



HAL
open science

Incompatibilités de déformation : modélisations micromécaniques et applications aux matériaux cristallins fortement anisotropes

Thiebaud Richeton

► **To cite this version:**

Thiebaud Richeton. Incompatibilités de déformation : modélisations micromécaniques et applications aux matériaux cristallins fortement anisotropes. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université de Lorraine, 2017. tel-01559259v2

HAL Id: tel-01559259

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01559259v2>

Submitted on 21 Sep 2018 (v2), last revised 7 Jan 2024 (v3)

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.

MEMOIRE D'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

par :

Thiebaud RICHETON

Incompatibilités de déformation : modélisations micromécaniques et applications aux matériaux cristallins fortement anisotropes

Habilitation soutenue publiquement le 8 mars 2017 à Metz devant le jury composé de :

Véronique DOQUET	LMS, Palaiseau	<i>Rapporteur</i>
Samuel FOREST	Centre des Matériaux, Evry	<i>Rapporteur</i>
MarcFIVEL	SIMaP, Saint-Martin-d'Hères	<i>Rapporteur</i>
Brigitte BACROIX	LSPM, Villetaneuse	<i>Examineur</i>
Mikhail LEBEDKIN	LEM3, Metz	<i>Examineur</i>
Stéphane BERBENNI	LEM3, Metz	<i>Examineur</i>

Table des matières

Notations	3
Introduction	6
1 Théorie continue des dislocations et conditions de continuité aux interfaces matérielles	10
1.1 Théorie	11
1.1.1 Tenseur densité de dislocations	11
1.1.2 Mécanique des Champs de Dislocations	12
1.1.3 Condition de saut	15
1.2 Ecrouissage des composites à matrice métallique	19
1.2.1 Description d'un modèle RPMFDM	19
1.2.2 Implémentation numérique sous <i>Abaqus</i>	21
1.2.3 Résultats de la modélisation	24
1.3 Relations entre maclage et glissement	25
1.3.1 Condition de saut à un joint de macle	25
1.3.2 Résultats pour les structures HC et confrontations à des mesures EBSD sur du Ti	27
1.4 Transport des densités de dislocations sur les systèmes de glissement	29
1.4.1 Description du formalisme par système	29
1.4.2 Implémentation numérique sous <i>freefem++</i>	33
1.4.3 Torsion de monocristaux de glace	34
1.4.4 Compression d'un multicristal de glace	36
1.5 Conclusions	41
2 Champs élastiques aux interfaces planes	43
2.1 Interface plane quelconque	44
2.1.1 Formulation du problème	44
2.1.2 Contraintes d'incompatibilité	46
2.1.3 Module effectif	50
2.1.4 Rotations élastiques	50
2.1.5 Cas isotrope	52

2.1.6	Fluctuation normale de la plasticité	54
2.2	Cas d'une symétrie de maclage	60
2.2.1	Macles de type I et de type II	60
2.2.2	Joint de macle $\Sigma 3(111)$	62
2.3	Glissement au joint de grains	67
2.3.1	Relations de compatibilité	67
2.3.2	Sauts de contrainte	69
2.3.3	Sauts de rotations élastiques	70
2.4	Applications	70
2.4.1	Début de plasticité dans des micropiliers bicristallins .	70
2.4.2	Structures lamellaires de macles	79
2.5	Conclusions	82
3	Modélisations micromécaniques	85
3.1	Plasticité intra-granulaire distribuée en bandes de glissement	86
3.1.1	Contrainte cinématique moyenne	86
3.1.2	Modélisation polycristalline	87
3.2	Gradients intra-granulaires de déformation plastique	90
3.2.1	Principe de la méthode de superposition des bicristaux	90
3.2.2	Application au problème d'Eshelby-Kröner	92
3.2.3	Inclusion avec plasticité non-uniforme	93
3.3	Modèle de sélection des macles secondaires	96
3.3.1	Observations expérimentales dans l'alliage AZ31	97
3.3.2	Modélisation micromécanique à double inclusions	98
3.3.3	Application aux macles de double extensions	101
3.4	Anisotropie et écrouissage du titane- α en conditions de traction	103
3.4.1	Caractérisations expérimentales	104
3.4.2	Modélisation auto-cohérente avec hypothèses spécifiques	107
3.4.3	Résultats des simulations et discussion	111
3.5	Conclusions	117
	Synthèse et perspectives de recherche	119
	Bibliographie	126
	Curriculum Vitae	142
	Résumé / Abstract	157

Notations

Les notations utilisées pour une quantité X sont les suivantes :

- vecteur : $\underline{X} \equiv X_i$
- tenseur d'ordre 2 : $\underline{\underline{X}} \equiv X_{ij}$
- tenseur d'ordre 4 : $\underline{\underline{\underline{X}}} \equiv X_{ijkl}$

La convention d'Einstein sur les opérations algébriques est utilisée.

La partie incompatible d'un tenseur d'ordre 2 $\underline{\underline{X}}$ est notée $\underline{\underline{X}}_{\perp}$.

La partie compatible d'un tenseur d'ordre 2 $\underline{\underline{X}}$ est notée $\underline{\underline{X}}_{\parallel}$.

Le tenseur unité d'ordre 2 est $I_{ij} = \delta_{ij}$ où $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ et $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$.

Le tenseur unité d'ordre 4 est $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{kj})$.

“.” représente le produit simplement contracté entre :

- deux vecteurs \underline{A} et \underline{B} , $\underline{A} \cdot \underline{B} \equiv A_i B_i$,
- deux tenseurs d'ordre 2 $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} \equiv A_{ij} B_{jl}$,
- un tenseur d'ordre 2 $\underline{\underline{A}}$ et un vecteur \underline{B} , $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{B} \equiv A_{ij} B_j$.

“:” représente le produit doublement contracté entre :

- deux tenseurs d'ordre 2 $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{B}} \equiv A_{ij} B_{ij}$,
- un tenseur d'ordre 4 $\underline{\underline{\underline{A}}}$ et un tenseur d'ordre 2 $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{\underline{A}}} : \underline{\underline{B}} \equiv A_{ijkl} B_{kl}$,
- deux tenseurs d'ordre 4 $\underline{\underline{\underline{A}}}$ et $\underline{\underline{\underline{B}}}$, $\underline{\underline{\underline{A}}} : \underline{\underline{\underline{B}}} \equiv A_{ijkl} B_{klmn}$.

“ \otimes ” représente le produit dyadique tel que $\underline{A} \otimes \underline{B} \equiv A_i B_j$.

L'opérateur “permutation” est noté ϵ_{ilm} avec $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$, $\epsilon_{321} = \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = -1$ et $\epsilon_{ilm} = 0$ si deux indices sont identiques.

L'opérateur “gradient” est noté ∇ tel que $(\nabla \underline{X})_{ij} = X_{i,j}$.

L'opérateur “divergence” est noté div tel que $(div \underline{\underline{X}})_i = X_{ij,j}$.

L'opérateur "laplacien" est noté Δ tel que $(\Delta \underline{\tilde{X}})_{ij} = (\text{div}(\nabla \underline{\tilde{X}}))_{ij}$.

L'opérateur "rotationnel" est noté Rot tel que $(Rot \underline{\tilde{X}})_{ij} = \epsilon_{jlm} X_{im,l}$.

Le "produit vectoriel" est noté \times tel que $(\underline{\tilde{X}} \times \underline{\tilde{y}})_{ij} = \epsilon_{hni} X_{jh} y_n$.

La dérivée temporelle (eulérienne) de $\underline{\tilde{A}}$ est notée $\dot{\underline{\tilde{A}}}$.

Le saut d'un champ mécanique ou d'une propriété matériau $\underline{\tilde{g}}$ à une interface entre des cristaux I et II orientée par $\underline{n} \equiv \underline{x_2}$ et dirigé de I vers II est notée

$$[\underline{\tilde{g}}] \text{ tel que } [\underline{\tilde{g}}] = \underline{\tilde{g}}^{II}(x_2 \rightarrow 0^+) - \underline{\tilde{g}}^I(x_2 \rightarrow 0^-).$$

La moyenne d'un champ mécanique ou d'une propriété matériau $\underline{\tilde{g}}$ à travers une interface entre des cristaux I et II orientée par \underline{n} est notée $\langle\langle \underline{\tilde{g}} \rangle\rangle$ tel que

$$\langle\langle \underline{\tilde{g}} \rangle\rangle = \frac{1}{2} \left(\underline{\tilde{g}}^I(x_2 \rightarrow 0^-) + \underline{\tilde{g}}^{II}(x_2 \rightarrow 0^+) \right) \text{ si } \underline{n} \equiv \underline{x_2}.$$

La moyenne d'un champ mécanique ou d'une propriété matériau $\underline{\tilde{g}}$ sur un volume V est notée $\langle \underline{\tilde{g}} \rangle_V$ tel que $\langle \underline{\tilde{g}} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \underline{\tilde{g}} dV$.

Pour des raisons de commodité, la notation contractée de Voigt [Voi28] ($11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2, 33 \rightarrow 3, 23 \rightarrow 4, 31 \rightarrow 5, 12 \rightarrow 6$) est parfois adoptée concernant les opérations portant sur des tenseurs d'ordre 2 et 4. Le produit contracté entre les tenseurs $\underline{\tilde{A}}$ et $\underline{\tilde{B}}$ s'écrit alors $\underline{\tilde{A}} : \underline{\tilde{B}} \equiv A_{pq} B_q$ où p et q prennent des valeurs allant de 1 à 6. Dans ce cas, pour des raisons de cohérence, une convention ingénieure est considérée pour les composantes des déformations, *i.e.*, $\epsilon_4 = 2\epsilon_{23}, \epsilon_5 = 2\epsilon_{31}, \epsilon_6 = 2\epsilon_{12}$. En notation matricielle, la loi de Hooke s'écrit ainsi :

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_1^e \\ \epsilon_2^e \\ \epsilon_3^e \\ \epsilon_4^e \\ \epsilon_5^e \\ \epsilon_6^e \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{bmatrix} \epsilon_1^e \\ \epsilon_2^e \\ \epsilon_3^e \\ \epsilon_4^e \\ \epsilon_5^e \\ \epsilon_6^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{12} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{13} & s_{23} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{14} & s_{24} & s_{34} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{15} & s_{25} & s_{35} & s_{45} & s_{55} & s_{56} \\ s_{16} & s_{26} & s_{36} & s_{46} & s_{56} & s_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (2)$$

où σ_i sont les contraintes de Cauchy, ϵ_i^e les déformations élastiques, c_{ij} les composantes du tenseur des modules élastiques et s_{ij} les composantes du tenseur des complaisances élastiques qui inclut les facteurs multiplicatifs 2

et 4 [Voi28].

On utilise également la notation de Schmid et Boas telle que décrit dans le tableau 1 pour nommer les 12 systèmes de glissement de type $(111) [0\bar{1}1]$ dans les cristaux CFC.

Système	Plan	Direction
A2	$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}1]$
A3	$(\bar{1}11)$	$[101]$
A6	$(\bar{1}11)$	$[110]$
B2	(111)	$[0\bar{1}1]$
B4	(111)	$[\bar{1}01]$
B5	(111)	$[\bar{1}10]$
C1	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[011]$
C3	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[101]$
C5	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[\bar{1}10]$
D1	$(1\bar{1}1)$	$[011]$
D4	$(1\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$
D6	$(1\bar{1}1)$	$[110]$

TABLE 1 – Notations de Schmid et Boas des systèmes de glissement des cristaux CFC.

Introduction

La déformation plastique des matériaux cristallins peut se révéler d'une très grande complexité en raison des interactions à différentes échelles entre défauts de la microstructure (dislocations, joints de grains, joints de phase, grains, macles, précipités) et de l'anisotropie de la déformation à l'échelle du cristal. Il en résulte généralement une grande hétérogénéité des champs mécaniques (contraintes, déformations, rotations) ainsi qu'un comportement dans le temps pas forcément continu et pouvant présenter une certaine intermittence même à l'échelle macroscopique [MVZ⁺01, LL08]. L'amélioration des connaissances concernant l'évaluation de l'hétérogénéité des champs mécaniques en lien avec l'évolution des défauts microstructuraux est un enjeu industriel majeur, notamment vis-à-vis de la conception de nouveaux matériaux aux propriétés optimisées, de la maîtrise des procédés de mise en forme ou de la prédiction de la tenue en service des structures.

Ces dernières décennies, la modélisation de la plasticité a fortement progressé en tenant compte du fait qu'elle résultait de glissements sur des plans cristallins spécifiques [HR72, Asa83, REH⁺10] et en liant l'écroutissage à l'évolution des densités de dislocations [FBZ80, KE90, KM03, KDH08]. Cependant, à l'heure actuelle, ces approches dites de plasticité cristalline, qu'elles soient en champs moyens [MCA87, LT93, MZ99, LTP07, BFB07, MB15] ou en champs complets [BDJC01, BFC01, REH⁺10, LKE12], n'arrivent pas encore à rendre compte de manière totalement satisfaisante de la distribution des contraintes au sein d'un matériau. En effet, certains paramètres matériaux sont mal connus, tels que les cisssions critiques ou les coefficients d'interactions entre systèmes de glissement. De plus, l'organisation spatio-temporelle des défauts est souvent décrite de manière trop grossière, comme par exemple au travers d'une densité homogène de dislocations statistiques par grain et par système. De fait, ces approches se révèlent incapables de rendre compte de l'émergence des effets de taille, comme par exemple celui de la taille des grains sur la limite d'élasticité [Hal51, Pet53], et des lois d'échelles, telles que les distributions en loi puissance des avalanches de dislocations significatives de comportements invariants d'échelle [MVZ⁺01]. En particulier, un point clé concerne la modélisation des mécanismes de déformation à proximité des interfaces matérielles comme les joints de grains, les joints de phase ou les interfaces entre différents constituants dans un com-

posite. Ces interfaces internes jouent en effet un rôle très important dans la déformation des matériaux cristallins. Elles sont souvent le siège de fortes concentrations de contraintes en raison du développement de contraintes d'incompatibilité, nécessaire pour assurer la cohésion de la matière entre deux régions qui, pris séparément, se déformeraient différemment en réponse à une même sollicitation macroscopique. De plus, ces interfaces interagissent fortement avec le mouvement des dislocations, pouvant soit les bloquer, soit les absorber, soit autoriser des transmissions partielles ou totales [Pri06], ce qui engendre à chaque fois des modifications différentes des champs mécaniques. La complexité de ces mécanismes d'interaction commencent seulement à pris partiellement en compte dans les approches de modélisation actuelles [MRR06, CGF⁺12, vBMKG13]. Or la fissuration d'un matériau s'initie très souvent au niveau d'une de ses interfaces internes. Evaluer correctement les concentrations de contraintes qui s'y développent est donc primordial pour une prédiction correcte de la rupture.

Les métaux qui possèdent une structure cristallographique hexagonale, comme les alliages de Ti, de Zr, de Mg ou de Zn, sont particulièrement sensibles aux effets énoncés ci-dessus en raison de leur très forte anisotropie plastique qui est liée à la faible symétrie de la structure hexagonale. Ces métaux se déforment généralement à la fois par glissement et par maclage [CM95], avec des cissions critiques très différentes entre familles de systèmes. L'étude des macles est ainsi utile pour un meilleur contrôle des microstructures et donc des propriétés mécaniques de ces matériaux. De plus, outre ceux de structure hexagonale, d'autres matériaux peuvent présenter des densités importantes de macles comme les aciers TWIP ("twinning-induced plasticity") ou les matériaux nanomaclés obtenus par électrodéposition (Cu par exemple [LSC⁺04]). Les matériaux nanomaclés sont justement très prometteurs du point de vue des propriétés mécaniques puisque qu'ils possèdent une limite élastique très élevée et, en comparaison des matériaux à grains ultra-fins, disposent généralement d'une ductilité et d'une résistance à la rupture bien meilleures [LSC⁺04, BAS08].

Ce sont justement ce type de matériaux fortement anisotropes auxquels je me suis intéressé jusqu'à présent, à savoir les alliages de Ti et de Mg utilisés notamment dans le secteur du transport afin d'alléger les structures, les matériaux présentant des structures lamellaires de macles $\Sigma 3(111)$ comme les aciers TWIP, les composites à matrice métallique mais aussi la glace qui n'est pas un métal mais qui possède une structure cristalline hexagonale. De par ses propriétés (biréfringence, taille de grains très élevée, anisotropie plastique vraiment très prononcée, etc.), la glace peut être considérée comme un matériau modèle pour l'étude des alliages métalliques. Par ailleurs, son étude présente également de nombreux intérêts en géophysique, tel l'écoulement des glaciers ou l'interprétation des signaux climatiques contenu dans les carottes de glace prélevées en Antarctique.

L'intérêt porté à la glace comme matériau modèle date de l'époque de ma thèse effectué au LGGE (Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement) à Grenoble sous la direction de Jérôme Weiss et François Louchet et s'est maintenu grâce à mon implication dans le projet ANR DREAM sur la recristallisation dynamique dont le LGGE est porteur. L'intérêt d'étudier les métaux hexagonaux trouve lui son origine dans la création de l'équipe APLI (Auto-organisation Plasticité Longueurs Internes) qui a réuni des chercheurs du LETAM (Laboratoire d'Etude des Textures et Application aux Matériaux) s'intéressant aux mécanismes de déformation dans les métaux hexagonaux avec des micromécaniciens et physiciens du LPMM (Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux) lors de la naissance du LEM3 (Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux) en 2011. Les premières discussions autour de cette création ont coïncidé avec ma candidature au CNRS. Après mon embauche en octobre 2008, j'ai alors soumis un projet ANR Jeunes Chercheurs et Jeunes Chercheuses (projet PHIRCILE finalement accepté en 2010) centré sur les thématiques de la future équipe APLI.

Comme de nombreuses équipes de recherche de part le monde, mes travaux de recherche s'intéressent donc aux liens microstructure - propriétés mécaniques avec comme objectif d'améliorer la prédiction des champs mécaniques. Cette problématique a été abordée selon différentes approches de modélisation et a permis de développer différents outils en lien avec les membres de l'équipe APLI.

La première approche, décrite dans le Chapitre 1, consiste en des simulation en champs complets de plasticité cristalline résolues par éléments finis qui intègrent le couplage avec le transport des dislocations géométriquement nécessaires selon la théorie initiée par Acharya [Ach01]. Cette théorie permet de rendre compte en partie de l'organisation spatio-temporelle des dislocations et de leurs interactions mutuelles (annihilation notamment).

La deuxième approche (Chapitre 2) consiste en le développement de formules analytiques explicites des contraintes et rotations élastiques aux interfaces planes dans le cadre d'une thermoélasticité anisotrope hétérogène en présence de distorsions plastiques et de glissement au joint. De telles formules donnent des effets de premier ordre et permettent de tester un très grand nombre de configurations du fait de l'immédiateté des résultats.

La troisième approche (Chapitre 3) consiste en des modèles de transition d'échelles susceptibles de traiter des volumes de plusieurs milliers de grains. Deux voies de modélisation micromécanique ont ainsi été proposées afin de lever l'hypothèse restrictive de champs de déformation plastique uniformes dans les grains lors des procédures d'homogénéisation. En introduisant la physique des processus intra-granulaires, ces approches permettent alors de capter des effets de taille des grains. Un modèle micromécanique statique muni d'une topologie à double inclusions a également été développé afin d'ex-

pliquer la sélection des macles secondaires. Enfin, un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique doté d'une formulation affine récemment développée au LEM3 [MB15] a été utilisé afin d'étudier l'anisotropie et l'écroutissement d'échantillons Ti de pureté commerciale en conditions de traction notamment à partir d'une hypothèse de viscosités différentes entre familles de glissement.

Le bilan de mes principales activités de recherche depuis mon entrée au CNRS est décrit au travers des trois chapitres énoncés. Le reste du manuscrit est constitué de mes perspectives de recherche ainsi que d'un curriculum vitae accompagné de la liste exhaustive de mes publications et communications. Dans les chapitres relatifs au bilan de mes activités de recherche, les références notées en gras sont celles dont je suis co-auteur.

Chapitre 1

Théorie continue des dislocations et conditions de continuité aux interfaces matérielles

Différentes approches sont adoptées dans la communauté scientifique pour traiter les problèmes de plasticité à longueurs internes. Parmi les approches continues, il existe notamment les modèles dits à gradients de variable interne où les lois de comportement sont affectées par l'introduction de gradients de variables internes comme la déformation plastique cumulée [Aif84, Aif87], ainsi que les modèles continus généralisés qui possèdent des degrés de liberté supplémentaires indépendants par rapport au milieu classique de Cauchy [FBC00, For09]. A une échelle inférieure, il se développe également des méthodes discrètes comme la dynamique des dislocations qui permet de simuler l'évolution d'un ensemble de dislocations discrètes au cours du temps et de remonter au comportement mécanique [KD97, VFG98]. Ce chapitre concerne une voie que l'on peut qualifier d'intermédiaire : la "Mécanique des Champs de Dislocations", théorie initiée par Acharya [Ach01] et développée au LPMM/LEM3 par Claude Fressengeas [Fre10]. Il s'agit d'une théorie continue dans le milieu classique de Cauchy. Les lois de comportement dépendent toutefois du tenseur densité de dislocations $\tilde{\alpha}$ et donc des gradients de distorsion élastique ou plastique. Le tenseur $\tilde{\alpha}$, initialement introduit par Nye [Nye53], est une mesure de l'incompatibilité du réseau cristallin. Il est à la base de la théorie élastique statique des dislocations continument distribuées, développée par Kröner [Krö58, Krö81] et différents autres chercheurs : Bilby *et al.* [BBS55], Mura [Mur63], Indenbom [Ind66], Willis [Wil68], Kosevich [Kos79] entre autres. Il y a quelques années, Acharya et ses collaborateurs [Ach01, Ach04, AR06, RA06, RPA07, PDA11]

ont repensé la théorie élastique statique des dislocations continument distribuées en intégrant également la déformation permanente résultant du déplacement des dislocations. C’est cette nouvelle théorie qui est appelée “Field Dislocations Mechanics” (FDM) en anglais, ou “Mécanique des Champs de Dislocations” en français [Fre10].

La première partie de ce chapitre correspond un travail effectué à mon entrée au CNRS et inscrit dans mon programme de recherche : l’implémentation d’un modèle FDM dans le logiciel éléments finis commercial *Abaqus*. Ce modèle a été appliqué à l’étude de l’érouissage des composites à matrice métallique. Ce chapitre traite aussi des conditions de continuité sur les champs mécaniques aux interfaces matérielles qui peuvent se déduire de la continuité du vecteur de Burgers. La pertinence de ces conditions a notamment été testée aux joints de macles dans des échantillons de Ti de pureté commerciale. Enfin, la dernière partie de chapitre a été réalisée plus récemment dans le cadre du post-doctorat de Lu Tuan Le intégré au projet ANR DREAM portant sur la recristallisation dynamique des matériaux fortement anisotropes. Un modèle de “Mécanique des Champs de Dislocations” considérant le transport des densités de dislocations sur les systèmes de glissement a été développé afin d’étudier la mise en place des mécanismes de relaxation dans la glace comme la formation de bandes en genou, la migration de joints de grains ou la germination de nouveaux grains.

Ce chapitre rassemble les résultats de 3 articles : [RWF11], [RB12] et [RLC⁺17], auxquels sont associées les contributions des collègues suivants : Lu Tuan Le, Guofeng Wang, Claude Fressengeas, Thomas Chauve, Stéphane Berbenni, Maurine Montagnat, Marc Bernacki, Lei Bao, Jean-Sébastien Lecomte et Christophe Schuman.

1.1 Théorie

1.1.1 Tenseur densité de dislocations

Il existe différentes définitions du tenseur densité de dislocations $\underset{\sim}{\alpha}$ [AB00, CG01, APBB04] dans le cadre du formalisme des transformations finies où le tenseur gradient de transformation $\underset{\sim}{F}$ est la composée d’un tenseur gradient de transformation élastique $\underset{\sim}{F}^e$ et d’un tenseur gradient de transformation plastique $\underset{\sim}{F}^p$:

$$\underset{\sim}{F} = \underset{\sim}{F}^e \cdot \underset{\sim}{F}^p. \quad (1.1)$$

Dans ce manuscrit, la définition donnée par Acharya et Bassani [AB00] est adoptée :

$$\underset{\sim}{\alpha} = -\text{Rot } \underset{\sim}{F}^{e-1}, \quad (1.2)$$

à laquelle est associée la définition du vecteur de Burgers résultant \underline{b} de toutes les dislocations perçant une surface S de vecteur normal \underline{n} et délimitée par un circuit fermé C :

$$\underline{b} = - \oint_C \tilde{F}^{e-1} dx. \quad (1.3)$$

En effet, le théorème de Stokes montre alors que :

$$\underline{b} = \int_S \tilde{\alpha} \cdot \underline{n} dS. \quad (1.4)$$

Le tenseur $\tilde{\alpha}$ s'exprime donc comme un rapport entre une longueur de vecteur de Burgers résultant et une surface, tandis que sa mesure dépend de l'échelle de résolution donnée par C et S . Si la taille des circuits C est si petite que jamais plus d'une seule dislocation ne les traverse, alors chaque dislocation individuelle peut être résolue au travers du tenseur $\tilde{\alpha}$. Si les circuits C sont suffisamment grands pour être traversés par plusieurs dislocations, on distingue :

- les dislocations qui se compensent statistiquement pour donner un vecteur de Burgers résultant nul ; ces dislocations ne créent aucune incompatibilité de réseau à l'échelle de résolution considérée et sont appelées dislocations statistiquement stockées (“SSD” en anglais),
- les dislocations qui créent collectivement une incompatibilité de réseau liée à un vecteur de Burgers résultant non nul ; ces dislocations sont appelées dislocations géométriquement nécessaires (“GND” en anglais [Ash70]), ou dislocations en excès ou encore dislocations polarisées.

Enfin, il est à noter qu'en termes de composantes, le tenseur densité de dislocations peut s'écrire $\alpha_{ij} = b_i t_j \delta(S)$ pour une dislocation individuelle de vecteur de ligne unitaire \underline{t} (convention inverse à celle de Kröner [Krö81] où $\alpha_{ij} = t_i b_j \delta(S)$).

1.1.2 Mécanique des Champs de Dislocations

Les principales équations de la “Mécanique des Champs de Dislocations” sont données ci-dessous dans le cadre du formalisme des petites perturbations (théorie linéaire) et à une échelle de résolution intermédiaire où coexistent à la fois des GND et des SSD. A une telle échelle, Acharya a dénommée sa théorie “Phenomenological Mesoscopic Field Dislocation Mechanics” (PMFDM) [AR06, RA06, RPA07, PDA11].

Si l'on affecte une vitesse \underline{V} aux GND, une analyse cinématique [Ach01, Fre10] montre que leur mouvement génère des vitesses de distorsion plastique représentées par le tenseur $\tilde{\alpha} \times \underline{V}$. Considérons un instant que $\tilde{\alpha}$ et \underline{V} soient donnés à une échelle permettant de résoudre individuellement chaque

dislocation et R un domaine assez grand pour inclure plusieurs dislocations. Il est alors important de noter que :

$$\langle \underline{\alpha} \times \underline{V} \rangle_R \neq \langle \underline{\alpha} \rangle_R \times \langle \underline{V} \rangle_R. \quad (1.5)$$

En effet, par exemple dans le cas d'une expansion régulière de boucle de dislocation à l'intérieur de R , $\langle \underline{\alpha} \rangle_R = \underline{0}$ mais $\langle \underline{\alpha} \times \underline{V} \rangle_R \neq \underline{0}$. Par conséquent, le tenseur des vitesses de distorsions plastiques lié aux mouvements des dislocations statistiquement distribuées à l'échelle de résolution R est défini comme :

$$L_{SSD}^p = \langle \underline{\alpha} \times \underline{V} \rangle_R - \langle \underline{\alpha} \rangle_R \times \langle \underline{V} \rangle_R. \quad (1.6)$$

Dans la suite, la notation $\langle \rangle_R$ est abandonnée, les valeurs étant considérées par défaut comme des valeurs moyennes à l'échelle de résolution considérée. A une échelle où il peut exister à la fois des GND et des SSD, le tenseur des vitesses de distorsions plastiques s'écrit donc comme :

$$\dot{\underline{\beta}}^p = \underline{\alpha} \times \underline{V} + L_{SSD}^p. \quad (1.7)$$

Par ailleurs, la matière est supposée continue sur tout le volume V considéré. Autrement dit, la distorsion totale dérive d'un gradient de déplacement : $\underline{\beta} = \nabla \underline{u}$, et vérifie donc l'équation de compatibilité :

$$Rot \underline{\beta} = \underline{0}. \quad (1.8)$$

De plus, sous l'hypothèse des petites déformations, $\underline{\beta}$ peut se décomposer additivement en parties élastique $\underline{\beta}^e$ et plastique $\underline{\beta}^p$:

$$\underline{\beta} = \underline{\beta}^e + \underline{\beta}^p. \quad (1.9)$$

En raison de leur incompatibilité, les tenseurs de distorsion élastique et plastique ne sont pas des gradients et donc leur rotationnel est non nul. D'après la décomposition orthogonale de Stokes-Helmholtz (pour plus de détails, voir [Ach01, Ach04, AR06, Fre10]), il est possible de les décomposer entre parties compatibles ($\underline{\beta}_{\parallel}^e, \underline{\beta}_{\parallel}^p$) et parties incompatibles ($\underline{\beta}_{\perp}^e, \underline{\beta}_{\perp}^p$) :

$$\underline{\beta}_{\parallel}^e = \underline{\beta}_{\parallel}^e + \underline{\beta}_{\perp}^e, \quad (1.10)$$

$$\underline{\beta}_{\parallel}^p = \underline{\beta}_{\parallel}^p + \underline{\beta}_{\perp}^p, \quad (1.11)$$

tel que :

$$Rot \underset{\sim}{\beta}_{\parallel}^e = Rot \underset{\sim}{\beta}_{\parallel}^p = \underset{\sim}{0}, \quad (1.12)$$

et :

$$div \underset{\sim}{\beta}_{\perp}^e = div \underset{\sim}{\beta}_{\perp}^p = \underset{\sim}{0}. \quad (1.13)$$

Compte tenu des équations 1.8 et 1.9, il est à noter que l'on a :

$$\underset{\sim}{\beta}_{\perp}^e = -\underset{\sim}{\beta}_{\perp}^p. \quad (1.14)$$

Afin d'assurer l'unicité des décompositions 1.10 et 1.11, la condition suivante est imposée à la frontière ∂V de V :

$$\underset{\sim}{\beta}_{\perp}^e \cdot \underline{n} = \underset{\sim}{\beta}_{\perp}^p \cdot \underline{n} = \underset{\sim}{0}, \quad (1.15)$$

où \underline{n} est la normale unitaire de ∂V . En conséquence de ces décompositions, le tenseur $\underset{\sim}{\alpha}$ peut s'écrire uniquement à partir du rotationnel des parties incompatibles :

$$\underset{\sim}{\alpha} = Rot \underset{\sim}{\beta}_{\perp}^e = -Rot \underset{\sim}{\beta}_{\perp}^p. \quad (1.16)$$

Ces densités de GND sont actualisées au travers de la résolution d'une équation de transport, initialement formulée par Mura [Mur63], qui s'écrit ici comme :

$$\dot{\underset{\sim}{\alpha}} = -Rot \left(\underset{\sim}{\alpha} \times \underline{V} + L_{SSD}^p \right). \quad (1.17)$$

Enfin, le tenseur symétrique des contraintes de Cauchy $\underset{\sim}{\sigma}$ est obtenu à partir de la loi de Hooke (eq. 1) qui, compte tenu des symétries du tenseur des modules élastiques $\underset{\sim}{C}$, peut s'écrire directement :

$$\underset{\sim}{\sigma} = \underset{\sim}{C} : \underset{\sim}{\beta}^e. \quad (1.18)$$

$\underset{\sim}{\sigma}$ satisfait l'équilibre statique sans force de volume :

$$div \underset{\sim}{\sigma} = 0, \quad (1.19)$$

auquel s'ajoutent des conditions aux limites standards en traction et/ou en déplacement sur ∂V .

Afin de déterminer les contraintes à l'aide des équations 1.18 et 1.19, Acharya et ses collaborateurs [AR06, RA06, RPA07, PDA11] proposent de calculer la distorsion élastique comme :

$$\beta_{\sim}^e = \nabla \underline{u} - \nabla \underline{z} + \beta_{\sim}^e, \quad (1.20)$$

où le vecteur continu \underline{z} est tel que $\nabla \underline{z} = \beta_{\sim}^p$. L'incrément $\nabla \underline{z}$ est déterminé par résolution du système ci-dessous (*cf.* eqs. 1.7 et 1.13) :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \nabla \underline{z} = \operatorname{div} \left(\underline{\alpha} \times \underline{V} + L_{SSD}^p \right) \\ \nabla \underline{z} \cdot \underline{n} = \left(\underline{\alpha} \times \underline{V} + L_{SSD}^p \right) \cdot \underline{n} \text{ sur } \partial V. \end{cases} \quad (1.21)$$

β_{\sim}^e est donnée par les équations 1.13, 1.15 et 1.16 qui se ramènent à la résolution d'une équation de Poisson :

$$\begin{cases} \Delta \beta_{\sim}^e = -\operatorname{Rot} \underline{\alpha} \\ \beta_{\sim}^e \cdot \underline{n} = \underline{0} \text{ sur } \partial V. \end{cases} \quad (1.22)$$

Une autre manière de faire est d'écrire :

$$\beta_{\sim}^e = \nabla \underline{u} - \beta_{\sim}^p, \quad (1.23)$$

où β_{\sim}^p est résolue incrémentalement à partir de l'équation 1.7. Ce type de modèle est appelé "Reduced Phenomenological Mesoscopic Field Dislocation Mechanics" (RPMFDM) [RPA07]. Dans ce cas, si l'on considère une densité initialement nulle de GND ($\underline{\alpha} = \underline{0}$), la décomposition orthogonale de Stokes-Helmholtz des distorsions élastique et plastique en parties compatible et incompatible n'est pas nécessaire pour déterminer les champs de contrainte et de déplacement.

1.1.3 Condition de saut

A une interface parfaite de discontinuité matérielle (joint de grains, joint de macle, etc.), fixe et plane de normale \underline{n} , on peut montrer que l'équation d'incompatibilité (eq. 1.2) devient [Ach07, BFG⁺09, MBA10, Fre10] :

$$\alpha_{\sim}^S = \left[F_{\sim}^{e-1} \right] \times \underline{n}, \quad (1.24)$$

où α_{\sim}^S est le tenseur densité de dislocations surfaciques dont les composantes s'expriment comme un rapport adimensionnel entre un module de vecteur de Burgers résultant et une longueur. Les dislocations de surface sont confinées à l'interface ($\alpha_{\sim}^S \cdot \underline{n} = \underline{0}$) et forment des ensembles de deux dimensions. Compte tenu de la compatibilité de la distorsion totale

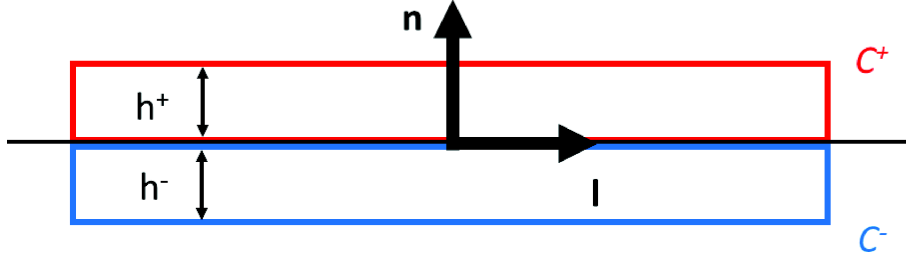


FIGURE 1.1 – Schéma de deux circuits de Burgers C^+ et C^- , d'épaisseur respective h^+ et h^- , qui sont adossés à une interface plane de normale \underline{n} le long de \underline{l} (\underline{l} étant un vecteur arbitraire dans le plan de l'interface).

(eq. 1.8), l'équation 1.24 peut également s'écrire dans le cadre des petites déformations :

$$\alpha_{\sim}^S = \left[\beta^P \right]_{\sim} \times \underline{n}. \quad (1.25)$$

Cette équation exprime le fait que n'importe quel saut du tenseur de distorsion plastique à l'interface de deux cristaux peut être accommodé par une distribution appropriée et singulière de dislocations de surface. Or d'après l'équation 1.3, la continuité du vecteur de Burgers résultant \underline{b} des dislocations de volume à travers l'interface peut s'écrire :

$$\oint_{C^+} F_{\sim}^{e-1} dx = \oint_{C^-} F_{\sim}^{e-1} dx, \quad (1.26)$$

où C^+ et C^- sont deux circuits de Burgers adossés à l'interface comme décrit sur la figure 1.1. Si l'on fait tendre les épaisseurs h^+ et h^- de ces circuits vers zéro, on obtient alors la condition $\left[F_{\sim}^{e-1} \right] \cdot \underline{l} = \underline{0}$ où \underline{l} est un vecteur appartenant à l'interface (figure 1.1), c'est à dire $\alpha_{\sim}^S = \underline{0}$ d'après l'équation 1.24, ou encore en petites déformations [MBA10, Fre10] [RWF11] :

$$\left[\beta^P \right]_{\sim} \times \underline{n} = \underline{0}. \quad (1.27)$$

Physiquement, la continuité du vecteur de Burgers devrait toujours être assurée. Cependant, la satisfaction de cette continuité dépend de l'échelle de résolution considérée car les joints de grains sont en réalité d'épaisseur non nulle et ceux-ci peuvent absorber des dislocations ou stocker des vecteurs de Burgers résiduels au passage d'une dislocation d'un grain à un autre. En revanche, la quantité de dislocations qu'un joint de grains peut stocker n'est pas infinie contrairement à ce qui peut arriver au cours des simulations de plasticité cristalline. En particulier, dans le cas d'un joint de grains complètement impénétrable, la condition de saut 1.27 devient :

$$\beta_{\sim}^{p+} \times \underline{n} = \beta_{\sim}^{p-} \times \underline{n} = \underline{0}. \quad (1.28)$$

Si l'on veut capter l'échelle de longueur associée à l'empilement des dislocations sur un joint impénétrable, il est nécessaire de respecter la condition 1.28 dans une certaine mesure. En effet, autrement, tout l'empilement de dislocations sera concentré dans l'interface et sera représenté par un vecteur de Burgers résultant égal à la somme des vecteurs de Burgers des dislocations de l'empilement. Numériquement, le respect de la condition saut 1.28 implique cependant que chaque variable représente une moyenne sur un volume suffisamment petit (au moins inférieur à la longueur d'un empilement).

Interface entre deux cristaux se déformant par glissement simple

Supposons maintenant que l'interface plane de normale \underline{n} sépare deux cristaux se déformant par glissement simple, la condition de saut 1.27 peut alors s'écrire sous sa forme dynamique comme :

$$(\dot{\gamma}^+ \underline{m}^+ \otimes \underline{n}^+ - \dot{\gamma}^- \underline{m}^- \otimes \underline{n}^-) \times \underline{n} = \underline{0}, \quad (1.29)$$

où $\dot{\gamma}^+$ et $\dot{\gamma}^-$ sont les taux de glissement de part et d'autre de l'interface, \underline{m}^+ et \underline{m}^- les vecteurs unitaires des directions de glissement et \underline{n}^+ et \underline{n}^- les vecteurs unitaires des normales aux plans de glissement. Si l'on se place dans un repère orthonormé $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ où $\underline{n} \equiv \underline{e}_3$, l'équation 1.29 conduit aux relations suivantes [RB12] :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^+ m_1^+ n_1^+ - \dot{\gamma}^- m_1^- n_1^- &= 0, \\ \dot{\gamma}^+ m_2^+ n_1^+ - \dot{\gamma}^- m_2^- n_1^- &= 0, \\ \dot{\gamma}^+ m_3^+ n_1^+ - \dot{\gamma}^- m_3^- n_1^- &= 0, \\ \dot{\gamma}^+ m_1^+ n_2^+ - \dot{\gamma}^- m_1^- n_2^- &= 0, \\ \dot{\gamma}^+ m_2^+ n_2^+ - \dot{\gamma}^- m_2^- n_2^- &= 0, \\ \dot{\gamma}^+ m_3^+ n_2^+ - \dot{\gamma}^- m_3^- n_2^- &= 0. \end{aligned} \quad (1.30)$$

De manière évidente, les relations 1.30 sont satisfaites pour différents cas particuliers :

- (i) $\dot{\gamma}^+ = \dot{\gamma}^- = 0$,
- (ii) $\dot{\gamma}^+ = 0$ et $\underline{n}^- = \underline{n}$ ou $\dot{\gamma}^- = 0$ et $\underline{n}^+ = \underline{n}$,
- (iii) $\underline{n}^+ = \underline{n}^- = \underline{n}$,
- (iv) $\underline{m}^+ = \underline{m}^-$, $\underline{n}^+ = \underline{n}^-$ et $\dot{\gamma}^+ = \dot{\gamma}^-$.

Dans le cas plus général où $\dot{\gamma}^+ \neq 0$ et $\underline{n}^+ \neq \underline{n}$, avec par exemple $n_1^+ \neq 0$, les trois premières relations de 1.30 permettent d'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{m_i^+}{m_i^-} &= \frac{\dot{\gamma}^- n_1^-}{\dot{\gamma}^+ n_1^+} \text{ si } m_i^- \neq 0, \\ m_i^+ &= m_i^- = 0 \text{ sinon.} \end{aligned} \quad (1.31)$$

Comme \underline{m}^+ et \underline{m}^- sont des vecteurs unitaires, on a $\underline{m}^+ = \underline{m}^-$ ou bien $\underline{m}^+ = -\underline{m}^-$, c'est à dire que les deux systèmes possèdent la même direction de glissement. Sans perte de généralité, on peut donc considérer que $\underline{m}^+ = \underline{m}^-$. La condition de saut 1.29 impose alors **[RB12]** :

$$\underline{m}^+ = \underline{m}^- = \underline{m} \text{ et } \dot{\gamma}^+ (\underline{n}^+ \times \underline{n}) = \dot{\gamma}^- (\underline{n}^- \times \underline{n}). \quad (1.32)$$

Cette dernière relation indique que \underline{n}^+ , \underline{n}^- et \underline{n} appartiennent à un même plan et donc que la direction de glissement commune \underline{m} est dans le plan de l'interface. Si les taux de glissement sont égaux, la seconde condition de 1.32 aboutit à deux types de configurations possibles pour les plans de glissement :

- la configuration "identique" déjà incluse dans le cas particulier (iv),
- la configuration "miroir" où les plans de glissement sont en position de symétrie orthogonale par rapport au plan de l'interface, comme dans le cas d'un joint de macles [CM95] ou plus généralement pour des joints de flexion symétrique ("symmetric tilt grain boundary").

Un écart à ces configurations idéales est possible en fonction du rapport des taux de glissement (eq. 1.32). Finalement, le tableau 1.1 récapitule les différentes possibilités de satisfaire la condition de saut 1.27 pour le cas d'un glissement simple de part et d'autre d'une interface plane. Dans le tableau 1.1, les cas D et E permettent la transmission du glissement à l'interface. Il est intéressant alors de comparer ces cas avec les critères géométriques de transfert établis expérimentalement. Il existe deux principaux facteurs qui sont supposés être corrélés avec la probabilité de transmission du glissement à une interface [BEZ⁺14] : les paramètres M [CWZS⁺92, SWC88, LRB89] et m' [LM95] :

$$M = (\underline{L}^+ \cdot \underline{L}^-) (\underline{m}^+ \cdot \underline{m}^-), \quad (1.33)$$

$$m' = (\underline{n}^+ \cdot \underline{n}^-) (\underline{m}^+ \cdot \underline{m}^-), \quad (1.34)$$

où \underline{L}^+ et \underline{L}^- sont les vecteurs unitaires des lignes d'intersection des plans de glissement incident et sortant avec le plan de l'interface. Si bien entendu

$M = m' = 1$ pour le cas D, le cas E donne toujours $M = 1$ mais pas nécessairement $m' = 1$. Par exemple, la configuration “miroir” du cas E a déjà été observée lors du glissement dévié des dislocations vis parfaites aux joints de macle $\Sigma 3(111)$ [ZWL⁺11, ZLW12, LAI⁺13, IKMD14, HS14]. Dans ce cas, $M = 1$ mais $m' = 0.78$. Inversement, $m' = 1$ implique la satisfaction de la condition de saut 1.27, ce qui n’est pas forcément vrai pour $M = 1$.

	A	$\dot{\gamma}^+ = \dot{\gamma}^- = 0$	Glissement bloqué de part et d’autre de l’interface
Pas de transmission	B	$\dot{\gamma}^+ = 0$ et $\underline{n}^- = \underline{n}$ ou $\dot{\gamma}^- = 0$ et $\underline{n}^+ = \underline{n}$	Glissement bloqué d’un côté et parallèle à l’interface de l’autre
	C	$\underline{n}^+ = \underline{n}^- = \underline{n}$	Glissement parallèle des deux côtés
	D	$\underline{m}^+ = \underline{m}^-, \underline{n}^+ = \underline{n}^-$ $\dot{\gamma}^+ = \dot{\gamma}^-$	Coincidence des deux systèmes de glissement
Transmission	E	$\underline{m}^+ = \underline{m}^-$ et $\dot{\gamma}^+ (\underline{n}^+ \times \underline{n}) = \dot{\gamma}^- (\underline{n}^- \times \underline{n})$	Direction commune de glissement dans l’interface et plans de glissement proches d’une configuration “identique” ou “miroir”

TABLE 1.1 – Différentes possibilités de satisfaire la condition de saut 1.27 pour le cas d’un glissement simple de part et d’autre d’une interface plane.

1.2 Ecrouissage des composites à matrice métallique

1.2.1 Description d’un modèle RPMFDM

Afin d’étudier l’effet des conditions aux interfaces sur l’écrouissage des composites à matrice métallique, un modèle RPMFDM a été implémenté en utilisant les ressources du logiciel éléments finis *Abaqus/Standard*. L’architecture de ce modèle est basée sur celle des modèles standards de plasticité cristalline [HR72, Asa83, PAN83, Hua91] et utilise le formalisme des petites déformations. Ainsi au niveau des lois constitutives, la vitesse moyenne des SSD mobiles sur leur système de glissement (s) est supposée suivre une relation en loi puissance :

$$v^{(s)} = v_0^{(s)} \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_c^{(s)}} \right|^{n^{(s)}} \text{sgn}(\tau^{(s)}), \quad (1.35)$$

où $v_0^{(s)}$ est une vitesse de référence, $n^{(s)}$ l’inverse de la sensibilité à la vitesse, $\tau^{(s)}$ la cission résolue ($\tau^{(s)} = R_{ij}^{(s)} \sigma_{ij}$, avec $\tilde{R}^{(s)}$ le tenseur symétrique d’orientation de Schmid) et $\text{sgn}(\tau^{(s)})$ le signe de $\tau^{(s)}$. $\tau_c^{(s)}$ représente une

cission critique due aux interactions avec des obstacles à courte distance. Elle s'écrit comme la somme d'une contrainte de friction de réseau $\tau_0^{(s)}$ et une loi de Taylor étendue prenant en compte les interactions courte-distance entre dislocations de différents systèmes [FBZ80] :

$$\tau_c^{(s)} = \tau_0^{(s)} + \mu b^{(s)} \sqrt{\sum_l a^{(sl)} \rho_f^{(l)}}. \quad (1.36)$$

$a^{(sl)}$ est un coefficient qui est relié à la force des interactions entre les dislocations des systèmes (s) et (l). μ est le module de cisaillement isotrope. $b^{(s)}$ est la magnitude du vecteur de Burgers du système (s). $\rho_f^{(l)}$ représente les densités de SSD immobiles sur le système (l). Concernant le vecteur vitesse \underline{V} des GND, sa direction est imposée afin d'assurer une dissipation positive (seconde loi de la thermodynamique) ainsi qu'une incompressibilité plastique (interdisant par conséquent la montée des dislocations) [AR06]. En revanche, un choix original a été fait concernant son amplitude V afin de tenir compte, dans une certaine mesure, du caractère cristallographique de la plasticité. V a été calculée comme la moyenne des vitesses des SSD sur les différents systèmes pondérée par l'activité des GND sur chaque système :

$$V = \frac{\sum_s |\dot{\xi}^{(s)}| |v^{(s)}|}{\sum_s |\dot{\xi}^{(s)}|}. \quad (1.37)$$

Dans la relation 1.37, $\dot{\xi}^{(s)}$ représente la contribution des GND au taux de glissement $\dot{\gamma}^{(s)}$ du système (s) tel que :

$$\underline{\alpha} \times \underline{V} = \sum_s \dot{\xi}^{(s)} \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)}, \quad (1.38)$$

et :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \rho_m^{(s)} b^{(s)} v^{(s)} + \dot{\xi}^{(s)}, \quad (1.39)$$

avec $\rho_m^{(s)}$ la densité de SSD mobiles. Ce formalisme permet d'écrire, de manière classique, $\dot{\beta}^p$ en fonction des taux de glissement des différents systèmes :

$$\dot{\beta}^p = \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)}. \quad (1.40)$$

Pour une structure cubique à faces centrées (CFC) avec 12 systèmes de glissement (111)[$\bar{1}01$], les valeurs des $\dot{\xi}^{(s)}$ sont déterminées à partir de l'équation 1.38 qui est réécrite sous la forme d'un système linéaire de 8 équations à 8 inconnues [RWF11]. En effet, du fait de l'incompressibilité plastique, les équations donnant les composantes $(\underline{\alpha} \times \underline{V})_{11}$, $(\underline{\alpha} \times \underline{V})_{22}$ et $(\underline{\alpha} \times \underline{V})_{33}$ sont liées par une relation linéaire. De plus, pour chacun des 4

plans (111), il y a 3 directions de glissement et chaque direction est une combinaison linéaire des 2 autres. Pour chacun des 4 plans (111), les valeurs des $\dot{\xi}^{(s)}$ sont ainsi considérées comme nulles sur le système avec le plus faible facteur de Schmid local. Au final, l'équation 1.38 devient ainsi un système linéaire de rang 8 qui permet d'obtenir de manière unique les valeurs des $\dot{\xi}^{(s)}$ [RWF11]. Par ailleurs, les lois d'évolution suivantes sont adoptées pour $\dot{\rho}_m^{(s)}$ et $\dot{\rho}_f^{(s)}$, en adaptant les travaux originaux de Kubin et Estrin [KE90], Kral et Lukac [KL97] et Kubin *et al.* [KDH08] :

$$\frac{\dot{\rho}_m^{(s)}}{\rho_{m0}} = \left(K_m - K_f + \frac{C_1}{\sqrt{\rho_{m0}}} \sum_j \sqrt{\rho_f^{(j)}} - \frac{C_2}{\rho_{m0}} \sum_j \sqrt{\rho_m^{(s)} \rho_f^{(j)}} \right) |\dot{\gamma}^{(s)}|, \quad (1.41)$$

$$\frac{\dot{\rho}_f^{(s)}}{\rho_{m0}} = \left(K_f + \frac{C_0}{\sqrt{\rho_{m0}}} \sqrt{\frac{|\alpha \cdot \tilde{n}^{(s)}|}{b^{(s)}}} + \frac{C_2}{\rho_{m0}} \sum_j \sqrt{\rho_m^{(s)} \rho_f^{(j)}} - \frac{C_3}{\rho_{m0}} \rho_f^{(s)} \right) |\dot{\gamma}^{(s)}|. \quad (1.42)$$

K_m est relié à la multiplication des dislocations mobiles sur des obstacles initialement présent dans le cristal et K_f à l'immobilisation des dislocations sur ces obstacles. C_1 reflète la contribution des dislocations immobiles comme sources pour la nucléation des dislocations mobiles. C_2 rend compte de l'immobilisation des dislocations mobiles par interaction avec des dislocations immobiles. Le terme C_0 est introduit afin de prendre en consideration la contribution des GND à l'écroutissage latent, $|\alpha \cdot \tilde{n}^{(s)}|/b^{(s)}$ étant une mesure de la densité de GND perçant le plan (s) (*cf.* eq. 1.3). Ces lois sont relativement complexes mais permettent de reproduire assez bien les effets d'orientations cristallines sur l'écroutissage des monocristaux d'Al [HFB60] [RWF11] (figure 1.2) et de Cu [Tak54].

