possible de déterminer le défaut de fermeture dans  $C^*$  à partir de la configuration  $C(t)$  en utilisant la transformation  $\tilde{F}^{e-1}$ .

$$\bar{b}^e(\partial S) \equiv \int_{\partial S} \tilde{F}^{e-1} d\bar{x} = \int_S (rot \tilde{F}^{e-1})^T \bar{n} dA$$

L'élément de surface  $\bar{n} dA$  est défini dans  $C(t)$ .

Ces vecteurs de Burgers correspondent aux dislocations géométriquement nécessaires qui permettent d'assurer la compatibilité de la déformation. Par unité de surface on obtient :

$$G^p = \frac{I}{J^p} F^p Rot F^p = G^e = J^e \tilde{F}^{e-1} rot F^{e-1}$$

La mesure de l'incompatibilité est donc donnée par  $rot \tilde{F}^{e-1}$  ou par  $Rot F^p$

#### A3.5 Calcul des densités de dislocations géométriquement nécessaire

Acharya et Beaudoin [ACH 00], [BEA 00], [ACH 02] définissent pour caractériser

la compatibilité de la déformation, le scalaire  $\lambda^k = \sqrt{(\tilde{\lambda} : \tilde{n}^k)(\tilde{\lambda} : \tilde{n}^k)}$

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

Où  $\tilde{\Lambda} = \left( \tilde{F}_{ij,k}^{e-l} - \tilde{F}_{ik,j}^{e-l} \right) \bar{e}_i \otimes \bar{e}_j \otimes \bar{e}_k$  est un tenseur du troisième ordre qui est calculé à chaque incrément de déformation et  $\hat{n}^k$  un tenseur anti-symétrique défini par commodité à partir du vecteur  $\bar{n}^k$ , vecteur unitaire normal à la surface,  $S$  limitée par le circuit  $C$ . La surface est percée par les dislocations du système (k). Le tenseur  $\hat{n}^k$  est un tenseur antisymétrique.

## Bibliographie

- [ACH 00] Acharya A., Bassani J.L., 2000. *Lattice incompatibility and gradient theory of crystal plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 48, 1565-1595.
- [ALD 70] Aldrich J.W., Armstrong R.W., 1970. *Grain Size Dependence of Yield, Flow and Fracture Stress of commercial purity Silver*. Metallurgical Transactions 1, 2547.
- [ASA 77] Asaro R.J., Rice J.R., 1977. *Strain localization in ductile single crystals*. Journal of Mechanics Physics of Solids 25, 309-338.
- [ASA 79] Asaro R.J. 1979. *Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals*. Acta Metallurgica 23, 445-453.
- [ASH 70] Ashby M.F., 1970. *The deformation of plastically non-homogeneous materials*. Philosophical Magazine 21, 399-424.
- [ARM 62] Armstrong R. W., Codd I., Douthwaite R. M., Petch R. M., 1962. *The plastic deformation of polycrystalline aggregates*. Philosophical Magazine 7, 45-58.
- [ARM 70] Armstrong R. W., 1970. *The influence of polycrystal grain size on several mechanical properties of materials*. Metallurgical Transactions 1, 1169-1176.
- [BAR 01a] Barbe F., Decker L., Jeulin D., Cailletaud G., 2001. *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates, Part 1 : F.E. model*. International Journal of Plasticity, 17, 513-536.
- [BAR 01b] Barbe F., Forest S., Cailletaud G., 2001. *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates, Part 2 : Results*. International Journal of Plasticity 17, 537-563.
- [BEA 95] Beaudoin A.J., Dawson P.R., Mathur K.K., Kocks U.F., 1995. *A hybrid finite element formulation for polycrystal plasticity with consideration of macrostructural and microstructural linking*. International Journal of Plasticity 11, 501-521.
- [BEA 00] Beaudoin A., Acharya A., Chen S. R., Korzekwa D.A., Stout M.G., 2000. *Consideration of grain-size effect and Kinetics in the plastic deformation of metal polycrystals*. Acta Materiala 48 3409-3423.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