1.2.2 Implémentation numérique sous *Abaqus*

L'équation de transport 1.17 a été résolue grâce à la formulation explicite Galerkin/Moindres carrés de Varadhan *et al.* [VBF06] qui est implémentée pour un maillage régulier au sein d'une UMAT de plasticité cristalline [Hua91] qui fonctionne avec le logiciel éléments finis (EF) commercial *Abaqus*. Ce schéma de résolution implique l'utilisation de trois paramètres numériques : χ qui donne le poids des termes Galerkin par rapport aux termes moindres carrés, η un coefficient de diffusion isotrope artificielle (voir plus loin eqs. 1.59 et 1.60) et c le nombre de Courant. La condition de Courant pour la stabilité numérique établit une valeur maximale pour l'incrément de temps Δt :

$$\Delta t \leq c \frac{\Delta h}{v_{max}}, \quad (1.43)$$

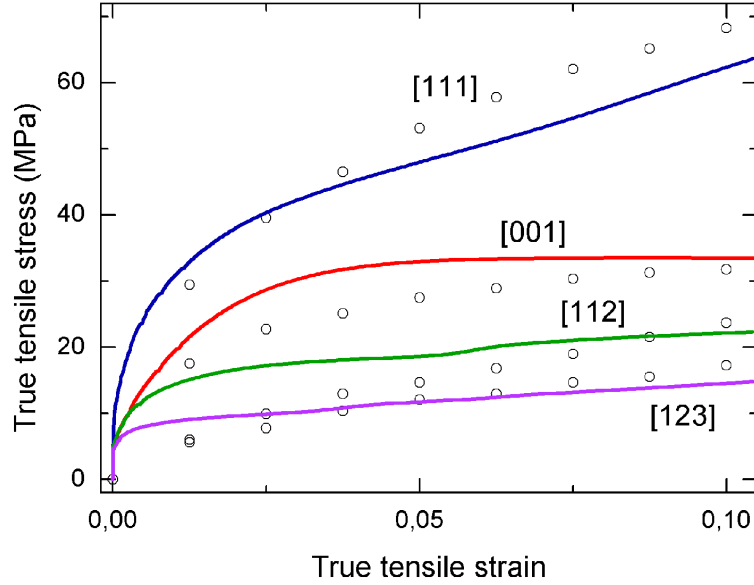


FIGURE 1.2 – Comparaisons des courbes contrainte-déformation de monocristaux d’Al de différentes orientations obtenues par Hosford *et al.* à 273 K [HFB60] (cercles ouverts) avec les résultats des simulations éléments finis du Modèle 1a (traits pleins).

où v^{max} est la vitesse maximale des GND et Δh la taille du maillage. Les valeurs de χ , η et c sont données dans le tableau 1.2.

χ	η	c
1	0.005	0.15

TABLE 1.2 – Paramètres utilisés dans la résolution de l’équation de transport.

Des simulations d’essais de cisaillement simple par éléments finis ont été réalisées sur des composites Al/SiC à partir de 3 modèles différents :

- Modèle 1a qui est un modèle de plasticité cristalline conventionnelle ($\alpha = 0$). Aucune condition spécifique n’a été implémentée aux interfaces.
- Modèle 1b qui est similaire au Modèle 1a sauf que la condition de saut 1.27 a été implémentée aux interfaces Al/SiC.
- Modèle 2 qui est un modèle RPMFDM avec implémentation de la condition de saut 1.27 aux interfaces Al/SiC.

Le comportement des inclusions de SiC a été considéré purement élastique tandis que la matrice d’Al a été prise monocristalline et orientée avec les directions cristallographiques $[111]$ et $[10\bar{1}]$ suivant les directions \underline{e}_3 et \underline{e}_1 du

repère global. Des conditions périodiques ont été imposées sur les surfaces latérales alors qu'une vitesse de déplacement non nulle suivant \underline{e}_1 a été imposée sur les faces supérieures et inférieures de normale \underline{e}_3 . Avec cette configuration, seul le système de glissement $B4$ (*cf.* Notations) est actif au début de la déformation plastique. Des propriétés élastiques isotropes ont été considérées pour la matrice d'Al ($E = 69$ GPa et $\nu = 0.33$) et les particules de SiC ($E = 420$ GPa et $\nu = 0.17$).

L'implémentation de la condition de saut 1.27 aux interfaces Al/SiC s'est faite de manière simplifiée en considérant la spécificité d'une interface impénétrable de type élastique/plastique et en imposant à la fois $(\underline{\alpha} \times \underline{V}) \times \underline{n} = \underline{0}$ et $L_{SSD}^p \times \underline{n} = \underline{0}$ pour le Modèle 2 et juste $L_{SSD}^p \times \underline{n} = \underline{0}$ pour le Modèle 1b. Si l'on suppose que la normale à l'interface est de normale \underline{e}_3 , que la vitesse des dislocations est non nulle, et qu'il y a incompressibilité plastique, il est possible de montrer que la condition $(\underline{\alpha} \times \underline{V}) \times \underline{n} = \underline{0}$ impose la forme suivante au tenseur $\underline{\alpha}$ dans la matrice plastique à proximité immédiate de l'interface :

$$\underline{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.44)$$

ainsi que la condition $V_3 = 0$ [RWF11]. Les seules dislocations autorisées à proximité de l'interface ont donc leurs ligne et vecteur de Burgers dans le plan de l'interface et ne peuvent se déplacer que parallèlement à lui. De manière analogue, la condition $L_{SSD}^p \times \underline{n} = \underline{0}$ peut être satisfaite en n'autorisant que du glissement parallèle à l'interface. Cela peut être réalisé en considérant que le seul plan de glissement disponible à proximité immédiate de l'interface est le plan de l'interface lui-même et en y projetant les directions de glissement.

Les valeurs des paramètres matériau sont données dans le tableau 1.3. Les coefficients d'interaction $a^{(ij)}$ ont été estimés par Kubin et ses collaborateurs [MDK⁺03, HDK04, DHK05, DKH06, KDH08] par dynamique des dislocations discrètes dans des cristaux CFC. Ici, on s'est contenté de considérer deux types d'interaction : les interactions colinéaires (a_{coli}) qui sont reportées être les plus fortes et qui correspondent aux réactions entre dislocations de vecteurs de Burgers parallèles mais glissant dans des plans différents, et les autres types d'interaction $a_{\neq coli}$ pour lesquelles les différences sont moins significatives [MDK⁺03, HDK04, DHK05, DKH06, KDH08]. Ces coefficients ainsi que les constantes adimensionnelles K_m , K_f , C_1 , C_2 et C_3 ont été déterminés par ajustement des courbes contrainte-déformation de monocristaux d'Al de différentes orientations cristallines obtenues par Hosford *et al.* à 273 K [HFB60] (figure 1.2). Les autres paramètres matériau ρ_{m_0} , ρ_{f_0} , v_0 et

C_0 ont été choisis de telle sorte que la densité de GND autour des particules soit du même ordre de grandeur que la densité de dislocations statistiques mobiles, si bien que l'influence des GND sur l'érouissage des composites est non négligeable [RWF11].

n	v_0	ρ_{m_0}	ρ_{f_0}	a_{coli}	$a_{\neq coli}$
20	$5.12 \cdot 10^{-17} \text{ ms}^{-1}$	$2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-2}$	$2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-2}$	0.12	1.265
K_m	K_f	C_0	C_1	C_2	C_3
$2.8 \cdot 10^4$	$1.4 \cdot 10^4$	$2.2 \cdot 10^4$	$2.2 \cdot 10^4$	80	500

TABLE 1.3 – Paramètres matériau utilisés dans les simulations.

1.2.3 Résultats de la modélisation

Il a été montré que l'implémentation de la condition de saut 1.27 et la prise en compte du transport des GND accentuait l'effet de morphologie et conduisait à un effet Bauschinger plus important (figures 1.3 et 1.4).

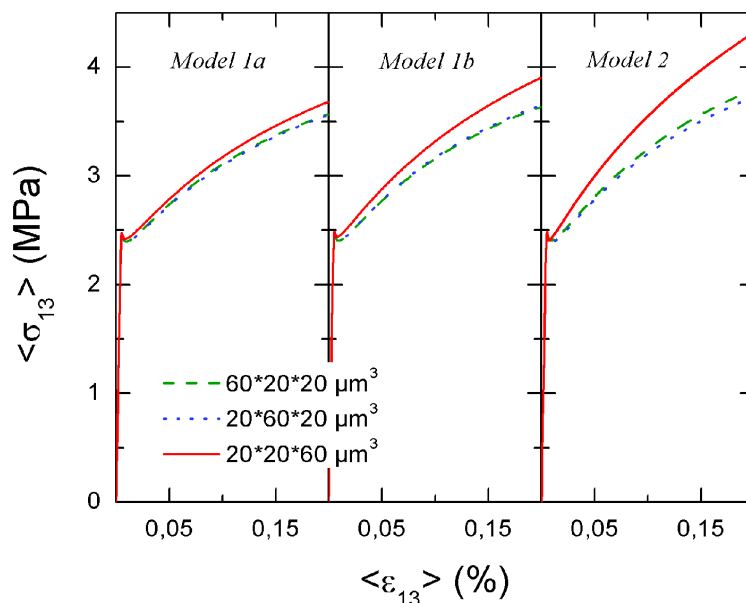


FIGURE 1.3 – Courbes contrainte-déformation obtenues par les 3 modèles pour différentes morphologies de particules de fraction volumique 2.4%.

En particulier, le modèle RPMFDM permet d'interpréter l'effet Bauschinger en termes de microstructure polarisée de dislocations formée lors du chargement direct, son annihilation puis son inversion lors du chargement inverse ou de manière équivalente comme une conséquence du développement des contraintes internes lors du chargement direct, leur relaxation puis leur

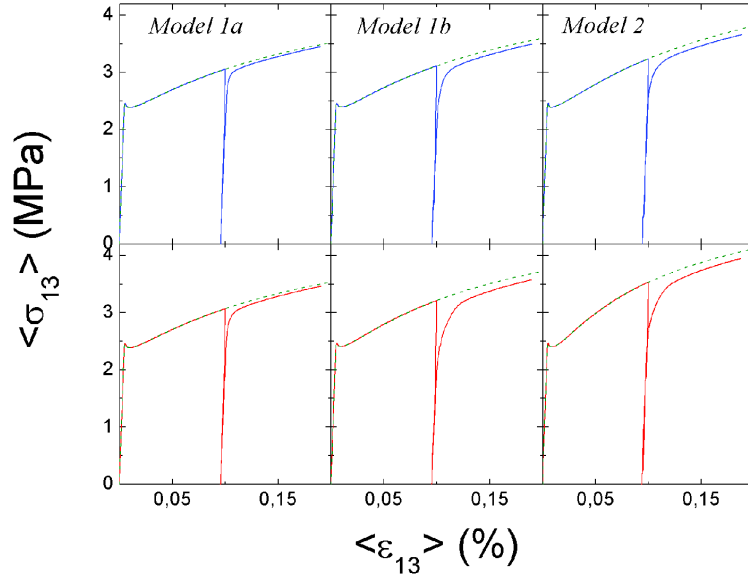


FIGURE 1.4 – Courbes contrainte-déformation obtenues par les 3 modèles pour des particules de fraction volumique 0.8% et de taille $20 * 20 * 20 \mu\text{m}^3$ (haut) et $10 * 10 * 10 \mu\text{m}^3$ (bas). Le sens de cisaillement est inversé après 0.1%. Pour faciliter les comparaisons, les courbes inverses sont réfléchies dans le domaine direct.

reconstruction avec une polarisation inverse lors du chargement inverse. En effet, lorsque le sens de cisaillement est inversé, la vitesse des dislocations change de signe. En raison de leur distribution spatiale autour des particules, des dislocations de signe opposé vont alors s’annihiler. Ensuite, une nouvelle microstructure de dislocations ayant une polarisation inversée par rapport au chargement direct va se reconstruire autour des particules. Ceci est illustré sur la figure 1.5 où l’on constate que le changement de polarité entre les deux distributions de dislocations a lieu de manière très soudaine entre 0.012 et 0.013% de déformation inverse.

1.3 Relations entre maclage et glissement

1.3.1 Condition de saut à un joint de macle

Des interfaces planes cohérentes peuvent apparaître lors du maclage ou pour certaines transformations martensitiques. Par construction, on peut considérer que la densité de dislocations de surface assignée à ces interfaces est nulle : $\alpha_{\sim}^S = 0$ (cf. 1.24 et 1.25) [CC80]. En effet, le cisaillement de maclage laisse le plan de macle invariant [CM95]. Les joints de macle cohérents peuvent toutefois aussi être formellement décrits comme des joints de flexion symétriques en utilisant des dislocations de surface [CC80, HL82, CM95].

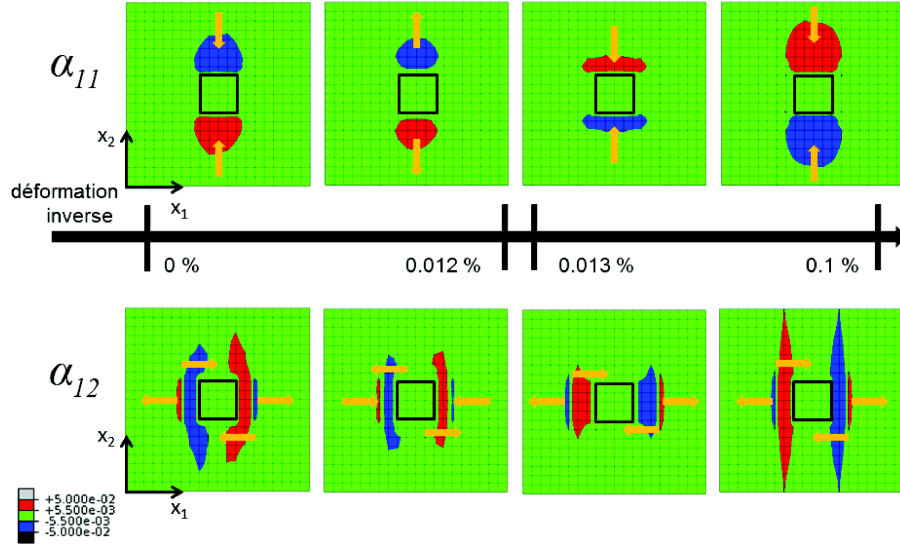


FIGURE 1.5 – Distribution des densités α_{11} et α_{12} (en mm^{-1}) lors du chargement inverse autour d'une particule de taille $20 * 20 * 20 \mu m^3$. Les flèches indiquent les directions des vitesses de dislocations.

La majorité des joints de macle possédant une très forte désorientation, une telle description impose cependant des densités de dislocation si grandes que les coeurs de celles-ci se chevauchent de manière irréaliste. Pour ces raisons, on s'est intéressé dans ce travail aux interactions entre glissement et maclage en assignant une densité nulle de dislocations surfaciques au joint de macle. A une échelle mésoscopique où il est raisonnable de considérer un glissement cristallographique moyen, l'étude a porté sur les situations où du maclage s'initie en présence d'un glissement simple dans le grain parent. On a alors analysé quelles étaient les conséquences de supposer valide la condition de saut 1.27 entre la distorsion plastique due au système actif dans le grain parent et la distorsion plastique due à la transformée de ce système dans la macle. Autrement dit, on a regardé les cas où la création d'un joint de macle préserve la continuité du vecteur de Burgers.

Le processus de maclage est accompli par un cisaillement simple d'une région du cristal, de telle sorte que le nouveau réseau maclé soit l'image miroir du réseau original parent [CM95]. Ce cisaillement peut être décrit par un tenseur \tilde{S} de la forme [Nie10] :

$$\tilde{S} = \tilde{I} + \lambda_T \underline{\eta}_1 \otimes \underline{n}^{K_1}, \quad (1.45)$$

où λ_T est la magnitude du cisaillement de maclage, $\underline{\eta}_1$ la direction unitaire du cisaillement et \underline{n}^{K_1} la normale unitaire au plan de macle K_1 où le cisaillement a lieu. Le tenseur vitesse de distorsion plastique dû au glisse-

ment simple dans le cristal parent peut lui s'écrire :

$$\dot{\beta}_{\sim}^p = \dot{N} \underline{b} \otimes \underline{h}, \quad (1.46)$$

où \dot{N} représente le flux de dislocations tandis que \underline{b} et \underline{h} sont des vecteurs colinéaires aux direction et normale au plan de glissement et dont les longueurs correspondent au module du vecteur de Burgers et à l'inverse de la distance entre plans adjacents, respectivement. En supposant que le flux de dislocations \dot{N} reste continu au joint de macle, la condition de saut 1.27 entre un système de glissement et son transformé par maclage s'écrit sous sa forme dynamique (voir aussi eq. 1.29) :

$$\left(\underline{b} \otimes \underline{h} - \underset{\sim}{S} \cdot \underline{b} \otimes \underline{h} \cdot \underset{\sim}{S}^{-1} \right) \times \underline{n}^{K_1} = \underset{\sim}{0}. \quad (1.47)$$

La satisfaction de la relation 1.47 peut s'analyser au regard des différents cas du tableau 1.1 permettant la satisfaction de la condition de saut avec un glissement simple de part et d'autre d'une interface plane. Le cas A correspond au cas particulier où $\dot{N} = 0$. Sinon, les cas B, C, D et E impliquent tous que la direction de glissement soit dans le plan de macle puisque le cisaillement de maclage $\underset{\sim}{S}$ a lieu dans le plan de l'interface. On a donc $\underset{\sim}{S} \cdot \underline{b} = \underline{b}$ et la relation 1.47 devient :

$$\underline{h} \times \underline{n}^{K_1} = \left(\underline{h} \cdot \underset{\sim}{S}^{-1} \right) \times \underline{n}^{K_1}, \quad (1.48)$$

De par la définition de $\underset{\sim}{S}$ (eq. 1.45), cette dernière relation est en fait toujours vraie [RB12]. En conclusion, afin de satisfaire la condition de saut 1.27 entre un système de glissement et son transformé par maclage, il est nécessaire et suffisant que le vecteur de Burgers du système actif appartienne au plan de macle.

1.3.2 Résultats pour les structures HC et confrontations à des mesures EBSD sur du Ti

Les correspondances admissibles entre systèmes de glissement et de maclage basées sur la relation 1.47 ont été analysées pour les systèmes couramment rencontrés dans les cristaux de structure hexagonale compacte (HC) [RB12]. De manière intéressante, les modes de maclage $(10\bar{1}2)$ et $(10\bar{1}3)$ sont uniquement compatibles avec du glissement ayant lieu le long de la direction $\langle a \rangle$ de la maille hexagonale. Inversement, les modes de maclage $(11\bar{2}1)$ et $(1\bar{1}\bar{1}2)$ sont uniquement compatibles avec du glissement ayant lieu le long de la direction $\langle c+a \rangle$ de la maille hexagonale. Le mode de maclage $(10\bar{1}1)$ est lui compatible à la fois avec les directions $\langle a \rangle$ et $\langle c+a \rangle$.

Ces conditions de compatibilité ont été confrontées à des mesures EBSD obtenues après un essai de compression plane sur des tôles de titane commercialement pur (T40) à gros grains (150 à 250 μm) [BSL⁺10] [RB12] (figure

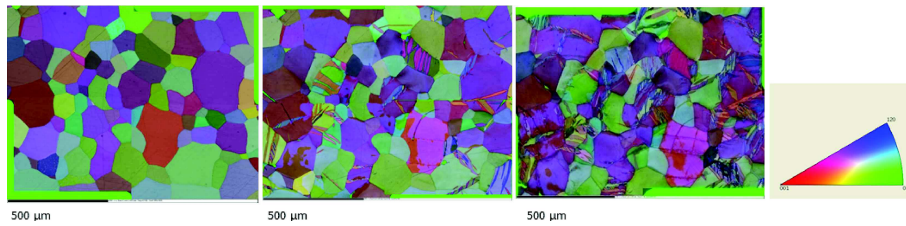


FIGURE 1.6 – Cartes d’orientations EBSD d’échantillons de T40 obtenues à l’état initial, après 8% et 16% de réduction (de gauche à droite).

1.6). Plus de 80 grains ont été analysés et ont permis de mettre en évidence la présence de macles primaires et secondaires d’extension (T) $(10\bar{1}2) [\bar{1}011]$ et de contraction (C) $(11\bar{2}2) [11\bar{2}\bar{3}]$ de l’axe $\langle c \rangle$. De manière remarquable, les macles d’extension T ont été observées uniquement dans des cristaux (A) présentant un facteur de Schmid supérieur à 0.46 sur un système prismatique tandis que les macles de contraction C ont été observées uniquement dans des cristaux (B) dont le facteur de Schmid sur les systèmes prismatiques ne dépasse pas 0.15 (voir tableaux 1.4 et 1.5). Etant donné qu’il est raisonnable de supposer que les grains A se sont déformés initialement par du glissement prismatique $\langle a \rangle$ vu que ce glissement est reconnu comme le plus facile dans le Ti [Chu54, PSHE95, SKS05, Zae03, WKNS07, GW09, GKS11, LMB⁺13, WJRD12, BBB⁺13, GOL⁺13, BDC⁺15] et que les grains B étaient orientés très favorablement pour du glissement $\langle c+a \rangle$, ces observations sont en plein accord avec les prédictions théoriques liées à la relation 1.47. Toutefois, dans la population A, les systèmes prismatiques compatibles avec les systèmes de maillage observés ne sont jamais ceux qui présentent le plus haut facteur de Schmid (voir tableaux 1.4 et 1.5). Cela laisse conjecturer que le maillage, en tant que mécanisme de relaxation des contraintes, n’intervient pas pendant la phase de glissement facile mais plutôt lorsque débute le glissement secondaire ou en présence de glissement difficile comme le $\langle c+a \rangle$ dans le Ti.

Selon ces résultats, les macles devraient seulement s’initier dans des régions où des systèmes de glissement admissibles sont actifs (ou bien où aucun système n’est actif). L’application d’une telle règle aurait notamment des conséquences en termes de modélisation car elle restreint les possibilités d’activité simultanée de glissement et de maillage en un même point.

Cristal	FS maximum					Macles observées	FS max. parmi les systèmes admissibles
	B	P	$\Pi_1^{<a>}$	$\Pi_1^{<c+a>}$	$\Pi_2^{<a>}$		
	Grain 1						
parent	0.06	0.48	0.44	0.45	0.40	T : (0 $\bar{1}$ 12) [01 $\bar{1}$ 1]	0.12
	Grain 2						
parent	0.07	0.50	0.46	0.46	0.46	T : (0 $\bar{1}$ 12) [0 $\bar{1}$ 11]	0.12
macle	0.30	0.05	0.16	0.50	0.49	C : ($\bar{1}$ $\bar{1}$ 22) [$\bar{1}$ $\bar{1}$ 2 $\bar{3}$]	0.50
	Grain 3						
parent	0.16	0.47	0.46	0.48	0.49	T : (01 $\bar{1}$ 2) [0 $\bar{1}$ 11]	0.34
						T : (0 $\bar{1}$ 12) [01 $\bar{1}$ 1]	0.34
macle	0.31	0.06	0.19	0.49	0.48	C : (11 $\bar{2}$ 2) [11 $\bar{2}$ 3]	0.50
	Grain 4						
parent	0.05	0.49	0.45	0.45	0.46	T : (0 $\bar{1}$ 12) [01 $\bar{1}$ 1]	0.33
macle	0.32	0.07	0.21	0.48	0.46	C : (1 $\bar{2}$ 12) [1 $\bar{2}$ 1 $\bar{3}$]	0.46
	Grain 5						
parent	0.36	0.09	0.24	0.48	0.44	C : (1 $\bar{2}$ 12) [1 $\bar{2}$ 1 $\bar{3}$]	0.46
	Grain 6						
parent	0.33	0.06	0.18	0.50	0.48	C : (1 $\bar{2}$ 12) [1 $\bar{2}$ 1 $\bar{3}$]	0.49
	Grain 7						
parent	0.30	0.06	0.18	0.48	0.48	C : ($\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 2) [$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 3]	0.48
macle	0.13	0.49	0.47	0.48	0.47	T : (0 $\bar{1}$ 12) [01 $\bar{1}$ 1]	0.28
	Grain 8						
parent	0.36	0.08	0.19	0.50	0.47	C : (2 $\bar{1}$ 12) [2 $\bar{1}$ 1 $\bar{3}$]	0.50
macle	0.20	0.46	0.49	0.50	0.44	T : (0 $\bar{1}$ 12) [01 $\bar{1}$ 1]	0.15

TABLE 1.4 – Dans les grains parent où du maclage a été observé et dans les macles primaires où il y a eu du maclage secondaire : valeurs des facteur de Schmid (FS) maximum sur les différentes familles de glissement, variantes de macle identifiées et FS maximum parmi les systèmes de glissement admissibles avec la variante de macle observée selon la relation 1.47. B : (0001) [1 $\bar{2}$ 10], P : ($\bar{1}$ 010) [1 $\bar{2}$ 10], $\Pi_1^{<a>}$: ($\bar{1}$ 011) [1 $\bar{2}$ 10], $\Pi_1^{<c+a>}$: (10 $\bar{1}$ 1) [2 $\bar{1}$ 1 $\bar{3}$], $\Pi_2^{<c+a>}$: (2 $\bar{1}$ 12) [2 $\bar{1}$ 1 $\bar{3}$].

1.4 Transport des densités de dislocations sur les systèmes de glissement

1.4.1 Description du formalisme par système

Transport par système

Le formalisme qui consiste à affecter un unique vecteur vitesse aux GND (eq. 1.7) est acceptable dans les cas de glissement simple dans un monocristal [AR06, RA06, RPA07, TVC⁺07] où dans les modèles FDM, si l'élasticité cristalline non linéaire est prise en compte pour incorporer la périodicité et la symétrie du réseau cristallin [Ach03, Ach04]. Cependant, les modèles (R)PMFDM utilisent l'élasticité linéaire standard et le caractère cristallographique de la plasticité est partiellement perdu en situation de glissement multiple [PDA11] [RWF11]. En particulier, la vitesse des dislocations dépend de la cisson résolue et donc les GND ne doivent pas glisser avec

Cristal	FS maximum					Macles observées	FS max. parmi les systèmes admissibles
	B	P	$\Pi_1^{<a>}$	$\Pi_1^{<c+a>}$	$\Pi_2^{<a>}$		
Grain 9							
parent	0.43	0.15	0.30	0.46	0.38	C : ($\bar{1}\bar{1}22$) [$\bar{1}\bar{1}2\bar{3}$]	0.38
macle	0.11	0.49	0.46	0.47	0.47	T : (01 $\bar{1}2$) [0 $\bar{1}11$]	0.31
Grain 10							
parent	0.40	0.12	0.26	0.48	0.42	C : ($1\bar{2}12$) [$1\bar{2}1\bar{3}$]	0.45
macle	0.01	0.50	0.44	0.44	0.42	T : (01 $\bar{1}2$) [0 $\bar{1}11$]	0.24
Grain 11							
parent	0.38	0.11	0.26	0.48	0.43	C : ($1\bar{2}12$) [$1\bar{2}1\bar{3}$]	0.43
macle	0.01	0.49	0.43	0.43	0.44	T : (0 $\bar{1}12$) [0 $\bar{1}11$]	0.34
Grain 12							
parent	0.40	0.13	0.29	0.46	0.40	C : ($1\bar{2}12$) [$1\bar{2}1\bar{3}$]	0.40
macle	0.08	0.50	0.46	0.47	0.45	T : (01 $\bar{1}2$) [0 $\bar{1}11$]	0.26
Grain 13							
parent	0.12	0.01	0.06	0.46	0.49	C : ($\bar{2}112$) [$\bar{2}11\bar{3}$]	0.46
						C : ($1\bar{2}12$) [$1\bar{2}1\bar{3}$]	0.48
Grain 14							
parent	0.16	0.01	0.08	0.47	0.49	C : ($11\bar{2}2$) [$11\bar{2}\bar{3}$]	0.49
						C : ($\bar{2}112$) [$\bar{2}11\bar{3}$]	0.44
						C : ($\bar{1}\bar{1}22$) [$2\bar{1}\bar{1}\bar{3}$]	0.46
						C : ($\bar{1}2\bar{1}2$) [$\bar{1}2\bar{1}\bar{3}$]	0.49
Grain 15							
parent	0.35	0.08	0.20	0.49	0.47	C : ($\bar{2}112$) [$\bar{2}11\bar{3}$]	0.44
						C : ($\bar{1}\bar{1}22$) [$\bar{1}\bar{1}2\bar{3}$]	0.49
						C : ($1\bar{2}12$) [$1\bar{2}1\bar{3}$]	0.47
						C : ($2\bar{1}\bar{1}2$) [$2\bar{1}\bar{1}\bar{3}$]	0.49

TABLE 1.5 – Suite du tableau 1.4.

la même vitesse selon qu'elles sont localisées sur un système fortement ou faiblement contraint. Dans les matériaux de structure HC, la nature cristallographique de la plasticité est encore plus cruciale puisque la les lois de vitesse sont supposées dépendre de paramètres propres à chaque famille, tels les cissions critiques ou les sensibilités à la vitesse. Afin de pallier à cette insuffisance, un modèle RPFDM a été développé où les densités de GND sont reliées aux systèmes de glissement et possèdent des vitesses spécifiques. L'équation de transport 1.17 est ainsi réécrite de la manière suivante :

$$\dot{\tilde{\alpha}} = \sum_s -Rot \left(\dot{\gamma}^{(s)} \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)} \right) = \sum_s \dot{\tilde{\alpha}}^{(s)}, \quad (1.49)$$

où $\dot{\tilde{\alpha}}^{(s)}$ est le tenseur densité de GND associé au système de glissement (s). En introduisant $\underline{k}^{(s)} = \underline{m}^{(s)} \times \underline{n}^{(s)}$ le vecteur unitaire tangent à la ligne des dislocations coins du système (s) [APBB04], $\dot{\tilde{\alpha}}^{(s)}$ peut se décomposer comme [RLC⁺17] :

$$\dot{\tilde{\alpha}}^{(s)} = \dot{\alpha}_{vis}^{(s)} \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{m}^{(s)} + \dot{\alpha}_{coin}^{(s)} \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{k}^{(s)}, \quad (1.50)$$

où $\dot{\alpha}_{vis}^{(s)}$ et $\dot{\alpha}_{coin}^{(s)}$, respectivement, les taux de densité de GND vis et coin sur le système (s) , sont donnés par :

$$\dot{\alpha}_{vis}^{(s)} = \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial k^{(s)}}, \quad (1.51)$$

$$\dot{\alpha}_{coin}^{(s)} = -\frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial m^{(s)}}. \quad (1.52)$$

Avec ce formalisme, il est supposé que les GND ne peuvent pas quitter leur système de glissement, *i.e.*, la montée et le glissement dévié des dislocations ne sont pas pris en compte dans les équations de transport 1.51 et 1.52. Ces mécanismes pourraient être pris en compte en considérant le mouvement hors-plan dans une équation de transport plus générale pour $\dot{\alpha}^{(s)}$ [Ach03]. Cependant, il est quelque peu illusoire d'essayer de reproduire ces mécanismes élémentaires au travers d'une équation de transport à l'échelle de nos simulations puisque celles-ci sont destinées à modéliser des ensembles de plusieurs grains.

Lois constitutives pour la glace

La glace possède une très grande anisotropie plastique avec une forte prédominance du glissement basal [DAA83]. De forts gradients de distorsion plastique et donc des densités élevées de GND accompagnent la déformation des polycristaux de glace [MBP⁺11], ce qui en fait un matériau idéal pour appliquer des modèles de type (R)PMFDM. De plus, du fait de sa biréfringence, de la possibilité de travailler proche du point de fusion et sur des microstructures contrôlées, la glace peut être considérée comme un matériau modèle, notamment afin d'étudier la recristallisation dynamique. En conditions de laboratoire, ce mécanisme apparaît en effet à de très faibles taux de déformation ($\sim 1\%$) [GMC⁺12, CMV15].

Dans la glace, la montée et le glissement dévié des dislocations sont invoqués pour expliquer la multiplication des dislocations basales [AW88, MWD⁺11]. Dans le modèle développé, ces phénomènes ont été pris en compte indirectement au travers de la loi constitutive pour l'évolution des SSD mobiles $\rho_m^{(s)}$ [EK86] :

$$\dot{\rho}_m^{(s)} = \left[\frac{C_1^{(s)}}{b^{(s)2}} - C_2^{(s)} \rho_m^{(s)} \right] |\dot{\gamma}^{(s)}|, \quad (1.53)$$

où la multiplication des SSD mobiles est reliée au paramètre $C_1^{(s)}$ tandis que $C_2^{(s)}$ caractérise leur annihilation. De plus, par souci de simplicité, la même amplitude $v^{(s)}$ est considérée pour tous les types de dislocations (vis, coin et SSD) appartenant à un même système, ce qui est plutôt justifié pour

les dislocations basales dans la glace [SW91, OHM99]. En supposant que la vitesse des dislocations est proportionnelle à la projection de la force motrice (analogue à la force de Peach-Koehler appliquée à une ligne discrète [Ach01]) sur le plan de glissement, l'expression suivante de $\dot{\gamma}^{(s)}$ est obtenue sous la forme d'une relation classique d'Orowan [Ach03] [**RLC**⁺**17**] :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \left(\rho_m^{(s)} b^{(s)} + \sqrt{\alpha_{vis}^{(s)2} + \alpha_{coin}^{(s)2}} \right) v^{(s)}, \quad (1.54)$$

où $b^{(s)}$ est l'amplitude du vecteur de Burgers. Dans cette étude, $v^{(s)}$ suit à nouveau une loi puissance fonction de la cission résolue (eq. 1.35) et dépend de plus de l'activation thermique [BA82] :

$$v^{(s)} = v_0^{(s)} e^{-\frac{G}{kT}} \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_c^{(s)}} \right|^{n^{(s)}} \text{sgn}(\tau^{(s)}), \quad (1.55)$$

où k est la constante de Boltzmann et G l'énergie d'activation reliée à la température T . La cission critique $\tau_c^{(s)}$ est toujours donnée par une équation de Taylor étendue (eq. 1.36) :

$$\tau_c^{(s)} = \tau_0^{(s)} + \mu b^{(s)} \sqrt{\sum_l a^{(sl)} \rho_t^{(l)}}, \quad (1.56)$$

mais exprimée dorénavant en fonction de $\rho_t^{(l)}$ la densité totale de dislocations du système (l), correspondant à la somme des SSD et des GND :

$$\rho_t^{(l)} = \rho_m^{(l)} + \rho_f^{(l)} + \rho_{GND}^{(l)} \text{ avec } \rho_{GND}^{(l)} = \frac{\sqrt{\alpha_{vis}^{(l)2} + \alpha_{coin}^{(l)2}}}{b^{(l)}}. \quad (1.57)$$

Par ailleurs, un formalisme similaire à celui établi par Kubin *et al.* [KDH08] dans les cristaux CFC est adopté concernant l'équation d'évolution des SSD immobiles :

$$\dot{\rho}_f^{(s)} = \left[\frac{C_3}{b^{(s)}} \sqrt{\sum_{l \in \text{foret}} a^{(sl)} \rho_f^{(l)}} + \frac{C_4}{b^{(s)}} \left(\sqrt{a^{(ss)} \rho_f^{(s)}} + \sum_{l \in \text{copl}} \sqrt{a^{(sl)} \rho_f^{(l)}} \right) - C_5 \rho_f^{(s)} \right] |\dot{\gamma}^{(s)}|. \quad (1.58)$$

Ce formalisme fait la distinction entre le stockage des dislocations dû aux interactions avec les systèmes de la forêt (formation de jonctions décrit par la constante C_3) et le stockage dû aux auto-interactions et aux interactions coplanaires (constante C_4). Le stockage dû aux interactions colinéaires n'est pas pris en compte ici puisque celles-ci produisent essentiellement des annihilations [KDH08]. Enfin, la constante C_5 permet de décrire la restauration dynamique.

1.4.2 Implémentation numérique sous *freefem++*

Le modèle intègre le transport des GND par système (eqs. 1.51 et 1.52) et les lois constitutives 1.53-1.58 dans une formulation de plasticité cristalline [Asa83] [RLC⁺17]. Les équations du modèle sont résolues par la méthode des éléments finis grâce à l'utilisation du logiciel libre *freefem++* [Hec12]. La formulation explicite Galerkin/Moindres carrés [VBF06] est également adoptée pour la résolution du transport par système. Elle correspond à [RLC⁺17] :

$$\begin{aligned} \int_V \alpha_{vis}^{(s)}(t + \Delta t) w_1 dV &= \int_V \alpha_{vis}^{(s)}(t) w_1 dV + \Delta t \int_V \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} w_1 dV \\ &+ \frac{\Delta t^2}{1+\chi} \left(\int_V V_3^{(s)} \frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} dV + \int_V V_1^{(s)} \frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} dV \right) \\ &- \eta \Delta h^2 \int_V \left(\frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} \frac{\partial \alpha_{screw}^{(s)}}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} + \frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} \frac{\partial \alpha_{screw}^{(s)}}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} \right) dV, \end{aligned} \quad (1.59)$$

$$\begin{aligned} \int_V \alpha_{coin}^{(s)}(t + \Delta t) w_2 dV &= \int_V \alpha_{coin}^{(s)}(t) w_2 dV - \Delta t \int_V \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} w_2 dV \\ &- \frac{\Delta t^2}{1+\chi} \left(\int_V V_1^{(s)} \frac{\partial w_2}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} dV + \int_V V_3^{(s)} \frac{\partial w_2}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} dV \right) \\ &- \eta \Delta h^2 \int_V \left(\frac{\partial w_2}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} \frac{\partial \alpha_{edge}^{(s)}}{\partial \mathbf{m}^{(s)}} + \frac{\partial w_2}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} \frac{\partial \alpha_{edge}^{(s)}}{\partial \mathbf{k}^{(s)}} \right) dV, \end{aligned} \quad (1.60)$$

où w_1 et w_2 sont des fonctions test. $V_3^{(s)}$ et $V_1^{(s)}$ correspondent, respectivement, aux vitesses des densités vis et coin sur le système (s). Les valeurs de χ , η et c utilisées pour cette étude sont données dans le tableau 1.6.

χ	η	c
1	0.01	0.15

TABLE 1.6 – Paramètres utilisés dans la résolution des équations de transport.

Le glissement sur les familles basale B , prismatique P et pyramidale $\Pi_2^{<c+a>}$ (cf. Tableau 1.4) ont été pris en compte [CDMB08, MBP⁺11]. Cependant, du fait de la très forte anisotropie plastique de la glace et par souci de simplicité, seules les GND sur les systèmes basaux ont été considérées. Aux joints de grains, les équations de transport 1.51 et 1.52 sont résolues en choisissant pour chaque système de glissement donné dans un grain, un système correspondant dans le grain adjacent. Ce choix ne va pas affecter la valeur de $\tilde{\alpha}$ mais va modifier la distribution $\tilde{\alpha}^{(s)}$ sur les différents systèmes. Dans le modèle actuel, les joints de grains correspondent juste à une forte variation de l'orientation cristalline. Dans le cadre d'une première approche simplifiée, il a ainsi été décidé de résoudre les équations de transport pour tous les systèmes portant le même label (1, 2 ou 3), qu'ils se trouvent ou

non dans un même grain. En conséquence, une nouvelle numérotation des systèmes basaux a été réalisée au travers des 12 rotations équivalentes de la maille hexagonale de sorte que les systèmes labellisés 1 aient toujours le facteur de Schmid initial (positif) le plus élevé et les systèmes labellisés 2 le second (positif) plus élevé.

1.4.3 Torsion de monocristaux de glace

Les valeurs de certains paramètres du modèle correspondent directement à des mesures expérimentales comme les constantes élastiques et les paramètres de maille [GKCD83] (tableau 1.7), la valeur de la sensibilité à la vitesse des dislocations basales [SW91, OHM99], ou celle de l'énergie d'activation G prise pour tous les systèmes comme égale à la valeur mesurée pour les dislocations vis basales [OHM99] (tableaux 1.8 et 1.9). Les coefficients d'interaction entre systèmes basaux et prismatiques sont ceux calculés par dynamique des dislocations dans un monocristal de glace [Dev13] (tableau 1.10). Les autres paramètres sont déterminés en tenant compte des modélisations déjà réalisées sur la glace [TVC⁺07, CDMB08, GMC⁺12] [TRC⁺08] et en ajustant les courbes de fluage en torsion de deux monocristaux de glace (A and B) ayant leur axe c parallèle à l'axe de torsion (voir les détails expérimentaux dans [MWD⁺11, TVC⁺07, Che08]). Pour ces deux essais de torsion, la cission maximale appliquée est la même (0.1 MPa) mais la température (A : $-10.5^\circ C$, B : $-13.5^\circ C$) et la taille de l'échantillon (A : 46 mm (diamètre) * 50 mm (hauteur), B : 30 mm * 40 mm) sont différentes et le sens de torsion est inversé après 5% (A) et 4% (B) de cisaillement. Les essais de torsion sont idéals pour calibrer les paramètres d'un modèle (R)PMFDM puisque la cission appliquée augmente depuis l'axe central jusqu'à la surface externe du cylindre, ce qui génère un gradient de distorsion plastique et donc une densité significative de GND [TVC⁺07]. De plus, la prédiction des courbes inverses de fluage ne peut se faire que si l'annihilation de densités de dislocations polarisées est incluse dans le modèle.

c/a	$b^{<a>}$	$b^{<c+a>}$	μ	
1.629	4.52 Å	8.63 Å	3.00 GPa	
C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}
12.93 GPa	15.01 GPa	3.01 GPa	7.08 GPa	5.76 GPa

TABLE 1.7 – Paramètres cristallins de la glace à $-16^\circ C$.

La figure 1.7 compare les courbes de fluage expérimentales et simulées. L'accélération de la vitesse de fluage durant le fluage direct s'interprète comme étant causée par la multiplication des GND dû à l'existence d'un gradient de déformation permanent dans l'échantillon. Les courbes de fluage inverse montrent un ralentissement de la vitesse de fluage qui est suivi par une ré-accélération. Ce comportement est globalement bien reproduit par

	B	P	Py
τ_0	0.04 MPa	0.1 MPa	0.5 MPa
n	1	2.85	4
C_1	$8 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$
ρ_{f0}	$1 \cdot 10^6 \text{ m}^{-2}$	$1 \cdot 10^5 \text{ m}^{-2}$	$1 \cdot 10^5 \text{ m}^{-2}$
ρ_{m0}	$8 \cdot 10^7 \text{ m}^{-2}$	$8 \cdot 10^6 \text{ m}^{-2}$	$8 \cdot 10^6 \text{ m}^{-2}$

TABLE 1.8 – Paramètres spécifiques aux familles de glissement. B : (0001) [11 $\bar{2}$ 0], P : (1 $\bar{1}$ 00) [11 $\bar{2}$ 0], Py : (11 $\bar{2}$ 2) [11 $\bar{2}$ 3].

v_0	G	C_2	C_3	C_4	C_5
$1.2 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$	0.76 eV	17	$2 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-3}$	10

TABLE 1.9 – Paramètres non spécifiques aux familles de glissement.

le modèle actuel bien que la réponse mécanique soit en réalité très sensible aux conditions initiales comme l'orientation cristalline, la température et la densité de dislocations. Des disparités dans ces paramètres peuvent expliquer les différences entre courbes expérimentales et simulées. Quand la torsion est inversée, des GND de signe opposé à celles issues du fluage direct se forment. Ces GND s'annihilent ainsi avec les GND de signe opposé déjà présentes, ce qui conduit à une quasi disparition de la densité de GND (figure 1.7). Ensuite, une nouvelle microstructure de GND émerge et induit une ré-accelération de la vitesse de fluage. Il est à noter que le monocristal B possède un rayon plus petit que le monocristal A. Par conséquent, la production de GND y est plus importante, ce qui est normalement associé à une vitesse de fluage plus grande [TVC⁺07]. Cependant, le monocristal B est aussi déformé à une température plus basse qui conduit à une plus faible mobilité des dislocations (eq. 1.55). Ce dernier effet est prédominant puisque le monocristal B présente une plus faible vitesse de fluage.

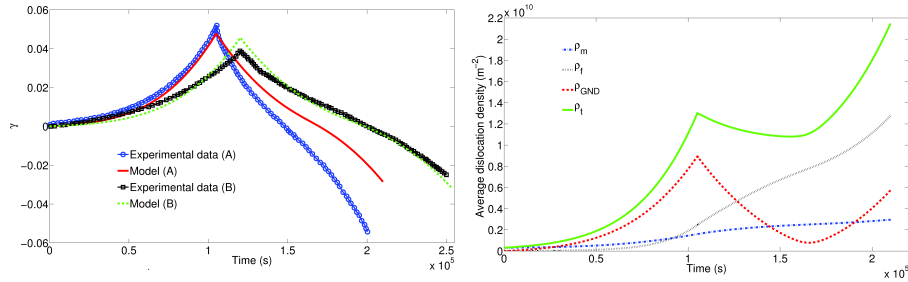


FIGURE 1.7 – A gauche : courbes de fluage expérimentales et simulées pour les monocristaux A et B. γ représente la déformation de cisaillement macroscopique. A droite : évolution des densités moyennes ρ_m , ρ_f , ρ_{GND} et ρ_t cumulées sur tous les systèmes de glissement au cours de l'essai A.

α^{BP}	α^{PB}	α^{PP}	α^{coli}	α^{BB}	α^{Py}
0.034	0.082	0.1	0.65	0.04	0.15

TABLE 1.10 – Valeurs des coefficients d’interaction ent entre systèmes de glissement. α^{BP} : basal-prismatique, α^{PB} : prismatique-basal, α^{PP} : prismatique-prismatique, α^{coli} : interactions colinéaires basal-prismatique, α^{BB} : basal-basal, α^{Py} : interactions impliquant un système pyramidal.

1.4.4 Compression d’un multicristal de glace

Procédure expérimentale

Afin de tester le modèle, un multicristal de glace (15 grains) (figure 1.8), de forme rectangulaire ($48 * 47.7 * 12.1mm^3$), a été spécifiquement déformé en compression à $-4^\circ C$ sous une contrainte de fluage de $0.25MPa$ jusqu’à 1.9% de déformation macroscopique puis déchargé. L’échantillon, découpé dans de la glace colonnaire (voir détails de la méthode dans [GMC⁺12]), contient un seul grain dans l’épaisseur et les joints de grains sont quasi-perpendiculaires aux deux faces de l’échantillon. Les coordonnées des axes c sont mesurées sur toute la surface de l’échantillon avant et après le test grâce à un analyseur automatique (AITA) (voir figure 1.8 et détails de la méthode dans [WRhS03]). L’orientation complète du réseau cristallin est elle mesurée initialement dans chaque grain à l’intérieur de zones représentatives par cryo-EBSD à Géosciences Montpellier (voir détails de la méthode dans [MCB⁺15]). Au cours de l’essai, des mesures 2D des champs de déplacement sont obtenues par DIC avec une résolution spatiale de $0.51mm/pix$ (voir détails de la méthode dans [GMC⁺12]).

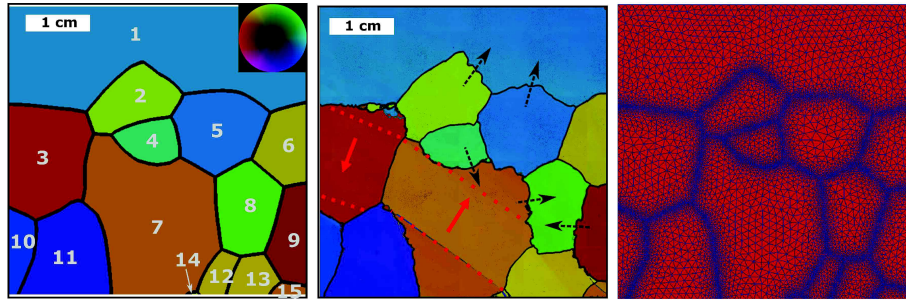


FIGURE 1.8 – A gauche : orientations de l’axe c mesurées avant et après déformation par AITA. Les lignes rouges en pointillés indiquent la présence d’une bande en genou qui traverse les grains 3 et 7. Les flèches rouges représentent les projections des directions de glissement basal labellisées 1 dans le plan de la figure. Les flèche noires en tirets indiquent les directions supposées des migrations de joint de grains. A droite : maillage utilisé dans la simulation EF du multicristal.

Résultats des simulations

Cet essai est simulé en utilisant 106152 éléments triangulaires de type $P1$ (linéaire) pour le maillage d'une structure de $47.7 * 48 * 1.2 \text{mm}^3$ (figure 1.8) et en reprenant les mêmes paramètres que ceux déterminés pour les essais de torsion. La figure 1.9 montre qu'il y a des différences entre la courbe de fluage ainsi simulée et la courbe expérimentale. Alors que la vitesse de fluage est plus ou moins constante, il y a une accélération du fluage dans la simulation qui précède une vitesse plus stable. Les distributions des champs ε_{yy} , ε_{xx} et ε_{xy} sont en revanche en bon accord avec celles mesurées par DIC [RLC⁺17] (figure 1.10). Il y a toutefois une plus forte localisation de la déformation dans les grains 3 et 7 mais cela s'explique par la présence d'une large bande en genou qui traverse ces deux grains et qui est orthogonale à la direction de glissement labellisée 1 (figure 1.8). La présence de cette bande en genou est confirmée par des mesures de désorientation de l'axe c : en moyenne 6° dans le grain 7 et 4° dans le grain 3 [RLC⁺17]. Si par construction le modèle ne permet pas de décrire complètement la formation d'une bande en genou, il est très intéressant de constater que la position observée coïncide particulièrement bien avec une zone de forte désorientation de l'axe c prédite par le modèle (figure 1.11). La continuité de la désorientation au travers des grains 3 et 7 est notamment à souligner. De plus, il est remarquable que la position observée de la bande en genou soit délimitée dans la simulation par des densités opposées de dislocations coins (figure 1.11), tel que cela est attendu d'après la théorie [FS52, CGF⁺12] et les observations des bandes en genou [YHiI⁺13, PMG⁺15].

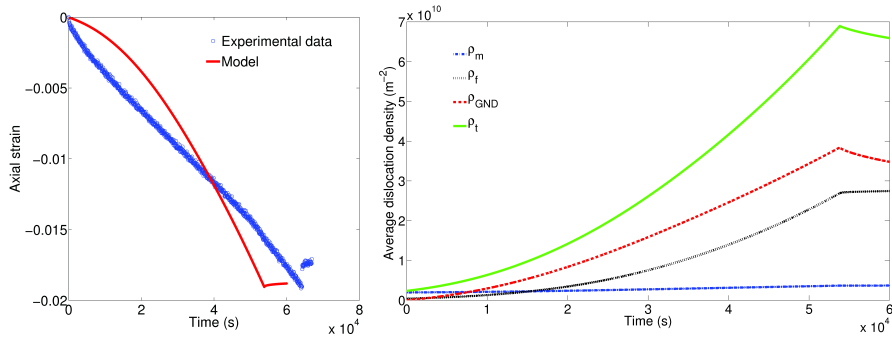


FIGURE 1.9 – A gauche : courbes de fluage expérimentale et simulée pour le multicristal. A droite : évolution des densités moyennes ρ_m , ρ_f , ρ_{GND} et ρ_t cumulées sur tous les systèmes de glissement au cours de la compression du multicristal.

La comparaison de la microstructure avant et après déformation (figure 1.8) permet de mettre en évidence deux autres mécanismes de relaxation : la migration de joints de grains et la germination de nouveaux grains. Ces mécanismes engendrent une redistribution des champs mécaniques locaux

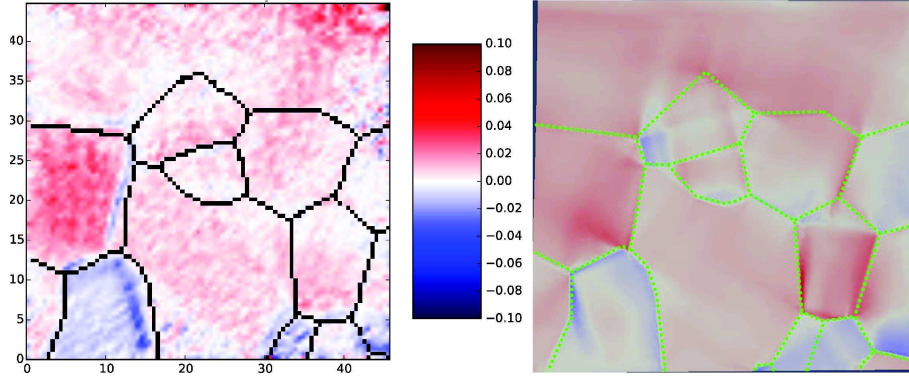


FIGURE 1.10 – Distribution de ε_{xy} à -1% de déformation macroscopique : mesures DIC (à gauche) et simulation RPMFDM (à droite). Les positions initiales des joints de grains sont indiquées en noir ou en vert.

[CMV15] et le fait que le modèle n'en tienne pas compte peut expliquer une partie des différences constatés avec l'expérience. De même, les conditions aux limites simulées peuvent être plus ou moins loin de la réalité, par exemple en raison de la friction entre la presse et l'échantillon ou d'un possible mauvais parallélisme des faces de l'échantillon [RLC⁺17], et peuvent affecter la réponse mécanique d'autant plus que l'échantillon est loin d'être un volume représentatif. Malgré tout, l'accélération irréaliste du fluage semble liée à l'augmentation de la densité de GND (figure 1.9), de manière similaire à ce qui a été observé dans les essais de torsion. En effet, si l'on considère que la densité totale de dislocations varie presque comme la densité de GND (figure 1.9), le taux de glissement $\dot{\gamma}^{(s)}$ varie, en première approximation, comme $\rho_{GND}^{(s) 1 - \frac{n(s)}{2}}$ d'après les équations 1.54, 1.55, 1.56, 1.57, c'est à dire que pour les systèmes basaux on aurait en première approximation $\dot{\gamma}^{(s)} \sim \sqrt{\rho_{GND}^{(s)}}$.

La figure 1.12 montre la distribution spatiale des différentes densités ρ_m , ρ_f , ρ_{GND} et ρ_t au sein l'échantillon. La densité de SSD mobiles suit les zones de fortes vitesses de distorsion plastique, tout comme la densité de SSD immobiles. En raison de leur équation d'évolution 1.58, ces dernières se localisent aussi dans les zones où le glissement multiple devient prononcé, notamment autour des joints de grains. Comme attendu, la densité de GND débute par croître à partir des jonctions triples et des joints de grains puis s'étend progressivement vers l'intérieur des grains. Etant donné la distribution de la densité totale de dislocations, il est à noter que la mobilité des dislocations (eqs. 1.35 et 1.36) est fortement réduite à proximité de certains joints de grains. Par ailleurs, selon les théories de la recristallisation et des mouvements de joints de grains [BH62], la distribution des densités de dislocations est parfaitement cohérente avec les mouvements observés de joints

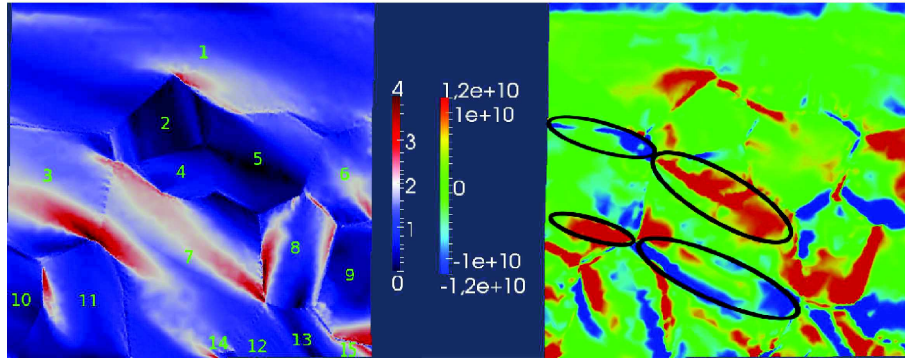


FIGURE 1.11 – A gauche : distribution simulée de la désorientation de l’axe c en degrés par rapport à l’orientation initiale à -1% de déformation macroscopique. A droite : distribution de la densité de GND coins en m^{-2} associée au système basal labellisé 1.

de grains, c’est à dire que les joints migrent depuis les zones de faible densité vers les zones à forte densité (figures 1.8 et 1.12). Les jonctions triples où de la germination de grains est observée sont caractérisées par des densités élevées de GND (figure 1.12), ainsi que par de forts gradients de la densité d’énergie élastique [RLC⁺17].

Écrouissage cinématique

S’il y a une tendance à ce que la vitesse de glissement basale augmente avec la densité de GND, cette dernière dépend également de l’écrouissage cinématique au travers de l’évolution de $\tau^{(s)}$ (eq. 1.55). Un écrouissage cinématique significatif est en effet présent dans la simulation comme l’illustre la figure 1.13 qui représente l’évolution de $\tau^{(1)}$. Par construction, $\tau^{(1)}$ est positif partout au début de l’essai de fluage. Dans la plupart des endroits, $\tau^{(1)}$ décroît au cours de la simulation et devient même négatif dans certains grains. Par conséquent, $\tau^{(1)}$ est essentiellement négatif dans l’échantillon après la décharge (figure 1.13), ce qui provoque une plasticité inverse. En effet, après la décharge, la déformation axiale augmente continûment sous chargement nul, tandis que la densité de GND décroît en raison de l’annihilation de dislocations de signes opposés (figure 1.9). Il se construit donc bien un champ de contraintes internes qui s’oppose au glissement des dislocations lors de la charge. Malgré tout, la déformation inverse à la décharge est bien plus faible que celle mesurée, ce qui semble signifier que le niveau de l’écrouissage cinématique simulé n’est pas assez important. Ce niveau dépend notamment de la manière dont sont modélisés les interactions entre dislocations et joints de grains et comment est résolu le transport aux joints de grains. Même si la mobilité des dislocations est fortement réduite proche de certains joints de grains, le traitement simplifié actuel de-

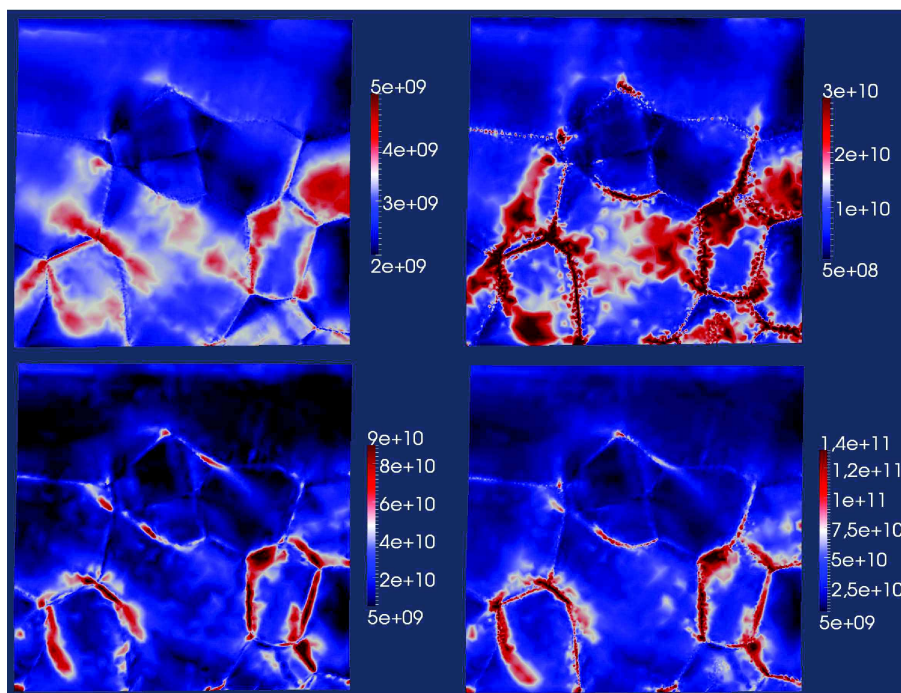


FIGURE 1.12 – Distribution des densités ρ_m , ρ_f , ρ_{GND} et ρ_t en m^{-2} cumulées sur tous les systèmes de glissement à -1% de déformation macroscopique (de gauche à droite et de haut en bas, respectivement).

vra sans aucun doute être amélioré à l’avenir. Par exemple, une résistance additionnelle au glissement pourrait être introduite en fonction de la distance aux joints de grains, comme dans [MRR06], ou bien une contrainte cinématique phénoménologique pourrait être ajoutée dans la loi de vitesse comme dans [TVC⁺07, PDA11, BBG06, vBMKG13]. Les systèmes de glissement impliqués dans la résolution du transport aux joints pourraient aussi être mieux sélectionnés, par exemple en suivant les critères géométriques de transmission établis expérimentalement [SWC88, LRB90, LR85]. Cependant, il n’est pas certain qu’un tel modèle amélioré soit suffisant pour reproduire complètement la décharge expérimentale étant donné que la contrainte cinématique simulée est déjà du même ordre de grandeur que la contrainte appliquée [RLC⁺17]. La différence de cinétique entre l’expérience et la simulation doit aussi être considérée : une déformation plastique inverse quasi-instantanée comparée à un saut purement élastique très faible suivi d’une déformation plastique inverse progressive (figure 1.9). En effet, le modèle considère la même loi de vitesse que durant la charge alors que les dislocations semblent repartir avec une vitesse extrêmement élevée dans l’expérience. Cela pourrait être lié au comportement avalancheux des dislocations dans la glace [MVZ⁺01] [RWL05], ou à des mécanismes non inclus dans le modèle,

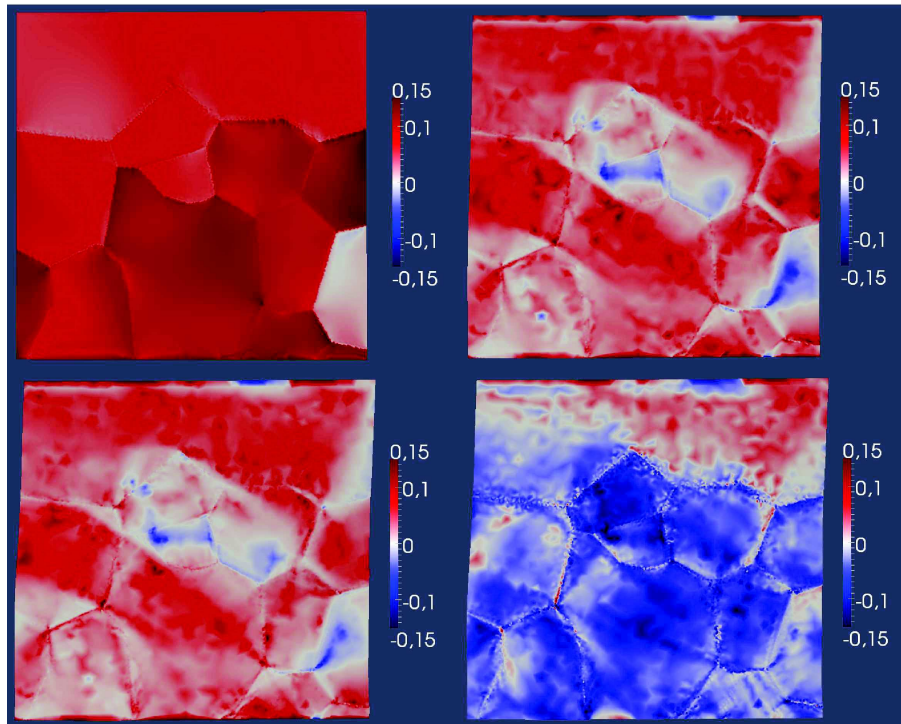


FIGURE 1.13 – Distribution de la cisssion résolue sur le système basal labellisé 1, $\tau^{(1)}$, en MPa , juste après le chargement, à -1% de déformation macroscopique, juste avant la décharge à -1.9% et juste après la décharge.

comme les effets inertiels et/ou de tension de ligne [HSZG14], qui pourraient prévaloir lors de la décharge.

1.5 Conclusions

Deux applications de modèles RPMFDM ont été vues dans ce chapitre. Par rapport à des modèles EF de plasticité cristalline standard, les champs mécaniques sont modifiés mais dans des proportions plus ou moins importantes selon la taille du maillage et le choix des lois constitutives. En effet, le tenseur densité de dislocations $\tilde{\alpha}$ dépend, par construction, de l'échelle de résolution considérée et donc du maillage. L'effet des GND sur les champs mécaniques dépend également de leurs lois de mobilité et de la manière dont elles sont intégrées dans le durcissement isotrope. Selon les situations, la présence de GND peut ainsi induire un plus fort durcissement ou au contraire augmenter la valeur du taux de glissement. En revanche, lorsqu'il y a des changements de trajets, les modèles RPMFDM se distinguent des modèles de plasticité cristalline standard car ils rendent naturellement

compte de l'annihilation des dislocations de signes opposés. La pertinence de ces effets a été démontrée avec plusieurs exemples : effet Bauschinger dans des composites à matrice métallique (figure 1.4 et 1.5), torsion inverse de monocristaux de glace (figure 1.7), plasticité inverse à la décharge d'un multicristal de glace (figure 1.9). Un autre bénéfice important de ces modèles est qu'ils permettent de donner une idée de l'arrangement des dislocations dans le matériau, notamment quand les densités sont reliées aux systèmes de glissement. Un exemple convaincant a été montré où des densités opposées de dislocations coins délimitent la position observée d'une bande en genou (figure 1.11). Bien entendu, suivant l'échelle de résolution considérée, ces prédictions restent assez grossières par rapport à celles issues de simulations de dynamique des dislocations discrètes car elles ne rendent pas compte de la plupart des mécanismes à courte distance telle la formation de jonctions. En revanche, les simulations de dynamique des dislocations ne sont elles pas encore capables de traiter les milieux avec une élasticité anisotrope hétérogène et sont généralement limitées à des volumes et des temps physiques plus petits que ceux des simulations RPFDM.

Ce chapitre a également permis de mettre en avant les différents cas possibles pour lesquels deux systèmes de glissement restent compatibles à une interface plane (tableau 1.1). Il y a notamment le cas où les deux systèmes possèdent la même direction de glissement, que celle-ci se trouve dans le plan de l'interface et que les plans de glissement respectifs sont en position de symétrie orthogonale par rapport au plan de l'interface, comme dans le cas d'un joint de macle ou plus généralement des joints de flexion symétrique. Précisément pour les joints de macle, il a été montré qu'un système de glissement reste compatible avec son transformé par maclage, à la condition nécessaire et suffisante que son vecteur de Burgers appartienne au plan de macle. Dans les cristaux HC, il existe ainsi des modes de maclage uniquement compatibles avec du glissement selon $\langle a \rangle$ ou $\langle c + a \rangle$ ou les deux. Dans le cadre de la modélisation du maclage, ces conditions peuvent servir de critères complémentaires pour la sélection des variantes et montrent que les joints de macle n'agissent pas toujours comme des barrières au glissement des dislocations.

Chapitre 2

Champs élastiques aux interfaces planes

Dans les polycristaux, des contraintes d'incompatibilité apparaissent en raison des interactions entre les grains adjacents dont les déformations anisotropes sont fonction de l'orientation cristalline. Pour la même raison, la présence de macles à l'intérieur des grains induit également des contraintes d'incompatibilité. Ces contraintes d'incompatibilité peuvent être responsables de l'initiation de fissures, notamment lors de sollicitations en fatigue [TW56, VLD87, HN90, BT03, VNM04]. Elles peuvent être estimées directement dans des polycristaux grâce à des simulations en champs complets résolues par EF [BDJC01, BFC01, REH⁺10] ou par FFT [MS98, LKE12]. Afin d'améliorer la compréhension du rôle spécifique de chaque type de joints de grains dans la déformation des polycristaux, il est également intéressant de se focaliser sur des problèmes avec une seule interface. De fait, plusieurs études expérimentales et théoriques portent sur le comportement des bicristaux [Hir72, RZ80, RZ82, VLD87, GPK89, SAS⁺98, VNM04, LD66, OBP⁺09].

Ce chapitre a lui pour objectif principal de développer des expressions analytiques explicites des champs élastiques (*i.e.*, contrainte et rotation) en présence d'interfaces planes dans le cadre d'une thermoélasticité anisotrope hétérogène et en présence de distorsions plastiques uniformes par morceaux (ou qui fluctuent uniquement le long de la normale à l'interface), ainsi qu'éventuellement d'un glissement au joint (sous l'hypothèse de gradient constant). L'intérêt des formules analytiques réside dans l'immédiateté des résultats et donc dans la possibilité d'étudier l'influence de différents paramètres : fraction volumique, orientation de l'interface, chargement macroscopique, orientations cristallines, valeurs des constantes élastiques, sans passer par des simulations EF ou FFT. Cela permet également de voir l'effet des différentes sources d'incompatibilité et leur couplage éventuel.

Dans la deuxième partie du chapitre, les formules théoriques développées

sont appliquées à l'étude de la déformation d'un bicristal réel, un micropilier bicristallin de Ni. Ce travail a été réalisé dans le cadre de la thèse d'Idriss Tiba [Tib15] en co-tutelle avec l'Université de la Sarre. Une autre étude numérique a été réalisée à partir des formules développées. Elle concerne l'influence de l'élasticité anisotrope sur l'initiation du glissement en présence de structures lamellaires de joints de macles $\Sigma 3(111)$.

Ce chapitre rassemble les résultats de 4 articles : [RB13], [RB14], [RTBB15] et [TRM⁺15], auxquels sont associées les contributions des collègues suivants : Stéphane Berbenni, Idriss Tiba, Christian Motz, Horst Vehoff et Olivier Bouaziz.

2.1 Interface plane quelconque

2.1.1 Formulation du problème

Dans un milieu continu, une interface plane, fixe, infinie, qui sépare deux cristaux I et II est considérée (figure 2.1). Nous nous plaçons dans le cadre d'une approche statique, et toujours dans le cadre de l'hypothèse des petites déformations où $\beta = \beta^e + \beta^p$. Le vecteur unitaire normal à l'interface \underline{n} est supposé être orienté du cristal I vers le cristal II suivant la direction \underline{e}_2 (figure 2.1). Dans ce chapitre, l'exposant I sera utilisé pour nommer les variables dans le cristal I ($x_2 < 0$) et l'exposant II les variables dans le cristal II ($x_2 > 0$). V , V^I et V^{II} désignent ainsi, respectivement, le volume total (infini) du bicristal, celui du cristal I et celui du cristal II . Les fractions volumiques des cristaux I et II sont dénotées, respectivement, $f^I = \frac{V^I}{V}$ et $f^{II} = \frac{V^{II}}{V}$. Ce bicristal est supposé s'être déformé en l'absence de force de volume et sous l'action de chargements macroscopiques homogènes en déformation $\underline{\tilde{E}}$ et en rotation $\underline{\tilde{\Omega}}$ appliqués sur sa frontière externe repoussée à l'infini, ainsi que d'une variation de température ΔT supposée homogène dans tout le volume V . $\underline{\tilde{E}}$ et $\underline{\tilde{\Omega}}$ vérifient les théorèmes des moyennes des déformations et des rotations, respectivement :

$$\underline{\tilde{E}} = \langle \underline{\epsilon} \rangle_V, \quad (2.1)$$

$$\underline{\tilde{\Omega}} = \langle \underline{\omega} \rangle_V. \quad (2.2)$$

De même, le tenseur des contraintes macroscopiques $\underline{\tilde{\Sigma}}$ est supposé homogène et correspond à la moyenne des contraintes :

$$\underline{\tilde{\Sigma}} = \langle \underline{\sigma} \rangle_V. \quad (2.3)$$

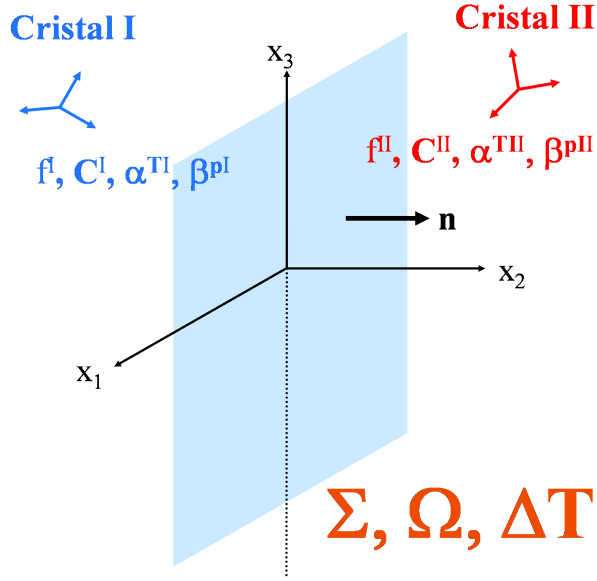


FIGURE 2.1 – Bicristal infini avec interface plane.

Le tenseur des complaisances élastiques isothermes $\underset{\sim}{s}$, le tenseur symétrique des dilatations thermiques $\underset{\sim}{\alpha}^T$ et le tenseur des distorsions plastiques $\underset{\sim}{\beta}^p$ sont supposés uniformes dans chaque cristal, ce qui permet d'écrire :

$$\underset{\sim}{s} = \underset{\sim}{s}^I + \left[\underset{\sim}{s} \right] H(x_2), \quad (2.4)$$

$$\underset{\sim}{\alpha}^T = \underset{\sim}{\alpha}^{T I} + \left[\underset{\sim}{\alpha}^T \right] H(x_2), \quad (2.5)$$

$$\underset{\sim}{\beta}^p = \underset{\sim}{\beta}^{p I} + \left[\underset{\sim}{\beta}^p \right] H(x_2), \quad (2.6)$$

où $H(x_2)$ est la fonction échelon d'Heaviside. Le problème statique de la figure 2.1 considère l'existence de champs de contrainte et de distorsion dans un volume infini. Du fait de la géométrie de ce problème et des hypothèses concernant les propriétés thermo-élastiques (eqs. 2.4 et 2.5) et la plasticité (eq. 2.6), les champs de contrainte et de distorsion sont forcément invariants le long de x_2 et x_3 :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{\sim,1} = \underset{\sim}{\sigma}_{\sim,3} = 0, \quad (2.7)$$

$$\underset{\sim}{\beta}_{\sim,1} = \underset{\sim}{\beta}_{\sim,3} = 0. \quad (2.8)$$

Compte tenu des équations 2.7 et 2.3, l'équilibre des contraintes conduit à la condition suivante :

$$\sigma_{i2} = \Sigma_{i2}. \quad (2.9)$$

Ainsi, seules les composantes plan σ_{11} , σ_{33} et σ_{31} sont inconnues. Etant donné les invariances de β (eq. 2.8), la compatibilité des distorsions (eq. 1.8) est donnée par $(Rot \beta)_{ij} \sim \epsilon_{j2m} \beta_{im,2} = 0$. A l'aide des équations 2.6 et 2.5, il est alors possible d'écrire :

$$\forall j \neq 2, \beta_{ij}^e = \beta_{ij} - \beta_{ij}^p - \alpha_{ij}^T \Delta T = K_{ij} - \left(\left[\beta_{ij}^p \right] + \left[\alpha_{ij}^T \right] \Delta T \right) H(x_2), \quad (2.10)$$

où K_{ij} sont des constantes uniformes dans l'espace. Les composantes $\beta_{ij}^e (j \neq 2)$ sont donc également uniformes par morceaux. D'après l'équation 2.9 et la linéarité de la loi de Hooke écrite pour les composantes ϵ_{11}^e , ϵ_{33}^e et ϵ_{31}^e , les composantes inconnues des contraintes sont donc aussi uniformes par morceaux :

$$\underline{\sigma} = \underline{\sigma}^I + \left[\underline{\sigma} \right] H(x_2), \quad (2.11)$$

avec $[\sigma_{i2}] = 0$ (continuité du vecteur contrainte). Par conséquent, d'après l'équation 2.3, le tenseur des contraintes macroscopiques vérifie la relation suivante :

$$\underline{\Sigma} = f^I \underline{\sigma}^I + f^{II} \underline{\sigma}^{II}. \quad (2.12)$$

Les contraintes étant uniformes par morceaux, la loi de Hooke donnant les composantes ϵ_{12}^e , ϵ_{22}^e et ϵ_{23}^e montre que toutes les composantes des déformations élastiques sont uniformes par morceaux. De plus, $\omega_{13}^e = \frac{1}{2} (\beta_{13}^e - \beta_{31}^e)$, alors que les composantes 21 et 32 des rotations élastiques peuvent s'écrire : $\omega_{21}^e = -\epsilon_{12}^e + \beta_{21}^e$ et $\omega_{32}^e = \epsilon_{23}^e - \beta_{23}^e$, c'est à dire également comme la somme de champs uniformes par morceaux. Toutes les rotations élastiques sont donc uniformes par morceaux. Du fait de la décomposition en partie élastique et plastique, il en est de même des rotations totales. D'après l'équation 2.2, ces dernières vérifient alors :

$$\underline{\Omega} = f^I \underline{\omega}^I + f^{II} \underline{\omega}^{II}. \quad (2.13)$$

2.1.2 Contraintes d'incompatibilité

Dans cette sous-section et les suivantes, la notation contractée de Voigt [Voi28] (*cf.* Notations) est adoptée pour les tenseurs symétriques d'ordre 2 et 4. A partir de la loi de Hooke et des équations 2.10 et 2.9, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
s_{11}\sigma_1 + s_{13}\sigma_3 + s_{15}\sigma_5 + s_{12}\Sigma_2 + s_{14}\Sigma_4 + s_{16}\Sigma_6 &= K_1 - \left([\varepsilon_1^p] + [\alpha_1^T] \Delta T\right) H(x_2), \\
s_{13}\sigma_1 + s_{33}\sigma_3 + s_{35}\sigma_5 + s_{23}\Sigma_2 + s_{34}\Sigma_4 + s_{36}\Sigma_6 &= K_3 - \left([\varepsilon_3^p] + [\alpha_3^T] \Delta T\right) H(x_2), \\
s_{15}\sigma_1 + s_{35}\sigma_3 + s_{55}\sigma_5 + s_{25}\Sigma_2 + s_{45}\Sigma_4 + s_{56}\Sigma_6 &= K_5 - \left([\varepsilon_5^p] + [\alpha_5^T] \Delta T\right) H(x_2).
\end{aligned} \tag{2.14}$$

En écrivant l'expression des constantes K_i en fonction de σ_{\sim}^{II} dans le cristal I (grâce à l'équation 2.12) et dans le cristal II , puis en égalisant membre à membre et en multipliant par f^I on obtient :

$$\begin{aligned}
&\left(f^{II} s_{11}^I + f^I s_{11}^{II}\right) \sigma_1^{II} + \left(f^{II} s_{13}^I + f^I s_{13}^{II}\right) \sigma_3^{II} + \left(f^{II} s_{15}^I + f^I s_{15}^{II}\right) \sigma_5^{II} \\
&= -f^I \left([\varepsilon_1^p] + [\alpha_1^T] \Delta T + [s_{12}] \Sigma_2 + [s_{14}] \Sigma_4 + [s_{16}] \Sigma_6\right) + s_{11}^I \Sigma_1 + s_{13}^I \Sigma_3 + s_{15}^I \Sigma_5, \\
&\left(f^{II} s_{13}^I + f^I s_{13}^{II}\right) \sigma_1^{II} + \left(f^{II} s_{33}^I + f^I s_{33}^{II}\right) \sigma_3^{II} + \left(f^{II} s_{35}^I + f^I s_{35}^{II}\right) \sigma_5^{II} \\
&= -f^I \left([\varepsilon_3^p] + [\alpha_3^T] \Delta T + [s_{23}] \Sigma_2 + [s_{34}] \Sigma_4 + [s_{36}] \Sigma_6\right) + s_{13}^I \Sigma_1 + s_{33}^I \Sigma_3 + s_{35}^I \Sigma_5, \\
&\left(f^{II} s_{15}^I + f^I s_{15}^{II}\right) \sigma_1^{II} + \left(f^{II} s_{35}^I + f^I s_{35}^{II}\right) \sigma_3^{II} + \left(f^{II} s_{55}^I + f^I s_{55}^{II}\right) \sigma_5^{II} \\
&= -f^I \left([\varepsilon_5^p] + [\alpha_5^T] \Delta T + [s_{25}] \Sigma_2 + [s_{45}] \Sigma_4 + [s_{56}] \Sigma_6\right) + s_{15}^I \Sigma_1 + s_{35}^I \Sigma_3 + s_{55}^I \Sigma_5.
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Afin d'exprimer ce système sous une forme plus compacte, les notations suivantes sont adoptées :

$$\tilde{s} \approx f^{II} s_{\approx}^I + f^I s_{\approx}^{II} = s_{\approx}^I + f^I \left[s_{\approx} \right], \tag{2.16}$$

$$\left[\varepsilon_{\sim}^{\star} \right] = \left[s_{\sim} \right] : \Sigma + \left[\varepsilon_{\sim}^p \right] + \left[\alpha_{\sim}^T \right] \Delta T. \tag{2.17}$$

Le système 2.15 peut alors s'écrire de manière plus condensée :

$$\begin{aligned}
\tilde{s}_{11} (\sigma_1^{II} - \Sigma_1) + \tilde{s}_{13} (\sigma_3^{II} - \Sigma_3) + \tilde{s}_{15} (\sigma_5^{II} - \Sigma_5) &= -f^I \left[\varepsilon_1^{\star} \right], \\
\tilde{s}_{13} (\sigma_1^{II} - \Sigma_1) + \tilde{s}_{33} (\sigma_3^{II} - \Sigma_3) + \tilde{s}_{35} (\sigma_5^{II} - \Sigma_5) &= -f^I \left[\varepsilon_3^{\star} \right], \\
\tilde{s}_{15} (\sigma_1^{II} - \Sigma_1) + \tilde{s}_{35} (\sigma_3^{II} - \Sigma_3) + \tilde{s}_{55} (\sigma_5^{II} - \Sigma_5) &= -f^I \left[\varepsilon_5^{\star} \right].
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Le système 2.18 est un système linéaire à 3 équations et 3 inconnues (σ_1^{II} , σ_3^{II} , σ_5^{II}) qui peut être résolu analytiquement, à l'aide de la règle de Cramer par exemple. Les contraintes dans le cristal I (σ_1^I , σ_3^I , σ_5^I) se déduisent ensuite directement à partir de l'équation 2.12. Au final, il est possible d'exprimer les contraintes dans les cristaux I et II de la façon suivante :

$$\sigma_{\sim}^I = \Sigma - f^{II} G : \left[\varepsilon_{\sim}^{\star} \right] \text{ et } \sigma_{\sim}^{II} = \Sigma + f^I G : \left[\varepsilon_{\sim}^{\star} \right], \tag{2.19}$$

ou bien de manière complètement explicite dans le cristal I :

$$\begin{aligned}
\sigma_1^I &= \Sigma_1^I - f^{II} (G_{11} [\varepsilon_1^*] + G_{13} [\varepsilon_3^*] + G_{15} [\varepsilon_5^*]), \\
\sigma_2^I &= \Sigma_2^I, \\
\sigma_3^I &= \Sigma_3^I - f^{II} (G_{13} [\varepsilon_1^*] + G_{33} [\varepsilon_3^*] + G_{35} [\varepsilon_5^*]), \\
\sigma_4^I &= \Sigma_4^I, \\
\sigma_5^I &= \Sigma_5^I - f^{II} (G_{15} [\varepsilon_1^*] + G_{35} [\varepsilon_3^*] + G_{55} [\varepsilon_5^*]), \\
\sigma_6^I &= \Sigma_6^I,
\end{aligned} \tag{2.20}$$

et dans le cristal II :

$$\begin{aligned}
\sigma_1^{II} &= \Sigma_1^{II} + f^I (G_{11} [\varepsilon_1^*] + G_{13} [\varepsilon_3^*] + G_{15} [\varepsilon_5^*]), \\
\sigma_2^{II} &= \Sigma_2^{II}, \\
\sigma_3^{II} &= \Sigma_3^{II} + f^I (G_{13} [\varepsilon_1^*] + G_{33} [\varepsilon_3^*] + G_{35} [\varepsilon_5^*]), \\
\sigma_4^{II} &= \Sigma_4^{II}, \\
\sigma_5^{II} &= \Sigma_5^{II} + f^I (G_{15} [\varepsilon_1^*] + G_{35} [\varepsilon_3^*] + G_{55} [\varepsilon_5^*]), \\
\sigma_6^{II} &= \Sigma_6^{II},
\end{aligned} \tag{2.21}$$

où les composantes non-nulles du tenseur symétrique G sont données par :

$$\begin{aligned}
G_{11} &= (\tilde{s}_{33}\tilde{s}_{55} - \tilde{s}_{35}^2) / D, & G_{13} &= G_{31} = (\tilde{s}_{15}\tilde{s}_{35} - \tilde{s}_{13}\tilde{s}_{55}) / D, \\
G_{33} &= (\tilde{s}_{11}\tilde{s}_{55} - \tilde{s}_{15}^2) / D, & G_{15} &= G_{51} = (\tilde{s}_{13}\tilde{s}_{35} - \tilde{s}_{15}\tilde{s}_{33}) / D, \\
G_{55} &= (\tilde{s}_{11}\tilde{s}_{33} - \tilde{s}_{13}^2) / D, & G_{35} &= G_{53} = (\tilde{s}_{13}\tilde{s}_{15} - \tilde{s}_{35}\tilde{s}_{11}) / D,
\end{aligned}$$

$$\text{avec } D = \tilde{s}_{11}\tilde{s}_{35}^2 + \tilde{s}_{33}\tilde{s}_{15}^2 + \tilde{s}_{55}\tilde{s}_{13}^2 - \tilde{s}_{11}\tilde{s}_{33}\tilde{s}_{55} - 2\tilde{s}_{13}\tilde{s}_{15}\tilde{s}_{35}. \tag{2.22}$$

Les autres composantes de G sont nulles, *i.e.*, $G_{AA} = G_{AP} = G_{PA} = 0$ avec P les composantes plan (1, 3, 5) et A les composantes anti-plan (2, 4, 6). Ainsi, nous pouvons noter que les composantes anti-plan de $[\varepsilon^*]$ n'induisent aucune contrainte d'incompatibilité telles que définies ci-dessous :

$$\sigma_{\sim}^{\perp I} = -f^{II} G_{\sim} : [\varepsilon_{\sim}^*] \text{ et } \sigma_{\sim}^{\perp II} = f^I G_{\sim} : [\varepsilon_{\sim}^*]. \tag{2.23}$$

Dans la suite, nous noterons également :

$$\sigma_{\sim}^{\perp *} = G_{\sim} : [\varepsilon_{\sim}^*] = [\sigma_{\sim}]. \tag{2.24}$$

Les contraintes principales du tenseur $\sigma_{\sim}^{\perp *}$ sont :

$$\begin{aligned}
\sigma_I^{\perp\star} &= \frac{\sigma_1^{\perp\star} + \sigma_3^{\perp\star}}{2} - \sqrt{\frac{\sigma_1^{\perp\star 2} + \sigma_3^{\perp\star 2}}{2} + \sigma_5^{\perp\star 2}}, \\
\sigma_{II}^{\perp\star} &= 0, \\
\sigma_{III}^{\perp\star} &= \frac{\sigma_1^{\perp\star} + \sigma_3^{\perp\star}}{2} + \sqrt{\frac{\sigma_1^{\perp\star 2} + \sigma_3^{\perp\star 2}}{2} + \sigma_5^{\perp\star 2}}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

On en déduit les valeurs maximales du cisaillement induit par les incompatibilités de déformation :

$$\begin{aligned}
\tau_{max}^{\perp I} &= f^{II} \sqrt{\frac{\sigma_1^{\perp\star 2} + \sigma_3^{\perp\star 2}}{2} + \sigma_5^{\perp\star 2}}, \\
\tau_{max}^{\perp II} &= f^I \sqrt{\frac{\sigma_1^{\perp\star 2} + \sigma_3^{\perp\star 2}}{2} + \sigma_5^{\perp\star 2}}.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Ces cisaillements additionnels s'exercent dans les deux cristaux sur un même plan qui est orthogonal à l'interface et selon des directions opposées qui sont parallèles au plan de l'interface. Leur amplitude relative est l'inverse du rapport des fractions volumiques. Par ailleurs, on peut noter que la pression hydrostatique induit par les incompatibilités de déformation est de signe opposé d'un cristal à l'autre et vaut :

$$P^{\perp I} = -f^{II} (\sigma_1^{\perp\star} + \sigma_3^{\perp\star}) \text{ et } P^{\perp II} = f^I (\sigma_1^{\perp\star} + \sigma_3^{\perp\star}). \tag{2.27}$$

Les expressions des contraintes d'incompatibilité données par les équations 2.20 et 2.21 ont été validés numériquement en simulant par EF le comportement mécanique d'un bicristal auquel des conditions périodiques ont été imposées sur les surfaces latérales [RB13]. Ces expressions montrent l'existence d'effets de couplage entre incompatibilités élastique et plastique, ainsi qu'entre incompatibilités élastique et thermique. Elles ont ainsi été utilisées afin de quantifier les effets de différentes sources d'incompatibilité (élastique seule, plastique seule et couplage élastique/plastique) au cours de simulations EF [RB13]. Par ailleurs, il est important de noter que les contraintes obtenues dans le cas du bicristal de la figure 2.1 sont également valables pour une structure laminée périodique avec propriétés thermo-élastiques et distorsions plastiques uniformes dans chaque phase (figure 2.2) [RTBB15]. En effet, les équations de champs d'une structure laminée périodique (équations de compatibilité, équilibre des contraintes, invariance du problème) restent les mêmes que celles du bicristal infini [OFSH00, SP02, FB07] et donc les expressions des contraintes $\tilde{\sigma}^I$ et $\tilde{\sigma}^{II}$ données par les équations 2.19 sont également valables dans les phases I et II de la structure laminée de la figure 2.2.

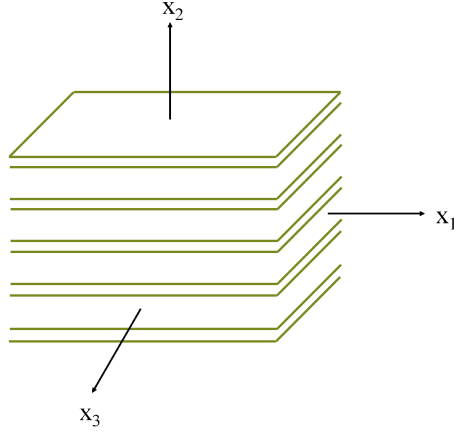


FIGURE 2.2 – Structure laminée périodique.

2.1.3 Module effectif

L'écriture des contraintes telle que donnée dans l'équation 2.19 à l'aide du tenseur \tilde{G} permet également d'obtenir une expression relativement compacte du tenseur des complaisances effectives $s_{\tilde{\approx}}^{eff}$, défini pour un comportement élastique par $\tilde{E} = s_{\tilde{\approx}}^{eff} : \tilde{\Sigma}$. Dans le repère des figures 2.1 et 2.2, on obtient ainsi pour un bicristal ou une structure laminée périodique :

$$s_{\tilde{\approx}}^{eff} = \langle s_{\tilde{\approx}} \rangle + f^I f^{II} \left[s_{\tilde{\approx}} \right] : \tilde{G} : \left[s_{\tilde{\approx}} \right], \quad (2.28)$$

c'est à dire en notation indicielle et avec la notation contractée de Voigt : $s_{ij}^{eff} = \langle s_{ij} \rangle + f^I f^{II} [s_{ik}] G_{kl} [s_{lj}]$.

2.1.4 Rotations élastiques

Dans cette sous-section, nous cherchons à obtenir l'expression du tenseur des rotations élastiques $\tilde{\omega}^e$. En raison de sa nature anti-symétrique, seules trois composantes sont à rechercher.

La décomposition des rotations en partie élastique et plastique permet de réécrire l'équation 2.13 sous la forme $\tilde{\Omega} = f^I \left(\tilde{\omega}^{eI} + \tilde{\omega}^{pI} \right) + f^{II} \left(\tilde{\omega}^{eII} + \tilde{\omega}^{pII} \right)$. Ainsi, il est possible d'exprimer les tenseurs des rotations élastiques dans les cristaux I et II en fonction du saut des rotations élastiques $\left[\tilde{\omega}^e \right]$ et des tenseurs de rotation macroscopique et rotation plastique dans chaque cristal qui sont des données d'entrée du problème :

$$\begin{aligned}
\omega_{\sim}^{eI} &= \Omega_{\sim} - f^{II} [\omega_{\sim}^e] - f^I \omega_{\sim}^{pI} - f^{II} \omega_{\sim}^{pII}, \\
\omega_{\sim}^{eII} &= \Omega_{\sim} + f^I [\omega_{\sim}^e] - f^I \omega_{\sim}^{pI} - f^{II} \omega_{\sim}^{pII}.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Or, d'après l'équation 2.10, les composantes plan des sauts de distorsion élastique sont connues :

$$\forall j \neq 2, [\beta_{ij}^e] = - [\beta_{ij}^p] - [\alpha_{ij}^T] \Delta T. \tag{2.30}$$

Les composantes anti-plan peuvent elles s'exprimer comme la combinaison d'un saut de déformation élastique $[\varepsilon_{\sim}^e]$ et d'une composante plan. Au final, les sauts de rotation élastique sont alors donnés par :

$$\begin{aligned}
[\omega_{32}^e] &= [\varepsilon_{23}^e] + [\beta_{23}^p] + [\alpha_{23}^T] \Delta T, \\
[\omega_{13}^e] &= - [\omega_{13}^p], \\
[\omega_{21}^e] &= - [\varepsilon_{12}^e] - [\beta_{21}^p] - [\alpha_{12}^T] \Delta T.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Les sauts de déformation élastique se déduisent eux de la loi de Hooke et de l'équation 2.19 :

$$[\varepsilon_{\sim}^e] = [\underline{s}] : \Sigma + \tilde{s} : \sigma_{\sim}^{\perp*}. \tag{2.32}$$

Ainsi, pour les rotations élastiques aussi, il existe des effets de couplage entre incompatibilités élastique, plastique et thermique. Ensuite, par combinaison des équations 2.29 et 2.31, nous obtenons les expressions définitives des rotations élastiques dans chaque cristal :

$$\begin{aligned}
\omega_{32}^{eI} &= \Omega_{32} - f^{II} [\varepsilon_{23}^e] - f^{II} [\beta_{23}^p] - f^{II} [\alpha_{23}^T] \Delta T - f^I \omega_{32}^{pI} - f^{II} \omega_{32}^{pII}, \\
\omega_{13}^{eI} &= \Omega_{13} - \omega_{13}^{pI}, \\
\omega_{21}^{eI} &= \Omega_{21} + f^{II} [\varepsilon_{12}^e] + f^{II} [\beta_{21}^p] + f^{II} [\alpha_{12}^T] \Delta T - f^I \omega_{21}^{pI} - f^{II} \omega_{21}^{pII},
\end{aligned} \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned}
\omega_{32}^{eII} &= \Omega_{32} + f^I [\varepsilon_{23}^e] + f^I [\beta_{23}^p] + f^I [\alpha_{23}^T] \Delta T - f^I \omega_{32}^{pI} - f^{II} \omega_{32}^{pII}, \\
\omega_{13}^{eII} &= \Omega_{13} - \omega_{13}^{pII}, \\
\omega_{21}^{eII} &= \Omega_{21} - f^I [\varepsilon_{12}^e] - f^I [\beta_{21}^p] - f^I [\alpha_{12}^T] \Delta T - f^I \omega_{21}^{pI} - f^{II} \omega_{21}^{pII},
\end{aligned} \tag{2.34}$$

avec :

$$\begin{aligned}
[\varepsilon_{23}^e] &= \frac{1}{2} [\varepsilon_4^e] = \frac{1}{2} \left([s_{i4}] \Sigma_i + \tilde{s}_{i4} G_{ij} \left([s_{jk}] \Sigma_k + [\varepsilon_j^p] + [\alpha_j^T] \Delta T \right) \right), \\
[\varepsilon_{12}^e] &= \frac{1}{2} [\varepsilon_6^e] = \frac{1}{2} \left([s_{i6}] \Sigma_i + \tilde{s}_{i6} G_{ij} \left([s_{jk}] \Sigma_k + [\varepsilon_j^p] + [\alpha_j^T] \Delta T \right) \right).
\end{aligned} \tag{2.35}$$

2.1.5 Cas isotrope

Dans cette section, les propriétés thermo-élastiques de chaque cristal sont supposées isotropes. L'élasticité de chaque cristal est caractérisée par un module de cisaillement $\mu^{I,II}$ et un coefficient de Poisson $\nu^{I,II}$, tandis que le tenseur des coefficients de dilatation thermique est pris sphérique : $\underset{\sim}{\alpha}^{T^{I,II}} = \alpha^{T^{I,II}} \underset{\sim}{I}$. Afin de simplifier certaines expressions, on introduit également les modules d'Young $E^{I,II} = 2\mu^{I,II}(1 + \nu^{I,II})$.

Elasticité et expansion thermique homogènes

Si l'élasticité et l'expansion thermique sont supposées homogènes, nous avons $\underset{\sim}{s} = \underset{\sim}{s}$ et $[\underset{\sim}{\varepsilon}^*] = [\underset{\sim}{\varepsilon}^p]$. Dans le cas d'une élasticité isotrope, les composantes non-nulles du tenseur symétrique $\underset{\sim}{G}$ se réduisent alors à :

$$G_{11} = G_{33} = \frac{-2\mu}{(1-\nu)}, \quad G_{13} = \frac{-2\mu\nu}{(1-\nu)} \quad \text{et} \quad G_{55} = -\mu. \quad (2.36)$$

Nous en déduisons ensuite directement l'expression des contraintes plan dans chaque cristal, ainsi que celle des rotations élastiques :

$$\begin{aligned} \sigma_1^I &= \Sigma_1 + f^{II} \frac{2\mu}{1-\nu} ([\varepsilon_1^p] + \nu[\varepsilon_3^p]), \\ \sigma_3^I &= \Sigma_3 + f^{II} \frac{2\mu}{1-\nu} ([\varepsilon_3^p] + \nu[\varepsilon_1^p]), \\ \sigma_5^I &= \Sigma_5 + f^{II} \mu [\varepsilon_5^p], \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \sigma_1^{II} &= \Sigma_1 - f^I \frac{2\mu}{1-\nu} ([\varepsilon_1^p] + \nu[\varepsilon_3^p]), \\ \sigma_3^{II} &= \Sigma_3 - f^I \frac{2\mu}{1-\nu} ([\varepsilon_3^p] + \nu[\varepsilon_1^p]), \\ \sigma_5^{II} &= \Sigma_5 - f^I \mu [\varepsilon_5^p], \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \omega_{32}^{e\ I} &= \Omega_{32} - f^{II} [\beta_{23}^p] - f^I \omega_{32}^{p\ I} - f^{II} \omega_{32}^{p\ II}, \\ \omega_{13}^{e\ I} &= \Omega_{13} - \omega_{13}^{p\ I}, \\ \omega_{21}^{e\ I} &= \Omega_{21} + f^{II} [\beta_{21}^p] - f^I \omega_{21}^{p\ I} - f^{II} \omega_{21}^{p\ II}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \omega_{32}^{e\ II} &= \Omega_{32} + f^I [\beta_{23}^p] - f^I \omega_{32}^{p\ I} - f^{II} \omega_{32}^{p\ II}, \\ \omega_{13}^{e\ II} &= \Omega_{13} - \omega_{13}^{p\ II}, \\ \omega_{21}^{e\ II} &= \Omega_{21} - f^I [\beta_{21}^p] - f^I \omega_{21}^{p\ I} - f^{II} \omega_{21}^{p\ II}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ces expressions des contraintes peuvent être retrouvées par l'intermédiaire d'autres techniques comme les transformées de Fourier dans [RS76] et le potentiel des contraintes de Kröner [Krö81] dans [Ber80, RZ80]. Il est à noter que dans ce dernier cas, contrairement à la démarche proposée ici, la résolution du calcul nécessite l'utilisation de l'hypothèse d'incompressibilité plastique. Par ailleurs, nous pouvons noter que les rotations élastiques ne dépendent plus des constantes élastiques en élasticité homogène isotrope.

Elasticité et expansion thermique hétérogènes

Dans le cas d'une élasticité et d'une expansion thermique isotropes mais hétérogènes, les composantes non-nulles du tenseur symétrique \underline{G} se réduisent à :

$$\begin{aligned} G_{11} &= G_{33} = -(f^I E^I + f^{II} E^{II}) E^I E^{II} / Q, \\ G_{13} &= -(f^I \nu^{II} E^I + f^{II} \nu^I E^{II}) E^I E^{II} / Q, \\ G_{55} &= -\frac{\mu^I \mu^{II}}{f^I \mu^I + f^{II} \mu^{II}}, \end{aligned}$$

$$\text{avec } Q = f^{I^2} E^{I^2} (1 - \nu^{II^2}) + f^{II^2} E^{II^2} (1 - \nu^{I^2}) + 2f^I f^{II} E^I E^{II} (1 - \nu^I \nu^{II}). \quad (2.41)$$

Nous donnons alors ci-dessous les expressions des composantes σ_5^I et σ_5^{II} qui sont relativement compactes :

$$\sigma_5^I = \frac{\mu^I \Sigma_5 + f^{II} \mu^I \mu^{II} [\varepsilon_5^p]}{f^I \mu^I + f^{II} \mu^{II}}, \quad (2.42)$$

$$\sigma_5^{II} = \frac{\mu^{II} \Sigma_5 - f^I \mu^I \mu^{II} [\varepsilon_5^p]}{f^I \mu^I + f^{II} \mu^{II}}. \quad (2.43)$$

Par ailleurs, nous notons que sous ces hypothèses, $[\varepsilon_4^e] = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu^{II}} - \frac{1}{\mu^I} \right) \Sigma_4$ et $[\varepsilon_6^e] = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu^I} - \frac{1}{\mu^{II}} \right) \Sigma_6$, ce qui simplifie les expressions des rotations élastiques (eqs. 2.33 et 2.34). Ces dernières ne comportent alors plus d'effets de couplage entre incompatibilités élastique, plastique et thermique.

Enfin, il est intéressant de constater que les expressions des composantes 1 et 3 des contraintes se simplifient grandement si l'on considère un coefficient de Poisson identique pour les deux cristaux ($\nu^I = \nu^{II} = \nu$). Dans ce cas en effet, $Q = (1 - \nu^2) (f^I E^I + f^{II} E^{II})^2$ (eq. 2.41) et par suite des équations 2.20 et 2.21, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\sigma_1^I &= \frac{E^I \Sigma_1 + f^{II} \frac{\nu}{1-\nu} (E^{II} - E^I) \Sigma_2 + f^{II} \frac{E^I E^{II}}{1-\nu^2} ([\varepsilon_1^p] + \nu[\varepsilon_3^p]) + (1+\nu) [\alpha^T] \Delta T}{f^I E^I + f^{II} E^{II}}, \\
\sigma_3^I &= \frac{E^I \Sigma_3 + f^{II} \frac{\nu}{1-\nu} (E^{II} - E^I) \Sigma_2 + f^{II} \frac{E^I E^{II}}{1-\nu^2} ([\varepsilon_3^p] + \nu[\varepsilon_1^p]) + (1+\nu) [\alpha^T] \Delta T}{f^I E^I + f^{II} E^{II}}, \\
\sigma_1^{II} &= \frac{E^{II} \Sigma_1 + f^I \frac{\nu}{1-\nu} (E^I - E^{II}) \Sigma_2 - f^I \frac{E^I E^{II}}{1-\nu^2} ([\varepsilon_1^p] + \nu[\varepsilon_3^p]) + (1+\nu) [\alpha^T] \Delta T}{f^I E^I + f^{II} E^{II}}, \\
\sigma_3^{II} &= \frac{E^{II} \Sigma_3 + f^I \frac{\nu}{1-\nu} (E^I - E^{II}) \Sigma_2 - f^I \frac{E^I E^{II}}{1-\nu^2} ([\varepsilon_3^p] + \nu[\varepsilon_1^p]) + (1+\nu) [\alpha^T] \Delta T}{f^I E^I + f^{II} E^{II}}.
\end{aligned} \tag{2.44}$$

A partir des expressions ci-dessus, nous observons que le problème devient purement unidirectionnel dans le cas d'un chargement uniaxial selon la direction 1 ou 3 en élasticité pure. En confondant E^I et E^{II} avec les modules d'Young directionnels selon la direction de chargement dans les cristaux I et II , nous retrouvons d'ailleurs les contraintes dans un bicristal données par Hook et Hirth [HH67]. Par exemple, pour un chargement uniaxial selon la direction 3 en élasticité pure, on a :

$$\begin{aligned}
\sigma_3^I &= \frac{E^I}{f^I E^I + f^{II} E^{II}} \Sigma_3, \quad \sigma_1^I = \sigma_2^I = \sigma_4^I = \sigma_5^I = \sigma_6^I = 0, \\
\sigma_3^{II} &= \frac{E^{II}}{f^I E^I + f^{II} E^{II}} \Sigma_3, \quad \sigma_1^{II} = \sigma_2^{II} = \sigma_4^{II} = \sigma_5^{II} = \sigma_6^{II} = 0.
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Ces expressions scalaires simples sont souvent utilisées en science des matériaux pour une évaluation rapide des contraintes d'incompatibilité d'origine élastique [Khe12]. Bien qu'elles négligent l'effet Poisson, elles peuvent constituer une bonne approximation si l'interface est bien parallèle à l'axe de chargement. En revanche, elles produisent des erreurs importantes dans le cas d'une interface inclinée.