- [BEC 95] Becker R., Panchanadeeswaran S., 1995. *Effect of grain interactions on deformation and local texture in polycrystals*. Acta Metallurgica and Materiala 43, 2701-2719.
- [BHA 01] Bhattacharyya A., El-Danaf E., Kalidindi S., Doherty R., 2001. *Evolution of grain scale microstructure during large strain simple compression of polycrystalline aluminium with quasi-columnar grains: OIM measurements and numerical simulations*. International Journal of Plasticity 17, 861-883.
- [CAI 94] Cailletaud G. and Pilvin P., 1994. *Identification and inverse problems related to material behaviour. Proceedings of the International Seminar on Inverse problems*, Clamart, 79-86.
- [CAI 87] Cailletaud G., 1987. *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse de Doctorat, Université Paris 6.
- [CED 08] Cédât D., 2008. *Etudes expérimentale et numérique du comportement mécanique d'un composite métal-céramique : MoTiC30%*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris.
- [CER 01] Cermelli P., Gurtin M.E., 2001. *On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 49, 1539-1568.
- [DEP 04] Déprés C., Robertson C.F., Fivel M. C., 2004. *Materials Science and Engineering A* 387-389, 288-291.
- [DEP 08] Déprés C., Fivel M., Tabourot L., 2008. *A dislocation-based model for low amplitude fatigue behaviour of face-centred cubic single crystals*. Scripta Materialia 58, 1086-1089.
- [DEV06] Devincere B., Kubin L., Hoc T., 2006. *Physical analyses of crystal plasticity by DD simulation*. Scripta materialia 54, 741-746.
- [ERI 04] Eriau P., Rey C., 2004. *Modelling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF steel aggregate during large plane strain compression*. International Journal of Plasticity 20, 1763-1788.
- [ERI 03] Eriau P., 2003. *Etude expérimentale et analyse numérique de l'influence des hétérogénéités induites par la déformation à froid, sur la recristallisation primaire d'un acier IF-Ti*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris.
- [ESH 57] Eshelby J.D., 1957. *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems*. Proceeding of the Royal Society of London A 376.
- [EVE 04] Evers L.P., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D., 2004. *Scale dependent crystal plasticity framework with density and grain boundary effects*. International Journal of Solids and Structures 41 5209-5230.
- [FEA 99] Feaugas X., 1999. *On the origin of the tensile flow stress in stainless steel 316L at 300K, back stress and effective stress*. Acta Materialia 47, 3617-3632.
- [FEA 04] Feaugas X., Gaudin C., 2004. *Ratchetting process in stainless steels AISI 316L at 300 K: an experimental investigation*. International Journal of Plasticity 20, 643-662.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

- [FLE 94] Fleck G. M., Muller G.M., Ashby M.F., Hutchinson J.W., 1994. *Strain gradient plasticity; theory and experiment*. Acta Metallurgica et Materialia 42, 475-487.
- [FOR 06] Forest S., 2006. *Milieux continus généralisés et matériaux hétérogènes*. Transvalor presses des Mines de Paris.
- [FRA 82] Franciosi P., Zaoui A., 1982. *Multislip tests on copper crystals : a junction hardening effect*. Acta Metallurgica 30, 2141-2151.
- [FRA 83] Franciosi P., 1983. *Glide mechanisms in B.C.C. crystals: an investigation of the case of iron through multislip and latent hardening tests*. Acta Metallurgica 31, 1331-1342.
- [GOU 03] Gourdet S., Montheillet F., 2003. *A model of continuous dynamic recrystallization*. Acta Materialia 57, 2685-2699.
- [GUR 02] Gurtin M.E., 2002. *A gradient theory of single-crystals viscoplasticity that account for geometrically necessary dislocation*. Journal of Mechanics and Solids 50, 5-32.
- [GUR 03] Gurtin M.E., 2003. *On framework for small- deformation viscoplasticity: free energy, microforces, strain gradients*. International Journal of Plasticity 19, 47-90.
- [GUR 05] Gurtin M.E., Anand L., 2005. *The decomposition  $F=FeFp$ , material symmetry and plastic irrotationality for solids that are isotropic-viscoplastic or amorphous*. International Journal of Plasticity 21, 1686-1719.
- [HAN 04] Hansen N., 2004. *Hall-Petch relation and boundary strengthening*. Scripta Materialia 51, 801-806.
- [HAN 05] Hansen N., 2005. *Boundary strengthening in underformed and deformed polycrystals*. Material Science and Engineering A 409, 39-45.
- [HAU 61] Hauser J.J., Chalmers B. 1961. *The plastic deformation of FCC bicrystals*. Acta Metallurgica 9, 802-816.
- [HIL 65] Hill R., 1965. *Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals*. Journal of Mechanics Physics Solids 13, 89-1001.
- [HIR 72] Hirth J.P. 1972. *The influence of grain boundaries on mechanical properties*. Metallurgical Transactions 3, 3047-3067.
- [HOO 67] Hook R. F., Hirth J. P. 1967. *The deformation behaviour of isoaxial bicrystals of Fe-3%Si*. Acta Metallurgica 15, 535-551.
- [HOC 01] Hoc T., Rey C., Raphanel J. L., 2001. *Experimental and numerical analysis of localization during sequential test for an IF-Ti steel*. Acta Materialia 49, 1835-1846.
- [HUM 04] Humphreys F.J., Hatherly M., 2004. *Recrystallization and related Annealing Phenomena*. Second Edition, Elsevier.
- [HUT92] Hutchinson W.B., 1992. *Nucleation of recrystallisation*. Scripta Metallurgica et Materialia 27, 1471-1575.
- [JON\_84] J.J. Jonas, 1994. *Dynamic recrystallization* . Scientific curiosity or industrial tool Materials Science and Engineering A 184, 155-165.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