2.1.6 Fluctuation normale de la plasticité

Contraintes d'incompatibilité

Dans cette sous-section, nous considérons à nouveau l'anisotropie et l'hétérogénéité des propriétés élastique et thermique et introduisons des variations possibles des distorsions plastiques le long de la normale à l'interface (figure 2.3). Ces variations sont supposées continues dans chaque cristal. De plus, on suppose également que les moyennes des distorsions plastiques dans chaque cristal sont des champs finis, *i.e.*, qu'on peut décomposer les distorsions plastiques sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\tilde{\beta}^{pI}(x_2) &= \tilde{\beta}^{p\infty I} + \delta\tilde{\beta}^{pI}(x_2), \\ \tilde{\beta}^{pII}(x_2) &= \tilde{\beta}^{p\infty II} + \delta\tilde{\beta}^{pII}(x_2).\end{aligned}\tag{2.46}$$

avec :

$$\begin{aligned}\tilde{\beta}^{p\infty I} &= \langle \tilde{\beta}^{pI}(x_2) \rangle_{V^I}, \\ \tilde{\beta}^{p\infty II} &= \langle \tilde{\beta}^{pII}(x_2) \rangle_{V^{II}},\end{aligned}\tag{2.47}$$

et :

$$\langle \delta\tilde{\beta}^{pI}(x_2) \rangle_{V^I} = \langle \delta\tilde{\beta}^{pII}(x_2) \rangle_{V^{II}} = 0.\tag{2.48}$$

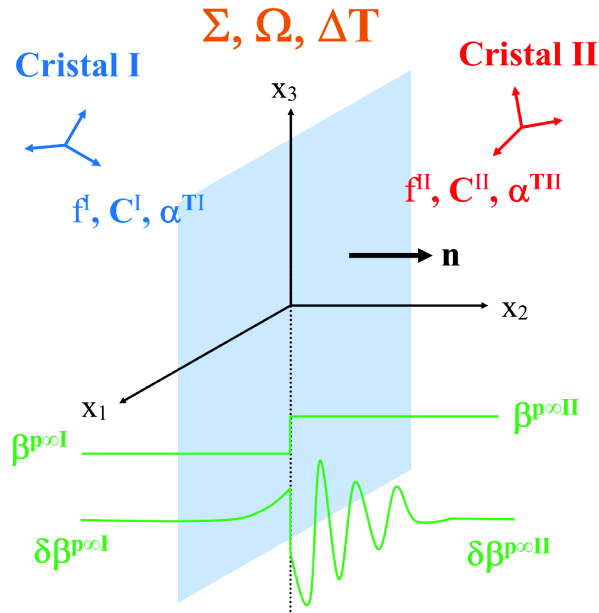


FIGURE 2.3 – Bicristal infini avec interface plane et variations possibles des distortions plastiques le long de la normale à l'interface.

Par construction, $\tilde{\beta}^{p\infty}$ ($= \tilde{\beta}^{p\infty I}$ si $x_2 < 0$; $\tilde{\beta}^{p\infty II}$ si $x_2 > 0$) est uniforme par morceaux, tandis que $\delta\tilde{\beta}^{p\infty}$ ($= \delta\tilde{\beta}^{pI}$ si $x_2 < 0$; $\delta\tilde{\beta}^{pII}$ si $x_2 > 0$) varie avec x_2 et est en moyenne nul dans chaque cristal. Il est à noter que $\tilde{\beta}^{p\infty}$ et $\delta\tilde{\beta}^{p\infty}$ peuvent tous les deux être discontinus à l'interface (figure 2.3). Les

invariances du problème restent les mêmes que précédemment (eqs. 2.7 et 2.8), ainsi que reste valable la relation $\sigma_{i2} = \Sigma_{i2}$ (eq. 2.9) [RB14]. La compatibilité des distorsions totales (eq. 1.8) conduit cependant maintenant aux relations suivantes :

$$\forall j \neq 2, \beta_{ij}^e(x_2) = K_{ij} - \left(\left[\beta_{ij}^{p\infty} \right] + [\alpha_{ij}^T] \Delta T \right) H(x_2) - \delta\beta_{ij}^p(x_2), \quad (2.49)$$

où K_{ij} sont toujours des constantes uniformes dans l'espace. Ainsi, $\langle \beta^{eI}(x_2) \rangle_{V^I}$ et $\langle \beta^{eII}(x_2) \rangle_{V^{II}}$ sont des champs finis, tout comme $\langle \sigma^I(x_2) \rangle_{V^I}$ et $\langle \sigma^{II}(x_2) \rangle_{V^{II}}$ par linéarité de la loi de Hooke. Il est alors possible de décomposer les tenseur des contraintes sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \sigma_{\sim}^I(x_2) &= \sigma_{\sim}^{\infty I} + \delta\sigma_{\sim}^I(x_2), \\ \sigma_{\sim}^{II}(x_2) &= \sigma_{\sim}^{\infty II} + \delta\sigma_{\sim}^{II}(x_2), \end{aligned} \quad (2.50)$$

avec :

$$\sigma_{\sim}^{\infty I} = \langle \sigma_{\sim}^I(x_2) \rangle_{V^I} \text{ et } \sigma_{\sim}^{\infty II} = \langle \sigma_{\sim}^{II}(x_2) \rangle_{V^{II}}, \quad (2.51)$$

et :

$$\langle \delta\sigma_{\sim}^{II}(x_2) \rangle_{V^I} = \langle \delta\sigma_{\sim}^{II}(x_2) \rangle_{V^{II}} = 0. \quad (2.52)$$

En conséquence des eqs. 2.48 and 2.52, les tenseurs de fluctuations, $\delta\beta_{\sim}^p$ et $\delta\sigma_{\sim}$, tendent forcément vers zéro à l'infini :

$$\begin{aligned} \delta\beta_{\sim}^{pI}(x_2 \rightarrow -\infty) &= \delta\beta_{\sim}^{pII}(x_2 \rightarrow +\infty) = 0, \\ \delta\beta_{\sim}^{pI}(x_2 \rightarrow -\infty) &= \delta\beta_{\sim}^{pII}(x_2 \rightarrow +\infty) = 0. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Etant donné les équations 2.3, 2.9, 2.51 et 2.50 nous avons aussi :

$$\delta\sigma_{i2} = 0, \quad (2.54)$$

ainsi que :

$$\Sigma = \frac{1}{2}(\sigma_{\sim}^{\infty I} + \sigma_{\sim}^{\infty II}). \quad (2.55)$$

L'équation 2.49 et la loi de Hooke permettent alors d'obtenir le système suivant d'équations :

$$\begin{aligned}
s_{11}\sigma_1 + s_{13}\sigma_3 + s_{15}\sigma_5 + s_{12}\Sigma_2 + s_{14}\Sigma_4 + s_{16}\Sigma_6 &= K_1 - \left([\varepsilon_1^{p\infty}] + [\alpha_1^T] \Delta T \right) H(x_2) - \delta\varepsilon_1^p, \\
s_{13}\sigma_1 + s_{33}\sigma_3 + s_{35}\sigma_5 + s_{23}\Sigma_2 + s_{34}\Sigma_4 + s_{36}\Sigma_6 &= K_3 - \left([\varepsilon_3^{p\infty}] + [\alpha_3^T] \Delta T \right) H(x_2) - \delta\varepsilon_3^p, \\
s_{15}\sigma_1 + s_{35}\sigma_3 + s_{55}\sigma_5 + s_{25}\Sigma_2 + s_{45}\Sigma_4 + s_{56}\Sigma_6 &= K_5 - \left([\varepsilon_5^{p\infty}] + [\alpha_5^T] \Delta T \right) H(x_2) - \delta\varepsilon_5^p.
\end{aligned} \tag{2.56}$$

Le tenseur σ_{\sim}^{∞} est obtenu en écrivant ce système en $x_2 \rightarrow -\infty$ et $x_2 \rightarrow +\infty$. Il correspond au tenseur des contraintes quand la plasticité est supposée uniforme par morceaux (eq. 2.19). Par différence, le tenseur $\delta\sigma_{\sim}$ est ainsi solution du système d'équations suivant :

$$\begin{aligned}
s_{11}\delta\sigma_1 + s_{13}\delta\sigma_3 + s_{15}\delta\sigma_5 &= -\delta\varepsilon_1^p, \\
s_{13}\delta\sigma_1 + s_{33}\delta\sigma_3 + s_{35}\delta\sigma_5 &= -\delta\varepsilon_3^p, \\
s_{15}\delta\sigma_1 + s_{35}\delta\sigma_3 + s_{55}\delta\sigma_5 &= -\delta\varepsilon_5^p,
\end{aligned} \tag{2.57}$$

qui peut être résolu aisément par analogie avec la résolution du système 2.18. Au final, les tenseurs des contraintes dans chaque cristal peuvent s'exprimer de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
\sigma_{\sim}^I(x_2) &= \Sigma_{\sim} - f^{II} G_{\sim} : [\varepsilon_{\sim}^{*\infty}] + G_{\sim}^I : \delta\varepsilon_{\sim}^{pI}(x_2), \\
\sigma_{\sim}^{II}(x_2) &= \Sigma_{\sim} + f^I G_{\sim} : [\varepsilon_{\sim}^{*\infty}] + G_{\sim}^{II} : \delta\varepsilon_{\sim}^{pII}(x_2),
\end{aligned} \tag{2.58}$$

avec :

$$[\varepsilon_{\sim}^{*\infty}] = [\underline{s}_{\sim}] : \Sigma_{\sim} + [\varepsilon_{\sim}^{p\infty}] + [\alpha_{\sim}^T] \Delta T, \tag{2.59}$$

et :

$$\begin{aligned}
G_{11}^{I,II} &= \left(s_{33}^{I,II} s_{55}^{I,II} - s_{35}^{I,II2} \right) / D^{I,II}, & G_{13}^{I,II} &= \left(s_{15}^{I,II} s_{35}^{I,II} - s_{13}^{I,II} s_{55}^{I,II} \right) / D^{I,II}, \\
G_{33}^{I,II} &= \left(s_{11}^{I,II} s_{55}^{I,II} - s_{15}^{I,II2} \right) / D^{I,II}, & G_{15}^{I,II} &= \left(s_{13}^{I,II} s_{35}^{I,II} - s_{15}^{I,II} s_{33}^{I,II} \right) / D^{I,II}, \\
G_{55}^{I,II} &= \left(s_{11}^{I,II} s_{33}^{I,II} - s_{13}^{I,II2} \right) / D^{I,II}, & G_{35}^{I,II} &= \left(s_{13}^{I,II} s_{15}^{I,II} - s_{35}^{I,II} s_{11}^{I,II} \right) / D^{I,II}, \\
D^{I,II} &= s_{11}^{I,II} s_{35}^{I,II2} + s_{33}^{I,II} s_{15}^{I,II2} + s_{55}^{I,II} s_{13}^{I,II2} - s_{11}^{I,II} s_{33}^{I,II} s_{55}^{I,II} - 2s_{13}^{I,II} s_{15}^{I,II} s_{35}^{I,II},
\end{aligned} \tag{2.60}$$

pour les composantes non-nulles des tenseurs symétriques $G_{\sim}^{I,II}$, celles de G étant donné par l'équation 2.22. On note que les termes à longue-distance σ_{\sim}^{∞} sont non-locaux dans le sens où ils dépendent des sauts $[\underline{s}_{\sim}]$, $[\varepsilon_{\sim}^{p\infty}]$ et $[\alpha_{\sim}^T]$, tandis que les termes $\delta\sigma_{\sim}^{I,II} = G_{\sim}^{I,II} : \delta\varepsilon_{\sim}^{pI,II}(x_2)$ sont purement locaux puisqu'ils ne dépendent que des propriétés élastiques locales et des valeurs locales de la déformation plastique.

Saut de contrainte

A partir du cadre développé, il est également intéressant de regarder l'expression du saut de contrainte car celui-ci intervient dans le calcul du saut de la densité d'énergie élastique $w^e = \frac{1}{2} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{\sigma}}$ dont dépend la thermodynamique des processus aux joints de grains comme la migration [BPC13]. En effet, on a (*cf.* Notations) :

$$[w^e] = \llcorner \underline{\underline{\sigma}} \gg : \llcorner \underline{\underline{s}} \gg : [\underline{\underline{\sigma}}] + \frac{1}{2} \llcorner \underline{\underline{\sigma}} \gg : [\underline{\underline{s}}] : \llcorner \underline{\underline{\sigma}} \gg . \quad (2.61)$$

D'après les équations 2.58, le saut de contrainte à l'interface vaut :

$$\begin{aligned} [\underline{\underline{\sigma}}] = & \underline{\underline{G}} : \left([\underline{\underline{s}}] : \underline{\underline{\Sigma}} + [\underline{\underline{\alpha}}^T] \Delta T \right) + \left(\underline{\underline{G}} - \underline{\underline{G}}^{II} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{p\infty II} \\ & - \left(\underline{\underline{G}} - \underline{\underline{G}}^I \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{p\infty I} + \underline{\underline{G}}^{II} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{p II}(0^+) - \underline{\underline{G}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^{p I}(0^-). \end{aligned} \quad (2.62)$$

En thermo-élasticité homogène, $[\underline{\underline{s}}] = 0$, $[\underline{\underline{\alpha}}^T] = 0$ et $\underline{\underline{G}} = \underline{\underline{G}}^I = \underline{\underline{G}}^{II}$, ce qui conduit à :

$$[w^e] = \llcorner \underline{\underline{\sigma}} \gg : \underline{\underline{s}} : [\underline{\underline{\sigma}}], \quad (2.63)$$

$$[\underline{\underline{\sigma}}] = \underline{\underline{G}} : [\underline{\underline{\varepsilon}}^p]. \quad (2.64)$$

Dans ce cas, le saut de contrainte dépend uniquement du saut de déformation plastique à l'interface alors que si l'élasticité est hétérogène, il dépend également des valeurs moyennes des déformations plastiques dans chaque cristal ainsi que du chargement.

Si la condition de saut sur la continuité du vecteur de Burgers à une interface fixe est satisfaite (eq. 1.27), on a $\underline{\underline{\varepsilon}}_P^{p I}(0^-) = \underline{\underline{\varepsilon}}_P^{p II}(0^+) = \underline{\underline{\varepsilon}}_P^p(0)$, d'où :

$$\begin{aligned} [\underline{\underline{\sigma}}] = & \underline{\underline{G}} : \left([\underline{\underline{s}}] : \underline{\underline{\Sigma}} + [\underline{\underline{\alpha}}^T] \Delta T \right) + \left(\underline{\underline{G}} - \underline{\underline{G}}^{II} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{p\infty II} \\ & - \left(\underline{\underline{G}} - \underline{\underline{G}}^I \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{p\infty I} + \left(\underline{\underline{G}}^{II} - \underline{\underline{G}}^I \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^p(0), \end{aligned} \quad (2.65)$$

et $[\underline{\underline{\sigma}}] = 0$ en thermo-élasticité homogène.

Rotations élastiques

En présence de variations des distorsions plastiques le long de la normale à l'interface, les rotations élastiques sont obtenues à partir de l'équation 2.49 et en écrivant la relation de moyenne suivante :

$$f^I \langle \omega_{\sim}^{eI} \rangle_{V^I} + f^{II} \langle \omega_{\sim}^{eI} \rangle_{V^{II}} = \tilde{\Omega} - f^I \omega_{\sim}^{p\infty I} - f^{II} \omega_{\sim}^{p\infty II} \quad (2.66)$$

Celles-ci peuvent alors s'exprimer comme :

$$\begin{aligned} \omega_{32}^{eI} &= \Omega_{32} - f^{II} [\varepsilon_{23}^{e\infty}] - f^{II} [\beta_{23}^{p\infty}] - f^{II} [\alpha_{23}^T] \Delta T \\ &\quad - f^I \omega_{32}^{p\infty I} - f^{II} \omega_{32}^{p\infty II} + \delta \varepsilon_{23}^{eI}(x_2) + \delta \beta_{23}^{pI}(x_2), \\ \omega_{13}^{eI} &= \Omega_{13} - \omega_{13}^{p\infty I} - \delta \omega_{13}^{pI}(x_2), \\ \omega_{21}^{eI} &= \Omega_{21} + f^{II} [\varepsilon_{12}^{e\infty}] + f^{II} [\beta_{21}^{p\infty}] + f^{II} [\alpha_{12}^T] \Delta T \\ &\quad - f^I \omega_{21}^{p\infty I} - f^{II} \omega_{21}^{p\infty II} - \delta \varepsilon_{12}^{eI}(x_2) - \delta \beta_{21}^{pI}(x_2), \end{aligned} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} \omega_{32}^{eII} &= \Omega_{32} + f^I [\varepsilon_{23}^{e\infty}] + f^I [\beta_{23}^{p\infty}] + f^I [\alpha_{23}^T] \Delta T \\ &\quad - f^I \omega_{32}^{p\infty I} - f^{II} \omega_{32}^{p\infty II} + \delta \varepsilon_{23}^{eII}(x_2) + \delta \beta_{23}^{pII}(x_2), \\ \omega_{13}^{eII} &= \Omega_{13} - \omega_{13}^{p\infty II} - \delta \omega_{13}^{pII}(x_2), \\ \omega_{21}^{eII} &= \Omega_{21} - f^I [\varepsilon_{12}^{e\infty}] - f^I [\beta_{21}^{p\infty}] - f^I [\alpha_{12}^T] \Delta T \\ &\quad - f^I \omega_{21}^{p\infty I} - f^{II} \omega_{21}^{p\infty II} - \delta \varepsilon_{12}^{eII}(x_2) - \delta \beta_{21}^{pII}(x_2), \end{aligned} \quad (2.68)$$

avec :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\sim}^{e\infty I,II} &= s_{\sim}^{I,II} : \sigma_{\sim}^{\infty I,II}, \\ \delta \varepsilon_{\sim}^{eI,II}(x_2) &= s_{\sim}^{I,II} : \delta \sigma_{\sim}^{I,II}(x_2). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Les sauts de rotations élastiques restent identiques aux expressions 2.31. Par ailleurs, si la condition de saut sur la continuité du vecteur de Burgers à l'interface est satisfaite (eq. 1.27), ces sauts deviennent :

$$\begin{aligned} [\omega_{32}^e] &= [\varepsilon_{23}^e] + [\alpha_{32}^T] \Delta T, \\ [\omega_{13}^e] &= 0, \\ [\omega_{21}^e] &= -[\varepsilon_{12}^e] - [\alpha_{21}^T] \Delta T, \end{aligned} \quad (2.70)$$

et $[\omega_{\sim}^e] = 0$ en thermo-élasticité homogène. Il est à noter que cette dernière condition a été implémentée dans un code de plasticité cristalline avec une formulation purement viscoplastique par Mach *et al.* [MBA10]. Ils ont montré qu'une telle condition conduisait à des textures moins marquées et plus proches de la réalité par rapport à un modèle de Taylor [Tay38] et un modèle à champs complets sans condition de saut.

2.2 Cas d'une symétrie de maclage

2.2.1 Macles de type I et de type II

Dans cette section, les interfaces planes des figure 2.1 et 2.2 sont supposées être des joints de macle où le cristal I représente la phase parent et le cristal II la phase maclée. Dans la réalité, les macles ont des dimensions finies et le cisaillement de maclage lui-même induit des contraintes d'incompatibilité. Cependant, dans la configuration actuelle, les macles sont de dimensions infinies et leur cisaillement n'induit aucune contrainte d'incompatibilité puisqu'il a lieu dans le plan des interfaces. Nous définissons alors $(\underline{e}_1^*, \underline{e}_2^*, \underline{e}_3^*)$ les vecteurs de base d'un repère orthonormé rattaché au joint de macle (figure 2.4). \underline{e}_1^* et \underline{e}_2^* sont colinéaires, respectivement, à $\underline{\eta}_1$ et à \underline{n}^{K_1} (cf. section 1.3.1). Dorénavant, s_{ij}^* désignera les complaisances élastiques du cristal I dans le repère du joint de macle, tandis que s_{ij} désignera les complaisances élastiques dans le repère du monocristal.

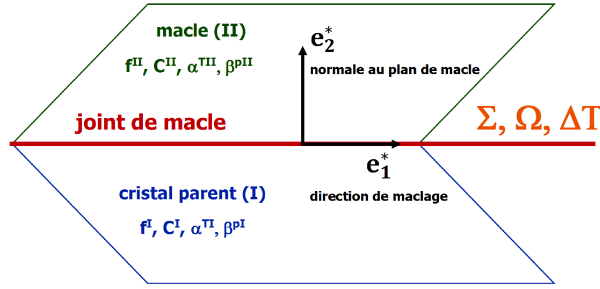


FIGURE 2.4 – Joint de macle plan infini.

Type I

Pour du maclage de type I, l'orientation du réseau maclé par rapport au réseau parent correspond à une rotation de 180° par rapport à \underline{n}^{K_1} [CM95]. Ainsi, dans le repère attaché au joint de macle, le tenseur des complaisances élastiques du cristal II (*i.e.*, le cristal maclé), S^{II} , se déduit du tenseur des complaisances élastiques du cristal I , $S^I = s^*$, par une rotation de 180° autour de \underline{e}_2^* :

$$S_{\approx}^{II} = \begin{bmatrix} s_{11}^* & s_{12}^* & s_{13}^* & -s_{14}^* & s_{15}^* & -s_{16}^* \\ s_{12}^* & s_{22}^* & s_{23}^* & -s_{24}^* & s_{25}^* & -s_{26}^* \\ s_{13}^* & s_{23}^* & s_{33}^* & -s_{34}^* & s_{35}^* & -s_{36}^* \\ -s_{14}^* & -s_{24}^* & -s_{34}^* & s_{44}^* & -s_{45}^* & s_{46}^* \\ s_{15}^* & s_{25}^* & s_{35}^* & -s_{45}^* & s_{55}^* & -s_{56}^* \\ -s_{16}^* & -s_{26}^* & -s_{36}^* & s_{46}^* & -s_{56}^* & s_{66}^* \end{bmatrix}. \quad (2.71)$$

Les composantes de S_{\approx}^{II} sont identiques ou juste de signes opposées à celles de S_{\approx}^I . Par conséquent, les composantes plan de $[\underline{\varepsilon}^*]$ (eq. 2.17) se réduisent à :

$$\begin{aligned} [\varepsilon_1^*] &= -2s_{14}^*\Sigma_4 - 2s_{16}^*\Sigma_6 + [\varepsilon_1^p] + [\alpha_1^T] \Delta T, \\ [\varepsilon_3^*] &= -2s_{34}^*\Sigma_4 - 2s_{36}^*\Sigma_6 + [\varepsilon_3^p] + [\alpha_3^T] \Delta T, \\ [\varepsilon_5^*] &= -2s_{45}^*\Sigma_4 - 2s_{56}^*\Sigma_6 + [\varepsilon_5^p] + [\alpha_5^T] \Delta T. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Ainsi, des 6 composantes de $\underline{\Sigma}$ exprimées dans le repère du joint de maclé, seules Σ_4 et Σ_6 interviennent dans l'expression des contraintes d'incompatibilité. Σ_6 correspond directement à la cission résolue macroscopique sur le système de maclage. Σ_4 est l'autre composante de cisaillement anti-plan. Elle agit dans le plan K_1 , mais selon une direction orthogonale à $\underline{\eta}_1$. Par conséquent, pour un chargement uniaxial, les contraintes d'incompatibilité dues à une différence de modules élastiques sont insignifiantes si le plan K_1 est quasi-parallèle ou quasi-perpendiculaire à l'axe de chargement. Inversement, si le plan K_1 se rapproche d'une orientation à 45° de l'axe de chargement, les contraintes d'incompatibilité seront favorisées. Concernant le tenseur \underline{G} (eq. 2.22), nous pouvons également noter que la simplification due à une symétrie de maclage de type I conduit à $\underline{G}(\tilde{s}) = \underline{G}(s^*)$. Cela signifie que la fraction volumique n'a aucune influence sur l'orientation du tenseur des contraintes d'incompatibilité. La fraction volumique influence uniquement l'amplitude des contraintes d'incompatibilité.

Type II

Pour du maclage de type II, l'orientation du réseau maclé par rapport au réseau parent correspond à une rotation de 180° par rapport à $\underline{\eta}_1$ [CM95]. Ainsi, S_{\approx}^{II} se déduit de S_{\approx}^I par une rotation de 180° autour de \underline{e}_1^* :

$$S_{\approx}^{II} = \begin{bmatrix} s_{11}^* & s_{12}^* & s_{13}^* & s_{14}^* & -s_{15}^* & -s_{16}^* \\ s_{12}^* & s_{22}^* & s_{23}^* & s_{24}^* & -s_{25}^* & -s_{26}^* \\ s_{13}^* & s_{23}^* & s_{33}^* & s_{34}^* & -s_{35}^* & -s_{36}^* \\ s_{14}^* & s_{24}^* & s_{34}^* & s_{44}^* & -s_{45}^* & s_{46}^* \\ -s_{15}^* & -s_{25}^* & -s_{35}^* & -s_{45}^* & s_{55}^* & s_{56}^* \\ -s_{16}^* & -s_{26}^* & -s_{36}^* & s_{46}^* & s_{56}^* & s_{66}^* \end{bmatrix}. \quad (2.73)$$

De nouveau, les composantes de S_{\approx}^{II} sont identiques ou juste de signes opposées à celles de S^I . Cependant, contrairement au type I, les 6 composantes de Σ interviennent dans l'expression des contraintes d'incompatibilité, comme cela peut être constaté au travers des composantes plan de $[\varepsilon_{\approx}^*]$:

$$\begin{aligned} [\varepsilon_1^*] &= -2s_{15}^* \Sigma_5 - 2s_{16}^* \Sigma_6 + [\varepsilon_1^p] + [\alpha_1^T] \Delta T, \\ [\varepsilon_3^*] &= -2s_{35}^* \Sigma_5 - 2s_{36}^* \Sigma_6 + [\varepsilon_3^p] + [\alpha_3^T] \Delta T, \\ [\varepsilon_5^*] &= -2s_{15}^* \Sigma_1 - 2s_{25}^* \Sigma_2 - 2s_{35}^* \Sigma_3 - 2s_{45}^* \Sigma_4 + [\varepsilon_5^p] + [\alpha_5^T] \Delta T. \end{aligned} \quad (2.74)$$

2.2.2 Joint de macle $\Sigma 3(111)$

Contraintes d'incompatibilité

L'interface plane de la figure 2.4 est maintenant supposée être un joint de macle $\Sigma 3(111)$ qui est le joint de macle le plus fréquemment rencontré dans les métaux CFC [CM95]. Ce joint de macle satisfait les relations de symétrie à la fois des macles de type I et des macles de type II. Le plan K_1 correspond à un plan cristallographique (111), tandis que la direction η_1 correspond à une direction cristallographique $[11\bar{2}]$. Dans le repère du monocristal, le tenseur des complaisances élastiques associé à un réseau de symétrie cubique s'écrit :

$$s_{\approx} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{bmatrix}. \quad (2.75)$$

Le tenseur des complaisances élastiques du cristal I dans le repère du joint de macle peut alors être obtenu à partir de la rotation qui transforme les vecteurs $\frac{1}{\sqrt{6}}[11\bar{2}]$ et $\frac{1}{\sqrt{3}}[111]$ en $[100]$ and $[010]$, respectivement. En conséquence, l'expression de S_{\approx}^I dans le repère du joint de macle est :

$$S^I \approx \begin{bmatrix} s_{11}^* & s_{12}^* & s_{13}^* & 0 & 0 & s_{16}^* \\ s_{12}^* & s_{22}^* & s_{12}^* & 0 & 0 & 0 \\ s_{13}^* & s_{12}^* & s_{11}^* & 0 & 0 & -s_{16}^* \\ 0 & 0 & 0 & s_{44}^* & -2s_{16}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2s_{16}^* & -2(s_{13}^* - s_{11}^*) & 0 \\ s_{16}^* & 0 & -s_{16}^* & 0 & 0 & s_{44}^* \end{bmatrix}. \quad (2.76)$$

où les s_{ij}^* sont reliées aux 3 complaisances indépendantes s_{11} , s_{12} et s_{44} de la manière suivante :

$$\begin{aligned} s_{11}^* &= s_{11} - \frac{A-1}{4}s_{44}, & s_{16}^* &= -\frac{\sqrt{2}}{6}(A-1)s_{44}, \\ s_{12}^* &= s_{12} + \frac{A-1}{6}s_{44}, & s_{22}^* &= s_{11} - \frac{A-1}{3}s_{44}, \\ s_{13}^* &= s_{12} + \frac{A-1}{12}s_{44}, & s_{44}^* &= \frac{2A+1}{3}s_{44}, \end{aligned} \quad (2.77)$$

avec A le facteur d'anisotropie élastique :

$$A = \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}} = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}. \quad (2.78)$$

En combinant les équations 2.19, 2.22, 2.71 (ou 2.73), 2.72 (ou 2.74) et 2.76, l'expression du tenseur des contraintes d'incompatibilité se simplifie prodigieusement pour un joint de macle $\Sigma 3(111)$. Dans le repère du joint de macle, les composantes plan de $\sigma_{\sim}^{\perp\star}$ sont :

$$\begin{aligned} \sigma_1^{\perp\star} &= \frac{-2s_{16}^*}{s_{13}^* - s_{11}^*} \Sigma_6 + \frac{s_{11}^* ([\varepsilon_1^p] + [\alpha_1^T] \Delta T) - s_{13}^* ([\varepsilon_3^p] + [\alpha_3^T] \Delta T)}{s_{13}^{*2} - s_{11}^{*2}}, \\ \sigma_3^{\perp\star} &= \frac{2s_{16}^*}{s_{13}^* - s_{11}^*} \Sigma_6 + \frac{s_{11}^* ([\varepsilon_3^p] + [\alpha_3^T] \Delta T) - s_{13}^* ([\varepsilon_1^p] + [\alpha_1^T] \Delta T)}{s_{13}^{*2} - s_{11}^{*2}}, \\ \sigma_5^{\perp\star} &= \frac{2s_{16}^*}{s_{13}^* - s_{11}^*} \Sigma_4 + \frac{[\varepsilon_5^p] + [\alpha_5^T] \Delta T}{2(s_{13}^* - s_{11}^*)}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Concernant les contributions reliées aux différences de déformation plastique et de dilatation thermique, nous pouvons noter la symétrie entre les composantes 1 et 3, ainsi que le fait que la contrainte de cisaillement ne dépend que des composantes de cisaillement plastique et thermique. Concernant les contributions reliées au tenseur des contraintes macroscopiques, la présence d'un pré-facteur commun est à souligner. En élasticité pure, l'expression de $\sigma_{\sim}^{\perp\star}$ dans le repère du joint de macle devient en effet très simple en tenant compte de l'équation 2.77 :

$$\sigma_{\sim}^{\perp\star} = 2\sqrt{2} \frac{A-1}{A+2} \begin{bmatrix} -\Sigma_6 & 0 & \Sigma_4 \\ 0 & 0 & 0 \\ \Sigma_4 & 0 & \Sigma_6 \end{bmatrix}. \quad (2.80)$$

Ce tenseur est purement déviatorique. Ses contraintes principales sont $2\sqrt{2}\frac{A-1}{A+2}(-T, 0, T)$ avec $T = \sqrt{\Sigma_4^2 + \Sigma_6^2}$. T est la composante tangentielle du vecteur traction macroscopique agissant sur le plan de macle. Ainsi, $\sigma_{\sim}^{\perp\star}$ correspond juste à un simple état de cisaillement dans le repère déduit du repère principal par rotation de 45° autour de la direction principale \underline{e}_2^* . Dans un tel repère, les tenseurs des contraintes d'incompatibilité dans le cristal parent (I) et dans la macle (II) s'écrivent alors :

$$\sigma_{\sim}^{\perp I, II} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \tau^{I, II} \\ 0 & 0 & 0 \\ \tau^{I, II} & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ avec } \begin{cases} \tau^I = -2\sqrt{2}\frac{A-1}{A+2}Tf^{II} \\ \tau^{II} = 2\sqrt{2}\frac{A-1}{A+2}Tf^I \end{cases} . \quad (2.81)$$

L'ensemble du tenseur des contraintes d'incompatibilité est contenu dans un scalaire qui correspond à la valeur maximale du cisaillement du cas général (*cf.* eq. 2.26). La direction spécifique des ces cisaillements additionnels dépend seulement du cisaillement macroscopique résolu dans le plan de macle.

La remarquable simplicité de ce résultat scalaire avait été en premier lieu établi par Neumann [Neu99] dans le cas de fractions volumiques égales. Neumann s'intéressait à l'initiation des fissures de fatigue. Puisque ces dernières apparaissent préférentiellement aux surfaces libres, Neumann utilisa ce résultat en volume afin d'estimer les contraintes d'incompatibilité aux joints de macle en surface grâce à plusieurs approximations [NT87, Neu99, HN90].

Module effectif

Le tenseur des complaisances effectives s_{\sim}^{eff} (eq. 2.28) se simplifie lui aussi grandement dans le cas d'un joint de macle $\Sigma 3(111)$. Dans le cas de fractions volumiques égales ($f^I = f^{II}$), s_{\sim}^{eff} adopte une symétrie transverse isotrope où la normale au joint de macle constitue l'axe de symétrie :

$$s_{\sim}^{eff} = \begin{bmatrix} s_{11} - \frac{A-1}{4}s_{44} & s_{12} + \frac{A-1}{6}s_{44} & s_{12} + \frac{A-1}{12}s_{44} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} + \frac{A-1}{6}s_{44} & s_{11} - \frac{A-1}{3}s_{44} & s_{12} + \frac{A-1}{6}s_{44} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} + \frac{A-1}{12}s_{44} & s_{12} + \frac{A-1}{6}s_{44} & s_{11} - \frac{A-1}{4}s_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{3A}{A+2}s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{A+2}{3}s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3A}{A+2}s_{44} \end{bmatrix} . \quad (2.82)$$

Il est intéressant de mettre en parallèle ce résultat avec la transformation martensitique ε qui opère dans les aciers et qui transforme une structure CFC en une structure HC. Cette transformation est en effet très similaire

au maillage puisque les plans d'habitat sont les plans (111) et qu'elle s'effectue également à partir du glissement des dislocations partielles de Shockley $a/6 < 11\bar{2} >$ [All12]. La transformation martensitique ε aboutit ainsi à une relation d'orientation $(111)_\gamma // (0001)_\varepsilon$. De plus, dans cette transformation, le glissement $[11\bar{2}]$ s'opère uniquement tous les deux plans (111) [All12], ce qui est cohérent avec le fait que la symétrie transverse isotrope de s^{eff} est obtenue uniquement pour $f^I = f^{II}$. Certains auteurs ont d'ailleurs observé la co-existence des macles $\Sigma 3(111)$ et des variantes de martensite ε au sein d'une même bande de déformation [Bra07].

Cissions résolues en élasticité

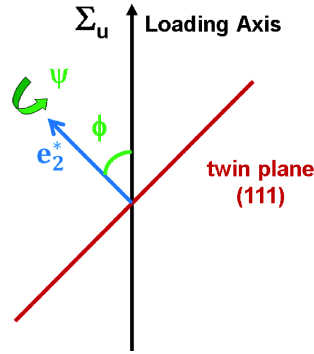


FIGURE 2.5 – ϕ est l'angle entre l'axe de chargement et la normale au joint de macle $\Sigma 3(111)$. ψ est un angle de rotation autour de la normale au joint de macle.

Il est également possible d'obtenir des expressions simples des cissions résolues sur les systèmes (111) $[0\bar{1}1]$ dans les phases parent et maclée dans le cas d'un chargement uniaxial Σ_u en élasticité. Pour cela, on introduit ϕ l'angle entre \underline{n}^{K_1} et l'axe de chargement ($0 \leq \phi \leq 90^\circ$), ainsi que ψ , un angle de rotation autour de \underline{n}^{K_1} ($0 \leq \psi \leq 360^\circ$) (figure 2.5). On considère que le plan K_1 est un plan B dans les notations de Schmid et Boas (cf. Notations). Dans le repère associé au chargement, on a $\underline{n}^{K_1} = [\cos \phi, 0, \sin \phi]$ et $T = (\cos \phi \sin \phi) \Sigma_u$. Le cas $\psi = 0$ correspond à $\underline{\eta}_1 = [\sin \phi, 0, -\cos \phi]$. À partir de l'équation 2.80 ou 2.81, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \tau^{(s)I} &= R_{\sim}^{(s)I} : \Sigma - f^{II} \frac{8\sqrt{3}}{9} \frac{A-1}{A+2} T \chi^{(s)I}, \\ \tau^{(s)II} &= R_{\sim}^{(s)II} : \Sigma + f^I \frac{8\sqrt{3}}{9} \frac{A-1}{A+2} T \chi^{(s)II}, \end{aligned} \quad (2.83)$$

où les fonctions $\chi^{(s)I,II}$ dépendent seulement de l'angle ψ . Avec les notations de Schmid et Boas, ces fonctions s'écrivent :

$$\begin{aligned}
\chi^{A2I} &= \sqrt{3} \cos\left(\psi - \frac{5\pi}{6}\right), & \chi^{A2II} &= \sqrt{3} \cos\left(\psi + \frac{\pi}{2}\right), \\
\chi^{A3I} &= \cos(\psi + \pi), & \chi^{A3II} &= \cos\left(\psi + \frac{\pi}{3}\right), \\
\chi^{A6I} &= \cos\left(\psi + \frac{\pi}{3}\right), & \chi^{A6II} &= \cos\left(\psi - \frac{\pi}{3}\right), \\
\chi^{B2I} &= 0, & \chi^{B2II} &= 0, \\
\chi^{B4I} &= 0, & \chi^{B4II} &= 0, \\
\chi^{B5I} &= 0, & \chi^{B5II} &= 0, \\
\chi^{C1I} &= \cos\left(\psi - \frac{2\pi}{3}\right), & \chi^{C1II} &= \cos\left(\psi + \frac{2\pi}{3}\right), \\
\chi^{C3I} &= \cos\left(\psi + \frac{2\pi}{3}\right), & \chi^{C3II} &= \cos(\psi), \\
\chi^{C5I} &= \sqrt{3} \cos\left(\psi - \frac{\pi}{2}\right), & \chi^{C5II} &= \sqrt{3} \cos\left(\psi + \frac{5\pi}{6}\right), \\
\chi^{D1I} &= \cos(\psi + \pi), & \chi^{D1II} &= \cos\left(\psi + \frac{\pi}{3}\right), \\
\chi^{D4I} &= \sqrt{3} \cos\left(\psi + \frac{5\pi}{6}\right), & \chi^{D4II} &= \sqrt{3} \cos\left(\psi + \frac{\pi}{6}\right), \\
\chi^{D6I} &= \cos\left(\psi - \frac{\pi}{3}\right), & \chi^{D6II} &= \cos(\psi + \pi).
\end{aligned} \tag{2.84}$$

De manière intéressante, on constate que les systèmes de glissement peuvent se classer en 3 groupes en fonction des expressions de $\chi^{(s)}$:

- groupe (1) : les systèmes $B2$, $B4$ et $B5$ pour lesquels $\chi^{(s)} = 0$,
- groupe (2) : les systèmes $A2$, $C5$ et $D4$ pour lesquels $\chi^{(s)}$ s'écrit comme $\sqrt{3}$ fois une fonction cosinus de ψ ,
- groupe (3) : les systèmes $A3$, $A6$, $C1$, $C3$, $D1$, $D6$ pour lesquels χ^s s'écrit juste comme une fonction cosinus de ψ .

Pour les systèmes du groupe (1), les contraintes d'incompatibilité n'ont pas d'effet sur les cission résolues, étant donné que le plan B est parallèle au plan de macle. De même, le glissement peut s'y développer librement sans induire aucune incompatibilité plastique (*cf.* cas C du tableau 1.1). Le groupe (2) rassemble les paires de système ayant la même direction de glissement et qui est contenue dans le plan du joint de macle, à savoir : $A2^I/D4^{II}$, $C5^I/A2^{II}$ et $D4^I/C5^{II}$. Ces paires de systèmes autorisent ainsi le glissement dévié des dislocations vis parfaites au joint de macle [ZWL⁺11, ZLW12]. Elles correspondent à la configuration "miroir" du cas E du tableau 1.1. Du glissement sur une paire de systèmes du groupe (2) ne générera donc non plus aucune contrainte d'incompatibilité. L'activation de telles paires de système a été récemment mise en évidence expérimentalement grâce à des essais sur des micropiliers de Cu avec un joint de macle $\Sigma 3(111)$ parallèle à l'axe de compression [LAI⁺13, IKMD14, HS14]. Quand la déformation plastique s'effectue par du glissement sur une de ces paires, aucun effet de durcissement ou d'écrouissage lié à la présence du joint de macle n'a été

observé par rapport au cas monocristallin, ce qui est en parfait accord avec l'absence de contrainte d'incompatibilité d'origine plastique dans ce cas.

Les expressions 2.84 montrent que la partie des cisssions issue du tenseur des contraintes d'incompatibilité augmentera plus rapidement avec le chargement pour les systèmes du groupe (2) en raison du facteur $\sqrt{3}$. Par conséquent, il est intéressant de souligner que le glissement dévié peut être favorisé au joint de macles par rapport à d'autres mécanismes grâce à l'élasticité anisotrope et les contraintes d'incompatibilité induites.

2.3 Glissement au joint de grains

2.3.1 Relations de compatibilité

Nous reprenons le problème de la section 2.1 (figure 2.1) en introduisant le glissement au joint de grains comme mécanisme de déformation supplémentaire au travers d'un tenseur de distorsion β^S . Les incompatibilités de déformation liés à du glissement au joint de grains ont déjà été calculées par Mussot *et al.* dans le cas d'un joint plan et d'un joint courbé [MRZ85]. Nous poursuivons ce travail afin d'évaluer les champs élastiques induits par ces incompatibilités dans le cas du joint plan. De manière analogue à l'expression du tenseur de distorsion plastique induit par la formation d'une boucle de dislocation [Kos79], le tenseur β^S est singulier au niveau de l'interface et pour un joint de grains plan de normale unitaire $\underline{n} \equiv \underline{e}_2$ (figure 2.1), il peut s'exprimer comme :

$$\beta_{ij}^S = g_i(x_1, x_3) n_j \delta(x_2), \quad (2.85)$$

où le vecteur $\underline{g} = [u]$ représente le saut de déplacement à l'interface dû au glissement au joint de grains. Par contraction, nous avons :

$$n_1 = n_3 = 0 \text{ et } n_2 = 1. \quad (2.86)$$

L'absence de décohésion de l'interface impose de plus [MRZ85] :

$$g_2 = 0. \quad (2.87)$$

Ainsi, les seules composantes non nulles de β^S sont β_{12}^S et β_{32}^S . Les complaisances élastiques, les dilatations thermiques et les distorsions plastiques sont toujours supposées uniformes dans chaque cristal. Nous considérons aussi toujours la continuité du vecteur contrainte à l'interface. De plus, nous faisons également l'hypothèse que les gradients $g_{i,j}$ sont uniformes. Ainsi, la distorsion totale est maintenant donnée par :

$$\begin{aligned} \beta_{ij}(x_1, x_2, x_3) = & \beta_{ij}^e(x_1, x_2, x_3) + \beta_{ij}^{pI} + [\beta_{ij}^p] H(x_2) \\ & + \left(\alpha_{ij}^{TI} + [\alpha_{ij}^T] H(x_2) \right) \Delta T + g_i(x_1, x_3) \delta_{j2} \delta(x_2). \end{aligned} \quad (2.88)$$

Le tenseur de Nye α (eq. 1.16) peut alors être évalué compte-tenu de la compatibilité des distorsions totales (eq. 1.8) et des conditions 2.86 :

$$\alpha_{ij} = - \epsilon_{j2m} \left([\beta_{im}^p] + [\alpha_{im}^T] \Delta T \right) \delta(x_2) - \epsilon_{jl2} g_{i,l} \delta(x_2). \quad (2.89)$$

Avec nos hypothèses, le tenseur α ne dépend donc que de x_2 . Il en est donc de même pour β_{\perp}^e la partie incompatible de la distorsion élastique (cf. eq. 1.22). On peut ainsi écrire :

$$\beta_{\perp}^e = \nabla_{\underline{z}} + \beta_{\perp}^e(x_2), \quad (2.90)$$

où \underline{z} est un vecteur continu tel que $\nabla_{\underline{z}} = \beta_{\parallel}^e$. D'après la relation 2.90, on alors :

$$\forall j \neq 2, \beta_{i2,j}^e = z_{i,2j} = z_{i,j2}. \quad (2.91)$$

En appliquant à nouveau la compatibilité des distorsions totales à l'équation 2.88 et en tenant compte de la relation 2.91, on obtient :

$$\forall i \neq 2, \forall j \neq 2, \beta_{ij,2}^e = z_{i,j2} - \left([\beta_{ij}^p] + [\alpha_{ij}^T] \Delta T - g_{i,j} \right) \delta(x_2) = 0, \quad (2.92)$$

ce qui devient par intégration par rapport à x_2 :

$$\forall i \neq 2, \forall j \neq 2, \beta_{ij}^e = z_{i,j} - \left([\beta_{ij}^p] + [\alpha_{ij}^T] \Delta T - g_{i,j} \right) H(x_2) + K_{ij}, \quad (2.93)$$

où K_{ij} sont des constantes uniformes dans l'espace. Par définition, on a $[z_i] = 0$, d'où $\forall j \neq 2, [z_{i,j}] = 0$ et par conséquent :

$$\forall i \neq 2, \forall j \neq 2, [\beta_{ij}^e] = - [\beta_{ij}^p] - [\alpha_{ij}^T] \Delta T + g_{i,j}. \quad (2.94)$$

Les relations 2.94 sont en accord avec les conditions de compatibilité établies par Mussot *et al.* [MRZ85, DB16]. Elles indiquent que le glissement au joint de grains peut engendrer des incompatibilités de déformation et de rotation à partir du moment où celui-ci est non-uniforme, comme cela a par exemple été observé récemment dans le Ti [DB16]. En effet, les termes $g_{i,j(j \neq 2)}$ sont directement reliés au gradient de β_{12}^S et β_{32}^S via les relations :

$$\begin{aligned} \forall j \neq 2, \beta_{12,j}^S &= g_{1,j} \delta(x_2), \\ \forall j \neq 2, \beta_{32,j}^S &= g_{3,j} \delta(x_2). \end{aligned} \quad (2.95)$$

2.3.2 Sauts de contrainte

En reprenant la notation contractée de Voigt [Voi28], les relations 2.94 permettent d'écrire le système suivant :

$$\begin{aligned} [\varepsilon_1^e] &= [s_{1j}\sigma_j] = -[\varepsilon_1^p] - [\alpha_1^T] \Delta T + gg_1, \\ [\varepsilon_3^e] &= [s_{3j}\sigma_j] = -[\varepsilon_3^p] - [\alpha_3^T] \Delta T + gg_3, \\ [\varepsilon_5^e] &= [s_{5j}\sigma_j] = -[\varepsilon_5^p] - [\alpha_5^T] \Delta T + gg_5, \end{aligned} \quad (2.96)$$

où les composantes du tenseur symétrique gg sont telles que :

$$\begin{aligned} gg_1 &= g_{1,1}, \\ gg_3 &= g_{3,3}, \\ gg_5 &= g_{1,3} + g_{3,1}, \\ gg_2 &= gg_4 = gg_6 = 0. \end{aligned} \quad (2.97)$$

En utilisant les relations $\left[\begin{smallmatrix} s \\ \approx \end{smallmatrix} : \begin{smallmatrix} \sigma \\ \approx \end{smallmatrix} \right] = \left[\begin{smallmatrix} s \\ \approx \end{smallmatrix} \right] : \ll \begin{smallmatrix} \sigma \\ \approx \end{smallmatrix} \gg + \ll \begin{smallmatrix} s \\ \approx \end{smallmatrix} \gg : \left[\begin{smallmatrix} \sigma \\ \approx \end{smallmatrix} \right]$ et $[\sigma_A = 0]$ (continuité du vecteur contrainte), le système 2.96 devient :

$$\begin{aligned} \ll s_{11} \gg [\sigma_1] + \ll s_{13} \gg [\sigma_3] + \ll s_{15} \gg [\sigma_5] &= -[s_{1j}] \ll \sigma_j \gg - [\varepsilon_1^p] - [\alpha_1^T] \Delta T + gg_1, \\ \ll s_{13} \gg [\sigma_1] + \ll s_{33} \gg [\sigma_3] + \ll s_{35} \gg [\sigma_5] &= -[s_{3j}] \ll \sigma_j \gg - [\varepsilon_3^p] - [\alpha_3^T] \Delta T + gg_3, \\ \ll s_{15} \gg [\sigma_1] + \ll s_{35} \gg [\sigma_3] + \ll s_{55} \gg [\sigma_5] &= -[s_{5j}] \ll \sigma_j \gg - [\varepsilon_5^p] - [\alpha_5^T] \Delta T + gg_5. \end{aligned} \quad (2.98)$$

En introduisant la notation :

$$\left[\begin{smallmatrix} \varepsilon^{**} \\ \approx \end{smallmatrix} \right] = \left[\begin{smallmatrix} s \\ \approx \end{smallmatrix} \right] : \ll \begin{smallmatrix} \sigma \\ \approx \end{smallmatrix} \gg + \left[\begin{smallmatrix} \varepsilon^p \\ \approx \end{smallmatrix} \right] + \left[\begin{smallmatrix} \alpha^T \\ \approx \end{smallmatrix} \right] \Delta T - gg, \quad (2.99)$$

le système 2.98 devient analogue au système 2.18, ce qui permet d'obtenir directement les solutions des sauts de contrainte :

$$\left[\begin{smallmatrix} \sigma \\ \approx \end{smallmatrix} \right] = G : \left[\begin{smallmatrix} \varepsilon^{**} \\ \approx \end{smallmatrix} \right], \quad (2.100)$$

où les composantes non nulles du tenseur G sont données par les relations 2.22 en remplaçant \tilde{s} par $\ll s \gg$ (ou bien en prenant $f^I = f^{II} = 0.5$). Au travers de l'équation 2.99, on voit que le glissement au joint de grains est un mécanisme qui permet de relaxer les contraintes d'incompatibilité d'origine élastique, plastique ou thermique bien que celles-ci n'agissent pas sur les cissions résolues dans le plan de l'interface qui sont généralement considérées comme la principale force motrice du glissement au joint [RA71].

2.3.3 Sauts de rotations élastiques

A partir des relations 2.94, les sauts de rotation élastique en présence de glissement au joint de grains s'expriment comme :

$$\begin{aligned} [\omega_{32}^e] &= [\varepsilon_{23}^e] + [\beta_{23}^p] + [\alpha_{23}^T] \Delta T, \\ [\omega_{13}^e] &= -[\omega_{13}^p] + \frac{1}{2} (g_{1,3} - g_{3,1}), \\ [\omega_{21}^e] &= -[\varepsilon_{12}^e] - [\beta_{21}^p] - [\alpha_{12}^T] \Delta T, \end{aligned} \quad (2.101)$$

avec $[\varepsilon^e] = [s] : \ll \tilde{\sigma} \gg + \ll \tilde{s} \gg : [\sigma]$. On voit ainsi que le glissement au joint de grains peut influencer l'évolution des textures cristallographiques.

2.4 Applications

2.4.1 Début de plasticité dans des micropiliers bicristallins

Procédure expérimentale

Dans le cadre de la thèse d'Idriss Tiba [Tib15], effectuée en collaboration avec l'Université de la Sarre, les formules analytiques précédentes des champs élastiques aux interfaces planes ont été utilisées pour prédire les cissions résolues sur les systèmes de glissement ainsi que l'évolution des rotations de réseau dans des bicristaux de Ni de très haute pureté (99.999%). Le choix de ce matériau CFC s'explique d'une part, par le fait que lignes de glissement émergeant à la surface sont aisément observables et d'autre part, en raison de son facteur d'anisotropie élastique relativement élevé avec $A = 2.37$. Trois micropiliers bicristallins de Ni ont ainsi été usinés par canon à ions focalisés (FIB) le long d'un joint de grain particulier, choisi sur une plaque polycristalline de Ni de $2mm$ d'épaisseur. Cette plaque avait auparavant subi un traitement thermique complexe afin d'obtenir des grains de taille millimétrique, des joints plus ou moins perpendiculaires à la surface et des contraintes résiduelles négligeables [TRM⁺15]. Les joints de macles $\Sigma 3(111)$, nombreux en raison du traitement thermique, ont été systématiquement écartés étant donné nos résultats montrant que les contraintes d'incompatibilité élastique sont nulles pour un chargement parallèle à un joint de macle de type I (eq. 2.72). Au final, un joint de grains général de désorientation 55.1° a été choisi (figure 2.6) en raison des écarts attendus sur les prédictions des systèmes actifs entre une loi de Schmid macroscopique ($\tau^s = R^s : \tilde{\Sigma}$) et une loi de Schmid tenant compte des contraintes d'incompatibilité.

Les trois micropiliers cylindriques fabriqués le long de ce joint de grains ont ensuite subi une compression uniaxiale en contrôle de déplacement ($1nms^{-1}$) à température ambiante à l'aide d'un nanoindenteur muni d'un poinçon plat. Chaque essai a été arrêté à trois taux de déformation afin

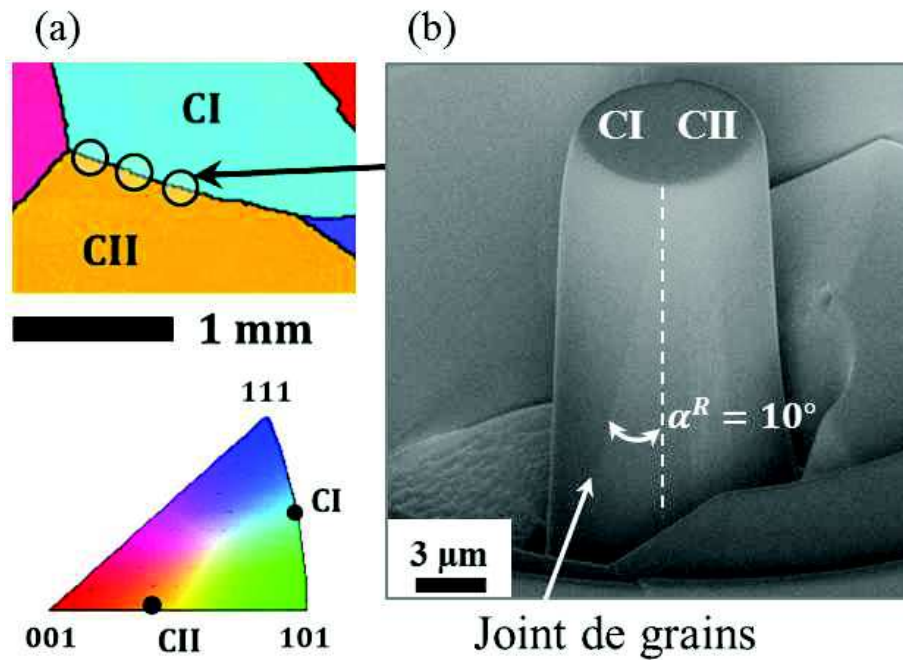


FIGURE 2.6 – (a) Cartographie EBSD des deux cristaux choisis pour usiner les bicristaux. Leurs orientations sont données dans le triangle inverse standard. (b) Micrographie MEB du micropilier avec le joint de grains incliné de 10° par rapport à l’axe de compression.

de pouvoir réaliser des observations microscopiques. Les trois micropiliers déformés possèdent un diamètre à mi-hauteur de $\sim 10\mu\text{m}$, une hauteur moyenne de $\sim 20\mu\text{m}$ et une assez faible conicité (2.6° à 3.7°). Pour ces trois bicristaux, les angles η des joints de grains avec l’axe de chargement sont de 10° , 9° et 4° . Pour une question de simplicité, les résultats sont uniquement présentés pour le micropilier avec le joint de grains incliné à 10° (figure 2.6), les résultats obtenus sur les deux autres piliers étant très similaires. La fraction volumique du cristal noté I de ce micropilier est de 0.25 [Tib15].

Caractérisation des systèmes de glissement activés

A chaque taux de déformation, des observations microscopiques ont été réalisées afin d’identifier les systèmes de glissement actifs par comparaison de l’orientation de leurs marches laissées à la surface avec celles calculées à partir des orientations cristallines initiales. En effet, ce type d’expérience permet d’avoir accès à une vue en 3 dimensions des micropiliers et donc de caractériser, en plus des plans de glissement, également les directions de glis-

sement. Ces observations ont conduit aux conclusions suivantes [TRM⁺15] :

- le premier cristal à être entré en plasticité est le cristal *I*, les lignes de glissement y étant beaucoup plus prononcées à 1.5%,
- la plasticité dans le cristal *I* s’effectue par du glissement simple sur le système *D6*,
- la plasticité dans le cristal *II* s’effectue par du glissement sur les systèmes *A3* et *B4*,
- après 3% de déformation, on observe également du glissement sur un plan *C* dans le cristal *II* et cela uniquement à proximité du joint de grains (l’identification de la direction n’a pas été possible car les traces étaient trop peu visibles).

Effets des contraintes d’incompatibilité en élasticité

Dans un premier temps, le calcul des contraintes a été appliqué à partir des formules 2.19 en élasticité pure (déformations plastiques et dilata-tions thermiques nulles). Les constantes élastiques anisotropes utilisées sont répertoriées dans le tableau 2.1. Ce calcul prend en compte une partie de la géométrie spécifique du micropilier au travers de la fraction volumique ($f^I = 0.25$) et de l’inclinaison du joint de grains ($\eta = 10^\circ$). Afin d’étudier l’effet de ces paramètres, trois cas supplémentaires ont également été considérés : (i) $f^I = 0.5$ et $\eta = 0^\circ$, (ii) $f^I = 0.5$ et $\eta = -10^\circ$, et (iii) $f^I = 0.25$ et $\eta = 0^\circ$. Deux rapports ont été introduits, R_1 afin de caractériser quel cristal entre le premier en plasticité :

$$R_1 = \frac{\tau_{max}^I - \tau_{max}^{II}}{\Sigma_u}, \quad (2.102)$$

où τ_{max}^I et τ_{max}^{II} sont les cisssions résolues maximales dans les cristaux *I* et *II* et Σ_u la valeur de la contrainte macroscopique uniaxiale appliquée, ainsi que R_2 le rapport entre le premier et le second maximum de la cisssion résolue dans un cristal :

$$R_2 = \frac{\tau_{max1}}{\tau_{max2}}. \quad (2.103)$$

Si R_2 est proche de l’unité, alors le cristal se déformera certainement en glissement multiple. Inversement, si R_2 est très élevé, alors le cristal aura une forte probabilité de se déformer en glissement simple. Une orientation monocristalline bien connue donnant du glissement simple lors d’un chargement uniaxial est [123] [Tak54] et correspond à $R_2 = 1.33$. En fait, la valeur la plus élevée possible de R_2 lors d’un chargement uniaxial est 1.38 obtenue avec l’orientation [13 21 34] [Fin74]. Le tableau 2.2 regroupe les valeurs des

paramètres R_1 et R_2 , ainsi que les valeurs maximales des cissions résolues sur les systèmes de glissement dans les cristaux I et II dans le cas d'une loi de Schmid tenant compte des contraintes d'incompatibilité ainsi que celui d'une loi de Schmid macroscopique.

C_{11}	C_{12}	C_{44}
244 GPa	158 GPa	102 GPa

TABLE 2.1 – Constantes élastiques cubiques du Ni.

	Avec contraintes d'incompatibilité				Loi de Schmid macroscopique
	$f = 0.5$ $\eta = 0^\circ$	$f = 0.5$ $\eta = -10^\circ$	$f = 0.25$ $\eta = 0^\circ$	$f = 0.25$ $\eta = -10^\circ$	
R_1	0.16	0.17	0.20	0.21	-0.07
Cristal I					
R_2	1.13	1.13	1.20	1.22	1.04
$D6$	0.53	0.54	0.62	0.63	0.41
$ \tau^s/\Sigma_u $ $D1$	0.47	0.47	0.52	0.52	0.42
$B2$	0.28	0.31	0.33	0.37	0.26
Cristal II					
R_2	1.15	1.12	1.07	1.05	1.01
$B4$	0.37	0.37	0.42	0.42	0.49
$A3$	0.32	0.33	0.39	0.40	0.49
$ \tau^s/\Sigma_u $ $B2$	0.27	0.26	0.29	0.29	0.33
$C1$	0.29	0.27	0.30	0.28	0.32
$D1$	0.22	0.22	0.27	0.27	0.33
$A2$	0.24	0.23	0.27	0.27	0.32

TABLE 2.2 – Prédications des deux modèles concernant les valeurs des paramètres R_1 et R_2 , ainsi que celles des cissions résolues normalisées sur les trois et six premiers systèmes de glissement dans les cristaux I et II , respectivement. Les valeurs des cissions normalisées présentent un erreur de ± 0.01 en tenant compte d'une variation de $\pm 1^\circ$ dans les mesures des angles d'Euler.

D'après le tableau 2.2, des différences en signe et en amplitude sont observées au niveau du critère d'entrée en plasticité entre une loi de Schmid tenant compte des contraintes d'incompatibilité ($R_1 = 0.21$ dans le cas réel $f^I = 0.25$ et $\eta = -10^\circ$) et une loi de Schmid macroscopique ($R_1 = -0.07$). Cela signifie que la loi de Schmid classique prévoit que le cristal II se déforme plastiquement très légèrement avant le cristal I , tandis que la prise en compte des contraintes d'incompatibilité indique clairement un début de plasticité dans le cristal I , en parfait accord avec les observations effectuées à 1.5%.

Par ailleurs, en accord avec les caractérisations expérimentales avant 3% de déformation, les modèles avec et sans prise en compte des contraintes d'in-

compatibilité prévoient tous les deux du glissement double sur les systèmes $A3$ et $B4$ dans le cristal II étant donné les faibles valeurs de R_2 : $R_2 = 1.05$ et $R_2 = 1.01$ respectivement. En revanche, seule la prise en compte des contraintes d'incompatibilité permet de prédire du glissement simple sur le système $D6$ dans le cristal I avec une valeur élevée du paramètre R_2 : $R_2 = 1.22$. La loi de Schmid macroscopique prédit elle du glissement double sur les systèmes $D1$ et $D6$ dans le cristal I ($R_2 = 1.04$), ce qui est en désaccord avec les observations.

Enfin, les résultats du tableau 2.2 permettent d'étudier l'effet de la fraction volumique et de l'inclinaison du joint. Nous pouvons constater qu'une variation de η de 0° à -10° n'influence que très légèrement les prédictions du modèle dans le cas étudié. En revanche, l'effet de fraction volumique est beaucoup plus net quand f^I passe de 0.25 à 0.5. En effet, l'amplitude des contraintes d'incompatibilité dans un cristal est quasi-proportionnelle à la fraction volumique du cristal voisin (eq. 2.19). C'est vraisemblablement pour cette raison que les prédictions de la loi de Schmid macroscopique sont meilleures dans le cristal II qui possède la fraction volumique la plus élevée ($f^{II} = 0.75$).

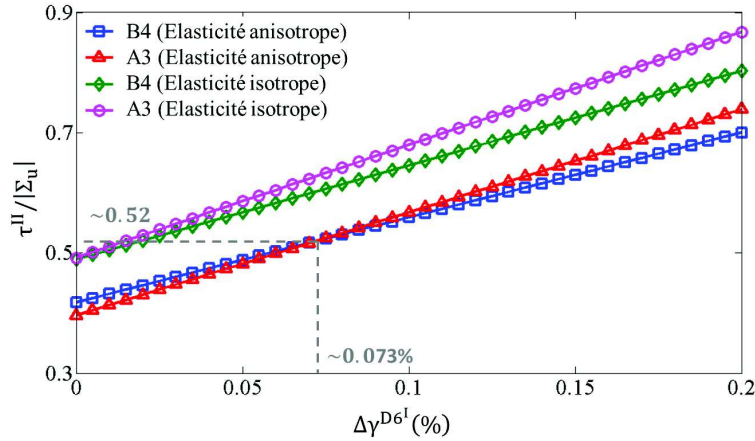


FIGURE 2.7 – Variation des cissions résolues sur les systèmes $A3$ et $B4$ dans le cristal II en fonction de l'amplitude du glissement sur le système $D6$ dans le cristal I $\Delta\gamma^{D6^I}$. Comparaison entre les prédictions des formulations anisotrope et isotrope.

De surcroît, des calculs de contrainte ont également été effectués en prenant en compte une évolution de la plasticité dans le cristal I due à du glissement simple sur le système $D6$. Les formulations anisotrope (eqs. 2.20 et 2.21) et isotrope (eqs. 2.37 et 2.38) ont été comparées (figure 2.7). Toutes les deux prédisent des cissions résolues maximales sur les systèmes $A3$ et $B4$ dans le cristal II avec une légère prédominance du système $A3$ qui a été confirmée expérimentalement à 1.5%. Contrairement à la formulation

isotrope, la formulation anisotrope montre cependant un croisement des valeurs des cissions résolues des systèmes $A3$ et $B4$ pour un glissement d'environ 0.07% sur le système $D6$ dans le cristal I . Au niveau de ce point de transition, les valeurs des cissions résolues sur les deux systèmes valent approximativement $0.52 |\Sigma_u|$, ce qui est inférieur à la valeur de la cission sur le système $D6$ dans le cristal I ($0.63 |\Sigma_u|$). Cela signifie que cette transition se produit vraisemblablement avant le début de la plasticité dans le cristal II , en cohérence avec les observations.

Validation par éléments finis

L'essai de compression du micropilier bicristallin de Ni étudié a aussi été simulé en élasticité par EF à l'aide du logiciel *Abaqus* dans le cas $\eta = 0^\circ$ [Tib15] (figure 2.8). Les composantes du tenseur des contraintes ont été comparées à celles données par les formules analytiques 2.19 (figure 2.9). Une excellente correspondance a été trouvée entre la solution analytique de la composante prédominante du tenseur des contraintes (σ_{22} dans le repère de la simulation EF qui correspond à la composante de compression le long de l'axe de chargement) et celle calculée par EF au niveau d'un profil à mi-hauteur du micropilier. En effet, les surfaces libres latérales n'ont qu'une influence minime, due à la conicité du micropilier, sur cette composante. Ceci explique vraisemblablement la capacité des formules analytiques à prédire correctement les systèmes de glissement actifs. Concernant les autres composantes, les formules analytiques permettent de retrouver correctement les sauts de contrainte au joint de grains à mi-hauteur du micropilier. En revanche, pour ces composantes, les solutions EF s'écartent clairement des solutions analytiques en s'éloignant du joint de grains. Par ailleurs, il y a également une influence grandissante des conditions limites sur toutes les composantes quand on se rapproche du haut et du bas du micropilier. En particulier, les simulations EF montrent l'existence d'une singularité des contraintes au point d'intersection entre le joint de grains et la face supérieure du micropilier.

Comparaison avec les critères géométriques de transmission

Les observations et les calculs indiquent que la plasticité commence dans le cristal I sur le système $D6$ et est suivie par l'activation du système $A3$ dans le cristal II . Ce scénario suggère que la déformation plastique peut être transmise au joint de grains du système $D6$ au système $A3$. Afin d'établir une connection entre les prédictions basées sur le calcul des contraintes d'incompatibilité et les processus de transmission du glissement, les paramètres géométriques de transmission habituellement utilisés dans la littérature ont été déterminés. Tout d'abord, le paramètre de transfert M a été considéré (eq. 1.33). La transmission du glissement est supposée avoir lieu avec le

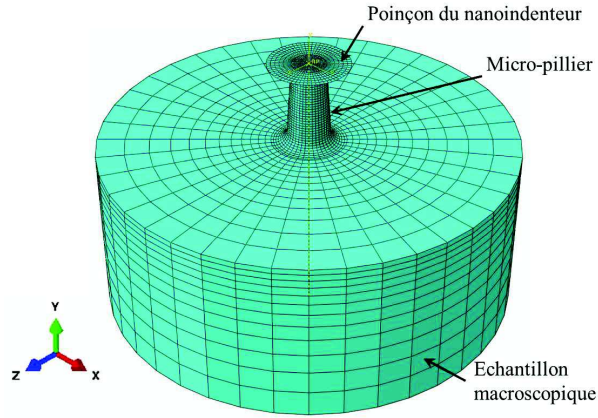


FIGURE 2.8 – Géométrie du micropilier utilisée dans la simulation EF.

système sortant maximisant la valeur de M [CWZS⁺92, SWC88, LRB89], autrement dit avec le système minimisant les angles entre \underline{L}^+ et \underline{L}^- et entre \underline{m}^+ et \underline{m}^- . Lee *et al.* [LRB90] et Kim et Raj [LR85] ont proposé un critère supplémentaire afin de prendre en compte l'effet des empilements de dislocations dans le plan incident sur la cission résolue du système sortant. Cette condition est basée sur la minimisation du vecteur de Burgers résiduel $|b_r|$ laissé à l'interface. Le tableau 2.3 reporte les valeurs des angles d'intersection au joint de grains entre les plans incident et sortant $\delta = \arccos(\underline{L}^I \cdot \underline{L}^{II})$, et entre les directions de glissement $\lambda = \arccos(\underline{m}^I \cdot \underline{m}^{II})$, ainsi que les valeurs de M et de $|b_r|$.

Le tableau 2.3 montre que l'angle δ est minimal entre le plan de glissement incident D et celui transmis C avec $\delta = 4^\circ$. En outre, parmi les directions possibles appartenant à ce plan de glissement, celle qui possède le plus grand facteur M et le plus faible vecteur de Burgers résiduel est le système $C3$, avec $M = 0.98$ et $|b_r|/b = 0.19$. D'après les observations expérimentales, le plan de glissement C a été effectivement observé près du joint de grains, mais seulement après un certain taux de déformation (4.5%). Cependant, la direction de glissement sur ce plan n'a pas pu être identifiée. Par ailleurs, le tableau 2.3 apporte des informations sur les systèmes $A3$ et $B4$ qui ont été les premiers observés dans le cristal II et qui présentent les plus fortes cissions résolues : le système $A3$ a également des paramètres de transmission très favorables avec $M = 0.93$ et $|b_r|/b = 0.19$ au contraire du système $B4$ qui présentent des paramètres très défavorables avec $M = 0.03$ et $|b_r|/b = 1.37$.

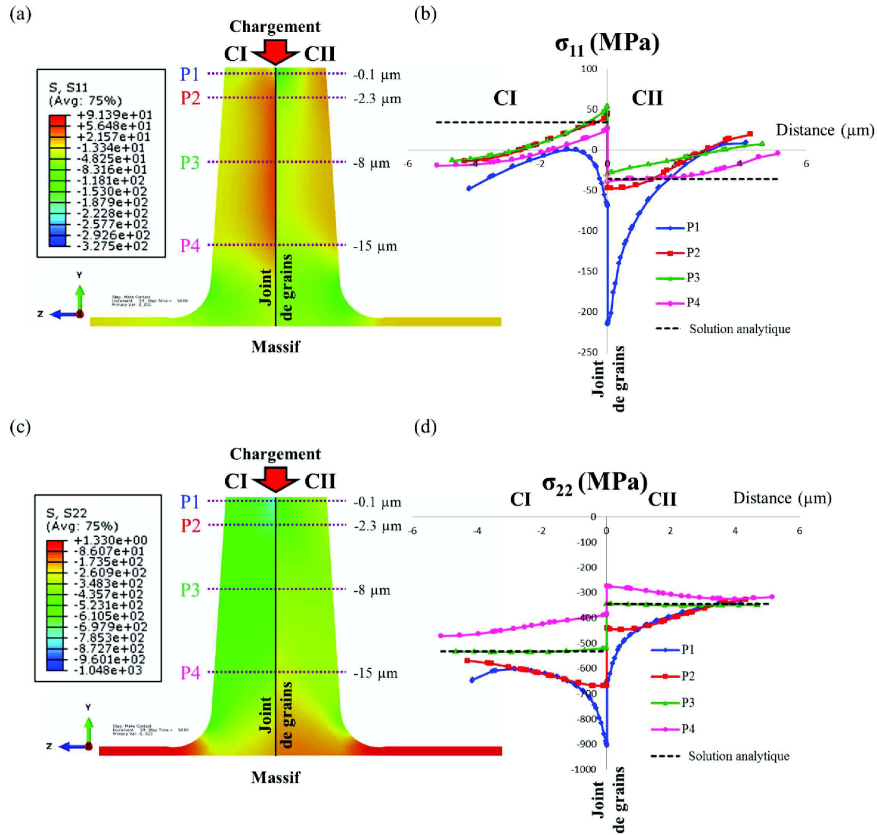


FIGURE 2.9 – Simulation EF du comportement du micropilier en élasticité pure. Variations des contraintes σ_{11} (a,b) et σ_{22} (c,d) le long de différents profils et comparaison avec la solution analytique.

Evolution moyenne des orientations cristallines

L'évolution des orientations cristallines a pu être mesurée par EBSD après 4.5% de déformation grâce à des découpes successives du micropilier [Tib15]. Les dernières mesures se situent à une distance de 3 – 4 μm du sommet du pilier étant donnée l'inclinaison de la coupe (10°). Ces mesures ont notamment été utilisées afin de rechercher les valeurs optimales des taux de glissement sur les systèmes du cristal II à partir des formules des rotations élastiques (eqs. 2.33 et 2.34). Pour cela, la flèche entre l'orientation initiale et finale dans chaque cristal a été considérée, *ie.*, le vecteur normalisé entre les deux orientations sur la figure de pôle inverse. Puis, en supposant uniquement du glissement sur le système D6 dans le cristal I, nous les glissements γ^{A3II} , γ^{B4II} et γ^{C3II} (le système C3 étant fortement suspecté d'avoir été activé d'après nos observations et les critères de transmission) dans le cristal II ont été ajustés afin que la somme des deux produits scalaires entre

Cristal <i>I</i>	Cristal <i>II</i>	δ°	λ°	M	$ b_r /b$
	<i>B2</i>		71	0.17	1.16
	<i>B4</i>	59	86	0.03	1.37
	<i>B5</i>		67	0.20	1.10
	<i>D1</i>		54	0.03	0.91
	<i>D4</i>	87	86	0.00	1.37
	<i>D6</i>		49	0.04	0.83
D6	<i>A2</i>		71	0.31	1.16
	<i>A3</i>	18	11	0.93	0.19
	<i>A6</i>		49	0.62	0.83
	<i>C1</i>		54	0.58	0.91
	<i>C5</i>	4	67	0.40	1.10
	<i>C3</i>		11	0.98	0.19

TABLE 2.3 – Valeurs des paramètres géométriques caractérisant le processus de transmission pour le micropilier étudié. Le vecteur de Burgers résiduel est normalisé par l’amplitude du vecteur de Burgers des dislocations parfaites dans le Ni. Toutes ces valeurs ont été calculées à partir des angles d’Euler avant déformation. Une erreur de $\pm 1^\circ$ sur les angles d’Euler induit une erreur de $\pm 1^\circ$ sur les valeurs de δ et λ .

les flèches expérimentales et théoriques des deux cristaux soit maximisée. A chaque test de triplet de valeurs, le glissement γ^{D6I} a lui été déterminé de sorte à obtenir une déformation plastique moyenne de 4.5%. La figure 2.10 représente une figure de pôle inverse associée à l’axe de compression. Les points en bas correspondent à des orientations dans le cristal *II* et ceux en haut à droite à des orientations dans le cristal *I*. Les croix vertes représentent les orientations initiales et les losanges bleus les orientations moyennes mesurées à 4.5%. Les points rouges correspondent aux valeurs données par les équations 2.33 et 2.34 après optimisation des taux de glissement sur les flèches entre orientations initiale et finale. Les taux de glissement ainsi obtenus valent :

$$\gamma^{A3II} = 0.042, \gamma^{B4II} = 0.049, \gamma^{C3II} = 0.003 \text{ et } \gamma^{D6I} = 0.11.$$

La même procédure d’optimisation en élasticité isotrope à l’aide des formules 2.39 et 2.40 donne :

$$\gamma^{A3II} = 0.044, \gamma^{B4II} = 0.049, \gamma^{C3II} = 0.005 \text{ et } \gamma^{D6I} = 0.10.$$

Ces valeurs montrent un effet peu prononcé de l’anisotropie élastique sur l’évolution des orientations cristallines dans ce cas optimisé. D’autre part, elles sont qualitativement très cohérentes par rapport aux observations : prédominance du glissement *D6* dans le cristal *I*, glissement à peu près

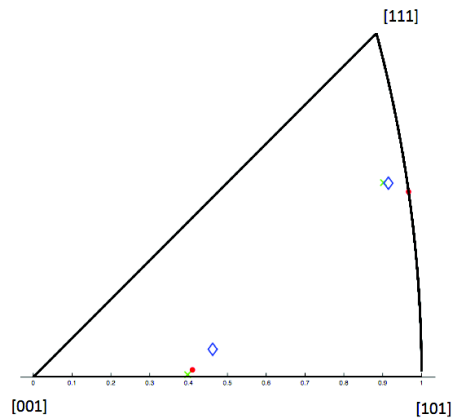


FIGURE 2.10 – Figure de pôle inverse associée à l’axe de compression : orientations moyennes mesurées à l’état initial (croix), après 4.5% (losanges) et prédites avec les valeurs optimisées des taux de glissement (disques) (*cf.* texte).

de même niveau sur les systèmes $A3$ et $B4$ et faible sur le système $C3$ dans le cristal II . Cependant, il est à noter que même si les tendances en termes de directions des flèches sur la figure de pôle inverse apparaissent satisfaisantes, il y a un certain écart avec les points expérimentaux en terme de désorientation (figure 2.10). Ces différences peuvent venir du fait que les valeurs expérimentales sont moyennées sur toute la surface du bicristal incluant les zones proches des surfaces libres qui ne sont pas prises en compte dans les formules développées.

2.4.2 Structures lamellaires de macles

Les expressions 2.83 des cissions résolues sur les systèmes $(111) [0\bar{1}1]$ ont permis de réaliser une étude de l’initiation du glissement dans les matériaux présentant des structures lamellaires avec des joints de macle $\Sigma 3(111)$, comme les aciers TWIP ou les matériaux nanomaclés obtenus par électrodéposition. Concernant les aciers TWIP, il est généralement admis que le maclage est séquentiel : un système de maclage primaire est d’abord activé avant l’activation d’un système secondaire aux plus fortes déformations [All04]. Pour un acier TWIP Fe-22Mn-0.6C wt.%, Allain [All04] a observé que la proportion de grains avec un seul système de maclage augmentait jusqu’à 50% à 15% de déformation, puis diminuait et se stabilisait autour de 20% jusqu’à la fin de l’essai. Pour un acier similaire à 30% et 40% de déformation, Gutierrez-Urrutia et Raabe [GUR11] ont mis en évidence que 30% des grains possédaient une unique structure lamellaire de macles tandis que 60% des grains étaient concernés par l’activation de deux systèmes de maclage. Ainsi, l’analyse numérique s’est uniquement concentrée sur le cas de structures lamellaires de joints de macle $\Sigma 3(111)$ issue d’un seul système, pour lesquelles

l'approximation d'une structure laminée périodique est directement pertinente (*cf.* figure 2.2). Pour un chargement uniaxial en élasticité, les cissions résolues sur les systèmes (111) $[0\bar{1}1]$ ont donc pu être directement estimées à partir des équations 2.83 en fonction des angles ϕ et ψ (*cf.* figure 2.5), du facteur d'anisotropie élastique A et de la fraction volumique de macle f^{II} . Dans la suite, on considère donc toujours des situations où le plan de macle correspond à un plan B .

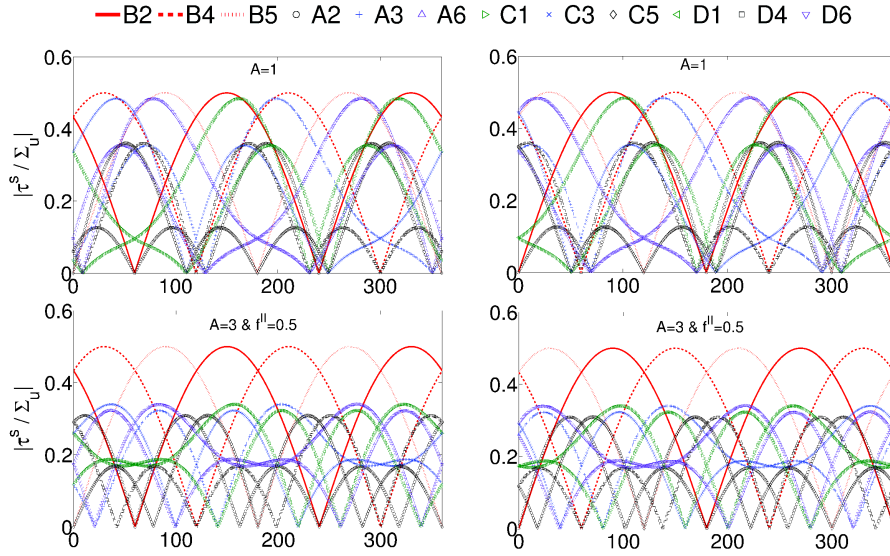


FIGURE 2.11 – Variations des cissions résolues dans le cristal parent (à gauche) et dans la macle (à droite) en élasticité en fonction de ψ pour $\phi = 45^\circ$, dans un cas sans contrainte d'incompatibilité ($A = 1$) et un cas avec ($A = 3$ et $f^{II} = 0.5$).

La figure 2.11 montre les variations de toutes les cissions résolues, dans les phases parent et maclée, pour la situation typique de joints de macles inclinés à 45° de l'axe de chargement. Dans le cas sans contrainte d'incompatibilité ($A = 1$), les plus fortes cissions ne sont pas systématiquement sur les plans B selon les valeurs de ψ , et quand c'est le cas, celles-ci ne sont pas tellement plus élevées que des cissions sur d'autres plans. Dans le cas $A = 3$ et $f^{II} = 0.5$, on constate que les contraintes d'incompatibilité ont pour effet d'abaisser considérablement les cissions qui étaient auparavant les plus élevées sur les plans autres que les plans B tandis que les cission sur les plans B restent identiques au cas $A = 1$ (*cf.* eq. 2.84). Dès lors, les cissions les plus élevées sont maintenant systématiquement sur des plans B et avec des valeurs bien plus élevées que sur les autres plans. Par conséquent, un glissement planaire parallèle au plan de macle est fortement favorisé dans ce cas et la probabilité de glissement simple est également très grande.

La promotion du glissement simple parallèle au plan de macle, à la fois

dans les phases parent et maclée, est un cas particulièrement intéressant puisqu'alors le mouvement des dislocations n'est plus contraint par les joints de macle. De plus, dans ce cas, le glissement s'effectue sur un même système dans tout le grain étant donné que le plan de macle est un plan invariant. Une question est de savoir avec quelle fréquence des situations similaires à celle de la figure 2.11 peuvent se rencontrer suivant l'orientation du joint de macle et les valeurs de A et f^{II} . La figure 2.12 fournit ainsi une carte donnant les fréquences de situations de glissement simple parallèle au plan de macle en fonction de A et de f^{II} . Ces fréquences ont été calculées en faisant varier les angles ϕ et ψ et en ne tenant compte que des orientations initialement favorables à l'activation du maclage afin d'être autant réaliste que possible [RTBB15]. Parmi ces orientations ($28.1^\circ \leq \phi \leq 77.9^\circ$ et $-25.7^\circ \leq \psi \leq 0^\circ$), la figure 2.12 représente la proportion des orientations qui sont caractérisées, simultanément dans les phases parent et maclée, à la fois par $R_2 > 1.2$ (eq. 2.103) et une cission résolue maximale sur un plan B . La figure 2.12 montre une grande zone avec des fréquences supérieures à 25% pour approximativement $3 < A < 6$ et $0.2 < f^{II} < 0.4$. Pour comparaison, le même calcul basé sur la loi de Schmid macroscopique donne une fréquence nulle.

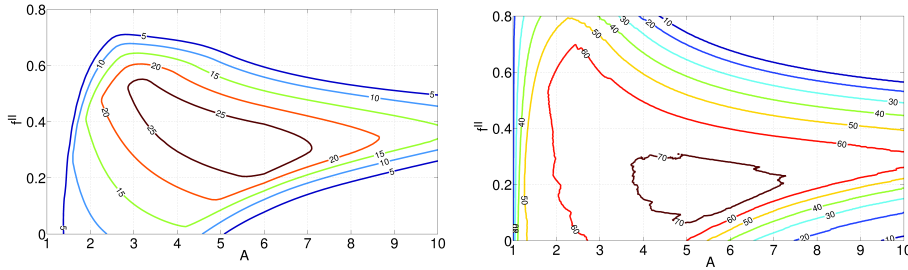


FIGURE 2.12 – Cartes indiquant la proportion des orientations caractérisées, simultanément dans les phases parent et maclée, à la fois par $R_2 > 1.2$ et une cission résolue maximale sur un plan B (carte de gauche) ou seulement par une cission résolue maximale sur un plan B (carte de droite). Seules les orientations initialement favorables à l'activation du maclage sont prises en compte dans le calcul ($28.1^\circ \leq \phi \leq 77.9^\circ$ et $-25.7^\circ \leq \psi \leq 0^\circ$).

Des calculs similaires ont également été effectués sans prendre en compte la condition $R_2 > 1.2$ (figure 2.12). La carte correspondante indique donc la probabilité d'avoir du glissement parallèle au plan de macle, simultanément dans les phases parent et maclée, en fonction de A et de f^{II} . Dans ce cas, des fréquences supérieures à 60% ou même 70% sont atteintes pour approximativement $2 < A < 7$ et $0 < f^{II} < 0.5$ alors que la loi de Schmid macroscopique donne elle une valeur de 17%. Les valeurs obtenues de A et de f^{II} pour la promotion du glissement (simple) parallèle au plan de macle sont plutôt très réalistes compte tenu des données de la littérature

sur les aciers TWIP [GUR11, PNM⁺13, GMK⁺11, DDR⁺12]. Il faut toutefois noter que des fractions de macles supérieures à 0.2 dans des grains avec un seul système de maclage ne peuvent être atteintes qu’assez loin en déformation, quand plusieurs autres grains présentent certainement déjà un deuxième système de maclage. Le facteur d’anisotropie élastique des aciers TWIP est lui souvent supposé comparable aux aciers austénitiques ordinaires ($A \sim 3.3 - 3.9$) malgré le manque de mesures expérimentales sur des monocristaux. Suivant la composition, certaines études rapportent des facteurs d’anisotropie élastique autour de 2 [PNM⁺13] quand d’autres études suggèrent des facteurs allant de 4 à plus de 7 [GMK⁺11].

Si le glissement a lieu parallèlement aux plans de macle, les joints de macle ne réduisent pas le libre parcours moyen des dislocations. Si de plus, il s’agit de glissement simple (avec des valeurs de R_2 pouvant théoriquement aller jusqu’à 2 [RTBB15]), les grains en question devraient présenter un premier stade d’écrouissage avec très peu de durcissement latent en raison de la faible densité de dislocations dans les autres systèmes. Ces grains devraient donc être très ductiles. Par ailleurs, leur forte anisotropie plastique devrait induire un fort écrouissage cinématique par interaction avec les grains voisins et des empilements de dislocations aux joints de grains sont très probables. Par conséquent, les résultats exposés ci-dessus sont cohérents avec la grande ductilité et le fort écrouissage cinématique observés dans les aciers TWIP [BAS08]. Ils sont également en accord avec les très répandus modèles d’écrouissage composite proposés pour les aciers TWIP [LK09, DDR⁺12]. Selon ces modèles, un glissement planaire parallèle au plan de maclage le plus actif a lieu dans les grains fortement maclés, étant donné que les joints de macle empêchent le mouvement des dislocations le long des autres plans, et est accomodé par du glissement multiple dans les grains voisins [LK09, DDR⁺12]. Ce type de modèle est en particulier recommandé pour capter la formation des textures des aciers TWIP [LK09, DDR⁺12].

2.5 Conclusions

Ce chapitre a tout d’abord permis de détailler les calculs analytiques des champs élastiques en présence d’interfaces planes infinies dans le cadre d’une thermoélasticité anisotrope hétérogène et d’une plasticité uniforme par morceaux. Les solutions en contrainte données par les équations 2.20 et 2.21 recouvrent celles originellement présentées par Gemperlova *et al.* [GP85, GPK89] sous la forme d’un système linéaire avec $f^I = f^{II}$ et sans les termes d’origine thermique. Ces solutions avaient été également données par Peralta *et al.* [PLBL94, PL97] et Blochwitz *et al.* [BT03, BT05], toujours sous la forme d’un système linéaire à résoudre numériquement. L’effet de fraction volumique avait déjà été pris en compte dans les travaux de

Stupkiewicz et Petryk [SP02] appliqués aux matériaux laminés et repris par Berbenni *et al.* [BPC13] dans le cas d'un bicristal. Le caractère explicite de ces solutions est donc original et il s'est révélé utile pour faire le lien avec les solutions déjà connues en élasticité isotrope homogène ainsi qu'avec celles données par Hook et Hirth en fonction des modules d'Young directionnels [HH67]. Il a également servi à faire apparaître des expressions simplifiées des contraintes d'incompatibilité pour des symétries particulières : joints de macles de type I et II ainsi que joint de macle $\Sigma 3(111)$. Par ailleurs, il a été montré que le cadre général construit permet aussi de considérer une fluctuation normale de la plasticité et d'autres sources d'incompatibilités comme une différence d'expansion thermique ou un glissement au joint. Ce cadre a également rendu possible la dérivation des expressions analytiques explicites des rotations élastiques en élasticité anisotrope hétérogène (eqs. 2.33 et 2.34) qui sont, à notre connaissance, elles complètement originales. Le plus souvent en effet, l'évolution des orientations cristallines est déterminée à partir du cas monocristallin ou d'un modèle de Taylor [Tay38] ou plus rarement à partir d'un modèle en élasticité isotrope homogène avec plasticité [Ber80]. Toutefois, les calculs effectués montrent que l'effet de l'hétérogénéité élastique sur l'évolution des orientations cristallines est faible.

Il se pose évidemment la question de la validité des formules développées dans des matériaux réels. Dans des matériaux polycristallins, il est attendu que ces formules analytiques soient uniquement pertinentes en volume, dans des zones relativement proches des joints de grains et loin des points triples [GPK89, PSL93]. A proximité immédiate des joints de grains, plusieurs effets non pris en compte par l'approche continue de ce chapitre peuvent toutefois prédominer : structure atomique du joint, effet des coeurs de dislocations, empilement des dislocations au joint, concentration de la plasticité dans des bandes de glissement, glissement dévié, etc. Ces effets peuvent être importants vis-à-vis des conditions de transmission du glissement au joint. Dans la thèse d'Idriss Tiba [Tib15], un bicristal a justement été modélisé à l'aide d'un mur double infini de dislocations coins rectilignes afin de rendre compte du caractère discret de la plasticité sous forme de bandes de glissement. Dans ce cas, il est établi que les formules continues des contraintes et des rotations élastiques sont retrouvées à longue distance et que de fortes fluctuations sont présentes autour du joint, dans une zone de l'ordre de grandeur de l'espacement entre bandes. Pour autant, la confrontation avec l'étude du glissement et de la désorientation dans un bicristal réel de Ni a démontré la pertinence d'utiliser de telles formules. En effet, à la différence de la loi de Schmid macroscopique, la prise en compte des contraintes d'incompatibilité a permis de prédire correctement l'ordre d'activation des premiers systèmes de glissement et peut donc être vu comme un outil complémentaire aux critères géométriques de transmission. Les résultats des simulations EF attestent cependant que les formules développées ne peuvent être valables que dans une zone à mi-hauteur du micropilier et éloignée des surfaces libres, sauf

en ce qui concerne la composante prédominante du tenseur des contraintes (composante de compression le long de l'axe de chargement) sur laquelle les surfaces libres latérales n'ont que peu d'influence. Cela explique vraisemblablement la capacité du modèle analytique à prédire correctement les systèmes de glissement actifs.

Enfin, on peut souligner la remarquable simplicité des expressions des contraintes d'incompatibilité en présence d'un joint de macle $\Sigma 3(111)$ et leurs intérêts pour la conception de nouveaux matériaux par des méthodes de "twin boundary engineering" [LSC⁺04, PLL13]. Dans la thèse d'Idriss Tiba [Tib15], elles ont eu une utilité immédiate en permettant d'éliminer ces joints de macle dans la sélection des bicristaux d'étude puisque ces expressions montrent qu'il n'y a pas d'effet de l'anisotropie élastique si le joint de macle est parallèle à l'axe de compression. Ce dernier cas a d'ailleurs été récemment étudié par une autre équipe dans un bicristal de Cu ($A = 3.26$) [LAI⁺13] et une activation des systèmes de glissement conforme à la loi de Schmid macroscopique a été observée. Les calculs théoriques aux joints de macle $\Sigma 3(111)$ collent également très bien avec deux autres études expérimentales indépendantes effectuées *a posteriori* qui ont mis en évidence du glissement parallèle aux plans de macle comme suggéré. La première étude concerne des essais de compression sur des micropiliers de Cu avec des joints de macle inclinés par rapport à l'axe de chargement et montre une prédominance des mouvements de dislocations le long des joints de macle [IKD15]. La deuxième étude concerne des mesures *in situ* de champs de déformation à l'échelle microscopique dans des aciers TWIP et montre des déformations plastiques intenses le long des joints de macle [YDZ16].

Chapitre 3

Modélisations micromécaniques

Les modèles de transition d'échelles font généralement l'hypothèse de champs plastiques moyens dans les grains. Afin de bâtir de nouvelles lois d'accommodation pour les matériaux polycristallins qui contiennent plus de physique, il est nécessaire de lever cette hypothèse. En effet, l'hypothèse de champs plastiques uniformes à l'intérieur des grains est éloignée de la réalité : la déformation plastique intra-granulaire se concentre à l'intérieur de bandes de glissement plus ou moins régulièrement espacées qui elles-mêmes peuvent être fortement hétérogènes, en raison par exemple de l'empilement des dislocations aux joints de grains. De plus, sous l'hypothèse de champs uniformes, les lois d'accommodation sont forcément indépendantes de la taille des grains et un effet de taille sur le comportement global ne peut être obtenu que par l'introduction de termes phénoménologiques supplémentaires. Les deux premières parties de ce chapitre portent ainsi sur deux approches permettant de lever cette hypothèse de micro-homogénéité. La première a été initiée lors de mon post-doctorat dans le cadre de l'ANR LIOM et consiste à considérer une plasticité en bandes de glissement dans les grains. La deuxième approche permet elle de considérer des gradients de déformation plastique à l'intérieur des grains.

La troisième partie de ce chapitre est consacrée au développement d'un modèle micromécanique afin d'expliquer la sélection des macles secondaires de double extensions $(10\bar{1}2) - (10\bar{1}2)$ lors d'essais de compression séquentiels sur des alliages de magnésium AZ31. Ce travail a été effectué dans le cadre du post-doctorat de Zhang-Zhi Shi intégré au projet ANR MAGTWIN portant sur le comportement plastique des alliages de Mg. Les approches micromécaniques classiques, type Eshelby [Esh57], n'arrivant pas à expliquer les observations de macles secondaires, un schéma muni d'une topologie à double inclusions a été introduit.

Enfin, la dernière partie de ce chapitre concerne l'étude de l'anisotropie

et de l'écroutissement du Ti- α en conditions de traction qui était au coeur du projet ANR PHIRCILE. Deux thèses ont porté sur cette étude, la thèse d'Amandine Roth [Rot14] et celle de Kékéli Amouzou [Amo15]. Ce chapitre concerne essentiellement la partie modélisation de cette étude. Un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique et doté d'une formulation affine récemment développée au LEM3 [MB15] a été utilisé. L'originalité de l'approche vient de la prise en compte, en plus des cissons critiques, de différentes propriétés spécifiques aux familles de glissement afin d'expliquer le comportement particulier observé de l'écroutissement du Ti- α en traction.

Ce chapitre rassemble les résultats de 6 articles : [BBR08], [RBB09], [RB14], [RLL⁺14], [ZZSZW⁺15] et [ARR⁺16], auxquels sont associées les contributions des collègues suivants : Stéphane Berbenni, Kékéli Amouzou, Amandine Roth, Mikhail Lebyodkin, Zhang-Zhi Shi, Marcel Berveiller, Tatiana Lebedkina, Pierre-Alexandre Juan, Jean-Sébastien Lecomte, Francis Wagner, Laurent Capolungo et Yudong Zhang.

3.1 Plasticité intra-granulaire distribuée en bandes de glissement

3.1.1 Contrainte cinématique moyenne

Une première levée de l'hypothèse de micro-homogénéité a été effectuée en calculant les contraintes et l'énergie élastique associée à une configuration de boucles de dislocations de glissement contraintes à l'interface d'un grain sphérique I de rayon a et de volume V_g qui est lui-même noyé dans une matrice purement élastique de volume infini V [BBR08]. En effet, un processus de plastification sous la forme d'un glissement simple concentré dans des bandes de glissement parallèles et séparées d'une distance h à l'intérieur du grain peut alors être considéré (figure 3.1). Ces bandes sont en fait décrites par des boucles de super-dislocations, de même vecteur apparent $\underline{B} = k\underline{b}$ où k représente le nombre de boucles dans un même plan. Le glissement moyen correspondant à ces super-dislocations s'écrit :

$$\langle \gamma \rangle_I = B \frac{\sum_{n=1}^N S^{(n)}}{V_g}, \quad (3.1)$$

où $S^{(n)}$ est l'aire formée par la super-boucle (n) . Il est à noter que la formation possible d'empilements de dislocations n'est pas pris en compte avec cette configuration où les super-dislocations restent contraintes au joint de grains. Suite à une variation de $\langle \gamma \rangle_I$ par une modification du vecteur de Burgers apparent et/ou du nombre de bandes, l'énergie élastique par unité de volume ϕ^e va être modifiée. D'après [BBR08], cette dernière peut s'écrire en élasticité homogène :

$$\phi^e = \frac{1}{V} \int_V w^e dV = \frac{1}{2} \left(\underline{E} - \underline{E}^p \right) : \underline{C} : \left(\underline{E} - \underline{E}^p \right) - \frac{1}{2V} \int_V \left(\underline{\sigma} - \underline{\Sigma} \right) : \underline{\varepsilon}^p dV, \quad (3.2)$$

avec toujours $\underline{E} = \langle \underline{\varepsilon} \rangle_V$, $\underline{\Sigma} = \langle \underline{\sigma} \rangle_V$ et ici en élasticité homogène $\underline{E}^p = \langle \underline{\varepsilon}^p \rangle_V$. Le dernier terme qui contient les contraintes internes correspond à l'énergie élastique interne par unité de volume, $\phi_{int} = \frac{1}{V} \Phi_{int}$, avec donc :

$$\Phi_{int} = -\frac{1}{2} \int_V \left(\underline{\sigma} - \underline{\Sigma} \right) : \underline{\varepsilon}^p dV. \quad (3.3)$$

La variation de l'énergie élastique interne Φ_{int} avec $\langle \gamma \rangle_I$ permet de définir une contrainte cinématique (“backstress”) moyenne sur le grain, τ_μ , telle que [RBB09] :

$$\tau_\mu = -\frac{1}{V_g} \frac{\partial \Phi_{int}}{\partial \langle \gamma \rangle_I}. \quad (3.4)$$

Afin de calculer τ_μ , il est supposé que les longueurs internes a et h ne varient pas pendant la déformation plastique, ce qui constitue toutefois une description grossière de la réalité au vu des observations montrant une forte hétérogénéité spatio-temporelle du développement des bandes de glissement [Neu83]. τ_μ peut alors être calculée à partir de l'expression analytique de l'énergie élastique associée à une distribution périodique de boucles de dislocations concentriques établie dans [BBR08] :

$$\tau_\mu = \mu \frac{7 - 5\nu}{15(1 - \nu)} \langle \gamma \rangle_I + \mu \chi(h, a) \langle \gamma \rangle_I. \quad (3.5)$$

où $\chi(h, a)$ est une fonction complexe dépendant de h et de a dont l'expression complète est donnée dans [RBB09]. Au travers de cette fonction $\chi(h, a)$, τ_μ dépend naturellement de la taille de grain a alors que sous l'hypothèse d'une déformation plastique homogène dans le grain (approche à champ moyen d'Eshelby [Esh57]), τ_μ se réduit au premier terme de l'équation 3.5 qui est indépendant de a . Ce terme est naturellement retrouvé quand les boucles de dislocations tapissent complètement la surface du grain, *i.e.*, $h/a \rightarrow 0 \Rightarrow \chi(h, a) = 0$.

3.1.2 Modélisation polycristalline

A partir du résultat sur la contrainte cinématique moyenne (eq. 3.5), il est possible de modéliser un effet de taille de grain sur le comportement mécanique d'un polycristal en supposant un processus de plastification sous la forme d'un glissement simple concentré dans des boucles de superdislocations pour chaque grain. Pour cela, un schéma de transition d'échelles

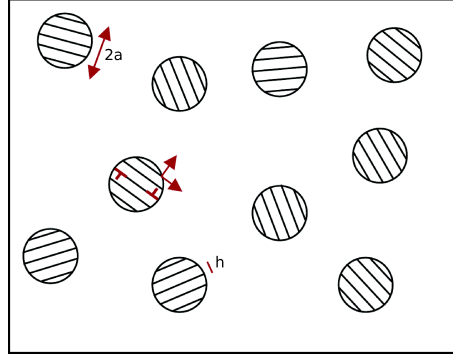


FIGURE 3.1 – Grains sphériques en concentration diluée dans une matrice au comportement purement élastique. Dans chaque grain, la plastification s’effectue sous la forme d’un glissement simple concentré dans des boucles de super-dislocations régulièrement espacées d’une distance h .

très simple est utilisé où seule une petite partie des grains se plastifient de sorte que ceux-ci peuvent être considérés comme dilués dans une matrice purement élastique (figure 3.1). Cette hypothèse peut correspondre aux tous premiers stades de déformation au cours du régime de micro-plasticité. On s’est donc limité aux très petites déformations et la rotation du réseau cristallin n’est pas prise en compte. L’élasticité est supposée isotrope et homogène dans tout le volume et les grains de forme sphérique avec un comportement élasto-plastique. Dans chaque grain I , il est donc supposé qu’au maximum un seul système de glissement peut devenir actif et cela si :

$$\begin{cases} \tau_{eff}^I = \tau_c^I \\ \dot{\tau}_{eff}^I = \dot{\tau}_c^I \end{cases}, \quad (3.6)$$

où :

$$\tau_{eff}^I = R^I : \tilde{\sigma} = R^I : \tilde{\Sigma} - \mu \left(\frac{7 - 5\nu}{15(1 - \nu)} - \chi(h, a) \right) \langle \gamma \rangle_I, \quad (3.7)$$

et τ_c^I est une cission critique supposée constante au cours du temps. Par conséquent la loi de consistance se réduit à :

$$\langle \dot{\gamma} \rangle_I = \frac{R^I : \dot{\tilde{\Sigma}}}{\Theta}, \quad (3.8)$$

avec $\Theta = -\mu \left(\frac{7 - 5\nu}{15(1 - \nu)} - \chi(h, a) \right)$, coefficient constant au cours de la déformation étant donné nos hypothèses. Ce modèle ne considère donc qu’un durcissement d’origine cinématique via une relation linéaire entre l’incrément de glissement sur le système actif et l’incrément de cission résolue appliquée.