- [KAS 95] Kashyap B.P., Tangry K., 1995. *On Hall-Petch relationship and substructural evolution in type 316L stainless steel*. Acta Metallurgica et Materialia 43, 3971-3981.
- [KOC 75] Kocks U. F., Argon A.S and Ashby M.F., 1975. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Progress in Materials Science 19, Pergamon Press Oxford.
- [KOC 76] Kocks U. F., 1976. *Laws for work hardening and low-temperature creep*. Journal of Engineering Materials and Technology 76-85.
- [KOK 02] Kok S., Beaudoin A.J., Tortorelli D.A., 2002. *A polycrystal plasticity model based on the mechanical threshold*. International Journal of Plasticity 18, 715-741.
- [KRO 58] Kröner E., 1958. *Konstitutivtheorie der versetzungen und eigenspannungen*. In *Ergebnisse der angewandten mathematik*, Springer Verlag, Berlin.
- [KUB 78] Kubin L.P., Louchet F. and Vesely D., 1978. *Description of low-temperature interstitial hardening of the BCC lattice from in situ experiments*. Philosophical Magazine A 38, 205-221.
- [KUH 89] Kuhlmann-Wilsdorf D., 1989. *Theory of plastic deformation: properties of low energy dislocation structures*. Material Science Engineering A 113, 1-41.
- [LIB 07] Libert M., 2007. *Etudes expérimentales et numériques de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris. <http://tel.archives-ouvertes.fr>
- [LIB 10] Libert M., Vincent L. Marini B., Rey C., 2010. *Towards a modelling of RPV steel brittle fracture using plasticity computation on polycrystalline aggregates*. Journal of Nuclear Materials 406, 91-96.
- [LIN 97] Lineau C., 1997. *Analyse expérimentale de la déformation plastique d'un polycristal d'acier. Comparaison avec des simulations de modèles polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [LOU 06] F. Louchet, J. Weiss and T. Richeton., 2006. *Hall-Petch Law Revisited in Terms of Collective Dislocation Dynamics*, Physical Review Letters 97, 075504.
- [MA 06] Ma A., Roters F., Raabe D., 2006. *On the consideration of interaction between dislocations and grain boundaries in crystal plasticity finite element modeling. theory, experiments and simulation*. Acta Materialia 54, 2181-2194.
- [MA 07] Ma A., Roters F., Raabe D., 2007. *A dislocation density based on constitutive law in BCC materials in crystal plasticity FEM*. Computation Material Science 39, 91-95.
- [MAN 73] Mandel J., 1973. *Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques*. International Journal Solids Structures 9, 725-740.
- [MEC 81] Mecking H., Kocks U. F., 1981. *Kinetics of flow and strain hardening*. Acta Metallurgica 29, 1865-1875.
- [MEI 01] Messonnier F. T., Busso E. P., O'Dowd N. P. 2001. *Finite element implementation of a generalised non-local rate-dependent crystallographic formulation for finite strains*. International Journal of Plasticity 17, 601-640.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