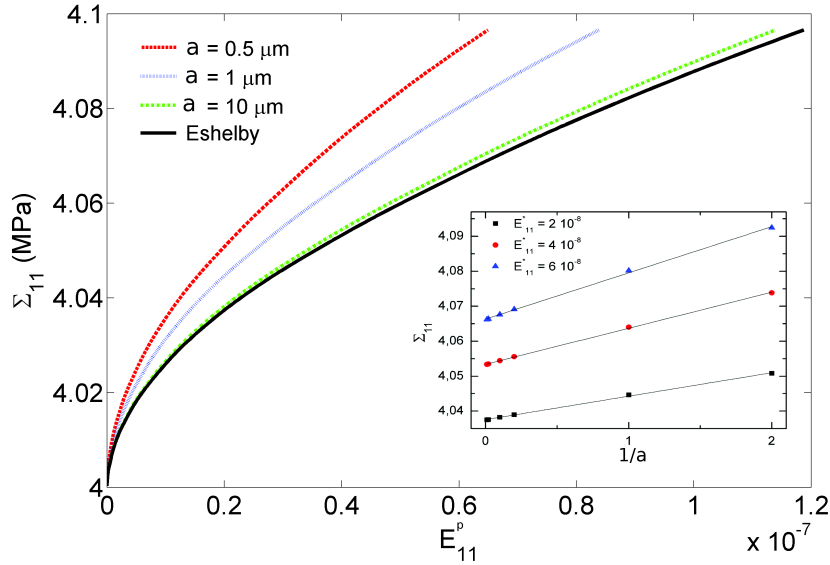


FIGURE 3.2 – Courbes contrainte-déformation plastique simulées pour différentes tailles de grain a . La courbe notée “Eshelby” représente la réponse du modèle Eshelby dilué. En encart : contraintes d’écoulement macroscopique en fonction de $1/a$ pour trois niveaux de déformations plastiques.

Ce modèle a alors servi à modéliser un essai de traction suivant la direction 1 du repère global à partir de 1000 grains d’orientations aléatoires et de structure CFC. Les coefficients de Lamé du Cu ont été utilisés : $\mu = 42$ GPa et $\nu = 0.324$. τ_μ a été fixée à 2 MPa et h à $0.1 \mu\text{m}$. La figure 3.2 montre que le comportement mécanique global du polycristal ainsi modélisé dépend de la taille de grain. Contrairement aux approches à champs moyens, l’écrouissage cinématique augmente quand la taille de grain diminue. L’effet de taille de grain simulé provient directement des contraintes internes induites par la microstructure intra-granulaire au travers de la fonction $\chi(h, a)$. Pour h fixe, cette fonction varie comme l’inverse de la taille de grain [RBB09]. L’encart de la figure 3.2 montre que cette loi d’échelle est retrouvée au niveau macroscopique avec une relation inverse entre Σ_{11} et a . On retrouve bien également que le comportement du polycristal converge vers le résultat d’Eshelby quand la taille de grain augmente ($h/a \rightarrow 0$).

3.2 Gradients intra-granulaires de déformation plastique

3.2.1 Principe de la méthode de superposition des bicristaux

Toujours dans le but de lever l'hypothèse de micro-homogénéité, une approche a été développée afin de traiter des problèmes d'inclusion sphérique avec des déformations plastiques non-uniformes. Il s'agit d'une méthode de superposition qui est basée sur les solutions générales du problème du bicristal avec fluctuation normale de la plasticité (eq. 2.58). Le cas d'une inclusion sphérique de rayon a avec une déformation plastique $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ qui est noyée dans dans une matrice de volume infini V avec une déformation plastique $\tilde{\varepsilon}^{p(ext)}$ est ainsi considéré. Le volume entier est soumis à un chargement macroscopique homogène $\tilde{\Sigma}$ et l'élasticité est supposée homogène et isotrope. L'idée est que les solutions en contrainte de ce problème peuvent être obtenues par une sommation appropriée des solutions du bicristal grâce au principe de superposition des contraintes en élasticité linéaire homogène. En effet, l'enveloppe externe d'une sphère peut être définie à partir de l'intersection d'un nombre infini de plans qui lui sont tangents (figure 3.3).

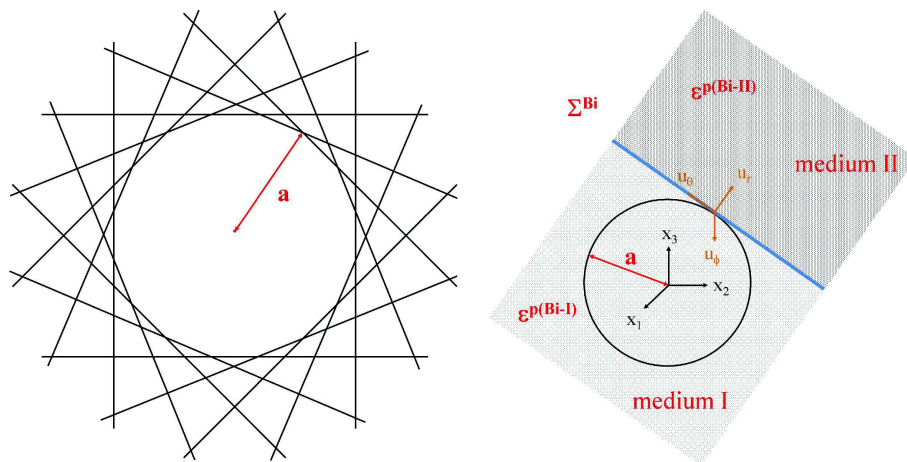


FIGURE 3.3 – Coupe 2D d'une sphère définie par l'intersection de plans continûment superposés et schéma illustrant le problème bicristallin pour un des plans tangents à la sphère.

Selon ce principe, le problème de l'inclusion sphérique est décomposé en une infinité de problèmes de bicristaux définis par les points d'intersection entre les interfaces planes de ces bicristaux et la surface de la sphère (en coordonnées polaires : $r = a, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi$, voir figure 3.3). Chaque interface plane sépare deux milieux I et II de même fraction volumique et de déformations plastiques $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-I)}$ et $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-II)}$, avec la convention que

l'inclusion sphérique est toujours incluse dans le milieu I (figure 3.3). A chaque bicristal est également associé un chargement homogène $\tilde{\Sigma}^{Bi}$. Dans un premier temps, le principe de la méthode de superposition consiste à trouver des champs $\tilde{\Sigma}^{Bi}$, $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-I)}$ et $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-II)}$ qui permettent de reconstruire, par sommation sur la surface de la sphère, les champs $\tilde{\Sigma}$, $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ et $\tilde{\varepsilon}^{p(ext)}$. Ainsi, les relations suivantes doivent être satisfaites (voir figure 3.4) :

$$\tilde{\Sigma} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{\Sigma}^{Bi}(\theta', \phi') \sin \theta' d\theta' d\phi', \quad (3.9)$$

$$\tilde{\varepsilon}^{p(int)}(r < a, \theta, \phi) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{\varepsilon}^{p(Bi-I)}((\theta', \phi'), d) \sin \theta' d\theta' d\phi', \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}^{p(ext)}(r > a, 0, 0) &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\arccos(\frac{a}{r})} \tilde{\varepsilon}^{p(Bi-II)}((\theta', \phi'), d) \sin \theta' d\theta' d\phi' \\ &+ \int_0^{2\pi} \int_{\arccos(\frac{a}{r})}^{\pi} \tilde{\varepsilon}^{p(Bi-I)}((\theta', \phi'), d) \sin \theta' d\theta' d\phi', \end{aligned} \quad (3.11)$$

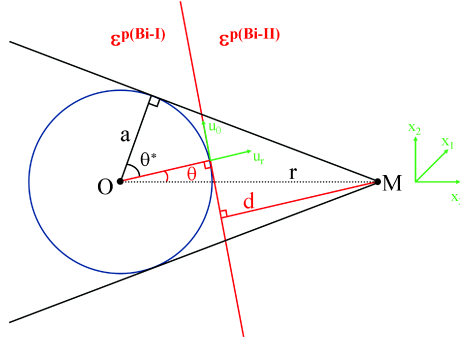


FIGURE 3.4 – Pour un point extérieur $M(r, 0, 0)$, tous les plans tangents avec $0 < \phi < 2\pi$ et $0 < \theta < \theta^* = \arccos(\frac{a}{r})$ contribuent avec $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-II)}$.

où la distance d entre la position en (r, θ, ϕ) et l'interface plane a été introduite (figure 3.4) afin de souligner que $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-I)}$ et $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-II)}$ peuvent varier le long de la normale à l'interface. Ensuite, les champs de contraintes à l'intérieur et à l'extérieur de l'inclusion se déduisent des champs de contraintes

associés aux problèmes bicristallins $\tilde{\sigma}^{Bi-I}$ et $\tilde{\sigma}^{Bi-II}$ par les mêmes opérations de sommation :

$$\tilde{\sigma}^{(int)}(r < a, \theta, \phi) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{\sigma}^{Bi-I}((\theta', \phi'), d) \sin \theta' d\theta' d\phi', \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}^{(ext)}(r > a, 0, 0) &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\arccos(\frac{a}{r})} \tilde{\sigma}^{Bi-I}((\theta', \phi'), d) \sin \theta' d\theta' d\phi' \\ &+ \int_0^{2\pi} \int_{\arccos(\frac{a}{r})}^{\pi} \tilde{\sigma}^{Bi-II}((\theta, \phi), d) \sin \theta d\theta d\phi, \end{aligned} \quad (3.13)$$

où $\tilde{\sigma}^{Bi-I}$ et $\tilde{\sigma}^{Bi-II}$ sont donnés par l'équation 2.58. Dans le cas présent où les fractions volumiques sont égales et l'élasticité est isotrope homogène, leurs expressions explicites en coordonnées polaires sont :

$$\begin{aligned} \sigma_{\theta\theta}^{Bi-I} &= \Sigma_{\theta\theta}^{Bi} + \frac{\mu}{1-\nu}([\varepsilon_{\theta\theta}^{p\infty(Bi)}] + \nu[\varepsilon_{\phi\phi}^{p\infty(Bi)}]) - \frac{2\mu}{1-\nu}(\delta\varepsilon_{\theta\theta}^{p(Bi-I)}(d) + \nu\delta\varepsilon_{\phi\phi}^{p(Bi-I)}(d)), \\ \sigma_{\phi\phi}^{Bi-I} &= \Sigma_{\phi\phi}^{Bi} + \frac{\mu}{1-\nu}([\varepsilon_{\phi\phi}^{p\infty(Bi)}] + \nu[\varepsilon_{\theta\theta}^{p\infty(Bi)}]) - \frac{2\mu}{1-\nu}(\delta\varepsilon_{\phi\phi}^{p(Bi-I)}(d) + \nu\delta\varepsilon_{\theta\theta}^{p(Bi-I)}(d)), \\ \sigma_{\theta\phi}^{Bi-I} &= \Sigma_{\theta\phi}^{Bi} + \mu[\varepsilon_{\theta\phi}^{p\infty(Bi)}] - 2\mu\delta\varepsilon_{\theta\phi}^{p(Bi-I)}(d), \\ \sigma_{rr}^{Bi-I} &= \Sigma_{rr}^{Bi}, \\ \sigma_{r\theta}^{Bi-I} &= \Sigma_{r\theta}^{Bi}, \\ \sigma_{r\phi}^{Bi-I} &= \Sigma_{r\phi}^{Bi}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\theta\theta}^{Bi-II} &= \Sigma_{\theta\theta}^{Bi} - \frac{\mu}{1-\nu}([\varepsilon_{\theta\theta}^{p\infty(Bi)}] + \nu[\varepsilon_{\phi\phi}^{p\infty(Bi)}]) - \frac{2\mu}{1-\nu}(\delta\varepsilon_{\theta\theta}^{p(Bi-II)}(d) + \nu\delta\varepsilon_{\phi\phi}^{p(Bi-II)}(d)), \\ \sigma_{\phi\phi}^{Bi-II} &= \Sigma_{\phi\phi}^{Bi} - \frac{\mu}{1-\nu}([\varepsilon_{\phi\phi}^{p\infty(Bi)}] + \nu[\varepsilon_{\theta\theta}^{p\infty(Bi)}]) - \frac{2\mu}{1-\nu}(\delta\varepsilon_{\phi\phi}^{p(Bi-II)}(d) + \nu\delta\varepsilon_{\theta\theta}^{p(Bi-II)}(d)), \\ \sigma_{\theta\phi}^{Bi-II} &= \Sigma_{\theta\phi}^{Bi} - \mu[\varepsilon_{\theta\phi}^{p\infty(Bi)}] - 2\mu\delta\varepsilon_{\theta\phi}^{p(Bi-II)}(d), \\ \sigma_{rr}^{Bi-II} &= \Sigma_{rr}^{Bi}, \\ \sigma_{r\theta}^{Bi-II} &= \Sigma_{r\theta}^{Bi}, \\ \sigma_{r\phi}^{Bi-II} &= \Sigma_{r\phi}^{Bi}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

3.2.2 Application au problème d'Eshelby-Kröner

Cette méthode de superposition a tout d'abord été appliquée au problème de l'inclusion sphérique d'Eshelby [Esh57] et Kröner [Krö61] où les champs

$\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ et $\tilde{\varepsilon}^{p(ext)}$ sont uniformes [RB14]. Les contraintes intérieures $\tilde{\sigma}^{(int)}$ et extérieures $\tilde{\sigma}^{(ext)}$ associées à ce problème sont retrouvées à partir des équations 3.12 et 3.13 en considérant, par exemple, le jeu suivant de champs bicristallins :

$$\begin{aligned}
\tilde{\Sigma}^{Bi} &= \frac{1}{4\pi} \tilde{\Sigma}, \\
\tilde{\varepsilon}^{p\infty(Bi-I)} &= \frac{1}{4\pi} \tilde{\varepsilon}^{p(int)}, \\
\tilde{\varepsilon}^{p\infty(Bi-II)} &= \frac{1}{4\pi} (2\tilde{\varepsilon}^{p(ext)} - \tilde{\varepsilon}^{p(int)}), \\
\tilde{\delta\varepsilon}^{p(Bi-I)}(d) &= 0, \\
\tilde{\delta\varepsilon}^{p(Bi-II)}(d) &= \frac{(n-1)a^n}{2\pi(a+d)^n} (\tilde{\varepsilon}^{p(ext)} - \tilde{\varepsilon}^{p(int)}) \text{ avec } n \rightarrow \infty.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Il est à noter que la solution $\tilde{\sigma}^{(int)}$ est donc indépendante de d (cf. eqs. 3.12 et 3.14). Ainsi, la propriété remarquable que les contraintes sont uniformes à l'intérieur de l'inclusion sphérique [Esh57] se retrouve par cette méthode du fait que $\tilde{\sigma}^{(int)}$ est donné en tout point à l'intérieur de l'inclusion par une même intégrale de champs uniformes.

3.2.3 Inclusion avec plasticité non-uniforme

La méthode de superposition a ensuite été utilisée pour traiter des problèmes d'inclusion sphérique avec plasticité non-uniforme. Dans une première approche, on s'est uniquement intéressé aux champs mécaniques à l'intérieur de l'inclusion et aux cas où $\tilde{\varepsilon}^{p(ext)} = 0$ et où $\tilde{\varepsilon}^{p(Bi-I)}$ est identique pour tous les bicristaux. Dans ces conditions, la méthode développée est particulièrement bien adaptée pour traiter des déformations plastiques $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ présentant des variations spatiales sous forme polynomiale avec des exposants pairs ou pouvant se développer en séries entières avec uniquement des exposants pairs comme $\cos x$, $\cosh x$, $\frac{\sin x}{x}$, $\frac{\sinh x}{x}$ [RB14].

Les expressions analytiques explicites des contraintes intérieures correspondant à une déformation plastique dans l'inclusion de forme $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}(r) = \tilde{\varepsilon}^{p0} r^{2n}$ (avec n entier positif) ont ainsi été déterminées [RB14]. Ces expressions montrent notamment qu'une dépendance en r^{2n} est retrouvée au niveau des contraintes comme indiqué par Asaro et Barnett [AB75], mais que celles-ci perdent la symétrie sphérique de $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ puisqu'elles dépendent de θ et ϕ [RB14].

Ensuite, une forme de $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ permettant, à la fois, d'appliquer aisément la méthode de superposition et de décrire de manière assez réaliste les gradients de déformation plastique se formant à l'intérieur des grains dû à

l'empilement des dislocations au joint a été recherchée. La forme suivante, caractérisée par une longueur interne l , a ainsi été adoptée :

$$\tilde{\varepsilon}^{p(int)}(r) = \tilde{\varepsilon}^{p0} \frac{\frac{a}{l}}{\left(\sinh \frac{a}{l} - \frac{a}{l}\right)} \left(\frac{\sinh \frac{a}{l}}{\frac{a}{l}} - \frac{\sinh \frac{r}{l}}{\frac{r}{l}} \right). \quad (3.17)$$

Quand $l \rightarrow 0$, une déformation plastique uniforme est retrouvée et quand $l \rightarrow +\infty$, une déformation plastique variant avec le carré de la distance radiale est obtenue (figure 3.5). Au travers de l , il est donc possible de décrire différents types de gradients (figure 3.5). Si la forme choisie pour $\tilde{\varepsilon}^{p(int)}$ reste une description grossière de la réalité, elle constitue toutefois une avancée par rapport à un champ complètement uniforme. De plus, pour $l \neq 0$, il y a continuité complète de la déformation plastique à l'interface matrice/inclusion (figure 3.5), de manière similaire aux conditions d'interface généralement requises dans les théories avec milieux à gradient [Aif84, Gud04] ou milieux continus généralisés [CGF⁺10]. Ces conditions sont cependant plus restrictives que la condition de saut 1.27 qui impose seulement la continuité tangentielle de la distorsion plastique.

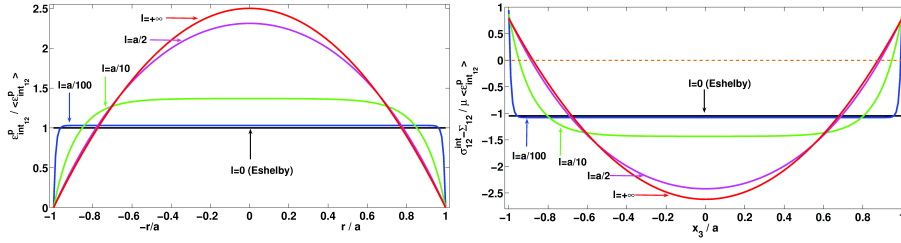


FIGURE 3.5 – Profil de $\varepsilon_{12}^{p(int)}$ (eq. 3.17) le long d'un diamètre du grain et de $\sigma_{12} - \Sigma_{12}$ le long de x_3 pour différentes valeurs de l .

Les contraintes à l'intérieur de l'inclusion, considérée dorénavant comme étant un grain, ont été déterminées de manière explicite par la méthode de superposition [RB14]. A titre d'illustration, σ_{12} est tracé le long de x_3 dans le grain pour différentes valeurs de l (figure 3.5). Pour $l \neq 0$, de très fortes concentrations de contrainte sont constatées proche des bords, avec des valeurs pouvant excéder celle de la contrainte macroscopique appliquée en dépit de la relaxation plastique à l'intérieur de l'inclusion. A partir du champ de contraintes, il est également possible d'obtenir une expression explicite de Φ_{int} (eq. 3.3). Dans le cas d'un glissement simple modélisé en considérant uniquement la composante $\varepsilon_{12}^{p(int)}$ comme non nulle, son expression est :

$$\Phi_{int} = \frac{8\mu\pi a^3}{45(1-\nu)} \chi \left(\frac{l}{a} \right) \left(\varepsilon_{12}^{p0} \right)^2, \quad (3.18)$$

avec :

$$\chi\left(\frac{l}{a}\right) = \frac{(14 - 10\nu) \cosh\left(\frac{2a}{l}\right) - (63 - 45\nu) \frac{\sinh\left(\frac{2a}{l}\right)}{\frac{a}{l}} + (84 - 60\nu) \frac{\cosh\left(\frac{2a}{l}\right) - 1}{\left(\frac{a}{l}\right)^2} - (56 - 40\nu)}{2 \cosh\left(\frac{2a}{l}\right) - 8 \frac{a}{l} \sinh\left(\frac{a}{l}\right) - 2 + 4 \left(\frac{a}{l}\right)^2}. \quad (3.19)$$

Puis, tout comme dans la section 3.1.1, une contrainte cinématique τ_μ , due au glissement moyen $\langle \gamma \rangle_I = 2 \langle \varepsilon_{12}^{p(int)} \rangle_I$, est calculée en considérant le paramètre l comme constant par souci de simplicité :

$$\tau_\mu = -\frac{\mu}{15(1-\nu)} \frac{\chi\left(\frac{l}{a}\right)}{\psi^2\left(\frac{l}{a}\right)} \langle \gamma \rangle_I, \quad (3.20)$$

avec :

$$\psi\left(\frac{l}{a}\right) = \frac{1}{\sinh\frac{a}{l} - \frac{a}{l}} \left(\sinh\frac{a}{l} - 3 \left(\frac{\cosh\frac{a}{l}}{\frac{a}{l}} - \frac{\sinh\frac{a}{l}}{\left(\frac{a}{l}\right)^2} \right) \right). \quad (3.21)$$

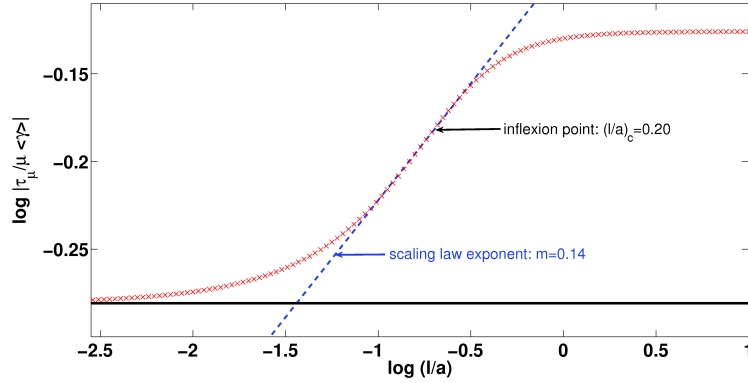


FIGURE 3.6 – Evolution de τ_μ avec le rapport l/a dans un diagramme $log-log$. La ligne noire horizontale représente la solution d'Eshelby.

Bien entendu, en réalité, l doit certainement évoluer avec la déformation puisque les dislocations s'empilent progressivement au joint de grains. La figure 3.6 représente l'évolution de τ_μ avec le rapport l/a dans un diagramme $log-log$. Une allure suivant une fonction $tanh$ est observée avec deux plateaux de saturation. Cette allure rappelle les courbes de forme $tanh$ qui sont obtenues par des théories avec milieux continus généralisés quand la contrainte d'écoulement d'un polycristal ou d'un composite à 2 phases est tracée en fonction de la longueur interne microstructurale du modèle [CGF⁺10, CFB⁺12]. Suivant les travaux de [CGF⁺10], une valeur critique du rapport l/a , noté $(l/a)_c$ est définie comme le point d'inflexion de la courbe de forme $tanh$. A proximité de ce point d'inflexion, une loi d'échelle est obtenue

	eq. 3.17	$p = 2$	$p = 4$	$p = 6$	$p = 8$	$p = 10$
$(\frac{l}{a})_c$	0.20	0.51	0.28	0.20	0.16	0.12
m	0.14	0.24	0.32	0.32	0.29	0.28

TABLE 3.1 – Valeurs de $(l/a)_c$ et de m déduites de la relation entre τ_μ et l/a quand $\varepsilon^{p(int)}$ est directement donné par l'équation 3.17 ou bien quand la fonction $\frac{\sinh r/l}{r/l}$ est approximée par des développements de Taylor à différents ordres p .

$$\tau_\mu \propto \left(\frac{l}{a}\right)^m, \quad (3.22)$$

où m définit la pente du régime linéaire dans le digramme *log-log*. Dans le cas présent, $(l/a)_c = 0.20$ et $m = 0.14$. La forme choisie pour $\varepsilon^{p(int)}$ permet ainsi de décrire un effet de taille de grain du moment que l n'est pas pris proportionnel à a . Si l est indépendant de a , un exposant de type Hall-Petch de -0.14 est obtenu, ce qui est faible comparé à l'exposant idéal de -0.5 [Hal51, Pet53]. Cela signifie qu'il est nécessaire de calibrer des relations d'évolution de l avec $\langle \gamma \rangle_I$ et a . Par ailleurs, des lois d'échelle différentes peuvent être obtenues à partir de la même configuration en considérant des développements de Taylor de la fonction $\frac{\sinh r/l}{r/l}$ à différents ordres p [RB14]. Le tableau 3.1 rassemble les valeurs de $(l/a)_c$ et de m ainsi calculées. Une valeur maximum de $m = 0.32$ est notamment obtenue pour $p = 4$ et $p = 6$, montrant que la distribution de la plasticité à l'intérieur du grain influence directement l'effet de taille de grain. Enfin, ces solutions explicites pourraient être utilisées afin de construire un modèle polycristallin rendant naturellement compte d'un effet de taille de grains, comme cela a été fait dans la section 3.1.1.

3.3 Modèle de sélection des macles secondaires

La succession de différents états de compression peut se rencontrer dans certains procédés de mise en forme, comme l'extrusion ou le cintrage, et induire la formation de macles de double extensions $(10\bar{1}2) - (10\bar{1}\bar{2})$ dans les alliages de Mg. Au contraire des macles secondaires de contraction auxquelles de nombreuses études ont été consacrées [Bar07, BKBM08, MCJJ10, AKS10], les macles d'extension ne se forment quasiment jamais à l'intérieur de macles primaires d'extension lors d'un chargement uniaxial en raison de la réorientation du réseau cristallin (86.3°). En comparaison, leur mécanisme de formation a donc été peu étudié [PHLL12, LLWZ14].

3.3.1 Observations expérimentales dans l’alliage AZ31

Le matériau étudié est un alliage commercial AZ31 (Mg-3Al-1Zn en wt.%) qui a subi un laminage suivi d’un recuit à 400°C pendant 2 h. La direction suivant le sens de laminage, la direction transverse et la direction normale sont respectivement notées RD, TD et ND. Des essais de compression sur des cubes de 10 mm de côté ont été réalisés à une vitesse de 10^{-3} s^{-1} , soit uniquement selon RD, soit uniquement selon TD, soit selon RD jusqu’à 1.8% puis, après une décharge, selon TD jusqu’à 1.3%. La figure 3.7 montre les courbes contrainte-déformation ainsi obtenues. Un plateau très marqué est visible sur les 2 courbes de compression uniaxiale, ce qui est une signature typique d’un important maclage $(10\bar{1}2)$ [HPL10]. Dans le cas d’un chargement séquentiel RD + TD, la limite élastique augmente de $\sim 45\text{ MPa}$ tandis que l’écroûissage est multiplié par ~ 2.8 par rapport au cas uniaxial suivant RD. Cela peut s’expliquer par un effet directionnel des interfaces formées suite au maclage du premier chargement qui viennent intersecter les directions de glissement des dislocations et de propagation des macles lors du second chargement et agissent ainsi comme de fortes barrières au développement de la plasticité. Des analyses de texture ont été réalisées par diffraction des rayons X ainsi que des analyses EBSD sur des coupes d’échantillons déformés [ZZSZW⁺15]. A partir des cartes EBSD suite à une déformation RD + TD, 585 macles secondaires de double extensions ont pu être répertoriées, représentant seulement 0.42% de la surface analysée (0.82 mm^2). En accord avec des études précédentes [HPL10] [SZW⁺15], aucune macle secondaire de double extensions n’est en revanche observée après une compression suivant RD seul, permettant d’affirmer que les macles secondaires observées sont formées pendant la seconde compression suivant TD.

Il existe 6 variantes de macle de type $(10\bar{1}2)$ $[\bar{1}011]$ et donc 36 possibilités de réaliser des macles secondaires de double extensions. En fonction de leur désorientation avec le cristal parent, ces 36 variantes peuvent se regrouper en 4 groupes distincts [ZZSZW⁺15] (voir tableau 3.2). Le premier groupe correspond à une désorientation de 0° (démaclage) et sa fréquence ne peut donc pas être quantifiée. La fréquence d’observation des 3 autres groupes est donnée dans la dernière colonne du tableau 3.2. Elle indique une nette prédominance des macles du groupe III (76%) tandis qu’aucune macle du groupe II n’est observée. La majorité des macles secondaires de double extensions, et plus particulièrement celles du groupe IV, ont des facteurs de Schmid macroscopiques assez élevés ($FS > 0.3$) et proches du FS maximal parmi les 6 variantes secondaires [ZZSZW⁺15]. En revanche, la loi de Schmid macroscopique ne permet pas d’expliquer la nette différence de fréquence d’observation entre le groupe III et le groupe IV (tableau 3.2). En effet, parmi les macles étudiées, la différence de FS maximal entre les deux groupes n’excède jamais 0.05, soit une valeur trop faible pour être décisive

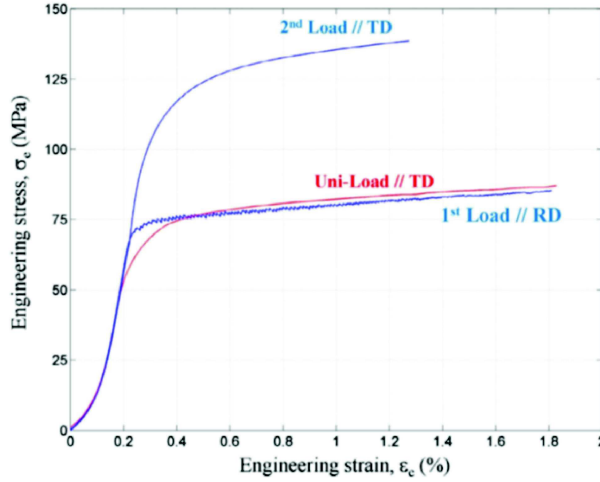


FIGURE 3.7 – Courbes contrainte-déformation obtenues par compression de cubes d’AZ31 selon RD + TD ou uniquement TD.

au niveau de la sélection des variantes. Cette faible différence s’explique par la désorientation minimale de 7.4° qui existe entre les macles du groupe III et celles du groupe IV [ZZSZW⁺15].

Groupe	Axe et angle de désorientation		Nombre de variantes	θ	Fréquence d’observation
I		0°	6	0°	
II	$[1\bar{2}10]$	7.4°	6	86.3°	0%
III	$[014\bar{1}41]$	60°	12	40.0°	76%
IV	$[17\bar{8}0]$	60.4°	12	72.6°	24%

TABLE 3.2 – Classement des macles secondaires de double extensions en 4 groupes distincts suivant leur désorientation avec le cristal parent (donnée par le couple axe et angle de désorientation minimum, colonnes 2 et 3), nombre de variantes, angle θ entre les plans de macle primaire et secondaire et fréquence d’observation associée.

3.3.2 Modélisation micromécanique à double inclusions

Le modèle micromécanique développé a pour but de comparer qualitativement les variations d’énergie libre dues à la formation des différentes variantes possibles de macles secondaires. Ce modèle est purement statique et est basé sur une topologie à double inclusions (figure 3.8). Il considère un volume V infini correspondant au grain parent. Les macles primaires et secondaires sont décrites par des ellipsoïdes de volume respectif V_A et V_B , avec $V_B \subseteq V_A \subseteq V$. Dans tout le volume V , le tenseur des modules élastiques \mathcal{C} est supposé isotrope et homogène, ce qui correspond bien au cas du Mg [KTW98]. On considère également des déformations plastiques uniformes

E_{\sim}^p , $\varepsilon_{\sim a}^p$ et $\varepsilon_{\sim b}^p$ dans les sous-domaines $V - V_A$, $V_A - V_B$ et V_B , respectivement. E_{\sim}^p correspond à la déformation plastique moyenne du grain parent. Par souci de simplicité, on fait de plus l'hypothèse que les déformations plastiques dans les macles primaires et secondaires sont uniquement dues au maclage. En notant $\varepsilon_{\sim 1}^p$ et $\varepsilon_{\sim 2}^p$ les tenseurs de déformation plastique induits par les cisaillements de maclage primaire et secondaire, on a alors :

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\sim a}^p &= \varepsilon_{\sim 1}^p, \\ \varepsilon_{\sim b}^p &= \varepsilon_{\sim 1}^p + \varepsilon_{\sim 2}^p,\end{aligned}\tag{3.23}$$

puisque le cristal a d'abord subi un maclage primaire dans tout le volume V_A , puis un maclage secondaire dans $V_B \subseteq V_A$. Seule la contribution de l'énergie élastique est prise en compte dans le calcul de l'énergie libre, les autres contributions, comme l'énergie de faute d'empilement ou l'énergie interfaciale, étant supposées induire des différences négligeables entre les différentes variantes de macle. D'après l'équation 3.2, l'énergie libre par unité de volume peut alors s'exprimer en élasticité homogène comme :

$$\phi = \frac{1}{2} \Sigma_{\sim} : E_{\sim} - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{\sim} : \varepsilon_{\sim}^p dV,\tag{3.24}$$

avec toujours $E_{\sim} = \langle \varepsilon \rangle_V$ et $\Sigma_{\sim} = \langle \sigma \rangle_V$. On note ensuite ϕ^I et ϕ^{II} les énergies libres par unité de volume après le maclage primaire et secondaire. En suivant la démarche de Tanaka et Mori [TM72], ϕ^{II} peut être approximée à partir des tenseurs moyens des contraintes $\langle \sigma \rangle_{V-V_A}$, $\langle \sigma \rangle_{V_B-V_A}$ et $\langle \sigma \rangle_{V_B}$:

$$\phi^{II} = \frac{1}{2} \Sigma_{\sim} : E_{\sim} - \frac{1}{2} \left(\frac{V - V_A}{V} \langle \sigma \rangle_{V-V_A} : E_{\sim}^p + \frac{V_A - V_B}{V} \langle \sigma \rangle_{V_A-V_B} : \varepsilon_{\sim a}^p + \frac{V_B}{V} \langle \sigma \rangle_{V_B} : \varepsilon_{\sim b}^p \right).\tag{3.25}$$

Le calcul de ces tenseurs s'effectue à partir de la loi de Hooke et des tenseurs moyens des déformations [ZZSZW⁺15] qui sont eux mêmes déduits de l'expression générale du tenseur des déformations étant donné une distribution de déformations plastiques $\varepsilon^p(\underline{x})$ [BFFH87] :

$$\varepsilon_{\sim}(\underline{x}) = E_{\sim} + \int_V \Gamma_{\sim}^s(\underline{x} - \underline{r}') : \underline{C} : \varepsilon^p(\underline{r}') \underline{dr}',\tag{3.26}$$

où Γ_{\sim}^s est le tenseur symétrique de Green modifié [Mur87]. D'après les résultats d'Eshelby [Esh57] sur les champs élastiques à l'intérieur et à l'extérieur d'une inclusion ellipsoïdale, le tenseur des déformations est uniforme dans V_B mais pas dans $V_A - V_B$. Le tenseur moyen des déformations dans $V_A - V_B$

est calculé grâce à une propriété d'inversion d'intégrale établie par Tanaka et Mori [TM72]. Au final, l'expression suivante de ϕ^{II} est obtenue [ZZSZW⁺15] :

$$\begin{aligned} \phi^{II} = & \frac{1}{2} \underline{\Sigma} : \left(\underline{E} - \underline{E}^p \right) - \frac{1}{2} \frac{V_A}{V} \left(\underline{\Sigma} : \left(\underline{\varepsilon}_1^p - \underline{E}^p \right) + \underline{C} : \left(S_{\approx}^{V_A} - \underline{I} \right) : \left(\underline{\varepsilon}_1^p - \underline{E}^p \right) : \underline{\varepsilon}_1^p \right) \\ & - \frac{1}{2} \frac{V_B}{V} \left(\underline{\Sigma} : \underline{\varepsilon}_2^p + \underline{C} : \left(\left(S_{\approx}^{V_A} - \underline{I} \right) : \left(\underline{\varepsilon}_1^p : \underline{\varepsilon}_2^p + \underline{\varepsilon}_2^p : \underline{\varepsilon}_1^p - \underline{E}^p : \underline{\varepsilon}_2^p \right) + \left(S_{\approx}^{V_B} - \underline{I} \right) : \underline{\varepsilon}_2^p : \underline{\varepsilon}_2^p \right) \right), \end{aligned} \quad (3.27)$$

où $S_{\approx}^{V_A}$ et $S_{\approx}^{V_B}$ sont les tenseurs intérieurs uniformes d'Eshelby pour les volumes V_A et V_B [Mur87] :

$$\begin{aligned} S_{\approx}^{V_A} &= \int_{V_A} \Gamma_{\approx}^s(\underline{r} - \underline{r}') : \underline{C} \, d\underline{r}' \text{ avec } \underline{r} \in V_A, \\ S_{\approx}^{V_B} &= \int_{V_B} \Gamma_{\approx}^s(\underline{r} - \underline{r}') : \underline{C} \, d\underline{r}' \text{ avec } \underline{r} \in V_B. \end{aligned} \quad (3.28)$$

A partir de l'expression 3.27, on peut vérifier qu'en cas de démaclage complet ($\underline{\varepsilon}_2^p = -\underline{\varepsilon}_1^p$ et $V_B = V_A$), ϕ^{II} se réduit à :

$$\phi^{II} = \frac{1}{2} \underline{\Sigma} : \underline{E} - \frac{1}{2} \frac{V - V_A}{V} \underline{\Sigma} : \underline{E}^p, \quad (3.29)$$

ce qui correspond bien à l'énergie élastique d'une inclusion ellipsoïdale de déformation plastique nulle. L'énergie libre par unité de volume après le maclage primaire ϕ^I est obtenue en prenant $\underline{\varepsilon}_2^p = \underline{0}$ et/ou $V_B = 0$ dans l'équation 3.27. La variation d'énergie libre dû à l'apparition du maclage secondaire se déduit par conséquent comme la différence $\Delta\phi = \phi^{II} - \phi^I$:

$$\begin{aligned} \Delta\phi = & -\frac{1}{2} \frac{V_B}{V} \left(\underline{\Sigma} : \underline{\varepsilon}_2^p + \underline{C} : \left(\left(S_{\approx}^{V_A} - \underline{I} \right) : \left(\underline{\varepsilon}_1^p : \underline{\varepsilon}_2^p + \underline{\varepsilon}_2^p : \underline{\varepsilon}_1^p - \underline{E}^p : \underline{\varepsilon}_2^p \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(S_{\approx}^{V_B} - \underline{I} \right) : \underline{\varepsilon}_2^p : \underline{\varepsilon}_2^p \right) \right). \end{aligned} \quad (3.30)$$

L'expression de $\Delta\phi$ dépend de la fraction volumique de macles secondaire, de la cristallographie des cisaillement induits par les macles primaire et secondaire, de la plasticité dans le grain parent, du chargement macroscopique, de l'élasticité du matériau, ainsi que de la morphologie des macles primaire et secondaire au travers des tenseurs $S_{\approx}^{V_A}$ et $S_{\approx}^{V_B}$. Il est à noter que le terme $\underline{\Sigma} : \underline{\varepsilon}_2^p$ est proportionnel au FS macroscopique pour le maclage secondaire et que les tenseurs $S_{\approx}^{V_A}$ et $S_{\approx}^{V_B}$ sont différents tant que V_A et V_B sont non homothétiques.

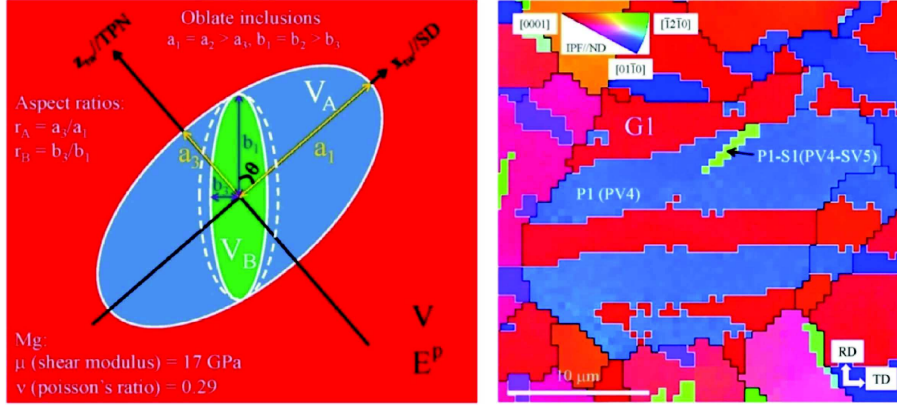


FIGURE 3.8 – Schéma illustrant le modèle à double inclusions ellipsoïdales et image EBSD d’une macle secondaire de double extensions utilisée comme exemple représentatif pour la modélisation.

3.3.3 Application aux macles de double extensions

La formule 3.30 est appliquée afin d’étudier la prédominance du groupe III parmi les modes de maclage secondaire de double extensions dans l’alliage d’AZ31. Les macles de volume V_A et V_B sont modélisées par des oblates, c’est à dire des ellipsoïdes dont les axes principaux vérifient $a_1 = a_2 > a_3$ pour V_A et $b_1 = b_2 > b_3$ pour V_B . Les directions de cisaillement de maclage sont supposées être selon les grands axes a_1 et b_1 et les normales au plan de macle selon les petits axes a_3 et b_3 . Par ailleurs, il est également supposé que le grand axe b_1 de la macle secondaire est contraint par le volume V_A (figure 3.8). De cette géométrie, il résulte alors que [ZZSZW⁺15] :

$$r_B = f^{II} r_A \left(\cos^2 \theta + \left(\frac{\sin \theta}{r_A} \right)^2 \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (3.31)$$

où $r_B = b_3/b_1$, $r_A = a_3/a_1$, θ est l’angle entre les plans de macle primaire et secondaire donné dans le tableau 3.2 (figure 3.8) et $f^{II} = V_B/V_A$. Ainsi, avec ces hypothèses, pour des valeurs fixes de f^{II} et r_A , r_B est d’autant plus petit que l’est l’angle θ , ce qui conduit au classement suivant des 4 groupes : $r_B^I < r_B^{III} < r_B^{IV} < r_B^{II}$.

Les calculs sont effectués avec $\mu = 17$ GPa, $\nu = 0.3$ et $\lambda_T = 0.129$. E^p est estimée à partir de la déformation plastique macroscopique et ses valeurs sont considérées à la fin du premier chargement suivant RD vu que le maclage secondaire est supposé débuté peu après la seconde compression. Expérimentalement, les composantes diagonales ont pu être mesurées : $E_{RD}^p = -0.018$, $E_{TD}^p = -0.0$ et $E_{ND}^p = 0.018$. Un exemple représentatif décrit sur la figure 3.8 est ensuite considéré, ce qui permet d’identifier la

variante de macle primaire et, à partir nos hypothèse géométriques, d'estimer son rapport d'aspect ($r_A = 0.2$) ainsi que la fraction volumique de macle secondaire ($f^{II} = 0.01$). La variation de l'énergie libre normalisée, $\Delta d = \Delta\phi \frac{V}{V_B}$, est alors calculée pour les 6 variantes possibles de macle secondaire à l'aide des équations 3.30 et 3.31.

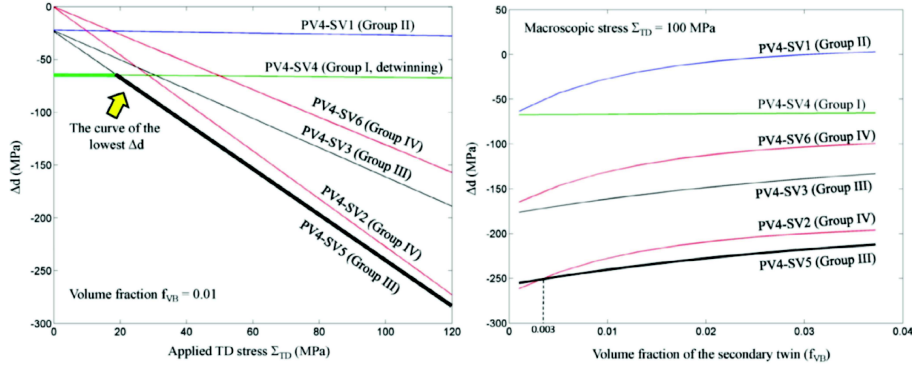


FIGURE 3.9 – Variation de l'énergie libre normalisée, Δd , pour les différentes variantes de macle secondaire en fonction de la contrainte appliquée lors de la seconde compression et en fonction de la fraction volumique de macle secondaire.

L'évolution de Δd pour les différentes variantes de macles secondaires en fonction de Σ_{TD} , la contrainte appliquée lors de la seconde compression, est représentée sur la figure 3.9. L'évolution de Δd avec Σ_{TD} est linéaire, la pente étant égale à $-\frac{1}{2}\tilde{\Sigma} : \tilde{\varepsilon}_2^p$ (eq. 3.30), c'est à dire proportionnelle à l'opposé du FS macroscopique. À charge nulle et jusqu'à 20 MPa, c'est le groupe I correspondant au démaclage qui est le plus favorable énergétiquement. Ce résultat est intéressant dans la mesure où le démaclage est souvent observé lors de la décharge d'essais mécaniques [KFAS10, GTH14]. Autour de 20 MPa, il se produit une transition et c'est la variante observée du groupe III qui devient la plus favorable énergétiquement. Ainsi, le démaclage est le mécanisme le plus favorable d'un point de vue purement configurationnel mais il bénéficie d'un FS défavorable. Il est à noter également que c'est une variante du groupe IV qui donne la pente la plus élevée (FS le plus favorable), mais la baisse d'énergie libre de celle-ci ne dépasse pour autant jamais celle de la variante du groupe III jusqu'à la limite élastique (~ 120 MPa) et même au-delà (figure 3.9). Ce résultat s'explique par la contribution des termes configurationnels non liés au FS dans l'équation 3.30.

L'évolution de Δd en fonction de f^{II} est également représentée sur la figure 3.9. La contrainte macroscopique est fixée à 100 MPa, ce qui correspond à la transition élasto-plastique (figure 3.7). Toutes les variantes montrent une augmentation de Δd avec f^{II} , mis à part la variante correspondant au démaclage dont les valeurs de Δd sont quasi-constantes. La variante avec

l'augmentation de Δd la deuxième plus faible est la variante observée du groupe III. Celle-ci devient la variante la plus favorable énergétiquement dès que $f^{II} > 0.003$. On peut également noter que c'est une variante du groupe II (jamais observé dans nos échantillons) qui montre la plus forte augmentation de Δd avec f^{II} .

Dans le cas caractéristique étudié, le modèle micromécanique développé prédit donc la plus forte diminution d'énergie libre pour l'apparition de la variante observée du groupe III et cela malgré un FS moins favorable qu'une des variantes du groupe IV. Ce résultat est notamment lié à la différence des valeurs de θ entre macles du groupe III et du groupe IV (tableau 3.2). Il permet donc d'expliquer la présence de la variante observée et plus généralement, la prédominance des macles secondaires du groupe III [ZZSZW⁺15]. Si l'approche statique développée ne tient pas compte de l'accommodation plastique, elle souligne toutefois l'importance de la topologie à double inclusions. En effet, un modèle d'inclusion unique de type Eshelby [Esh57] avait été au préalable testé mais s'était révélé incapable d'expliquer la prédominance des macles du groupe III.

3.4 Anisotropie et écrouissage du titane- α en conditions de traction

Tout comme le Mg, le Ti est de structure HC à température ambiante et possède une forte anisotropie plastique qui peut conduire à du maclage, mais généralement dans des proportions beaucoup moins importantes [MRH73, NNGC99, SKD03, NCL10, WWE⁺10, GKS11, GB11, WSB⁺12, LMB⁺13, LBBC14, BDC⁺15]. En particulier, le maclage est souvent évoqué afin d'expliquer le comportement en 3 stades du taux d'écrouissage $\Theta = d\Sigma_{11}/dE_{11}^p$ observé lors d'essais de compression [SKD02, SKD03, SKDS06]. Le stade initial A correspond à une décroissance de Θ . Il est suivi par une augmentation de Θ lors du stade B, puis par une nouvelle décroissance lors du stade C. Salem *et al.* ont observé que le début du maclage coïncidait avec le stade B [SKD02, SKD03, SKDS06]. Ils ont ainsi proposé d'attribuer l'augmentation du taux d'écrouissage à l'effet des joints de macle sur la résistance au glissement des dislocations et le stade C à une saturation de la fraction volumique de macles. Par opposition, l'écrouissage du Ti en conditions de traction était jusqu'il y a peu beaucoup moins documenté [BP13], notamment quand la propension au maclage est très faible, comme avec une petite taille de grains et un taux d'oxygène relativement élevé. Dans ce but, le comportement d'échantillons de Ti de pureté commerciale a été étudié en traction.

3.4.1 Caractérisations expérimentales

Techniques utilisées

Des essais de traction ont été réalisés sur des échantillons de titane T40 complètement recristallisés (voir la composition dans [RLL⁺14]) à faible taille de grains ($9\ \mu\text{m}$). La texture initiale est typique du titane laminé [WH03, BBB⁺13, BP13] avec les plans basaux inclinés de $30^\circ \pm 10^\circ$ de la direction normale vers la direction transverse [RLL⁺14, Amo15]. Les échantillons ont été découpés soit parallèlement à la direction de laminage (RD), soit parallèlement à la direction transverse (TD). Ils ont ensuite été tractionnés à température ambiante avec une vitesse constante de déplacement de la traverse correspondant à des déformations initiales allant de $5 \cdot 10^{-4}\ \text{s}^{-1}$ à $8 \cdot 10^{-3}\ \text{s}^{-1}$. Plusieurs essais ont été interrompus à différents taux de déformation coïncidant approximativement avec le stade B et la striction afin d'estimer la fraction volumique de macles et l'activité des différentes familles de glissement par analyse des lignes émergentes à la surface (pour plus de détails voir [RLL⁺14, ARR⁺16]). Il est à noter également que des mesures d'émission acoustique et d'extensométrie à très haute résolution temporelle ($10^3\ \text{HZ}$) ont été réalisées en parallèle lors de certains essais. Les mesures d'extensométrie ont notamment révélé une transition élasto-plastique quasi-homogène dans la zone étudiée d'une hauteur de 20mm (absence de propagation de bandes) [RLL⁺14].

Courbes de traction et évolution du taux d'érouissage

Les figures 3.10 et 3.11 représentent, respectivement, les courbes contrainte-déformation et évolutions du taux d'érouissage obtenues à partir d'essais selon RD et TD à trois vitesses de déformation. La figure 3.10 permet de constater que les courbes selon RD présentent une allure plus monotone, une limite élastique plus faible et une sensibilité à la vitesse de déformation moins grande que celles selon TD. La figure 3.11 montre elle la présence des trois stades A, B et C du taux d'érouissage pour les deux orientations en conditions de traction. Cette tendance est claire mais est toutefois beaucoup moins prononcée qu'en conditions de compression [SKD02, SKD03, SKDS06]. Par ailleurs, le puits observé à la transition des stades A et B est plus bas pour les essais selon TD que selon RD. Pour l'essai selon RD à la plus forte vitesse de déformation, il n'y a pas de puits mais un point d'inflexion est clairement visible dans l'évolution de Θ . Surtout, l'observation la plus frappante est un effet inverse de la vitesse de déformation sur la profondeur du puits pour les deux orientations : lorsque la vitesse augmente, le puits correspond à un taux d'érouissage plus faible pour les essais selon TD alors que c'est l'inverse pour les essais selon RD.

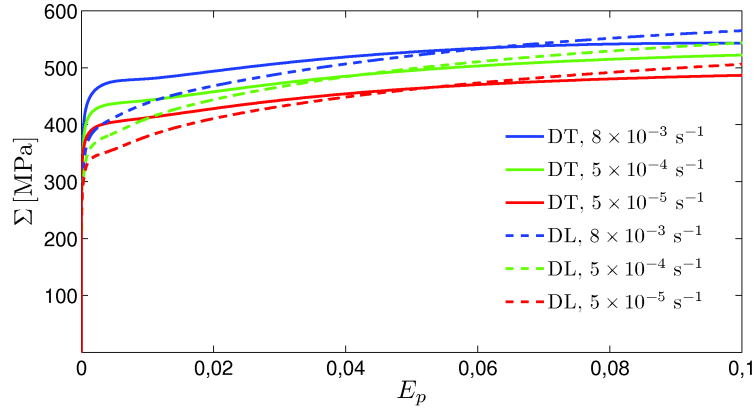


FIGURE 3.10 – Courbes contrainte-déformation plastique selon RD (\equiv DL) et TD (\equiv DT) pour différentes vitesses.

Fractions volumiques de macles

Deux types de macles ont été observées : des macles d’extension $(10\bar{1}2) [\bar{1}011]$ et des macles de contraction $(11\bar{2}2) [11\bar{2}\bar{3}]$. Le tableau 3.3 donne des estimations de leurs fractions volumiques à différents instants. La fraction volumique totale de macles des échantillons RD reste extrêmement faible tout au long de l’essai. Une plus grande quantité de macles a été observée dans les essais selon TD, avec des fractions plus faibles autour du stade B (1 à 2%) qu’à la fin de l’essai (3 à 6%).

Orientation	Vitesse de déformation	Stade B	Striction	Rupture
TD	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	1.9% T; 0% C	5.7% T; 0% C	-
	$8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	1.1% T; 0% C	-	2.6% T; 0% C
RD	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	0.4% T; 0.5% C	0% T; 0% C	-
	$8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	0% T; 0% C	-	0.2% T; 0.3% C

TABLE 3.3 – Estimations de la fraction volumique de macle. T représente les macles d’extension $(10\bar{1}2) [\bar{1}011]$ et C les macles de contraction $(11\bar{2}2) [11\bar{2}\bar{3}]$.

Activités des familles de glissement

Les tableaux 3.4 et 3.5 fournissent, respectivement, les fréquences des familles de glissement observées autour du stade B et de la striction. Tout d’abord, ces résultats indiquent que le glissement prismatique domine toujours en début d’essai, même dans les essais selon TD. Le glissement prismatique est toutefois plus présent selon RD que selon TD. Cela est en accord avec la distribution des FS macroscopiques selon les deux orienta-

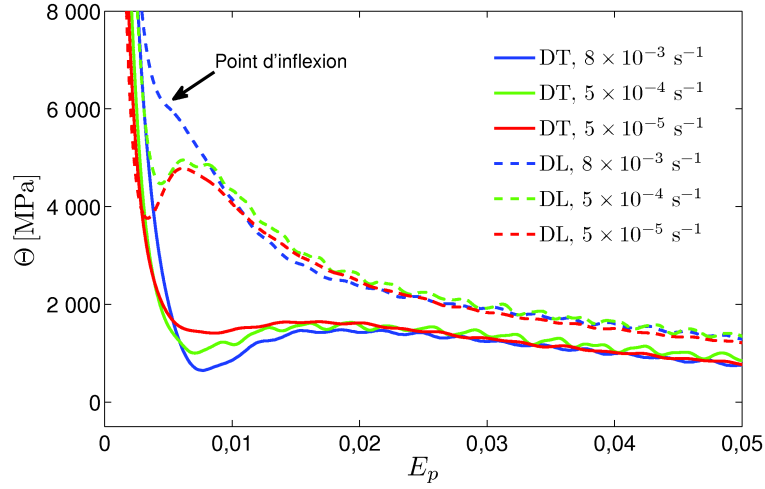


FIGURE 3.11 – Evolution du taux d'écroutissage en fonction de la déformation plastique.

tions [RLL⁺14] et la plus faible limite élastique reportée selon RD, étant donné que le glissement prismatique est reconnu comme le plus facile dans le Ti [Chu54, PSHE95, SKS05, Zae03, WKNS07, GW09, GKS11, LMB⁺13, WJRD12, BBB⁺13, GOL⁺13, BDC⁺15]. Il est également observé que la proportion de glissement pyramidal augmente au cours de l'essai pour les deux orientations, ce qui laisse supposer un possible lien avec l'augmentation de Θ au cours du stade B. De plus, les données semblent indiquer que la part du glissement prismatique augmente avec la vitesse de déformation.

Orientation	Vitesse de déformation	P	B	$\Pi_1^{<a>} + \Pi_1^{<c+a>}$	$\Pi_2^{<c+a>}$
TD	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	65%	1%	23%	11%
	$8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	73%	0%	14%	13%
RD	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	82%	0%	4%	14%
	$8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	81%	0%	8%	11%

TABLE 3.4 – Fréquence des familles de glissement observées autour du stade B.

Orientation	Vitesse de déformation	P	B	$\Pi_1^{<a>} + \Pi_1^{<c+a>}$	$\Pi_2^{<c+a>}$
TD	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	51%	0%	26%	23%
RD	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	65%	0%	17%	18%

TABLE 3.5 – Fréquence des familles de glissement observées autour à la striction.

Hypothèses

L'ensemble de ces résultats permet d'émettre des hypothèses sur les mécanismes responsables du comportement en 3 stades du taux d'écroissage. D'une part, les très faibles fractions de macle mesurées autour du stade B indiquent qu'il est peu probable que le maclage soit responsable de l'augmentation de Θ pendant le stade B. D'autre part, l'effet inverse de la sensibilité à la vitesse sur la prononciation du stade B peut difficilement s'expliquer comme une conséquence du maclage. C'est pourquoi il est nécessaire d'étudier ce comportement particulier de l'écroissage en prenant en compte les mécanismes liés au glissement des dislocations. Par exemple, Conrad [Con81] et Naka [Nak83] ont tous les deux suggéré d'attribuer le plateau observé sur les courbes de traction du Ti à une multiplication rapide des dislocations mobiles. Nous suggérons également que l'effet inverse de la vitesse suivant le sens de chargement pourrait être lié à des sensibilités différentes entre familles de glissement. Etant donné nos résultats expérimentaux (plus faible sensibilité à la vitesse de déformation selon RD, augmentation du glissement prismatique avec la vitesse de déformation), ainsi que les mesures de volume d'activation effectués par Levine [Lev66] (volume d'activation d'un monocristal en glissement prismatique supérieur à celui d'un monocristal en glissement basal), nous émettons l'hypothèse d'une sensibilité à la vitesse plus faible pour les systèmes prismatiques.

3.4.2 Modélisation auto-cohérente avec hypothèses spécifiques

La capacité des hypothèses formulées à expliquer le comportement particulier de l'écroissage observé est testée à l'aide d'un modèle polycristallin auto-cohérent, à même de capter les effets de textures. Le modèle de transition d'échelles utilisé repose sur le schéma auto-cohérent affine en élasto-viscoplasticité récemment développé par Mareau et Berbenni [MB15]. Il s'agit d'une approche à variables internes basée sur la méthode des champs translatsés [PSB99, PBF⁺01, MB15], ce qui facilite l'implémentation numérique par rapport aux approches héréditaires [MZ99]. La linéarisation affine des vitesses de déformation viscoplastiques ($\tilde{\dot{\epsilon}}^p = \tilde{m} : \tilde{\sigma} + \tilde{\eta}$) fournit des résultats plus proches des solutions en champs complets qu'une linéarisation sécante [MB15]. Le formalisme adopté est celui des petites perturbations avec une mise à jour des orientations cristallines [NBT01] [ARR⁺16].

Au niveau des lois constitutives, le maclage n'est délibérément pas considéré afin de voir si le comportement en 3 stades observé peut s'expliquer à partir de mécanismes liés uniquement au glissement. Le modèle considère ainsi le glissement des dislocations statistiques et traite séparément leur densité et leur vitesse moyenne (donnée par l'équation 1.35) afin de rendre compte de leur multiplication rapide tel que Conrad [Con81] et Naka [Nak83] l'ont proposé. Ces quantités sont reliées dans l'équation d'Orowan donnant les taux

de glissement :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \rho_m^{(s)} b^{(s)} v^{(s)}. \quad (3.32)$$

La cission critique $\tau_c^{(s)}$ s'écrit toujours comme la somme d'une contrainte de friction de réseau $\tau_0^{(s)}$ et d'une loi de Taylor étendue qui prend en compte les interactions entre systèmes [FBZ80]. Cependant, par rapport à l'équation 1.36, les modules de cisaillement directionnels $\mu^{(s)}$ sont dorénavant considérés :

$$\tau_c^{(s)} = \tau_0^{(s)} + \mu^{(s)} b^{(s)} \sqrt{\sum_l a^{(sl)} \rho_f^{(l)}}. \quad (3.33)$$

Ce choix est motivé par le fait qu'il s'agit de paramètres physiques non ajustés qui permettent de rendre partiellement compte de la forte anisotropie des cissions critiques. En effet, ces modules sont plus faibles sur les systèmes prismatiques et pyramidaux $\langle a \rangle$ et environ 1.4 fois plus élevé sur les systèmes basaux et pyramidaux $\langle c+a \rangle$ (tableau 3.6). Cette tendance est qualitativement similaire aux valeurs des cissions critiques estimées dans la littérature (tableau 3.7). En particulier, la prise en compte de l'anisotropie élastique dans la relation de Taylor pourrait avoir une certaine importance concernant le glissement basal étant donné que les approches *ab initio* et de dynamique moléculaire réalisées sur du Ti pur ne rapportent pas de grandes différences entre les contraintes de friction de réseau des systèmes prismatique et basal [PRX⁺11].

c/a	$b^{\langle a \rangle}$		$b^{\langle c+a \rangle}$	
1.587	2.95 Å		5.53 Å	
C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}
160 GPa	181 GPa	46.5 GPa	90 GPa	66 GPa
μ^P	μ^B	$\mu^{\Pi_1^{\langle a \rangle}}$	$\mu^{\Pi_1^{\langle c+a \rangle}}$	$\mu^{\Pi_2^{\langle c+a \rangle}}$
35.0 GPa	46.5 GPa	37.1 GPa	47.7 GPa	49.2 GPa

TABLE 3.6 – Paramètres cristallins du Ti à température ambiante.

Les équations suivantes sont adoptées concernant l'évolution des densités de dislocations mobiles et immobiles [EK86] :

$$\dot{\rho}_m^{(s)} = \frac{1}{b^{(s)}} \left[\frac{C_1^{(s)}}{b^{(s)}} - \frac{1}{L^{(s)}} \right] \left| \dot{\gamma}^{(s)} \right|, \quad (3.34)$$

$$\dot{\rho}_f^{(s)} = \frac{1}{b^{(s)}} \left[\frac{1}{L^{(s)}} - 2k_c^{(s)} b^{(s)} \rho_f^{(s)} \right] \left| \dot{\gamma}^{(s)} \right|, \quad (3.35)$$

$$\frac{1}{L^{(s)}} = b^{(s)} C_2^{(s)} \rho_m^{(s)} + \frac{\sqrt{\sum_l a^{(sl)} \rho_f^{(l)}}}{K^{(s)}}. \quad (3.36)$$

Dans ce formalisme, les termes négatifs de l'équation 3.34, correspondant à l'immobilisation des dislocations mobiles, apparaissent comme des termes positifs dans l'équation 3.35 et correspondent alors à l'accumulation des dislocations immobiles. Le libre parcours moyen des dislocations mobiles $L^{(s)}$ est supposé dépendre des réactions avec les autres dislocations mobiles (terme $C_2^{(s)}$) et des interactions avec les dislocations immobiles au travers des coefficients d'interactions $a^{(sl)}$ et des constantes $K^{(s)}$. $C_1^{(s)}$ est relié à la production de dislocations mobiles. $k_c^{(s)}b^{(s)}$ représente une distance d'annihilation entre dislocations et le terme associé la restauration dynamique.

Méthode	P	B	$\Pi_1^{<a>}$	$\Pi_1^{<c+a>}$	$\Pi_2^{<c+a>}$	O (wt.%)	Ref.
Analyse des	90 MPa	1.2	1.1	-	-	0.10	[Chu54]
lignes de	14 MPa	3.0	-	-	-	0.01	
glissement	-	3.6	25.4	22.5	-	0.25	[LMB ⁺ 13]
Observations TEM	-	-	< 13	-	-	0.10	[Zae03]
Analyse de lignes	120 MPa	1.5	1.2	2	-	0.16	
+ observations TEM	192 MPa	1.5	1.2	1.8	-	0.32	[BDC ⁺ 15]
Modèles EF de	181 MPa	1.2	-	2.6	-	0.07	[GW09]
monocristaux	150 MPa	2.3	-	7.4	-		[ZYBR12]
		6.0	-	9.0	-	0.11	[PSHE95]
Modèles type Taylor	37 MPa	1.3	-	5.3	-	<0.0002	[SKS05]
	30 MPa	5.0	-	4.0	-	<0.0002	[WKNS07]
	90 MPa	2.5	-	9.4	-		[GKS11]
	80 MPa	1.1	1.4	3.3	-	0.06	[WJRD12]
	57 MPa	4.8	2.9	5.4	4.1	0.13	[BBB ⁺ 13]
Modèles auto-cohérents	68 MPa	2.6	1.8	3.7	-	0.12	[GOL ⁺ 13]
	98 MPa	-	-	2.3	-	<0.001	[KLC ⁺ 13]
	141 MPa	1.8	1.4	2.4	2.5	0.11	Etude actuelle

TABLE 3.7 – Données non-exhaustives de la littérature sur les rapports de cisssions critiques relativement au glissement prismatique. Pour les systèmes prismatiques, les valeurs absolues des cisssions critiques sont données. Les cisssions critiques représentent les valeurs des cisssions résolues quand le glissement débute sur un système. Pour le modèle actuel et celui de [BBB⁺13], elles correspondent donc à $\tau_c^{(s)}$ calculés à partir des valeurs initiales de densités de dislocations (eq. 3.33).

Selon nos lois constitutives, le modèle nécessiterait 9 paramètres pour chaque famille de glissement en plus des coefficients d'interactions. Afin de gérer un nombre total limité de paramètres, seuls la contrainte de friction de réseau τ_0 , le coefficient de multiplication des dislocations mobiles C_1 et l'inverse n de la sensibilité à la vitesse sont supposés dépendre des familles de glissement (tableau 3.8). Il est reconnu que les modèles de plasticité cristalline sont très sensibles aux différences de valeurs des cisssions critiques. Le tableau 3.7 compare justement les valeurs utilisées dans cette étude avec

celles obtenues expérimentalement ou identifiées dans d'autres modèles de la littérature. On peut noter que nos valeurs se rapprochent de celles obtenues expérimentalement par Churchman [Chu54] et plus récemment par Barkia *et al.* [BDC⁺15]. D'autre part, l'anisotropie du glissement peut aussi résulter de l'évolution des densités de dislocations. Par conséquent, la constante C_1 , qui est liée à la multiplication des dislocations mobiles, est supposée avoir une valeur plus élevée sur les systèmes prismatiques. Cette hypothèse doit permettre d'obtenir une densité de dislocations totale plus élevée le long de RD, étant donné que le glissement prismatique y est plus important, et ainsi aider à reproduire le plus fort taux d'écroûissage observé le long de RD au cours du stade C (figure 3.11). Conformément à notre hypothèse initiale sur les différence de sensibilité à la vitesse entre systèmes, l'exposant n est pris plus élevé sur les systèmes prismatiques. Enfin, concernant les coefficients d'interaction $a^{(ij)}$, on s'est contenté de considérer les interactions colinéaires fortes ($a_{coli} = 0.7$) et les autres types d'interaction $a_{\neq coli} = 0, 1$ [ARR⁺16]. Dans le cas du Ti, aucune étude par dynamique des dislocations discrètes n'a en effet encore été réalisée pour estimer ces coefficients. Les valeurs choisies sont toutefois typiques des moyennes obtenues par simulations de dynamique des dislocations discrètes sur d'autres matériaux, y compris des métaux HC comme le Mg [BTB⁺14]. Les autres paramètres sont donnés dans le tableau 3.9. Leur ajustement s'est fait de telle sorte à reproduire :

- un comportement du taux d'écroûissage en 3 stades et surtout l'effet inverse de la vitesse de déformation suivant l'orientation de l'axe de traction,
- un taux d'activité réaliste pour les systèmes prismatiques,
- des valeurs correctes des coefficients de Lankford,
- une évolution cohérente de la texture.

	P	$\Pi_1^{<a>}$	B	$\Pi_1^{<c+a>}$	$\Pi_2^{<c+a>}$
τ_0	90 MPa	136 MPa	182 MPa	209 MPa	240 MPa
C_1	$8 \cdot 10^{-4}$			$1.5 \cdot 10^{-4}$	
n	65			32	

TABLE 3.8 – Paramètres spécifiques des familles de glissement.

v_0	ρ_{m_0}	ρ_{f_0}	C_2	K	a_{coli}	$a_{\neq coli}$	k_c
$3 \cdot 10^{-5} \text{ ms}^{-1}$	$1 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-2}$	$5 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$	75	80	0.7	0.1	9

TABLE 3.9 – Paramètres non spécifiques des familles de glissement.

3.4.3 Résultats des simulations et discussion

Evolution du taux d'écroissage et courbes de traction

La figure 3.12 compare les évolutions du taux d'écroissage prédites par le modèle à celles mesurées. On constate que le caractère en 3 stades est en effet qualitativement retrouvé. La confirmation que le modèle parvient à saisir correctement les mécanismes physiques en jeu vient de l'observation d'un effet inverse de la vitesse de déformation sur la profondeur des puits entre les orientations RD et TD. L'accord quantitatif est meilleur pour les tractions suivant TD. Les augmentations simulées de Θ durant les stades B sont néanmoins moins prononcées que celles mesurées. Pour les tractions suivant RD, le taux d'écroissage durant le stade B est plus élevé que celui observé expérimentalement. Toutefois, les incréments de Θ restent quantitativement en accord avec les mesures. En particulier, concernant l'échantillon déformé à la plus grande vitesse de déformation, l'évolution du taux d'écroissage ne montre pas de puits, mais un point d'inflexion, de manière similaire à l'expérience. Les encarts de la figure 3.12 montrent l'évolution du taux d'écroissage en prenant les mêmes valeurs de n et C_1 sur toutes les familles de glissement. Dans ce cas, il n'y a ni augmentation de Θ durant le stade B, ni effet inverse de la vitesse de déformation entre les orientations RD et TD.

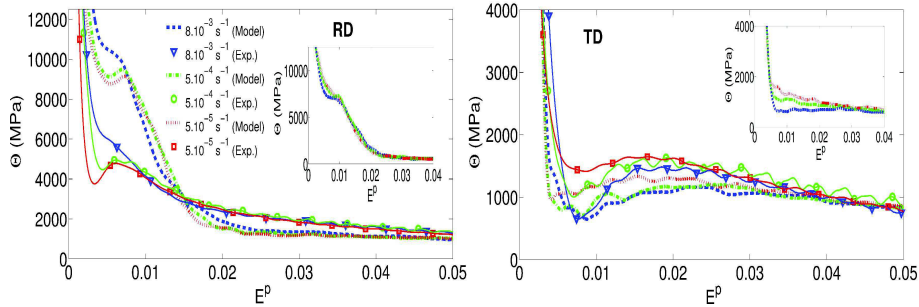


FIGURE 3.12 – Comparaisons des évolutions des taux d'écroissage entre expériences et simulations. En encart : résultats des simulations avec les mêmes valeurs de n et C_1 sur toutes les familles de glissement ($n = 50$ et $C_1 = 1.5 \cdot 10^{-4}$).

La figure 3.13 illustre la qualité des prédictions du modèle concernant les courbes contrainte-déformation plastique. A nouveau, l'accord est meilleur pour les tractions suivant TD. L'effet de la vitesse de déformation est globalement bien reproduit par le modèle pour les deux orientations bien que le début des courbes selon RD présentent un écroissage trop important.

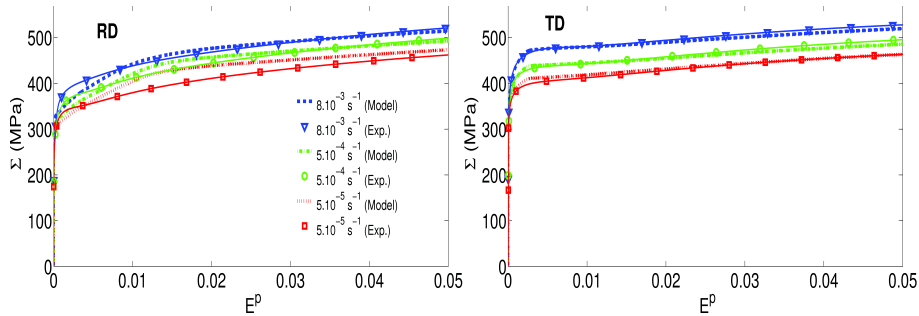


FIGURE 3.13 – Comparaisons des courbes contrainte-déformation plastique entre expériences et simulations.

Activités des systèmes de glissement

Afin de permettre des comparaisons au plus juste avec les mesures de lignes de glissement, la fréquence suivante a été calculée à partir des données du modèle :

- dans chaque grain, seul le système avec le plus fort glissement ($\gamma_{max}^{(s)}$) est considéré,
- si $\gamma_{max}^{(s)}$ dépasse une certaine valeur critique $\gamma_c = 0.004$, le grain est considéré comme ayant des lignes de glissement observables,
- les fréquences des familles de glissement sont ensuite calculées pour les grains retenus, avec une famille de glissement par grain.

La figure 3.14 présente les résultats obtenus à partir de ce calcul. Conformément aux observations, l'activité des systèmes prismatiques prédomine au début de la déformation pour les deux orientations. Néanmoins, pour l'orientation TD, l'activité prismatique diminue plus rapidement et se stabilise à une valeur comparable à l'activité du glissement pyramidal $\langle a \rangle$. Pour l'orientation RD, le système prismatique prédomine dans tout l'intervalle de déformation. Il est caractérisé par une lente diminution jusqu'à 2% de déformation plastique, puis par un niveau plus ou moins constant. Ces prédictions sont en bon accord avec les fréquences des lignes de glissement observées expérimentalement (tableaux 3.4 et 3.5). On peut toutefois noter que le modèle prédit une activité basale alors que presque aucune ligne basale n'a été observée dans nos échantillons. Cette proportion reste néanmoins faible ($< 4\%$ en DL et $< 9\%$ en DT) et cohérente avec les données expérimentales de la littérature [LMB⁺13, BDC⁺15].

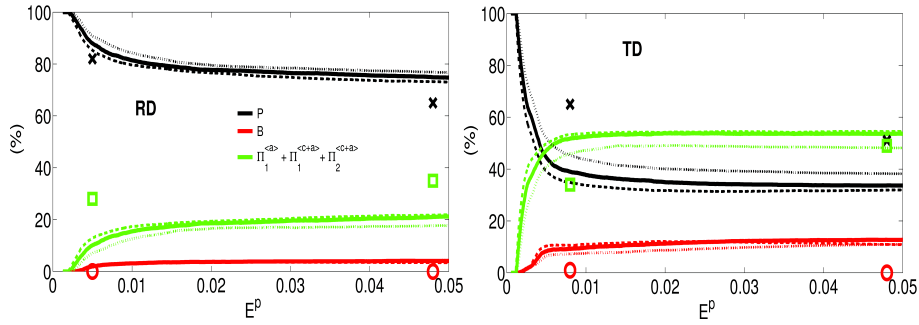


FIGURE 3.14 – Fréquence d’observation des familles de glissement estimée par le modèle pour différentes vitesses : $5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ (lignes en tirets), $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ (lignes pleines), $8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (lignes en pointillés). Les points sont les valeurs expérimentales à $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ (en réalité, les valeurs mesurées à la striction correspondent à des déformation > 0.1).

Coefficients de Lankford et évolution de texture

Le tableau 3.10 compare les coefficients de Lankford prédits par le modèle et ceux mesurés dans cette étude et dans une étude similaire [BBB⁺13]. La forte anisotropie plastique du titane commercialement pur est retrouvée par le modèle. Les coefficients de Lankford prédits correspondent bien aux valeurs expérimentales pour l’orientation RD ($R \sim 2$) mais sous-estiment un peu celle de l’orientation TD ($R \sim 4/R \sim 5$). Comme suggéré par Benmhenni *et al.* [BBB⁺13], l’absence de désorientation intragranulaire dans le modèle et/ou le faible écart par rapport aux activités de glissement réelles peuvent expliquer la différence observée selon TD. Par ailleurs, l’effet de l’élasticité anisotrope sur ces résultats est à souligner. En effet, les coefficients de Lankford sont sensiblement modifiés en prenant une élasticité isotrope, illustrant une répartition différente des activités des systèmes de glissement. En particulier, en passant d’un cadre anisotrope à un cadre isotrope, l’activité des systèmes prismatiques diminue alors que celle des systèmes basaux augmente [ARR⁺16].

	Mesures expérimentales		Prédictions du modèle (A // I)		
	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ (cette étude)	10^{-3} s^{-1} [BBB ⁺ 13]	$5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$
RD ($E^p = 9.0\%$)	2.1	2.2*	2.0 // 1.8	1.9 // 1.7	1.8 // 1.6
TD ($E^p = 6.2\%$)	5.5	4.9*	3.6 // 3.1	3.7 // 3.2	4.3 // 3.5

TABLE 3.10 – Coefficients de Lankford mesurés et prédits. “A” représente le cas de l’élasticité anisotrope et “I” le cas de l’élasticité isotrope ($\nu = 0.3$ et $\mu = 42.25 \text{ GPa}$). *Les valeurs de [BBB⁺13] sont en fait obtenues grâce à une régression linéaire sur un large intervalle de déformation.

Densités de dislocations

La figure 3.15 présente l'évolution des densités de dislocations mobiles et immobiles. Les densités sont plus élevées selon RD puisque la part de déformation réalisée par glissement prismatique y est plus importante et que C_1 y est plus grand. Par conséquent, la contribution des systèmes prismatiques à l'écroissage global est prépondérant en raison d'une diminution plus rapide du libre parcours moyen des dislocations (eq. 3.36). Ce scénario pourrait expliquer le plus fort taux d'écroissage selon RD durant le stade C (figure 3.11) malgré un maclage moins important et une part plus élevée de glissement facile. En revanche, les simulations qui sont exécutées avec une même valeur de C_1 pour toutes les familles de glissement présentent des densités de dislocations plus élevées selon TD (*cf.* les encarts de la figure 3.15) et donnent un plus fort durcissement durant le stade C selon TD. Par ailleurs, la figure 3.15 montre que plus la vitesse de déformation est élevée et plus la densité de dislocations est élevée.

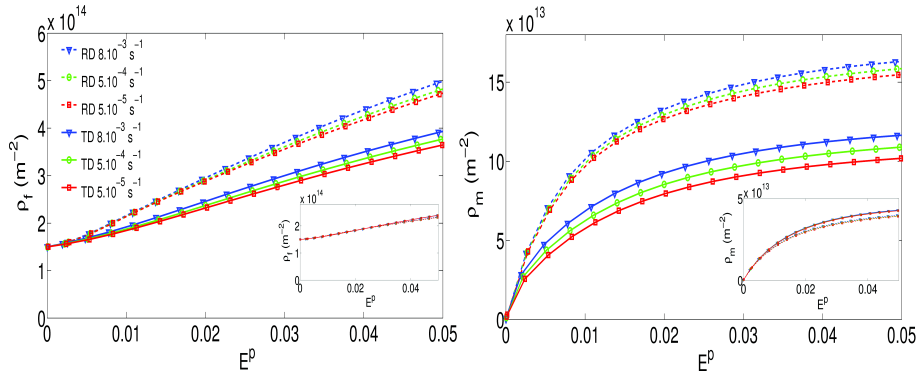


FIGURE 3.15 – Evolution des densités moyennes de dislocations immobiles et mobiles cumulées sur les 30 systèmes d'après le modèle. En encart : résultats des simulations avec les mêmes valeurs de n et C_1 sur toutes les familles de glissement.

Plastification des grains

Afin de comprendre l'écroissage initial, il est également intéressant de voir comment la plastification progressive des grains s'effectue dans les simulations. La figure 3.16 représente l'évolution de la proportion de grains avec 1 ou 2 systèmes actifs. On constate que l'entrée en plasticité s'effectue de manière plus diffuse selon TD. En outre, selon TD, le glissement secondaire commence plus tôt et le nombre de grains avec 2 systèmes actifs augmente plus rapidement. Cette observation est cohérente avec les valeurs plus élevées de la limite d'élasticité selon TD [RLL⁺14]. Dans le même temps, aucun effet évident de la vitesse de déformation sur l'entrée en plasticité ne peut être constaté à partir de la figure 3.16.

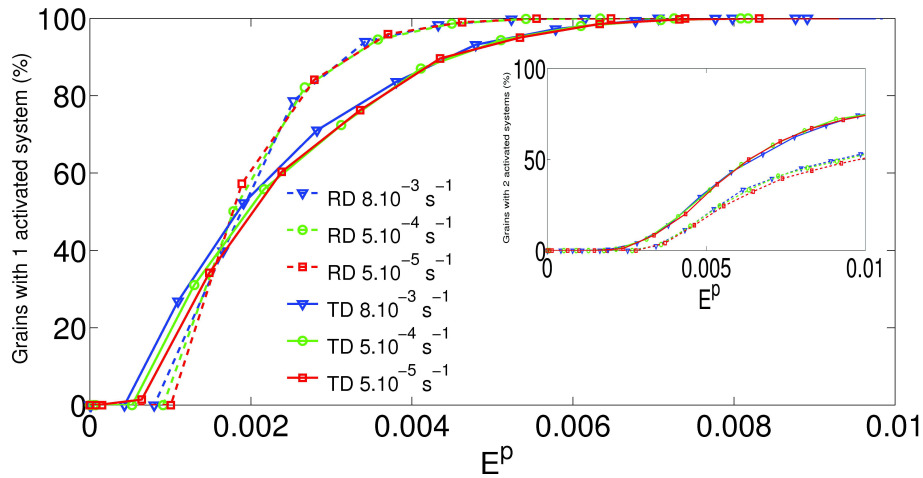


FIGURE 3.16 – Proportion des grains avec au moins un système actif ($\gamma > 0.004$). En encart : proportion des grains avec au moins deux systèmes actifs.

Discussion

La simple introduction des dislocations mobiles peut produire un comportement non monotone de Θ , étant donné que leur augmentation entraîne un adoucissement alors que l'augmentation des dislocations immobiles conduit à un durcissement. Toutefois, les encarts de la figure 3.12, obtenus avec des mêmes valeurs de n et C_1 pour toutes les familles, ne montrent aucune augmentation de Θ durant le stade B. Une autre contribution à la non monotonie de Θ provient donc des interactions complexes entre les activités des différentes familles de glissement. En effet, chaque système s'auto-écrouit et durcit les autres systèmes de manière différente, en raison des valeurs spécifiques des modules de cisailment directionnels, des coefficients d'interactions, des densités de dislocations immobiles et des sensibilités à la vitesse. Par exemple, l'activation des glissements pyramidaux $\langle a \rangle$ induit un très fort écrouissage du fait des interactions colinéaires avec les systèmes prismatiques (eq. 3.33). En effet, le long de RD, l'augmentation de Θ durant le stade B est corrélée avec l'augmentation de l'activité des systèmes pyramidaux $\langle a \rangle$ (figure 3.14), ainsi qu'avec celle du glissement secondaire (figure 3.16). La valeur du coefficient d'interaction colinéaire a donc une influence significative sur l'augmentation de Θ au stade B.

Dans le modèle, les puits qui apparaissent dans l'évolution de Θ se produisent aux environs de 0.5% et 0.8% de déformation plastique le long de RD et TD, respectivement (figure 3.12). Ces déformations correspondent précisément aux moments où tous les grains sont plastifiés par glissement simple (figure 3.16). Par conséquent, la chute de Θ au cours du stade A est vraisemblablement reliée à la plastification progressive des grains, comme

cela a également été suggéré par Barkia *et al.* [BDC⁺15]. Le long de RD, on peut déduire des figures 3.14 et 3.16 que la plupart des grains se déforment par glissement simple sur un système prismatique durant le stade A. Le long de TD, la situation est plus complexe avec plus de 65% des grains déjà en glissement multiple à la fin du stade A (figure 3.16) et une quantité comparable de glissement prismatique et pyramidal $\langle a \rangle$ (figure 3.14). En particulier, l'entrée en plasticité est beaucoup plus progressive le long de TD, ce qui explique certainement pourquoi ces échantillons s'écrouissent plus vite que le long de RD au tout début de la déformation plastique, et puis présentent finalement un taux d'écrouissage plus faible à partir la fin du stade A.

Les simulations réalisées avec les mêmes valeurs de n et C_1 pour toutes les familles de glissement retrouvent qualitativement l'effet de la vitesse de déformation sur le taux d'écrouissage au cours du stade A le long de TD (figure 3.12). Ce résultat signifie que, le long de TD, la profondeur du puits doit être avant tout influencée par la production des dislocations mobiles. Cette production est en effet d'autant plus prononcée que la vitesse de déformation augmente, et cela quelles que soient les hypothèses sur n et C_1 (figure 3.15). Par contre, le long de RD, l'hypothèse d'une sensibilité à la vitesse spécifique pour le glissement prismatique est nécessaire afin de retrouver l'effet de la vitesse de déformation. Dans ce cas, le comportement du taux d'écrouissage durant le stade A doit être avant tout influencé par la sélection des différents systèmes de glissement. Sur la figure 3.14, il est établi que la part d'activité prismatique augmente avec la vitesse de déformation. A première vue, on pourrait conjecturer que la promotion du glissement prismatique devrait conduire à un plus faible taux d'écrouissage étant donné que la production de dislocations mobiles est y supposée plus facile. Cependant, étant donné leur plus faible cission critique, l'activation d'un système prismatique à la place d'un autre système signifie également que le glissement se déroule sur un système moins bien orienté, et donc contribuant moins à l'allongement axial de l'échantillon [ARR⁺16]. Cet effet peut induire au final un taux d'écrouissage plus important.

Enfin, la surestimation du taux d'écrouissage durant le stade A le long de RD peut s'expliquer. En effet, puisque presque tous les grains se déforment par glissement simple lors de ce stade, l'accommodation plastique doit être difficile et d'importantes contraintes inter-granulaires sont attendues. Or, les modèles auto-cohérents à 1-site sont connus pour surestimer les contraintes internes par rapport aux méthodes à champs complets qui permettent de tenir compte des effets de voisinage [MB15]. Cet point est particulièrement vrai en cas de forte non-linéarité, comme ici avec $n = 32$ ou $n = 65$.

3.5 Conclusions

Dans ce chapitre, deux nouvelles lois d'accommodation qui dépendent naturellement de la taille des grains ont été déterminées. La première considère la plasticité intra-granulaire sous forme de boucles de super-dislocations et a pu être appliquée dans un modèle polycristallin simplifié. La deuxième loi a été dérivée en considérant des déformations plastiques intra-granulaires continues mais non-uniformes. Contrairement à la première approche, cette méthode ne rend pas compte du caractère discret lié à une distribution en bandes de glissement mais permet de considérer des gradients de déformation plastique comme ceux consécutifs à l'empilement des dislocations au joint de grains. Les calculs ont pu être réalisés grâce à une méthode de superposition utilisant les formules analytiques des contraintes à une interface plane développées au Chapitre 2. Ces deux approches ont montré que les effets de taille des grains obtenus étaient directement reliés à la manière dont la plasticité se distribuait à l'intérieur des grains.

Ce chapitre a également permis de voir qu'un modèle micromécanique statique avec une topologie à double inclusions était capable d'expliquer la sélection des macles secondaires de double extensions dans l'alliage de magnésium AZ31. Ce modèle est susceptible d'être appliqué à d'autres types de macles secondaires comme les macles de contraction incluses dans des macles d'extension qui se rencontrent plus fréquemment dans les alliages de Mg [Bar07, BKBM08, MCJJ10, AKS10] ou encore au maillage secondaire dans d'autres matériaux comme le Ti [BSL⁺10, XTS⁺17]. Dans le cas du Ti, il serait alors intéressant d'étendre le modèle à une formulation en élasticité anisotrope hétérogène.

La dernière partie de ce chapitre a concerné la modélisation du comportement en 3 stades du taux d'érouissage du Ti- α en traction. Cette étude s'est faite à l'aide d'un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique avec une formulation affine [MB15]. Ce modèle a permis de tester deux hypothèses fortes : une plus faible sensibilité à la vitesse ainsi qu'une multiplication plus rapide des dislocations sur les systèmes prismatiques. À partir de celles-ci, les courbes de traction ont été correctement reproduites et des estimations raisonnables des coefficients de Lankford, de l'activité du glissement prismatique et de l'évolution des textures [ARR⁺16] ont été obtenues. Plus important encore, l'effet inverse de la vitesse sur la profondeur du puits du taux d'érouissage selon l'orientation de l'axe de traction a été retrouvé de manière qualitative, permettant d'avancer une explication aux phénomènes observés. Le modèle s'est ainsi révélé capable d'expliquer qualitativement toutes les observations expérimentales, y compris les plus spécifiques. Enfin, il est à noter qu'en parallèle de cette étude, d'autres travaux ont été récemment conduits sur des échantillons de Ti de pureté commerciale avec des compositions proches de la nôtre [BDC⁺15, BDHG15, DB15, MMFS16, DB16]. Ce groupe de chercheurs a notamment été amené à effectuer une

hypothèse similaire de viscosité plus faible pour les systèmes prismatiques [DB15]. A l'aide d'un modèle à champs moyens viscoplastique, cette hypothèse leur a permis de reproduire l'effet de l'anisotropie et de la vitesse de déformation sur la viscosité globale [DB15]. Ils ont également mis en évidence l'existence de mécanismes de déformation par glissement au joint de grains et formation de bandes en genoux [BDHG15, DB16] et proposent d'attribuer le plateau visible au début des courbes de traction selon TD à un effet de vieillissement statique du fait des interactions entre dislocations $\langle c + a \rangle$ et atomes interstitiels d'oxygène [MMFS16].

Synthèse et perspectives de recherche

Mes 8 années de recherche au CNRS m'ont permis de développer différents outils de modélisation en lien avec les membres de l'équipe APLI, notamment des modèles champs complets de mécanique des champs de dislocations implémentés sous *Abaqus* et sous *freefem++* qui peuvent se réduire à des modèles de plasticité cristalline standards, des codes *Matlab* permettant le calcul immédiat des champs élastiques aux interfaces planes en fonction de différents paramètres et une méthode permettant de traiter les problèmes d'inclusion sphérique pour certaines formes d'*eigenstrain* non uniformes. Il est à noter aussi que l'extension affine du modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique à champs translétés a été implémenté sous *Fortran* pendant la thèse de Kékéli Amouzou [Amo15] à partir du code existant au LEM3 avec formulation sécante. Ces années de recherche ont aussi fourni quelques résultats concrets intéressants qui ont été confirmés *a posteriori* par des études indépendantes, comme la promotion du glissement parallèle aux joints de macles $\Sigma 3(111)$ du fait de l'anisotropie élastique [IKD15, YDZ16] ou la très probable plus faible sensibilité à la vitesse des systèmes prismatiques dans le Ti [DB15, ZJBD16].

En grande partie grâce au travail des doctorants et post-doctorants, les modèles développés ont pu être confrontés à différents types d'observations expérimentales : champs de déformations et de désorientation de l'axe *c* dans la glace, identification des variantes de macles primaire et secondaire dans des échantillons de Ti et d'alliages AZ31, identification des systèmes de glissement actifs et évolution des orientations cristallines dans des bicristaux micrométriques de Ni ainsi que micro-extensométrie et caractérisation de l'écroutissage, des systèmes de glissement actifs et de l'évolution de texture dans des échantillons de Ti en traction.

Mon projet scientifique s'effectuera majoritairement dans la continuité des études menées jusqu'à présent. Son ambition reste de mettre en évidence les relations qui existent entre les microstructures de défauts des matériaux cristallins (joints de grains, joints de phase, dislocations, macles) et leurs pro-

priétés mécaniques locales et globales. Pour cela, de nouveaux modèles seront développés et seront autant que possible confrontés à des caractérisations expérimentales fines (extensométrie haute résolution, essais mécaniques à l'échelle micrométrique, EBSD haute résolution, émission acoustique) grâce à des collaborations internes et externes. Ces nouvelles approches auront pour objectifs de fournir les outils d'analyse et de conception nécessaires à l'élaboration et à la mise en forme de nouveaux matériaux (composites, matériaux multiphasés, matériaux nano-structurés). Il sera ainsi nécessaire de trouver un équilibre entre le développement de recherches fondamentales et leurs applications à des problématiques industrielles (alliages légers, aciers hautes performances, matériaux composites). Mon projet scientifique peut se décomposer en trois thèmes principaux qui sont décrits ci-dessous.

Effets de l'anisotropie élastique sur la plasticité aux interfaces

A la suite de la thèse d'Idriss Tiba [Tib15], une nouvelle thèse en cotutelle avec l'Université de la Sarre a démarré en octobre 2016 (thèse de Xiaolei Chen sous la direction de Stéphane Berbenni, Christian Motz et moi-même). L'objectif est d'étudier les effets des propriétés anisotropes sur les mécanismes de déformation plastique aux joints de grains mais en considérant dorénavant des distributions discrètes de dislocations et non plus des champs continus de distorsions plastiques. Il est prévu d'effectuer des premiers calculs de champs de contraintes d'arrangements de dislocations dans un milieu élastique cubique en utilisant le formalisme de Stroh [ERS53, Str58, BB79] puis d'étendre ces calculs à un milieu élastique cubique hétérogène [DB80]. Ces calculs serviront ensuite à estimer précisément l'état des contraintes locales lors d'essais mécaniques (flexion, compression) à l'échelle micrométrique sur des bicristaux pour pouvoir ensuite déterminer la résistance intrinsèque de différents joints de grains à la transmission du glissement. Les matériaux d'étude seront de structure CFC avec des coefficients d'anisotropie élastique différents afin d'évaluer l'effet de l'anisotropie élastique sur la transmission du glissement par comparaison d'expériences. Ils devront également avoir une faible énergie de faute d'empilement afin d'obtenir du glissement planaire favorable à l'observation des lignes de glissement (qui aideront à implémenter les arrangements de dislocations dans le modèle) et à la formation d'empilements de dislocations au joint de grains. Un projet commun ANR/DFG sera déposé sur cette thématique en 2017 en collaboration avec l'équipe du professeur Christian Motz.

D'autres perspectives concernant les effets de l'anisotropie élastique sont également envisageables, notamment pour des applications en fatigue pour lesquelles les formules analytiques statiques développées au Chapitre 2 sont

bien adaptées. Ainsi, dans le cadre d'une action du Labex DAMAS sur le comportement mécanique des alliages de Ti, il est envisagé de regarder l'effet des contraintes d'incompatibilité dans les structures lamellaires α/β qui peuvent apparaître dans ces alliages à partir de ces formules. L'intérêt est d'apporter éventuellement des informations sur les mécanismes d'initiation de fissures en fatigue dans ces régions mais aussi d'effectuer des calculs pour la première fois dans le cas de deux phases de symétrie différente (HC et CC) et en relation d'orientation de Burgers.

Par ailleurs, nous avons jusqu'à présent uniquement étudié les conséquences des contraintes d'incompatibilité dans les structures lamellaires de joints de macles $\Sigma 3(111)$ sur l'activation des systèmes de glissement de dislocations parfaites. Or, les mécanismes de transmission aux joints de macles $\Sigma 3(111)$ sont nombreux et impliquent le plus souvent des dislocations partielles [R76, ZWL⁺11, ZLW12]. Il serait ainsi intéressant de compléter l'étude déjà réalisée en regardant l'effet des contraintes d'incompatibilité sur l'activité des dislocations partielles. Une analyse complète des mécanismes de transmission aux joints de macles $\Sigma 3(111)$ par modification des contraintes locales pourrait ainsi être réalisée et appliquée aux aciers TWIP.

Enfin, à plus long terme, il peut être envisageable d'effectuer des calculs analytiques des contraintes d'incompatibilité aux points triples en élasticité anisotrope hétérogène comme cela a déjà été effectué en élasticité isotrope homogène [CZ96]. Comme pour les interfaces planes, le but serait d'obtenir grâce à ces calculs une estimation immédiate des niveaux de contrainte à un noeud triple ou multiple en fonction de l'anisotropie élastique du matériau, de la fraction volumique et de l'orientation cristalline des grains, de l'orientation de la jonction et du chargement macroscopique.

Transport des GND par système en grandes déformations et couplages thermomécaniques

Pour un couplage vraiment efficace avec la plasticité cristalline, il sera nécessaire à l'avenir de résoudre le transport des GND par système dans une formulation grandes déformations [Ach01, Ach04]. En effet, la résolution actuelle des équations de transport par système est simplifiée (eqs. 1.59 et 1.60) et néglige certaines des contributions liées à la rotation des plans cristallins qui peuvent avoir une influence, en particulier aux joints de grains [RLC⁺17]. Cela reste un challenge car une résolution rigoureuse complexifie énormément les équations. Pour véritablement apprécier les effets nouveaux qui pourraient émerger de ce cadre grandes déformations, il faudra également chercher en parallèle à réduire, voir à supprimer, la diffusion actuellement présente dans la résolution par méthode Galerkin/Moindres carrés [VBF06]. Cette diffusion engendre assurément des effets non physiques, en particulier vis-à-vis des densités de GND aux vitesses quasi-nulles qui sont sensées être

stables tant que leur vitesse n'augmente pas mais qui diffusent dans les simulations. Une solution peut être de changer de schéma de résolution et de s'aider de techniques de stabilisation comme dans [HMPG15].

La résolution du transport par système aux joints de grains pourra aussi être améliorée par une meilleure sélection des systèmes à mettre en correspondance. Cela pourra se faire en fonction des critères géométriques de transmission établis expérimentalement [SWC88, LRB90, LR85], ainsi que du type de joint de grains, de l'état des contraintes locales et de la quantité de dislocations interfaciales stockée dans le joint. Selon les cas, cela conduira ainsi à considérer soit le joint de grains comme impénétrable au système incident, soit à autoriser une transmission partielle ou totale sur un ou plusieurs systèmes sortants. Idéalement, l'optimisation de ces critères se fera par confrontation expériences/simulations sur des bicristaux ou des agrégats de quelques grains.

Par ailleurs, un autre intérêt d'avoir un modèle de transport par système réside dans la possibilité d'affecter des vitesses spécifiques aux parties vis et coin des densités de GND sur chaque système. Dans de nombreux matériaux en effet, tels ceux de structure cubique centrée (CC) [Kub82] ou les alliages de Ti par exemple [PRX⁺11], la mobilité des dislocations coin est beaucoup plus élevée que celle des dislocations vis. Pour de tels matériaux, il serait ainsi intéressant d'appliquer cette anisotropie de vitesse dans un modèle de mécanique des champs de dislocations afin d'étudier ses effets sur la structure des dislocations et les propriétés mécaniques. A plus long terme, il est ensuite envisageable de coupler ce type de modèle avec l'introduction de mécanismes spécifiques aux caractères vis et coin, tels que le glissement dévié et la montée des dislocations, respectivement.

Actuellement, notre modèle de mécanique des champs de dislocations ne permet pas d'étudier les effets d'une variation de température sur la réorganisation des dislocations alors que son utilisation dans ce sens serait pertinente puisqu'il considère des densités de dislocations polarisées vis et coin et rend bien compte de leur possible annihilation. Pour cela, il est envisageable de considérer les mouvements hors plan de glissement dans la résolution du transport et de leur affecter une loi de mobilité qui serait fonction de la diffusion thermique d'une distribution continue de lacunes [MaMFV08]. Il faudra également introduire les déformations thermiques et l'effet de la température sur un certain nombre de propriétés matérielles (mobilités des dislocations, constantes élastiques, cissions critiques, etc.), ce qui constituera une tâche plus aisée. Avec ces éléments, un changement de température consécutif à un chargement mécanique modifiera l'état de contraintes internes ainsi que la mobilité des dislocations, ce qui induira une réorganisation de la distribution des dislocations et du champ de contraintes. Dans ce cadre, le modèle pourra être appliqué à l'étude de la restauration. A plus long terme, un couplage thermomécanique encore plus complet est

concevable. Afin d'étudier tout type de sollicitation thermomécanique, celui-ci incluerait l'élévation de température due à la plasticité, la résolution de l'équation de la chaleur et les possibles anisotropies des coefficients de dilatation et de conductivité thermiques.

Il est à noter que le savoir développé en terme de mécanique des champs de dislocations sera probablement mutualisé au sein d'un groupement de recherche puisque le LEM3 a participé à la demande de mise en place d'un GDR "Recristallisation" (regroupant 12 laboratoires académiques et 10 partenaires industriels) pour 2017. Dans le cadre de ce futur GDR, il est prévu que le LEM3 s'implique au sein du groupe de travail "mécanismes fondamentaux" et collabore avec le LGGE et Géosciences Montpellier. L'objectif est la compréhension des processus de germination et de migration de joints de grains et des paramètres (gradients d'énergie élastique, densités de dislocations, etc.) qui les contrôlent, notamment par confrontation de différents matériaux très anisotropes (minéraux, glace, métaux hexagonaux).

Enfin, il faut souligner l'opportunité offerte à l'avenir de confronter les données issues de simulation de mécanique des champs de dislocations aux méthodes de caractérisation innovantes actuellement développées au LEM3, à savoir l'EBSD haute résolution et l'EBSD 3D notamment. Le LEM3 cherche en effet à développer sa propre technique de caractérisation d'EBSD haute résolution qui permettra d'accéder aux déformations élastiques (et donc aux contraintes locales), ainsi que d'améliorer la résolution angulaire sur les rotations de réseau de près de 2 ordres de grandeur [Wil96, MDF12, BW12]. Cette technique permettra ainsi d'accéder à une bien meilleure description de la distribution des densités de dislocations par calcul des composantes du tenseur de Nye [Nye53] qui dépendent à la fois des gradients de rotation de réseau et des gradients de déformation élastique. L'EBSD 3D offre elle la possibilité d'avoir accès à l'ensemble des composantes grâce à la mesure des gradients dans l'épaisseur. Or, un enjeu majeur actuel est de pouvoir valider le caractère prédictif des simulations à champs complets, non seulement en terme de distribution de champs de déformations, mais également en termes de champs de contraintes et de densités de dislocations. En effet, par la loi de Hooke les contraintes sont reliées aux seules déformations élastiques qui deviennent rapidement négligeables devant les déformations plastiques. Il est donc possible d'obtenir des prédictions relativement correctes du point de vue de la distribution des déformations totales et incorrectes vis-à-vis de celle des contraintes. Une prédiction plus robuste des champs de contraintes et de dislocations permettra d'identifier plus précisément les zones de la microstructure qui risquent de fissurer, de recristalliser ou encore de procéder à un changement de phase via le calcul des forces motrices associées.

Développement de méthodes d'homogénéisation en élasto-viscoplasticité polycristalline

Par rapport aux approches à champs complets, les méthodes d'homogénéisation conservent un intérêt dans la mesure où elles sont capables de traiter un très grand nombre de grains (jusqu'à plusieurs dizaines de milliers) relativement rapidement. La mise en données est également beaucoup plus facile puisqu'elles ignorent l'arrangement spatial des grains. Pour ces raisons, ces méthodes présentent un fort potentiel pour être appliquées par les industriels. Les prédictions des approches auto-cohérentes sont aussi bien plus précises que celles des modèles de type Taylor qui restent majoritairement utilisés dans l'industrie. Dans cette optique, il convient d'améliorer encore les capacités du modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique développé par l'équipe APLI. Plusieurs voies de développement sont envisagées : l'extension du modèle au formalisme des grandes transformations généralement nécessaire pour aborder les problématiques industrielles comme la mise en forme, la prise en compte du maclage comme mécanisme de déformation pour traiter des matériaux comme les alliages de Ti ou de Mg et, à plus long terme, l'intégration de lois d'accommodation à longueurs internes qui dépendent naturellement de la taille de grains comme celles développées au Chapitre 3.

En ce qui concerne l'extension aux grandes transformations, on souhaite conserver l'originalité de la méthode à champs translatsés [PSB99, PBF⁺01, MB15] car, en tant qu'approche à variables internes, l'implémentation numérique est plus simple que pour les autres approches auto-cohérentes. On souhaite également conserver le cadre élasto-viscoplastique et rendre compte de l'évolution de la morphologie des grains, ce qui constitue le véritable challenge de ce projet. En effet, seuls quelques modèles auto-cohérents ont pour l'instant été développés dans un cadre élasto-viscoplastique et déformations finies mais avec d'autres approximations que celles de la méthode à champs translatsés [NNO86, Har91, WWTH10]. Le développement d'un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique en grandes déformations permettra alors d'étudier les effets de texture cristallographique, de morphologies de grains ou des processus d'accommodation entre différentes phases à n'importe quel taux de déformation et pourra éventuellement être complété par l'implémentation de critères de localisation de la déformation.