- [MUG 88] Mughrabi H., 1988. *Dislocation clustering and long range stresses in monotonally and cyclically metals crystals*. *Revue de Physique Appliquée* 23, 367-379.
- [MUG 01] Mughrabi H., 2001. *The effect of geometrically necessary dislocations on the flow stress of deformed crystals containing a heterogeneous dislocation distribution*. *Materials Science and Engineering A319-321*, 139-143.
- [MUG 04] Mughrabi H., 2004. *On the current understanding of strain gradient plasticity*. *Materials Science and Engineering A387-389*, 209-213.
- [MUG 06] Mughrabi H., 2006. *Dual role of deformation-induced geometrically necessary dislocations with respect to lattice plane misorientations and/or long range internal stresses*. *Acta Materialia* 54 3417-3427.
- [MUS 85] Mussot P., Rey C., Zaoui, 1985. *Grain boundary sliding and strain incompatibility*. *Res Mechanica* 14, 69-79.
- [NYE 53] Nye J.F., 1953. *Some geometrical relations in dislocated solids*. *Acta Metallurgica* 1, 153-162.
- [MON 09] Montheillet F., Lurdos O., Dammame G., 2009. *A grain scale approach for modeling steady state discontinuous dynamic recrystallization*. *Acta Materialia* 57, 1602-1612.
- [OSI 07] Osipov, N., 2007. *Génération de microstructures bainitiques*, Thèse de Doctorat, École des Mines de Paris.
- [PEI 82] Peirce D., Asaro R.J., Needleman A., 1982. *An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystal*. *Acta Metallurgica* 30, 1087-1119.
- [PEI 83] Peirce D., Asaro R.J. and Needleman A., 1983. *Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids*. *Acta Metallurgica* 31, 1951-1976.
- [QUE 09] Queyreau S., Monnet G., Devincere B., 2009. *Slip systems interactions in  $\alpha$ -iron determined by dislocation dynamic simulation*. *International Journal of Plasticity* 25, 361-377.
- [RAU 93] Rauch E. 1993. *Etude de l'écroûissage des métaux, aspects microstructuraux et lois de comportement*. HDR, Institut National Polytechnique de Grenoble.
- [REY 80] Rey C., Zaoui A., 1980. *Slip heterogeneities in deformed aluminium bicrystals*. *Acta Metallurgica* 28, 687-697.
- [REY 82] Rey C., Zaoui A., 1982. *Grain boundary effects in deformed bicrystals*. *Acta Metallurgica* 30, 523-535.
- [REY 88] Rey C., 1988. *Effect of grain boundaries on the mechanical behaviour of grains in polycrystals*. *Revue de Physique Appliquée* 23, 491-500.
- [ROT 10] Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto, D.D., Bieler T.R., Raabe D. 2010. *Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite element modelling: theory, experiments, applications*. *Acta Materialia* 58, 1152-1211.
- [ROL 01] Rollet A.D., Raabe D., 2001. *A hybrid model for mesoscopic simulation of recrystallization*. *Computational Materials Science* 21, 69-78.

# Mécanique et Ingénierie des Matériaux

## Les joints de grains dans les matériaux

### HERMES

- [SAC 02] Sachtleber M., Zhao Z., Raabe D., 2002. *Experimental investigation of plastic grain interaction*. Materials Science and Engineering A336, 81-87.
- [SCH 10] Schwartz J., Fandeur O., Rey C., 2010. *Fatigue crack initiation modeling of 316LN steel based on non local plasticity theory*. Procedia Engineering, 1353-1362.
- [SCH 11] Schwartz J., Fandeur O., Rey C., 2011. *Effects of boundary conditions, meshing, local and non local approaches, on the identification processes of material parameters* (to be published).
- [SCH 11] Schwartz J. 2011. *Approche non locale en plasticité cristalline : application à l'étude du comportement mécanique de l'acier AISLN en traction simple et en fatigue olygocyclique*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris.
- [SOL 01] Solas D.E., Tomé C.N., Engler O., Wenk H.R., 2001. *Deformation and recrystallization of hexagonal metals: modelling and experimental results for Zinc*. Acta Materiala 49, 3791-3801.
- [SOL 10] Solas D., Thébault J., Rey C., Baudin T., *Dynamic recrystallization modeling during hot forging of a nickel based superalloy*. Materials Science Forum 638-642 (2010) 2321-2326.
- [STA 02] Stainier L., Cuitiño A.M., Ortiz M., 2002. *A micromechanical model of hardening rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 50, 1511-1545.
- [TAB 97] Tabourot L., Fivel M., Rauch E., 1997. *Generalised constitutive laws for F.C.C. single crystals*. Materials Science: and Engineering A234-235, 639-642.
- [TEO 93] Teodosiu C., Raphanel J.L., Tabourot L., 1993. *Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals*. MECAMAT'91, Teodosiu, Raphanel & Sidoroff (eds) © Balkema, Rotterdam, 153-160.
- [THE 08] Thébault J., Solas D., Rey C., Baudin T., Fandeur O., Clavel M. 2008. *Polycrystalline modelling of UDIMET720 forging*. Superalloys 2008 TMS 985-992.
- [THE 09] Thébault J., 2009. *Etudes expérimentale et numérique des mécanismes de déformation et de recristallisation de l'UDIMET 720 lors du forgeage*. Thèse de Doctorat Ecole Centrale Paris.
- [THO 71] Thompson A.W., 1975. *Yielding in nickel as a function of grain or celle size*. Acta Metallurgica 23 1337-1342.
- [ZEG07a] Zeghadi A., N'guyen F., Forest S., Gourgues A.-F., Bouaziz O. 2007. *Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with constrained surface microstructure – Part1: anisotropic elastic behaviour*. Philosophical Magazine, 87:8, 1401-1424.
- [ZEG07b] Zeghadi A., N'guyen F., Forest S., Gourgues A.-F., Bouaziz O. 2007. *Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with constrained surface microstructure – Part2: crystal plasticity*. Philosophical Magazine, 87:8, 14025-1446.