En ce qui concerne la prise en compte du maclage intra-granulaire dans le modèle auto-cohérent, on souhaite reprendre dans un cadre élasto-viscoplastique avec la méthode à champs translatsés le problème de double inclusions appliqué au cas du maclage primaire dans un polycristal [JBB⁺14]. La topologie est similaire à celle de la figure 3.8 mais sans considération du maclage secondaire : le premier ellipsoïde représentant le grain parent, le deuxième la macle primaire, et le tout étant noyé dans un milieu homogène équivalent

représentant le polycristal. Contrairement aux autres modèles avec maillage [Hou78, TLK91, Kal98, PTK07, CTBA08], cette topologie permet un couplage mécanique direct entre la macle et le grain parent : les contraintes internes dues au maillage sont calculées en moyenne dans le grain parent et la macle suivant la démarche de Tanaka et Mori [TM72]. Il est à noter que ce type de modèle permettra également d'aborder les problèmes de transformation de phase sous divers chargements mécaniques en rendant compte des interactions effectives entre une variante de phase transformée et son cristal parent.

Bibliographie

- [AB75] R. J. Asaro and D. M. Barnett. The non-uniform transformation strain problem for an anisotropic ellipsoidal inclusion. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 23 :77–83, 1975.
- [AB00] A. Acharya and J.L. Bassani. Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :1565–1595, 2000.
- [Ach01] A. Acharya. A model of crystal plasticity based on the theory of continuously distributed dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :761–784, 2001.
- [Ach03] A. Acharya. Driving forces and boundary conditions in continuum dislocation mechanics. *Proceedings of the Royal Society London A*, 459 :1343–1363, 2003.
- [Ach04] A. Acharya. Constitutive analysis of finite deformation field dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :301–316, 2004.
- [Ach07] A. Acharya. Jump condition for GND evolution as a constraint on slip transmission at grain boundaries. *Philosophical Magazine*, 87 :1349–1359, 2007.
- [Aif84] E. C. Aifantis. On the microstructural origin of certain inelastic models. *Transactions of the ASME. Journal of Engineering Materials and Technology*, 106 :326–330, 1984.
- [Aif87] E.C. Aifantis. The physics of plastic deformation. *International journal of plasticity*, 3 :211–247, 1987.
- [AKS10] D. Ando, J. Koike, and Y. Sutou. Relationship between deformation twinning and surface step formation in AZ31 magnesium alloys. *Acta Materialia*, 58 :4316–4324, 2010.
- [All04] S. Allain. *Caractérisation et modélisation thermomécaniques multi-échelles des mécanismes de déformation et d'écrouissage d'aciers austénitiques à haute teneur en manganèse : application à l'effet TWIP*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2004.
- [All12] S. Allain. Comportement mécanique des aciers : des mécanismes fondamentaux à la déformation macroscopique. *Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Lorraine*, 2012.
- [Amo15] K.E.K. Amouzou. *Caractérisation et modélisation multi-échelles de l'anisotropie et de l'hétérogénéité de la déformation plastique du α -titane en conditions de traction*. PhD thesis, Université de Lorraine, 2015.
- [APBB04] A. Arsenlis, D.M. Parks, R. Becker, and V.V. Bulatov. On the evolution of crystallographic dislocation density in non-homogeneously deforming crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :1213–1246, 2004.

- [AR06] A. Acharya and A. Roy. Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales : Predictions of a Phenomenological model of Mesoscopic Field dislocation Mechanics : Part i. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :1687–1710, 2006.
- [ARR⁺16] K.E.K. Amouzou, T. Richeton, A. Roth, M.A. Lebyodkin, and T.A. Lebedkina. Micromechanical modeling of hardening mechanisms in commercially pure α -titanium in tensile condition. *International Journal of Plasticity*, 80 :222–240, 2016.
- [Asa83] R.J. Asaro. Crystal plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, 50 :921–934, 1983.
- [Ash70] M.F. Ashby. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philosophical Magazine*, 21 :399–424, 1970.
- [AW88] S. Ahmad and R.W. Whitworth. Dislocation motion in ice : a study by synchrotron x-ray topography. *Philosophical Magazine A*, 57 :749–766, 1988.
- [BA82] D.J. Bammann and E.C. Aifantis. On a proposal for a continuum with microstructure. *Acta Mechanica*, 45 :91–121, 1982.
- [Bar07] M.R. Barnett. Twinning and the ductility of magnesium alloys Part II. contraction twins. *Materials science and Engineering A*, 464 :8–16, 2007.
- [BAS08] O. Bouaziz, S. Allain, and C. Scott. Effect of grain and twin boundaries on the hardening mechanisms of twinning-induced plasticity steels. *Scripta Materialia*, 58 :484–487, 2008.
- [BB79] D.J. Bacon and D.M. Barnett. Anisotropic continuum theory of lattice defects. *Progress in Materials Science*, 23 :51–262, 1979.
- [BBB⁺13] N. Benmhenni, S. Bouvier, R. Brenner, T. Chauveau, and B. Bacroix. Micromechanical modelling of monotonic loading of cp α -ti : Correlation between macroscopic and microscopic behaviour. *Materials Science and Engineering A*, 573 :222–233, 2013.
- [BBG06] C.J. Bayley, W.A.M. Brekelmans, and M.G.D. Geers. A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 43 :7268–7286, 2006.
- [BBR08] S. Berbenni, M. Berveiller, and T. Richeton. Intra-granular plastic slip heterogeneities : Discrete vs. Mean Field approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 45 :4147–4172, 2008.
- [BBS55] B.A. Bilby, R. Bullough, and E. Smith. Continuous distributions of dislocations : a new application of the methods of non-Riemannian geometry. *Proceedings of the Royal Society London A*, 231 :263–273, 1955.
- [BDC⁺15] B. Barkia, V. Doquet, J. P. Couzinié, I. Guillot, and E. Héripéré. *In situ* monitoring of the deformation mechanisms in titanium with different oxygen contents. *Materials Science and Engineering A*, 636 :91–102, 2015.
- [BDHG15] B. Barkia, V. Doquet, E. Héripéré, and I. Guillot. Characterization and analysis of deformation heterogeneities in commercial purity titanium. *Materials Characterization*, 108 :94–101, 2015.
- [BDJC01] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, and G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 1 : F.E. model. *International Journal of Plasticity*, 17 :513–536, 2001.
- [Ber80] M. Berveiller. Thèse d'état : Contribution à l'étude du comportement plastique et des textures de déformation des polycristaux métalliques. *Sciences et techniques de l'armement*, 54, 1980.

- [BEZ⁺14] T.R. Bieler, P. Eisenlohr, C. Zhang, H.J. Phukan, and M.A. Crimp. Grain boundaries and interfaces in slip transfer. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 18 :212–226, 2014.
- [BFB07] S. Berbenni, V. Favier, and M. Berveiller. Impact of the grain size distribution on the behaviour of heterogeneous materials. *International Journal of Plasticity*, 23 :114–142, 2007.
- [BFC01] F. Barbe, S. Forest, and G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 2 : Results. *International Journal of Plasticity*, 17 :513–536, 2001.
- [BFFH87] M. Berveiller, O. Fassi-Fehri, and A. Hihi. The problem of 2 plastic and heterogeneous inclusions in an anisotropic medium. *International Journal of Engineering Science*, 25 :691–709, 1987.
- [BFG⁺09] B. Beausir, C. Fressengeas, N.P. Gurao, L.S. Toth, and S. Suwas. Spatial correlation in grain misorientation distribution. *Acta Materialia*, 57 :5382–5395, 2009.
- [BH62] J.E. Bailey and P.B. Hirsch. The recrystallization process in some polycrystalline metals. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 267 :11–30, 1962.
- [BKBM08] M.R. Barnett, Z. Keshavarz, A.G. Beer, and X. Ma. Non-Schmid behaviour during secondary twinning in a polycrystalline magnesium alloy. *Acta Materialia*, 56 :5–15, 2008.
- [BP13] H. Becker and W. Pantleon. Work-hardening stages and deformation mechanism maps during tensile deformation of commercially pure titanium. *Computational Materials Science*, 76 :52–59, 2013.
- [BPC13] S. Berbenni, B. Paliwal, and M. Cherkaoui. A micromechanics-based model for shear-coupled grain boundary migration in bicrystals. *International Journal of Plasticity*, 44 :68–94, 2013.
- [Bra07] L. Bracke. *Deformation behaviour of austenitic FeMn alloys by twinning and martensitic transformations*. PhD thesis, Université de Gent, 2007.
- [BSL⁺10] L. Bao, C. Schuman, J.-S. Lecomte, M.-J. Philippe, X. Zhao, L. Zuo, and C. Esling. Study of deformation mechanisms in titanium by interrupted rolling and channel die compression tests. *Computers, Materials, Continua*, 15 :113–127, 2010.
- [BT03] C. Blochwitz and W. Tirschler. Influence of texture on twin boundary cracks in fatigued austenitic stainless steel. *Crystal Research and Technology*, 339 :318–327, 2003.
- [BT05] C. Blochwitz and W. Tirschler. Twin boundaries as crack nucleation sites. *Materials Science Engineering A*, 40 :32–41, 2005.
- [BTB⁺14] N. Bertin, C. N. Tomé, I.J. Beyerlein, M. R. Barnett, and L. Capolungo. On the strength of dislocation interactions and their effect on latent hardening in pure magnesium. *International Journal of Plasticity*, 62 :72–92, 2014.
- [BW12] T.B. Britton and A.J. Wilkinson. High resolution electron backscatter diffraction measurements of elastic strain variations in the presence of larger lattice rotations. *Ultramicroscopy*, 114 :82–95, 2012.
- [CC80] J.W. Christian and A.G. Crocker. Dislocations and lattice transformations. In *Dislocations in Solids (vol 3)*. F.R.N. Nabarro, Amsterdam, North-Holland, 1980.
- [CDMB08] O. Castelnau, P. Duval, M. Montagnat, and R. Brenner. Elastoviscoplastic micro-mechanical modeling of the transient creep of ice. *Journal of Geophysical Research*, 113 :B11203 1–14, 2008.

- [CFB⁺12] N. M. Cordero, S. Forest, E. P. Busso, S. Berbenni, and M. Cherkaoui. Grain size effects on plastic strain and dislocation density tensor fields in metal polycrystals. *Computational Materials Science*, 52 :7–13, 2012.
- [CG01] P. Cermelli and M.E. Gurtin. On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :1539–1568, 2001.
- [CGF⁺10] N. M. Cordero, A. Gaubert, S. Forest, E. P. Busso, F. Gallerneau, and S. Kruch. Size effects in generalised continuum crystal plasticity for two-phase laminates. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58 :1963–1994, 2010.
- [CGF⁺12] H.-J. Chang, A. Gaubert, M. Fivel, S. Berbenni, O. Bouaziz, and S. Forest. Analysis of particle induced dislocation structures using three-dimensional dislocation dynamics and strain gradient plasticity. *Computational Materials Science*, 52 :33–39, 2012.
- [Che08] J. Chevy. *Viscoplasticité et Hétérogénéités de déformation du monocristal de glace : expériences et simulations*. PhD thesis, Institut Polytechnique de Grenoble, 2008.
- [Chu54] A. T. Churchman. The slip modes of titanium and the effect of purity on their occurrence during tensile deformation of single crystals. *Proceedings of the Royal Society London A*, 226 :216–226, 1954.
- [CM95] J.W. Christian and S. Mahajan. Deformation twinning. *Progress in Materials Science*, 39 :1–157, 1995.
- [CMV15] T. Chauve, M. Montagnat, and P. Vacher. Strain field evolution during dynamic recrystallization nucleation; A case study on ice. *Acta Materialia*, 101 :116–124, 2015.
- [Con81] H. Conrad. Effect of interstitial solutes on the strength and ductility of titanium. *Progress in Materials Science*, 26 :123–403, 1981.
- [CTBA08] B. Clausen, C. N. Tomé, D. W. Brown, and S. R. Agnew. Reorientation and stress relaxation due to twinning : Modeling and experimental characterization for Mg. *Acta Materialia*, 56 :2456–2468, 2008.
- [CWZS⁺92] W.A.T. Clark, R.H. Wagoner, T.C. Lee Z.Y. Shen, I.M. Robertson, and H.K. Birnbaum. On the criteria for slip transmission across interfaces in polycrystals. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 26 :203–206, 1992.
- [CZ96] S. Caré and A. Zaoui. Cavitation at triple nodes in α -zirconium polycrystals. *Acta Materialia*, 44 :1323–1336, 1996.
- [DAA83] P. Duval, M.F. Ashby, and I. Anderman. Rate-controlling processes in the creep of polycrystalline ice. *The Journal of Physical Chemistry*, 87 :4066–4074, 1983.
- [DB80] M. Dupeux and R. Bonnet. Stresses, displacements and energy calculations for interfacial dislocations in anisotropic two-phase media. *Acta Metallurgica*, 28 :721–728, 1980.
- [DB15] V. Doquet and B. Barkia. A micromechanical model of the viscoplastic behaviour of titanium accounting for its anisotropic and strain-rate dependent viscosity. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 19 :153–166, 2015.
- [DB16] V. Doquet and B. Barkia. Combined AFM, SEM and crystal plasticity analysis of grain boundary sliding in titanium at room temperature. *Mechanics of Materials*, 103 :18–27, 2016.
- [DDR⁺12] S. Dancette, L. Delannay, K. Renard, M.A. Melchior, and P.J. Jacques. Crystal plasticity modeling of texture development and hardening in TWIP steels. *Acta Materialia*, 60 :2135–2145, 2012.

- [Dev13] B. Devincré. Dislocation dynamics simulations of slip systems interactions and forest strengthening in ice single crystal. *Philosophical Magazine*, 93 :235–246, 2013.
- [DhK05] B. Devincré, T. Hoc, and L. P. Kubin. Collinear interactions of dislocations and slip systems. *Materials Science and Engineering A*, 400-401 :182–185, 2005.
- [DKH06] B. Devincré, L. Kubin, and T. Hoc. Physical analyses of crystal plasticity by dd simulations. *Scripta Materialia*, 54 :741–746, 2006.
- [EK86] Y. Estrin and L. P. Kubin. Local strain hardening and nonuniformity of plastic deformation. *Acta Metallurgica*, 34 :2455–2466, 1986.
- [ERS53] J.D. Eshelby, W.T. Read, and W. Shockley. Anisotropic elasticity with applications to dislocation theory. *Acta Metallurgica*, 1 :251–259, 1953.
- [Esh57] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceedings of the Royal Society London A*, 241 :376–396, 1957.
- [FB07] P. Franciosi and S. Berbenni. Heterogeneous crystal and poly-crystal plasticity modeling from a transformation field analysis within a regularized Schmid law. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55 :2265, 2007.
- [FBC00] S. Forest, F. Barbe, and G. Cailletaud. Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multiphase materials. *International Journal of Solids and Structures*, 37 :7105–7126, 2000.
- [FBZ80] P. Franciosi, M. Berveiller, and A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28 :273–283, 1980.
- [Fin74] J.M. Finney. PhD thesis, University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania, 1974.
- [For09] S. Forest. Micromorphic approach for gradient elasticity, viscoplasticity, and damage. *Journal of Engineering Mechanics*, 135 :117–131, 2009.
- [Fre10] C. Fressengeas. *Mécanique des Champs de Dislocations*. Hermes Science, Lavoisier, 2010.
- [FS52] F.C. Frank and A.N. Stroh. On the theory of kinking. *Proceedings of the Physical Society B*, 65 :811–821, 1952.
- [GB11] A. Ghaderi and M. R. Barnett. Sensitivity of deformation twinning to grain size in titanium and magnesium. *Acta Materialia*, 59 :7824–7839, 2011.
- [GKCD83] P.H. Gammon, H. Kiefte, M.J. Clouter, and W.W. Denner. Elastic constants of artificial and natural ice samples by brillouin spectroscopy. *Journal of Glaciology*, 29 :433–460, 1983.
- [GKS11] N. P. Gurao, R. Kapoor, and S. Suwas. Deformation behaviour of commercially pure titanium at extreme strain rates. *Acta Materialia*, 59 :3431–3446, 2011.
- [GMC⁺12] F. Grennerat, M. Montagnat, O. Castelnau, P. Vacher, H. Moulinec, P. Suquet, and P. Duval. Experimental characterization of the intragranular strain field in columnar ice during transient creep. *Acta Materialia*, 60 :3655–3666, 2012.
- [GMK⁺11] T. Gebhardt, D. Music, D. Kossmann, M. Ekholm, I.A. Abrikosov, L. Vitos, and J.M. Schneider. Elastic properties of fcc Fe–Mn–X (X = Al, Si) alloys studied by theory and experiment. *Acta Materialia*, 59 :3145–3155, 2011.
- [GOL⁺13] D. Gloagen, G. Oum, V. Legrand, J. Fajoui, and S. Branchu. Micromechanical modelling of monotonic loading of cp α -ti : Correlation between macroscopic and microscopic behaviour. *Acta Materialia*, 61 :5779–5790, 2013.

- [GP85] J. Gemperlova and V. Paidar. Stresses in deformed cubic bicrystals with a tilt $\langle 001 \rangle$ grain boundary. *Journal of Physics B*, 35 :351–354, 1985.
- [GPK89] J. Gemperlova, V. Paidar, and F. Kroupa. Compatibility stresses in deformed bicrystals. *Journal of Physics B*, 39 :427–446, 1989.
- [GTH14] C.F. Gu, L.S. Toth, and M. Hoffman. Twinning effects in a polycrystalline magnesium alloy under cyclic deformation,. *Acta Materialia*, 62 :212–224, 2014.
- [Gud04] P. Gudmundson. A unified treatment of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 :1379–1406, 2004.
- [GUR11] I. Gutierrez-Urrutia and D. Raabe. Dislocation and twin substructure evolution during strain hardening of an Fe–22 wt.% Mn–0.6 wt.% C TWIP steel observed by electron channeling contrast imaging. *Acta Materialia*, 59 :6449–6462, 2011.
- [GW09] J. Gong and A. J. Wilkinson. Anisotropy in the plastic flow properties of single-crystal α -titanium determined from micro-cantilever beams. *Acta Materialia*, 57 :5693–5705, 2009.
- [Hal51] E. O. Hall. The deformation and aging of mild steel. Part III : discussion and results. *Proceedings of the Physical Society of London*, 64 :747–753, 1951.
- [Har91] S.V. Harren. The finite deformation of rate-dependent polycrystals. II. A comparison of the self-consistent and taylor methods. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 39 :361–383, 1991.
- [HDK04] T. Hoc, B. Devincere, and L. Kubin. Deformation stage i of fcc crystals : Constitutive modelling. In *Evolution of Deformation Microstructures in 3D*, pages 43–59. C.E.A. Gundlach (Eds.), Risoe National Laboratory, Roskilde, Denmark, 2004.
- [Hec12] F. Hecht. New development in freefem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20 :251–266, 2012.
- [HFB60] W.F. Hosford, R.L. Fleischer, and W.A. Backofen. Tensile deformation of aluminium single crystals at low temperatures. *Acta Metallurgica*, 8 :187–199, 1960.
- [HH67] R.E. Hook and J.P. Hirth. The deformation behavior of isoaxial bicrystals of Fe–3%Si. *Acta Metallurgica*, 15 :535–551, 1967.
- [Hir72] J.P. Hirth. The influence of grain boundaries on mechanical properties. *Metallurgical Transactions*, 3 :3047–3063, 1972.
- [HL82] J.P. Hirth and J. Lothe. *Theory of dislocations*. Wiley, New York, 1982.
- [HMPG15] H. Hernández, T.J. Massart, R.H.J. Peerlings, and M.G.D. Geers. Towards an unconditionally stable numerical scheme for continuum dislocation transport. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23 :085013 (1–23), 2015.
- [HN90] A. Heinz and P. Neumann. Crack initiation during high cycle fatigue of an austenitic steel. *Acta Metallurgica et Materialia*, 38 :1933–1940, 1990.
- [Hou78] P. Van Houtte. Simulation of the rolling and shear texture of brass by the taylor theory adapted for mechanical twinning. *Acta Metallurgica*, 26 :591–604, 1978.
- [HPL10] S.G. Hong, S.H. Park, and C.S. Lee. Role of 10–12 twinning characteristics in the deformation behavior of a polycrystalline magnesium alloy. *Acta Materialia*, 58 :5873–5885, 2010.
- [HR72] R. Hill and J.R. Rice. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 20 :401–413, 1972.

- [HS14] T. Hirouchi and Y. Shibutani. Mechanical responses of copper bicrystalline micro pillars with σ_3 coherent twin boundaries by uniaxial compression tests. *Materials Transactions*, 55 :52–57, 2014.
- [HSZG14] T. Hochrainer, S. Stanfeld, M. Zaiser, and P. Gumbsch. Continuum dislocation dynamics : Towards a physical theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 63 :167–178, 2014.
- [Hua91] Y. Huang. A user material subroutine incorporating single crystal plasticity in the abaqus finite element program. *Harvard University Cambridge, Massachusetts*, pages 1–21, 1991.
- [IKD15] P.J. Imrich, C. Kirchlechner, and G. Dehm. Influence of inclined twin boundaries on the deformation behavior of Cu micropillars. *Materials Science and Engineering A*, 642 :65–70, 2015.
- [IKMD14] P.J. Imrich, C. Kirchlechner, C. Motz, and G. Dehm. Differences in deformation behavior of bicrystalline Cu micropillars containing a twin boundary or a large-angle grain boundary. *Acta Materialia*, 73 :240–250, 2014.
- [Ind66] V.L. Indenbom. Internal stresses in crystals. In *Theory of Crystal Defects*, pages 257–274. Academy of Sciences, Prague, 1966.
- [JBB⁺14] P. A. Juan, S. Berbenni, M. R. Barnett, C. N. Barnett, and L. Capolungo. A double inclusion homogenization scheme for polycrystals with hierarchal topologies : application to twinning in Mg alloys. *International Journal of Plasticity*, 60 :182–196, 2014.
- [Kal98] S.R. Kalidindi. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46 :267–290, 1998.
- [KD97] L.P. Kubin, , and B. Devincre. Mesoscopic simulations of dislocations and plasticity. *Materials Science and Engineering A*, 234-236 :8–14, 1997.
- [KDH08] L. Kubin, B. Devincre, and T. Hoc. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Materialia*, 56 :6040–6049, 2008.
- [KE90] L. Kubin and Y. Estrin. Evolution of dislocation densities and the critical conditions for the Portevin-Le Châtelier effect. *Acta Materialia*, 38 :697–708, 1990.
- [KFA10] J. Koike, N. Fujiyama, D. Ando, and Y. Sutou. Roles of deformation twinning and dislocation slip in the fatigue failure mechanism of AZ31 Mg alloys. *Scripta Materialia*, 63 :747–750, 2010.
- [Khe12] N. Kheradmand. *Grain boundary-dislocation interaction : A local investigation via micron-sized bicrystals*. PhD thesis, Universität des Saarlandes, 2012.
- [KL97] R. Kral and P. Lukac. Modelling of strain hardening and its relation to the onset of Portevin-Le Châtelier effect in Al–Mg alloys. *Materials Science Engineering A*, 234-236 :786–789, 1997.
- [KLC⁺13] M. Knezevic, R. A. Lebensohn, O. Cazacu, B. Revil-Baudard, G. Proust, S. C. Vogel, and M. E. Nixon. Modeling bending of α -titanium with embedded polycrystal plasticity in implicit finite elements. *Materials Science and Engineering A*, 564 :116–126, 2013.
- [KM03] U. F. Kocks and H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening : the FCC case. *Progress in Materials Science*, 48 :171–273, 2003.
- [Kos79] A M. Kosevich. Crystal dislocations and the theory of elasticity (Chap. 1). In *Dislocations in Solids (vol 1)*, pages 33–141. F.R.N. Nabarro, Amsterdam, North-Holland, 1979.

- [Krö58] E. Kröner. *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Springer Verlag, Berlin, 1958.
- [Krö61] E. Kröner. Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta Metallurgica*, 9 :155–161, 1961.
- [Krö81] E. Kröner. Continuum theory of defects. In *Physics of defects*, pages 215–315. R. Balian et al. (Eds.), Les Houches, Session 35, North Holland, New York, 1981.
- [KTW98] U.F. Kocks, C.N. Tomé, and H.R. Wenk. *Texture and Anisotropy*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [Kub82] L.P. Kubin. The low temperature mechanical properties of bcc metals and their alloys II. *Reviews on the Deformation Behavior of Materials*, 4 :181–275, 1982.
- [LAI⁺13] L.L. Li, X.H. An, P.J. Imrich, P. Zhang, Z.J. Zhang, G. Dehm, and Z.F. Zhang. Microcompression and cyclic deformation behaviors of coaxial copper bicrystals with a single twin boundary. *Acta Materialia*, 69 :199–202, 2013.
- [LBBC14] H. Li, C. J. Boehler, T. R. Bieler, and M. A. Crimp. Analysis of the deformation behavior in tension and tension-creep of Ti-3Al-2.5v (wt pct) at 296 K and 728 K (23 °c and 455 °C) using *in situ* SEM experiments. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 45A :6053–6066, 2014.
- [LD66] H. Liang and F.P.E. Dunne. Gnd accumulation in bi-crystal deformation : Crystal plasticity analysis and comparison with experimentss. *International Journal of Mechanical SciencesE*, 51 :326–333, 1966.
- [Lev66] E. D. Levine. Deformation mechanisms in titanium at low temperatures. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 236 :1558–1565, 1966.
- [LK09] T. Leffers and R.K. Kay. The brass-type texture and its deviation from the copper-type texture. *Progress in Materials Science*, 54 :351–396, 2009.
- [LKE12] R.A. Lebensohn, A.K. Kanjarla, and P. Eisenlohr. An elasto-viscoplastic formulation based on fast Fourier transforms for the predictions of micromechanical fields in polycrystalline materials. *International Journal of Plasticity*, 32-33 :59–69, 2012.
- [LL08] T. Lebedkina and M. Lebyodkin. Effect of deformation geometry on the intermittent plastic flow associated with the portevin-le chatelier effect. *Acta Materialia*, 56 :5567–5574, 2008.
- [LLWZ14] Z.X. Long, T.M. Liu, Y.G. Wu, and Y. Zhang. Improving the anisotropy of rolled Mg-3Al-1Zn alloy by pre-strain and annealing. *Materials Science and Engineering A*, 616 :240–245, 2014.
- [LM95] J. Luster and J.M. Morris. Compatibility of deformation in two-phase ti-al alloys : dependence on microstructure and orientation relationships. *Metallurgical Materials Transactions A*, 26 :1745–1756, 1995.
- [LMB⁺13] H. Li, D. E. Mason, T. R. Bieler, C. J. Boehler, and M. A. Crimp. Methodology for estimating the critical resolved shear stress ratios of α -phase Ti using EBSD-based trace analysis. *Acta Materialia*, 61 :7555–7567, 2013.
- [LR85] L.C. Lim and R. Raj. Interaction between lattice and grain boundary dislocations and their role in the mechanical properties of interfaces. *Journal de Physique*, 46 :581–595, 1985.
- [LRB89] T.C. Lee, I.M. Robertson, and H.K. Birnbaum. Anomalous slip in an FCC system. *Journal of Ultramicroscopy*, 29 :212–216, 1989.
- [LRB90] T.C. Lee, I.M. Robertson, and H.K. Birnbaum. An in situ transmission electron microscope deformation study of the slip transfer mechanisms in metals. *Metallurgical Transactions A*, 21 :2437–2447, 1990.

- [LSC⁺04] L. Lu, Y.F. Shen, X.H. Chen, L.H. Qian, and K. Lu. Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper. *Science*, 304 :422, 2004.
- [LT93] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : Application to zirconium alloys. *Acta Metallurgica et Materialia*, 41 :2611–2624, 1993.
- [LTP07] R.A. Lebensohn, C.N. Tomé, and P. PonteCastaneda. Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Philosophical Magazine*, 87 :4287–4322, 2007.
- [MaMFV08] D. Mordehai, E. Clouet and M. Fivel, and M. Verdier. Introducing dislocation climb by bulk diffusion in dislocation dynamics. *Philosophical Magazine*, 88 :899–925, 2008.
- [MB15] C. Mareau and S. Berbenni. An affine formulation for the self-consistent modeling of elasto-viscoplastic heterogeneous materials based on the translated fields method. *International Journal of Plasticity*, 64 :134–150, 2015.
- [MBA10] J. Mach, A.J. Beaudoin, and A. Acharya. Continuity in the plastic strain rate and its influence on texture evolution. *Journal of the Mechanics and Physics Solids*, 58 :105–128, 2010.
- [MBP⁺11] M. Montagnat, J.R. Blackford, S. Piazzolo, L. Arnaud, and R.A. Lebensohn. Measurements and full-field predictions of deformation heterogeneities in ice. *Earth and Planetary Science Letters*, 305 :153–160, 2011.
- [MCA87] A. Molinari, G.R. Canova, and S. Ahzi. A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica*, 35 :2983–2994, 1987.
- [MCB⁺15] M. Montagnat, T. Chauve, F. Barou, A. Tommasi, B. Beausir, and C. Fressengeas. Analysis of dynamic recrystallization of ice from ebsd orientation mapping. *Frontiers in Earth Science*, 3 :1–11, 2015.
- [MCJJ10] E. Martin, L. Capolungo, L. Jiang, and J.J. Jonas. Variant selection during secondary twinning in Mg-3 *Acta Materialia*, 58 :3970–3983, 2010.
- [MDF12] C. Maurice, J.H. Driver, and R. Fortunier. On solving the orientation gradient dependency of high angular resolution ebsd. *Ultramicroscopy*, 113 :171–181, 2012.
- [MDK⁺03] R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc, and D. Rodney. The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science*, 301 :1879–1882, 2003.
- [MMFS16] A. Marchenko, M. Mazière, S. Forest, and J.L. Strudel. Crystal plasticity simulation of strain aging phenomena in α -titanium at room temperature. *International Journal of Plasticity*, 85 :1–33, 2016.
- [MRH73] S.N. Monteiro and R.E. Reed-Hill. An empirical analysis stress-strain curves of titanium. *Metallurgical Transactions*, 4 :1011–1015, 1973.
- [MRR06] A. Ma, F. Roters, and D. Raabe. On the consideration of interactions between dislocations and grain boundaries in crystal plasticity finite element modeling – Theory, experiments, and simulations. *Acta Materialia*, 54 :2181–2194, 2006.
- [MRZ85] P. Mussot, C. Rey, and A. Zaoui. Grain boundary sliding and strain compatibility. *Res Mechanica*, 14 :69–79, 1985.
- [MS98] H. Moulinec and P. Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157 :69–94, 1998.
- [Mur63] T. Mura. Continuous distribution of moving dislocations. *Philosophical Magazine*, 89 :843–857, 1963.

- [Mur87] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1987.
- [MVZ⁺01] M. C. Miguel, A. Vespignani, S. Zapperi, J. Weiss, and J. R. Grasso. Intermittent dislocation flow in viscoplastic deformation. *Nature*, 410 :667–671, 2001.
- [MWD⁺11] M. Montagnat, J. Weiss, P. Duval, H. Brunjail, and J.G. Sevillano. The heterogeneous nature of slip in ice single crystals deformed under torsion. *Philosophical Magazine*, 86 :4259–4270, 2011.
- [MZ99] R. Masson and A. Zaoui. Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47 :1543–1568, 1999.
- [Nak83] S. Naka. *Etude des mécanismes de déformation plastique à basse température de monocristaux de titane α* . PhD thesis, Université de Paris Sud (Orsay), 1983.
- [NBT01] E.V. Nesterova, B. Bacroix, and C. Teodosiu. Microstructure and texture evolution under strain-path changes in low-carbon interstitial-free steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32 :2527–2538, 2001.
- [NCL10] M. E. Nixon, O. Cazacu, and R. A. Lebensohn. Anisotropic response of high-purity α -titanium : Experimental characterization and constitutive modeling. *International Journal of Plasticity*, 26 :516–532, 2010.
- [Neu83] H. Neuhäuser. Slip-line formation and collective dislocation motion. In *Dislocations in Solids (vol 6)*. F.R.N. Nabarro, Amsterdam, North-Holland, 1983.
- [Neu99] P. Neumann. In *Proceedings of the 7th International Fatigue Congress*, page 107, Beijing, P.R.C., June 1999.
- [Nie10] M. Niewczas. Lattice correspondence during twinning in hexagonal close-packed crystals. *Acta Materialia*, 58 :5848–5857, 2010.
- [NNGC99] S. Nemat-Nasser, W. G. Guo, and J. Y. Cheng. Mechanical properties and deformation mechanisms of a commercially pure titanium. *Acta Materialia*, 47 :3705–3720, 1999.
- [NNO86] S. Nemat-Nasser and M. Obata. Rate-dependent finite elasto-plastic deformation of polycrystals. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 407 :343–375, 1986.
- [NT87] P. Neumann and A Tönnessen. In *Proceedings of the 3rd International Conference on Fatigue and Fatigue Thresholds*, page 3, Charlottesville, U.S.A., June 1987.
- [Nye53] J. F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1 :153–162, 1953.
- [OBP⁺09] T. Ohashi, R.I. Barabash, J.W.L Pang, G.E. Ice, and O.M Barabash. X-ray micro-diffraction and strain gradient crystal plasticity studies of geometrically necessary dislocations near a ni bicrystal grain boundary. *International Journal of Plasticity*, 25 :920–941, 2009.
- [OFSH00] A. El Omri, A. Fennan, F. Sidoroff, and A. Hihi. Elastic-plastic homogenization for layered composites. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 19 :585, 2000.
- [OHM99] Y. Okada, T. Hondoh, and S. Mae. Basal glide of dislocations in ice observed by synchrotron radiation topography. *Philosophical Magazine*, 79 :2853–2868, 1999.
- [PAN83] D. Peirce, R.J. Asaro, and A. Needleman. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica*, 31 :1951–1976, 1983.
- [PBF⁺01] A. Paquin, S. Berbenni, V. Favier, X. Lemoine, and M. Berveiller. Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behaviour of polycrystalline steels. *International Journal of Plasticity*, 17 :1267–1302, 2001.

- [PDA11] S. Puri, A. Das, and A. Acharya. Mechanical response of multicrystalline thin films in mesoscale field dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics Solids*, 59 :2400–2417, 2011.
- [Pet53] N. J. Petch. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of Iron Steel Institute*, 174 :25–28, 1953.
- [PHLL12] S.H. Park, S.G. Hong, J.H. Lee, and C.S. Lee. Multiple twinning modes in rolled Mg–3Al–1Zn alloy and their selection mechanism. *Materials Science and Engineering A*, 532 :401–406, 2012.
- [PL97] P. Peralta and C. Laird. Compatibility stresses in fatigued bicrystals : dependence on misorientation and small plastic deformations. *Acta Metallurgica*, 45 :5129–5143, 1997.
- [PLBL94] P. Peralta, L. Llanes, J. Bassani, and C. Laird. Deformation from twin-boundary stresses and the role of texture : application to fatigue. *Philosophical Magazine A*, 70 :219–232, 1994.
- [PLL13] Q.S. Pan, Q.H. Lu, and L. Lu. Fatigue behavior of columnar-grained cu with preferentially oriented nanoscale twins. *Acta Materialia*, 61 :1383–1393, 2013.
- [PMG⁺15] S. Piazzolo, M. Montagnat, F. Grennerat, H. Moulinec, and J. Wheeler. Effect of local stress heterogeneities on dislocation fields : Examples from transient creep in polycrystalline ice. *Acta Materialia*, 90 :303–309, 2015.
- [PNM⁺13] D.T. Pierce, K. Nowag, A. Montagne, J.A. Jiménez, J.E. Wittig, and R. Ghisleni. Single crystal elastic constants of high-manganese transformation-and twinning-induced plasticity steels determined by a new method utilizing nanoindentation. *Materials Science and Engineering A*, 578 :134–139, 2013.
- [Pri06] L. Priester. *Les joints de grains de la théorie à l'ingénierie*. EDP Sciences, France, 2006.
- [PRX⁺11] A. Poty, J.-M. Raulot, H. Xu, C. Schuman, J.-S. Lecomte, M.-J. Philippe, and C. Esling. Classification of the critical resolved shear stress in the hexagonal-close-packed materials by atomic simulation : Application to α -zirconium and α -titanium. *Journal of Applied Physics*, 110 :014905 (1–15), 2011.
- [PSB99] A. Paquin, H. Sabar, and M. Berveiller. Integral formulation and selfconsistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials. *Archive of Applied Mechanics*, 69 :14–35, 1999.
- [PSHE95] M.-J. Philippe, M. Serghat, P. Van Houtte, and C. Esling. Modelling of texture evolution for materials of hexagonal symmetry— II : Application to zirconium and titanium α or near α alloys. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43 :1619–1630, 1995.
- [PSL93] P. Peralta, A. Schober, and C. Laird. Elastic stresses in anisotropic bicrystals. *Materials Science and Engineering A*, 169 :43–51, 1993.
- [PTK07] G. Proust, C. N. Tomé, and G. C. Kaschner. Modeling texture, twinning and hardening evolution during deformation of hexagonal materials. *Acta Materialia*, 55 :2137–2148, 2007.
- [R⁷⁶] L. Rémy. Twin-slip interaction in F.C.C. crystals. *Acta Metallurgica*, 25 :711–714, 1976.
- [RA71] R. Raj and M.F. Ashby. On grain boundary sliding and diffusional creep. *Metallurgical Transactions*, 2 :1113–1127, 1971.
- [RA06] A. Roy and A. Acharya. Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales : Predictions of a Phenomenological model of Mesoscopic Field Dislocation Mechanics : Part II. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 :1711–1743, 2006.

- [RB12] T. Richeton and S. Berbenni. Relations between twin and slip in parent lattice due to kinematic compatibility at interfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 49 :1355–1364, 2012.
- [RB13] T. Richeton and S. Berbenni. Effects of heterogeneous elasticity coupled to plasticity on stresses and lattice rotations in bicrystals : a Field Dislocation Mechanics viewpoint. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 37 :231–247, 2013.
- [RB14] T. Richeton and S. Berbenni. From bicrystals to spherical inclusions : A superposition method to derive analytical expressions of stress fields in presence of plastic strain gradients. *International Journal of Solids and Structures*, 51 :794–807, 2014.
- [RBB09] T. Richeton, S. Berbenni, and M. Berveiller. Grain-size dependent accommodation due to intragranular distributions of dislocation loops. *Acta Materialia*, 57 :1347–1356, 2009.
- [REH⁺10] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, and D. Raabe. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58 :1152–1211, 2010.
- [RLC⁺17] T. Richeton, L.T. Le, T. Chauve, M. Bernacki, S. Berbenni, and M. Montagnat. Modelling the transport of geometrically necessary dislocations on slip systems : application to single- and multicrystals of ice. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 25 :025010 (1–27), 2017.
- [RLL⁺14] A. Roth, M.A. Lebyodkin, T.A. Lebedkina, J.S. Lecomte, T. Richeton, and K.E.K. Amouzou. Mechanisms of anisotropy of mechanical properties of α -titanium in tension conditions. *Materials Science and Engineering A*, 596 :236–243, 2014.
- [Rot14] A. Roth. *Etude multi-échelles de l'hétérogénéité et de l'anisotropie de la déformation plastique : cas des aciers TWIP et du Ti- α* . PhD thesis, Université de Lorraine, 2014.
- [RPA07] A. Roy, S. Puri, and A. Acharya. Phenomenological mesoscopic field dislocation mechanics, lower-order gradient plasticity, and transport of mean excess dislocation density. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15 :167–180, 2007.
- [RS76] C. Rey and G. Saada. The elastic field of periodic dislocation networks. *Philosophical Magazine*, 33 :825–841, 1976.
- [RTBB15] T. Richeton, I. Tiba, S. Berbenni, and O. Bouaziz. Analytical expressions of incompatibility stresses at $\Sigma 3(111)$ twin boundaries and consequences on single-slip promotion parallel to twin plane. *Philosophical Magazine*, 95 :12–31, 2015.
- [RWF11] T. Richeton, G.F. Wang, and C. Fressengeas. Continuity constraints at interfaces and their consequences on the work hardening of metal-matrix composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59 :2023–2043, 2011.
- [RWL05] T. Richeton, J. Weiss, and F. Louchet. Breakdown of avalanche critical behaviour in polycrystalline plasticity. *Nature Materials*, 4 :465–469, 2005.
- [RZ80] C. Rey and A. Zaoui. Slip heterogeneities in deformed aluminum bicrystals. *Acta Metallurgica*, 28 :687–697, 1980.
- [RZ82] C. Rey and A. Zaoui. Grain boundary effects in deformed bicrystals. *Acta Metallurgica*, 30 :523–535, 1982.
- [SAS⁺98] S. Sun, B.L. Adams, C. Shet, S. Saigal, and K.K. King. Mesoscale investigation of the deformation field of an aluminium bicrystal. *Scripta Materialia*, 39 :501–508, 1998.

- [SKD02] A. A. Salem, S. R. Kalidindi, and R. G. Doherty. Strain hardening regimes and microstructure evolution during large strain compression of high purity titanium. *Scripta Materialia*, 46 :419–423, 2002.
- [SKD03] A. A. Salem, S. R. Kalidindi, and R. G. Doherty. Strain hardening of titanium : role of deformation twinning. *Acta Materialia*, 51 :4225–4237, 2003.
- [SKDS06] A. A. Salem, S. R. Kalidindi, R. G. Doherty, and S. L. Semiatin. Strain hardening due to deformation twinning in α -titanium : Mechanisms. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 37 :259–268, 2006.
- [SKS05] A. A. Salem, S. R. Kalidindi, and S. L. Semiatin. Strain hardening due to deformation twinning in α -titanium : Constitutive relations and crystal-plasticity modeling. *Acta Materialia*, 53 :3495–3502, 2005.
- [SP02] S. Stupkiewicz and H. Petryk. Modelling of laminated microstructures in stress-induced martensitic transformations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :2303–2331, 2002.
- [Str58] A.N. Stroh. Dislocations and cracks in anisotropic elasticity. *Philosophical Magazine*, 3 :625–646, 1958.
- [SW91] C. Shearwood and R. Withworth. The velocity of dislocations in ice. *Philosophical Magazine*, 64 :289–302, 1991.
- [SWC88] Z. Shen, R.H. Wagoner, and W.A.T. Clark. Dislocation and grain boundary interactions in metals. *Acta Metallurgica*, 36 :3231–3242, 1988.
- [SZW⁺15] Z.-Z. Shi, Y.D. Zhang, F. Wagner, P.-A. Juan, S. Berbenni, L. Capolungo, J.-S. Lecomte, and T. Richeton. On the selection of extension twins with low schmid factors in a deformed Mg alloy. *Acta Materialia*, 83 :17–28, 2015.
- [Tak54] T. Takeuchi. Work hardening of copper single crystals with multiple glide orientations. 16 :629–640, 19754.
- [Tay38] G.I. Taylor. Plastic strain in metals. *Journal of the Institute of Metals*, 62 :307–324, 1938.
- [Tib15] I. Tiba. *Effets des interfaces cristallines sur les champs mécaniques en plasticité cristalline et conséquences sur le glissement dans des micro-piliers bi-cristallins*. PhD thesis, Université de Lorraine / Universität des Saarlandes, 2015.
- [TLK91] C. N. Tomé, R. A. Lebensohn, and U. F. Kocks. A model for texture development dominated by deformation twinning : application to Zirconium alloys. *Acta Metallurgica et Materialia*, 39 :2667–2680, 1991.
- [TM72] K. Tanaka and T. Mori. Note on volume integrals of the elastic field around an ellipsoidal inclusion. *Journal of elasticity*, 2 :199–200, 1972.
- [TRC⁺08] V. Taupin, T. Richeton, J. Chevy, C. Fressengeas, J. Weiss, F. Louchet, and M.C. Miguel. Rearrangement of dislocation structures in the aging of ice single crystals. *Acta Materialia*, 56 :1555–1563, 2008.
- [TRM⁺15] I. Tiba, T. Richeton, C. Motz, H. Vehoff, and S. Berbenni. Incompatibility stresses at grain boundaries in ni bicrystalline micropillars analyzed by an anisotropic model and slip activity. *Acta Materialia*, 83 :227–238, 2015.
- [TVC⁺07] V. Taupin, S. Varadhan, J. Chevy, C. Fressengeas, A.J. Beaudoin, M. Montagnat, and P. Duval. Effects of size on the dynamics of dislocations in ice single crystals. *Physical Review Letters*, 99 :155507 (1–4), 2007.
- [TW56] N. Thompson and N. Wadsworth. *Philosophical Magazine A*, 1 :113, 1956.

- [VBF06] S.N. Varadhan, A.J. Beaudoin, and C. Fressengeas. Dislocation transport using an explicit Galerkin/least-squares formulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 14 :1245–1270, 2006.
- [vBMKG13] P.R.M. van Beers, G.J. McShane, V.G. Kouznetsova, and M.G.D. Geers. Grain boundary interface in strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61 :2659–2679, 2013.
- [VFG98] M. Verdier, M. Fivel, and I. Groma. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamic in fcc metals : Principle and applications. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 6 :755–770, 1998.
- [VLD87] H. Vehoff, C. Laird, and D.J. Duquette. The effect of hydrogen and segregation on fatigue crack nucleation at defined grain boundaries in nickel bicrystals. *Acta Metallurgica*, 35 :2877–28860, 1987.
- [VNM04] H. Vehoff, A. Nykyforchyn, and R. Metz. Fatigue crack nucleation at interfaces. *Materials Science and Engineering A*, 387-389 :546–551, 2004.
- [Voi28] W. Voigt. *Lehrbuch Der Kristallphysik*. B.G. Teubner, Leipzig, Germany, 1928.
- [WH03] Y. N. Wang and J. C. Huang. Texture analysis in hexagonal materials. *Materials Chemistry and Physics*, 81 :11–26, 2003.
- [Wil68] J. R. Willis. Second order effects of dislocations in anisotropic crystals. *International Journal of Engineering Science*, 5 :171–190, 1968.
- [Wil96] A.J. Wilkinson. Measurement of elastic strains and small lattice rotations using electron backscatter diffraction. *Ultramicroscopy*, 62 :237–247, 1996.
- [WJRD12] J. L. W. Warwick, N. G. Jones, K. M. Rahman, and D. Dye. Lattice strain evolution during tensile and compressive loading of cp ti. *Acta Materialia*, 60 :6720–6731, 2012.
- [WKNS07] X. Wu, S.R. Kalidindi, C. Necker, and A. A. Salem. Prediction of crystallographic texture evolution and anisotropic stress-strain curves during large plastic strains in high purity α -titanium using a Taylor-type crystal plasticity model. *Acta Materialia*, 55 :423–432, 2007.
- [WRhS03] C.J. Wilson, D.S. Russell-head, and H.M. Sim. The application of an automated fabric analyzer system to the textural evolution of folded ice layers in shear zones. *Annals of Glaciology*, 37 :7–17, 2003.
- [WSB⁺12] S. Wang, C. Schuman, L. Bao, J.-S. Lecomte, Y. Zhang, J.-M. Raulot, M.-J. Philippe, X. Zhao, and C. Esling. Variant selection criterion for twin variants in titanium alloys deformed by rolling. *Acta Materialia*, 60 :3912–3919, 2012.
- [WWE⁺10] L. Wang, Y. Wang, P. Eisenlohr, T. R. Bieler, M. A. Crimp, and D. E. Mason. Twin nucleation by slip transfer across grain boundaries in commercial purity titanium. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 41 :421–430, 2010.
- [WWTH10] H. Wang, P.D. Wu, C.N. Tomé, and Y. Huang. A finite strain elasto-viscoplastic self-consistent model for polycrystalline materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58 :594–612, 2010.
- [XTS⁺17] S. Xu, L.S. Toth, C. Schuman, J.S. Lecomte, and M.R. Barnett. Dislocation mediated variant selection for secondary twinning in compression of pure titanium. *Acta Materialia*, 124 :59–70, 2017.
- [YDZ16] H.K. Yang, V. Doquet, and Z.F. Zhang. Micro-scale measurements of plastic strain field, and local contributions of slip and twinning in TWIP steels during *in situ* tensile tests. *Materials Science and Engineering A*, 672 :7–14, 2016.

- [YHiI⁺13] M. Yamasaki, K. Hagihara, S. i. Inoue, J.P. Hadorn, and Y. Kawamura. Crystallographic classification of kink bands in an extruded Mg–Zn–Y alloy using intragranular misorientation axis analysis. *Acta Materialia*, 61 :2065–2076, 2013.
- [Zae03] S. Zaefferer. A study of active deformation systems in titanium alloys : dependence on alloy composition and correlation with deformation texture. *Materials Science and Engineering A*, 344 :20–30, 2003.
- [ZJBD16] Z. Zhang, T.S. Jun, T.B. Britton, and F.P.E. Dunne. Determination of Ti-6242 α and β slip properties using micro-pillar test and computational crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 95 :393–410, 2016.
- [ZLW12] Y.T. Zhu, X.Z. Liao, and X.L. Wu. Deformation twinning in nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*, 57 :1–62, 2012.
- [ZWL⁺11] Y.T. Zhu, X.L. Wu, X.Z. Liao, J. Narayan, L.J. Kecskes, and S.N. Mathaudhu. Dislocation-twin interactions in nanocrystalline fcc metals. *Acta Materialia*, 59 :812–821, 2011.
- [ZYBR12] C. Zambaldi, Y. Yang, T. R. Bieler, and D. Raabe. Orientation informed nanoindentation of α -titanium : Indentation pileup in hexagonal metals deforming by prismatic slip. *Journal of Materials Research*, 27 :356–367, 2012.
- [ZZSZW⁺15] Y Z.-Z. Shi, Zhang, F. Wagner, T. Richeton, P.-A. Juan, J.-S. Lecomte, L. Capolungo, and S. Berbenni. Sequential double extension twinning in a magnesium alloy : Combined statistical and micromechanical analyses. *Acta Materialia*, 96 :333–343, 2015.

Résumé

Mes activités de recherche concernent la prédiction des champs mécaniques dans les matériaux cristallins fortement anisotropes en lien avec les incompatibilités de déformation engendrées par les défauts de la microstructure (dislocations, macles, grains). Cette problématique a été abordée selon plusieurs approches de modélisation, à chaque fois confrontées à l'observation (mesures de champs, essais mécaniques à l'échelle micrométrique, microscopie électronique). La première consiste en des simulations de plasticité cristalline intégrant un couplage avec le transport des densités de dislocations polarisées, ce qui permet de rendre compte en partie de l'organisation spatio-temporelle des dislocations. La deuxième voie consiste en le développement de formules explicites des contraintes et rotations élastiques aux interfaces planes dans le cadre d'une thermoélasticité anisotrope hétérogène en présence de distorsions plastiques et de glissement au joint. De telles formules donnent des effets de premier ordre et permettent de tester un très grand nombre de configurations du fait de l'immédiateté des résultats. Des approches micromécaniques ont aussi été proposées pour capter les effets de taille des grains lors des procédures d'homogénéisation à partir de la physique des processus intra-granulaires. Enfin, un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique a été utilisé afin d'étudier l'anisotropie et l'écroutissage du titane en traction à partir d'une hypothèse de viscosités différentes entre familles de glissement.

Mots-clés : dislocations, joints de grains, maclage, contraintes d'incompatibilité, anisotropie, micromécanique

Abstract

My research activities deal with mechanical field predictions in strongly anisotropic crystalline materials in relation with strain incompatibilities generated by microstructural defects (dislocations, twins, grains). This issue is tackled according to several modeling approaches, which were confronted with observation (field measurements, mechanical tests at the micrometric scale, electron microscopy). The first one consists in crystal plasticity simulations enclosing a coupling with the transport of polarized dislocation densities, which makes it possible to account to some extent for the spatio-temporal organization of dislocations. The second way consists in the development of explicit analytical expressions of stresses and elastic rotations at plane interfaces in the context of heterogeneous anisotropic thermoelasticity with plastic distortions and grain boundary sliding. Such expressions provide first order effects and allow to test a very large number of configurations thanks to instantaneous results. Micromechanical approaches have also been proposed to capture grain size effects during homogenization procedures from the physics of intra-granular processes. Finally, an elasto-viscoplastic self-consistent model was used to study the anisotropy and work hardening of titanium under tensile conditions from an assumption of different viscosities between slip families.

Keywords : dislocations, grain boundaries, twinning, incompatibility stresses, anisotropy, micromechanics